Ε ι σ α γ ω γ ή
σ τ η ν
Κ β α ν τ ο μ η χ α ν ι κ ή

Αντώνης Στρέκλας

Επίκουρος Καθηγητής

Τμήμα Μαθηματικό

Π ά τ ρ α   2 0 0 5

Π ε ρ ι ε χ ό μ ε ν α

Εισαγωγή

Κεφάλαιο 1

Κεφάλαιο 2

Κεφάλαιο 3

Κεφάλαιο 4

Κεφάλαιο 5

Κεφάλαιο 6

Πρόλογος

Η ύλη του βιβλίου αυτού διδάσκεται στους τεταρτοετείς φοιτητές του Μαθηματικού Τμήματος σαν μάθημα επιλογής. Η στάθμη του βιβλίου είναι εισαγωγική και δίνεται έμφαση στον μαθηματικό τμήμα της θεωρίας που είναι και ο στόχος του μαθήματος.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια μικρή ιστορική εισαγωγή στην κβαντομηχανική. Περιγράφονται συνοπτικά τα πρώτα φυσικά πειράματα που εμφανίστηκαν και δεν μπορούσαν να λυθούν με τις μεθόδους της κλασσικής φυσικής. Στο δεύτερο και τρίτο κεφάλαιο αναπτύσσονται οι ελάχιστες εκείνες μαθηματικές έννοιες, που είναι απαραίτητες για την αυστηρή διατύπωση της μη σχετικιστικής κβαντομηχανικής. Πολλά θεωρήματα δίνονται χωρίς απόδειξη και πολλές έννοιες αναφέρονται συνοπτικά ή θεωρούνται ότι είναι γνωστές. Στο τέταρτο κεφάλαιο διατυπώνονται τα πέντε βασικά αξιώματα, πάνω στα οποία χτίζεται όλη η θεωρία. Στα δύο τελευταία κεφάλαια λύνονται ορισμένα από τα προβλήματα, που μπορούν να λυθούν ακριβώς και να δώσουν αναλυτικές λύσεις και δίνονται ποιοτικές αναλύσεις των αποτελεσμάτων.

Το βιβλίο, όπως κάθε ανθρώπινο κατασκεύασμα, φυσικά δεν είναι τέλειο. Παρακαλώ τους αναγνώστες να μην διστάσουν να μου υποδείξουν τυχόν φραστικά και υπολογιστικά λάθη αλλά και παραλείψεις που θα υποπέσουν στην αντίληψη τους. Θα τους είμαι λίαν υποχρεωμένος και θα τα λάβω σοβαρά υπόψη μου σε μια επόμενη έκδοση.

Εισαγωγή

Η κβαντομηχανική είναι ο κλάδος της μαθηματικής φυσικής που ασχολείται με την κίνηση των στοιχειωδών σωματιδίων όπως είναι για παράδειγμα τα ηλεκτρόνια, τα πρωτόνια και τα νετρόνια. Η θεωρία βασίζεται στην αντίληψη του Πλανκ ότι η ενέργεια είναι κβαντισμένη, δηλαδή αποτελείται από ακέραια πολλαπλάσια μιας μοναδιαίας ποσότητας ενέργειας που ονομάζεται κβάντο ενέργειας.

Η αρχή της ατομικής θεωρίας πρέπει φυσικά να αναζητηθεί στην αρχαία Ελλάδα. Η σκέψη ότι τα άτομα έχουν σχηματιστεί από στοιχειώδη σωματίδια που δεν μπορούν να διασπαστούν άλλο, αιώνια και αναλλοίωτα βρίσκεται για πρώτη φορά διατυπωμένη στα έργα του Λεύκιππου και του Δημόκριτου. Κατά τον Δημόκριτο τα μόνα πράγματα που υπάρχουν πραγματικά είναι τα άτομα και ο κενός χώρος. Ενα αιώνα αργότερα ο Επίκουρος έδωσε νέα πνοή στην ατομική θεωρία, η φυσική διδασκαλία του οποίου είχε σαν αντικειμενικό σκοπό να απαλλάξει τους ανθρώπους από τις προλήψεις και τις δεισιδαιμονίες. Οι ιδέες αυτές απορρίφθηκαν από τον Αριστοτέλη και συκοφαντήθηκαν από τους θεολόγους ερμηνευτές της Αριστοτελικής φιλοσοφίας.

Μια πολύ σημαντική μελέτη “περί φύσεως” περιέχεται στον Πλατωνικό διάλογο Τίμαιος. Τα στοιχειώδη σωμάτια της σύγχρονης φυσικής αντιστοιχούν στα τέσσερα πρωταρχικά στοιχεία του Εμπεδοκλή, τη φωτιά, τον αέρα, το νερό, και τη γη. Κατά τον Πλάτωνα τα στοιχεία αυτά δεν αποτελούνται από κάποια ουσία αλλά είναι μαθηματικές μορφές όπως είναι για παράδειγμα τα κανονικά στερεά, το τετράεδρο, το οκτάεδρο, το εικοσάεδρο και ο κύβος. Τα πάντα είναι αριθμοί όπως έλεγαν και οι Πυθαγόρειοι και τα στοιχεία αυτά με κάποια δεδομένη αναλογία αποτελούν τον κόσμο μας. Η άποψη αυτή φαίνεται να συμπίπτει με τη σύγχρονη Φυσική όπου τα στοιχειώδη σωμάτια περιγράφονται από μια συνάρτηση κύματος είναι δηλαδή επίσης μαθηματικές μορφές.

Στις αρχές του αιώνα άρχισαν να εμφανίζονται πειράματα, σε περιοχές ανεξερεύνητες μέχρι τότε, στην περιοχή του ατομικού μικρόκοσμου. Η επέκταση της κλασικής θεωρίας στον μικρόκοσμο οδηγούσε σε συμπεράσματα αντίθετα με τα πειράματα. Τα υποατομικά σωματίδια που απαρτίζουν τα άτομα και τα μόρια φαίνεται ότι δεν υπακούουν στους νόμους της κλασσικής μηχανικής. Αυτό το αδιέξοδο λύθηκε τελικά με μια καινούργια θεωρία την Κβαντομηχανική. Πριν την ανακάλυψη των αρχών της κβαντομηχανικής, οι φυσικοί θεωρούσαν δεδομένο ότι η κλασσική μηχανική μπορούσε να περιγράψει πλήρως όλα τα φαινόμενα. Ο ρόλος των φυσικών ήταν να εφαρμόσουν τους γνωστούς ήδη νόμους για να εξηγήσουν όλα τα πειράματα. Διευκρινίζουμε ότι η κβαντική θεωρία δεν καταργεί την κλασσική φυσική που διαπραγματεύεται την κίνηση των μεγάλων σωμάτων. Το περιεχόμενο της κλασσικής φυσικής συνοψίζεται στους νόμους του Νεύτωνα, που επιβεβαιώθηκαν πλήρως στην κίνηση των υλικών σωμάτων συνήθους μεγέθους.

Ετσι η κλασσική φυσική περιορίζεται στο να περιγράφει μόνο μακροσκοπικά σώματα, όπως είναι τα ουράνια σώματα, ενώ για τα ηλεκτρόνια στάθηκε αδύνατο να δώσει οποιαδήποτε απάντηση. Στην κλασσική μηχανική για παράδειγμα οι έννοιες σωμάτιο και κύμα είναι τελείως διαφορετικές. Στην κβαντομηχανική αντιθέτως αυτές οι δύο ασυμβίβαστες έννοιες της κλασσικής μηχανικής είναι συμπληρωματικές. Αυτός ο περίεργος κυματοσωματιδιακός δυϊσμός και των υλικών σωματιδίων αλλά και της ακτινοβολίας έχει αποδειχτεί πειραματικά. Η λύση αυτού του προβλήματος, όπως είναι γνωστή σήμερα, είναι και το περιεχόμενο της κβαντομηχανικής.

Η κβαντική θεωρία είναι προϊόν ερευνών που έγιναν στο πρώτο τέταρτο του 20−αιώνα από μια ομάδα μεγάλων φυσικών όπως ο Πλανκ, ο Χάιζενμπεργκ, ο Μπορ, ο Σρέντινγκερ, ο ντε Μπρολί, ο Μπορν, ο Αϊνστάιν, ο Ντιράκ, ο Φάυνμαν και άλλοι. Η Κβαντομηχανική αρχίζει ουσιαστικά το έτος 1925 με δύο σχεδόν συγχρόνους ανακοινώσεις, των Χάιζενμπεργκ και Σρέντινγκερ. Η πρώτη είναι η μαθηματική θεμελίωση της κβαντομηχανικής με τη βοήθεια των μητρών, μηχανική των μητρών και η δεύτερη η θεμελίωση της κβαντομηχανικής με τη βοήθεια των κυμάτων και των διαφορικών τελεστών, κυματομηχανική. Αργότερα αποδείχτηκε ότι οι δύο αυτές περιγραφές της κβαντομηχανικής είναι ισοδύναμες.

Η κβαντομηχανική δεν είναι η κλασσική φυσική "διορθωμένη", έτσι ώστε να ισχύει στον μικρόκοσμο, κάτι τέτοιο αποδείχτηκε ανέφικτο. Είναι μια καινούργια σύνθεση. Το μόνο κοινό που έχουν οι δύο αυτές θεωρίες, είναι η γλώσσα που χρησιμοποιούν, που φτιάχτηκε από τη καθημερινή μας εμπειρία. Μια εμπειρία που στηρίζεται στην κλασσική φυσική. Το γεγονός αυτό είναι δυνατόν να οδηγήσει σε παρανοήσεις. Ετσι δεν μπορούμε να πούμε τι ακριβώς είναι ένα άτομο, αλλά σίγουρα δεν είναι η μικρογραφία του ηλιακού μας συστήματος. Τέτοιες απεικονίσεις δανεισμένες από την καθημερινή μας εμπειρία πρέπει να αποφεύγονται. Η μόνη γλώσσα που δεν δέχεται παρανοήσεις, είναι τα μαθηματικά και πάνω εκεί θα προσπαθήσουμε να χτίσουμε την καινούργια θεωρία.

Είναι σχεδόν αδύνατο να περιγραφεί η θεωρία, χωρίς την χρησιμοποίηση προχωρημένων μαθηματικών μεθόδων της συναρτησιακής ανάλυσης. Η διατύπωση της κβαντομηχανικής, σαν λογισμός τελεστών σε έναν απείρων διαστάσεων χώρο Χίλμπερτ είναι μια μεγάλη καινοτομία στην σύγχρονη φυσική και πρέπει μάλλον να αποδοθεί στον φον-Νόυμαν.

Αν και η κβαντομηχανική είναι τελείως διαφορετική εννοιολογικά από την κλασσική μηχανική, οι δύο αυτές θεωρίες έχουν πολλά κοινά χαρακτηριστικά από καθαρά τυπική "μαθηματική" σκοπιά. Οπως η σχετικιστική μηχανική πρέπει να συμπίπτει με την κλασσική μηχανική για ταχύτητες πολύ μικρότερες από την ταχύτητα του φωτός, έτσι και η κβαντομηχανική πρέπει να δίνει τα ίδια αποτελέσματα σε καταστάσεις που η σταθερά της δράσης h του Πλανκ μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Ομως κάποια παρατηρήσημα μεγέθη της κβαντομηχανικής όπως είναι το σπιν για παράδειγμα δεν έχουν κλασσικό ανάλογο.

Πολλές είναι οι εφαρμογές της κβαντομηχανικής σε πολλούς επιστημονικούς τομείς. Στην ατομική και μοριακή φυσική και στην φυσικοχημεία, στην πυρηνική φυσική και την φυσική των στοιχειωδών σωματιδίων ή των υψηλών ενεργειών, στην κβαντική ηλεκτροδυναμική και στην κβαντική θεωρία πεδίων, στην κβαντική στατιστική μηχανική και στην θεωρία της στερεάς κατάστασης, στην σχετικιστική κβαντομηχανική και στην κβαντική βαρύτητα. Η κβαντομηχανική έχει επίσης εφαρμογές και σε πολλούς άλλους επιστημονικούς τομείς που δεν ανήκουν στην σφαίρα της φυσικής όπως είναι η χημεία, η αστροφυσική και η βιολογία. Αλλά και σε περισσότερο πρακτικό επίπεδο η τεχνολογία τροφοδοτείται συνεχώς από την κβαντική θεωρία με νέες πρακτικές και καινοτομίες. Χωρίς την κβαντομηχανική για παράδειγμα δεν θα είχαμε τους ηλεκτρονικός υπολογιστές, το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο χρησιμότατο εργαλείο για τους βιολόγους, τα ραδιοϊσότοπα για την καταπολέμηση του καρκίνου αλλά και τα λέιζερ που χρησιμοποιούνται σήμερα για λεπτότατες εγχειρήσεις.

Η σημαντικότερη όμως πλευρά της κβαντικής θεωρίας δεν είναι τόσο οι φυσικές εφαρμογές της, όσο ο φοβερός αντίκτυπος που είχε η θεωρία αυτή στα εννοιολογικά θεμέλια της επιστήμης και της φιλοσοφίας. Αυτός είναι και ο λόγος που την κάνει πολύ πιο "επαναστατική" από την σχεδόν σύγχρονη της θεωρία της σχετικότητας. Η κβαντική θεωρία έθεσε υπό αμφισβήτηση ακόμα και ορισμένες βεβαιότητες της κοινής λογικής. Το πρόβλημα της μέτρησης για παράδειγμα πρέπει να επανεξεταστεί και να τεθεί σε διαφορετικές βάσεις. Δεν μπορούμε να παρατηρήσουμε την κατάσταση οποιουδήποτε αντικειμένου χωρίς να την μεταβάλουμε. Το πρόβλημα αυτό δεν είναι τεχνικό είναι ουσιαστικό και οδηγεί στην αρχή της αβεβαιότητας. Η αρχή αυτή διάλυσε την φιλοσοφική θεωρία του "ντετερμινισμού" κατά την οποία όλα λειτουργούν με αυστηρή αιτιοκρατία. Οι πιθανότητες εισάγονται σε μια φυσική θεωρία με δραματικές φιλοσοφικές προεκτάσεις και συνέπειες. Τα αποτελέσματα των παρατηρήσεων έχουν πλέον στατιστικό χαρακτήρα.

Πολλά από τα θέματα που αναφέρονται στις φιλοσοφικές προεκτάσεις της θεωρίας είναι ακόμα ανοικτά. Γνωστοί είναι οι ομηρικοί καυγάδες του Μπορ και του Αϊνστάιν. Για το μαθηματικό μέρος της θεωρίας δεν υπάρχει αμφισβήτηση. Ολες οι διαφωνίες είναι φιλοσοφικού χαρακτήρα. Η κβαντομηχανική έδωσε σωστά αποτελέσματα όπου και αν εφαρμόστηκε μέχρι σήμερα και φυσικά οι εφαρμογές και η εξήγηση των πειραματικών δεδομένων, είναι το Α και το Ω μιας σωστής φυσικής θεωρίας. Ιδιαίτερα οι προβλέψεις της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής για παράδειγμα επαληθεύτηκαν με πολύ μεγάλη ακρίβεια.

Μια καινούργια θεωρία που θα συνδυάζει την σχετικιστική και την κβαντική μηχανική είναι το αντικείμενο της σύγχρονης έρευνας. Οι δύο θεωρίες φαίνεται ότι δεν είναι συμβιβαστές μεταξύ τους και το πρόβλημα παραμένει ανοικτό. Κάποια πρόοδος έχει γίνει για το πεδίο της βαρύτητας που είναι συνεπές και με την κβαντική και με την σχετικιστική μηχανική. Τέλος η κβαντική θεωρία των πεδίων έχει κάνει σπουδαία πρόοδο στην προσπάθεια για την κατανόηση της φύσης.

Ορφικός Υμνος Νόμου

Αθανάτων καλέω και	*Προσκαλώ των αθανάτων και των*
θνητών αγνόν άνακτα,	*θνητών τον αγνό άνακτα, τον επουράνιο*
Ουράνιον Νόμον, αστρο-	*Νόμο αυτόν που θέτει σε τάξη τα άστρα*
θέτην, σφραγίδα δικαίην	*με δίκαιη σφραγίδα και του θαλασσίου*
πόντου τ' ειναλίου και	*πόντου και της γης αυτόν που*
γης, φύσεως το βέβαιον	*φροντίζει πάντοτε να είναι η φύση*
ακλινές αστασίαστον	*σταθερή ασάλευτη αδιατάρακτη με*
αεί τηρούντα νόμοισιν,	*ειδικούς νόμους, που με αυτούς*
οίσιν άνωθε φέρων μέγαν	*κατευθύνει τα πάντα από ψηλά και*
ουρανόν αυτός οδεύει και	*διατρέχει και κυριαρχεί αυτός τον*
φθόνον ου δίκαιον ροίζου	*μέγα ουρανό και τον άδικο φθόνο*
τρόπου αυτός ελαύνει·	*σαν ορμητική δύναμη αποδιώχνει,*
ος και θνητοίσιν βιοτής	*αυτόν που ξυπνάει στους ανθρώπους*
τέλος έσθλον εγείρει.	*το καλό τέλος του βίου,*
αυτός γαρ μούνος	*διότι μόνο αυτός κρατάει το πηδάλιο*
ζώιων οίηκα κρατύνει,	*των ζωντανών, διότι είναι*
γνώμαις ορθοτάτησι	*σύμφυτος με ορθότατες γνώμες*
συνών αδιάστροφος αεί,	*είναι πάντοτε αμετακίνητος,*
ωγύγιος, πολύπειρος,	*πανάρχαιος με μεγάλη πείρα*
αβλάπτως πάσι συνοικών	*συγκατοικεί αβλαβώς με όλους τους*
τοις νόμιμοις, ανόμοις δε	*δίκαιους αλλά στους άνομους*
φέρων κακότητα βαρείαν	*επιφέρει βαριά συμφορά,*
αλλά μάκαρ πάντιμε,	*αλλά ω μακάριε, πολύτιμε συ που*
φερόλβιε, πάσι ποθεινέ	*φέρεις ευτυχία σε όλους περιπόθητε,*
ευγενές ήτορ έχον μνήμη	*έχοντας ευμενή καρδιά*
σέο πέμπε, φέριστε	*μη μας λησμονείς ω άριστε*

Κεφάλαιο 1

Ο Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός της ύλης

Στο κεφάλαιο αυτό θα περιγράψουμε ορισμένα πειράματα που φαίνεται η αδυναμία της κλασσικής φυσικής να ερμηνεύσει τα πειραματικά δεδομένα.

1.1 Η Κλασσική Φυσική

Η φυσική είναι η επιστήμη που έχει σκοπό να ανακαλύψει και να διατυπώσει τους "νόμους της φύσης". Είναι η επιστήμη που εξετάζει την ύλη και την ενέργεια. Η γλώσσα της φυσικής είναι τα μαθηματικά. Τα μαθηματικά χρησιμοποιούνται για να διατυπώσουμε με ακρίβεια και χωρίς παρανοήσεις την θεωρία. Ομως η φυσική είναι ουσιαστικά μια πειραματική επιστήμη και η ορθότητα της θεωρίας ελέγχεται από το πείραμα. Σκοπός της Φυσικής είναι να βρεθεί ένα ενοποιημένο σύνολο νόμων που να υπακούει η ύλη.

Η Φυσική που αναπτύχθηκε συστηματικά από τους Ελληνες Φιλοσόφους μέχρι τα τέλη του 19ου αιώνα είναι γνωστή σαν κλασσική φυσική. Μπορεί να περιγράψει με ικανοποιητική ακρίβεια τις κινήσεις των μακροσκοπικών σωμάτων που κινούνται αργά σχετικά με την ταχύτητα του φωτός. Εχει επίσης επιτύχει σε φαινόμενα που σχετίζονται με την θερμότητα τον ήχο, το φως, τον ηλεκτρομαγνητισμό και άλλα.

Η κλασσική Φυσική χωρίζεται σε τρεις θεμελιώδεις ενότητες. Την κλασσική μηχανική, την κλασσική θεωρία των πεδίων και την κλασσική στατιστική μηχανική. Στο κλασσικό οικοδόμημα με κάποιες τροποποιήσεις μπορεί να τοποθετηθεί και η ειδική θεωρίας της σχετικότητας.

Το περιεχόμενο της κλασσικής μηχανικής είναι η μελέτη της κίνησης των υλικών σωμάτων υπό την επίδραση δεδομένων δυνάμεων. Ο θεμελιώδης νόμος της κλασσικής μηχανικής είναι ο νόμος του Νεύτωνα

$$\vec{F} = m\vec{\gamma} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$

όπου $\vec{F}$ είναι η δύναμη που επιδρά σε ένα υλικό σημείο και $\vec{\gamma}$ η επιτάχυνση που προκαλείται από την δύναμη.

Το πρόβλημα στην κλασσική φυσική είναι το εξής:

Δίνεται η δύναμη $\vec{F}$ και ζητείται να βρεθεί η θέση $\vec{r}(t)$ και η ταχύτητα $\vec{v}(t) = d\vec{r}/dt$ (ή η ορμή $\vec{p} = m\vec{v}$) σε κάθε χρονική στιγμή. Οι τιμές των μεγεθών αυτών είναι γνωστές την χρονική στιγμή $t = 0$, $\vec{r}(0) = \vec{r}_0$ και $\vec{v}(0) = \vec{v}_0$.

Δηλαδή να λυθεί το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών.

$$\vec{F} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \qquad\qquad \vec{r}(0) = \vec{r}_0 \quad \dot{\vec{r}}(0) = \vec{v}_0$$

Στην ειδική σχετικότητα οι νόμοι της κλασσικής μηχανικής πρέπει να τροποποιηθούν έτσι ώστε να ισχύει η απαίτηση πως η ταχύτητα του φωτός στο κενό είναι μια οριακή ταχύτητα και κανένα σωμάτιο δεν μπορεί να την ξεπεράσει. Η απαίτηση αυτή μεταφέρεται στο γεγονός ότι οι εξισώσεις είναι αναλλοίωτες από τους μετασχηματισμούς Λόρεντς.

Η σχετικιστική διόρθωση του νευτώνειου πεδίου οδηγεί στις ακόλουθες εξισώσεις της ειδικής θεωρίας της σχετικότητας.

$$\vec{f} = \frac{d\vec{p}}{dt} \qquad\qquad m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Η κλασσική θεωρία των πεδίων ασχολείται με τους νόμους των θεμελιωδών δυναμικών πεδίων του πεδίου της βαρύτητας και του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

Η δύναμη της παγκοσμίου έλξης στο πεδίο της βαρύτητας είναι

$$\vec{F} = G\frac{m_1 m_2}{r^2}\vec{r}$$

Η σχετικιστική "διόρθωση" του πεδίου της βαρύτητας οδήγησε στην γενική θεωρία της σχετικότητας.

Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι πλουσιότερο σε δομή. Οι εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητισμού είναι οι εξισώσεις του Μάξγουελ

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \qquad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{dt}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \qquad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{dt} + \frac{4\pi}{c}\vec{J}$$

Οι εξισώσεις είναι αναλλοίωτες από τους μετασχηματισμού του Λόρεντς και άρα ικανοποιούν τις σχετικιστικές απαιτήσεις και δεν χρειάζονται σχετικιστική τροποποίηση.

Η δύναμη που ασκείται σε ένα φορτίο e μέσα στο πεδίο δίνεται από την σχέση του Λόρεντς

$$\vec{F} = e\left(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right)$$

Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο διαδίδεται και στο κενό όπου $\rho = 0$ και $\vec{J} = 0$. Τα δύο πεδία ικανοποιούν την κλασσική κυματική εξίσωση.

$$\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{E} = 0 \qquad \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{B} = 0$$

Παρατήρηση: Η λύση των παραπάνω κυματικών εξισώσεων για ένα στάσιμο ηλεκτρομαγνητικό κύμα, δίνει για τα κυματικά μεγέθη όπως η συχνότητα και το μήκος κύματος διακριτές τιμές είναι δηλαδή μεγέθη κβαντισμένα.

Τέλος η κλασσική στατιστική μηχανική διαπραγματεύεται μακροσκοπικά αντικείμενα όπου ο αριθμός των σωματιδίων που τα απαρτίζουν είναι πολύ μεγάλος. Η στατιστική μηχανική έχει ως αντικείμενο την ερμηνεία των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ύλης όπως για παράδειγμα ο όγκος, η πίεση, η θερμοκρασία κ.λ.π. με βάση τις μικροσκοπικές της ιδιότητες. Η λύση των εξισώσεων για κάθε σωματίδιο είναι αδύνατος λόγω του πλήθους τους. Από την άλλη μεριά ορισμένα φαινόμενα όπως ο νόμος της αύξησης της εντροπίας δεν μπορεί να αποδειχτεί από τις εξισώσεις των μικροσκοπικών σωματιδίων.

1.2 Η κβαντική μηχανική

Το περιεχόμενο της κβαντικής θεωρίας συνίσταται στην διαπίστωση ότι όλα τα σωμάτια και όλα τα πεδία έχουν ταυτόχρονα σωματιδιακό και κυματικό χαρακτήρα. Η κλασσική διαίρεση σε σωμάτια και κύματα, δεν φαίνεται να ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα του μικρόκοσμου. Οι δύο θεωρητικές απεικονίσεις, η σωματιδιακή και η κυματική, είναι ισοδύναμες και συμπληρωματικές περιγραφές της ίδιας πραγματικότητας. Αυτός ο δυϊσμός της ύλης έχει σαν συνέπεια βασικά χαρακτηριστικά της κλασσικής μηχανικής και της καθημερινής μας εμπειρίας, να μην ισχύουν στον μικρόκοσμο.

Βασικό χαρακτηριστικό της κλασσικής μηχανικής είναι η κίνηση πάνω σε καλά καθορισμένες τροχιές. Η κατάσταση ενός κλασσικού συστήματος προσδιορίζεται πλήρως, αν ξέρουμε την θέση και την ορμή του ανά πάσα χρονική στιγμή. Στην περιοχή του μικρόκοσμου είναι εξ ορισμού αδύνατο να μετρηθούν ταυτόχρονα η θέση και η ορμή και συνεπώς μια τέτοια περιγραφή της κατάστασης ενός κβαντομηχανικού συστήματος είναι αδύνατη. Οσο περισσότερο γνωρίζουμε τη θέση του συστήματος τόσο λιγότερο μπορούμε να ξέρουμε την ορμή του. Αυτή η διαπίστωση πρέπει, να τονίσουμε, ότι δεν οφείλεται στην ανεπάρκεια των πειραματικών διατάξεων, αλλά είναι ένας "νόμος της φύσης". Στην περιοχή του μικρόκοσμου, οι νόμοι της φυσικής όπως τους γνωρίζουμε από την καθημερινή μας εμπειρία παύουν να ισχύουν. Τα γεγονότα κυβερνώνται από πιθανότητες. Τα σωματίδια της κβαντομηχανικής είναι πραγματικά αλλά περιγράφονται από ένα κύμα. Η ένταση του κύματος σε κάποιο σημείο του χώρου, είναι ένα μέτρο της πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο σε εκείνο το συγκεκριμένο σημείο.

Ενα άλλο επίσης βασικό χαρακτηριστικό της κλασσικής μηχανικής, είναι το γεγονός ότι φυσικά μεγέθη όπως για παράδειγμα η ενέργεια η ορμή και η στροφορμή, παίρνουν όλες τις δυνατές τιμές στο επιτρεπόμενο διάστημα. Στην περιοχή του μικρόκοσμου τα μεγέθη αυτά είναι δυνατόν να παίρνουν ορισμένες μόνο τιμές. Το φαινόμενο ονομάζεται κβάντωση. Η έννοια της κβάντωσης όμως δεν είναι ολότελα ξένη προς την κλασσική μηχανική. Ενα τυπικό παράδειγμα είναι τα στάσιμα κύματα μιας χορδής. Το μήκος κύματος της χορδής μπορεί να πάρει ορισμένες μόνο τιμές. Ετσι μπορούμε να πούμε ότι η κβάντωση της κβαντομηχανικής, οφείλεται στην κυματική συμπεριφορά της ύλης.

Η διαδικασία της μέτρησης παίζει στην κβαντομηχανική έναν κεντρικό ρόλο. Με τον όρο μέτρηση εννοούμε την αλληλεπίδραση ενός αντικειμένου της κβαντομηχανικής για παράδειγμα ένα ηλεκτρόνιο με ένα κλασσικό αντικείμενο που ονομάζεται συσκευή μέτρησης. Η μέτρηση επηρεάζει την κατάσταση του ηλεκτρονίου και είναι αδύνατο να μηδενίσουμε την επίδραση αυτή. Ούτε είναι δυνατόν να την υπολογίσουμε και την αφαιρέσουμε από το αποτέλεσμα. Κάθε προσπάθεια να μειώσουμε την αλληλεπίδραση συνεπάγεται μικρότερη ακρίβεια στην μέτρηση. Φαίνεται ότι τα δυναμικά χαρακτηριστικά του ηλεκτρονίου εμφανίζονται μόνο σαν αποτελέσματα της μέτρησης.

Θα περιγράψουμε παρακάτω συνοπτικά τα πρώτα προβλήματα που απασχόλησαν τους φυσικούς και οδήγησαν στην ανακάλυψη της κβαντομηχανικής. Η κλασσική μηχανική για τα πειράματα αυτά οδηγούσε σε αποτελέσματα εντελώς διαφορετικά από τα πειραματικά δεδομένα.

1.3 Η ακτινοβολία του μαύρου σώματος

Μαύρο σώμα είναι κάθε υλικό που έχει την ιδιότητα να απορροφά τελείως την ακτινοβολία, οποιασδήποτε συχνότητας που προσπίπτει επάνω της. Μια μικρή οπή στο τοίχωμα μιας κοιλότητας είναι η “επιφάνεια” ενός μαύρου σώματος, διότι η ακτινοβολία που θα πέσει στην οπή θα απορροφηθεί εντελώς λόγω πολλαπλών ανακλάσεων. Η ακτινοβολία που αναδύεται από μια οπή στο τοίχωμα μιας κοιλότητας, που την κρατάμε σε κάποια ψηλή θερμοκρασία, ονομάστηκε ακτινοβολία μαύρου σώματος. Το φάσμα της ακτινοβολίας αυτής είναι συνεχές.

Για να βγάλουμε από τη μέση επουσιώδεις παραμέτρους στο πρόβλημα αυτό, βρίσκουμε την φασματική πυκνότητα $\upsilon(\nu, T)$ που δίνεται από τον τύπο

$$u(\nu, T) = \frac{\Delta \mathrm{E}}{V \Delta \nu}$$

όπου $\Delta\mathrm{E}$ είναι το μέρος της ακτινοβολίας που αντιστοιχεί στο διάστημα συχνοτήτων από ν μέχρι $\nu + \Delta\nu$, V ο όγκος της κοιλότητας και T η θερμοκρασία.

Ολες οι προσπάθειες να εξηγηθεί το φάσμα του μαύρου σώματος, κατέληξαν σε αποτυχία. Η κλασσική πρόβλεψη δίνει για την φασματική πυκνότητα τον τύπο

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^2}\varkappa T \sim \nu^2$$

Η σχέση αυτή είναι μια παραβολή και είναι σωστή μόνο στην περιοχή των χαμηλών συχνοτήτων. Αργότερα βρέθηκε εμπειρικά και άλλος τύπος που ήταν σωστός στην περιοχή των υψηλών συχνοτήτων.

Το 1900 ο Πλανκ κατάφερε να εξηγήσει το πρόβλημα αυτό με την παραδοχή ότι η ενέργεια δεν διαδίδεται κατά συνεχή τρόπο αλλά με διακεκριμένα ποσά ενέργειας, τα ενεργειακά κβάντα. Ετσι η ακτινοβολία αποκτάει κάποιο σωματιδιακό υπόβαθρο.

"Η ενέργεια ενός κύματος μέσα στην κοιλότητα είναι κβαντισμένη. Οι μόνες επιτρεπόμενες τιμές για την ενέργεια, είναι τα ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας $h\nu$".

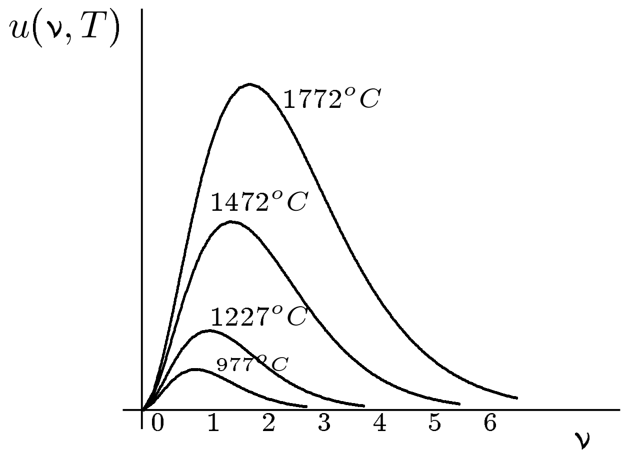
Η σταθερά h έχει διαστάσεις δράσης και ονομάζεται σταθερά δράσης του Πλανκ. Πολλές φορές χρησιμοποιούμε την σταθερά $\hbar = h/2\pi$.

$$h = 6,625 \cdot 10^{-27} erg \cdot sec \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \cdot 10^{-27} erg \cdot sec$$

Με την παραδοχή αυτή ο Πλανκ κατάφερε να αποδείξει τον νόμο της ακτινοβολίας του μαύρου σώματος που είχε ήδη βρει εμπειρικά από τα πειραματικά δεδομένα. Ο νόμος αυτός περιγράφεται από την σχέση

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/\varkappa T} - 1}$$

Η σταθερά k είναι η σταθερά του Μπόλτσμαν.

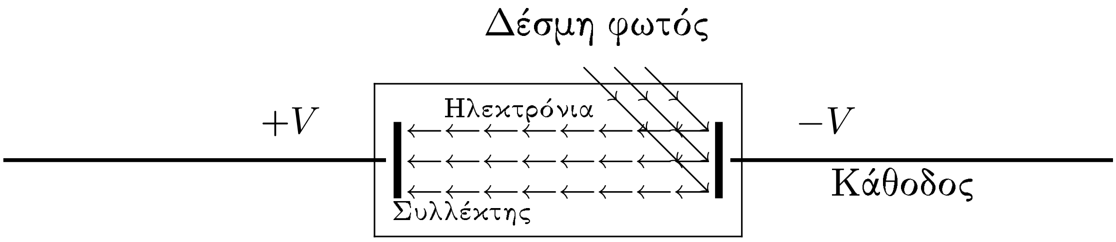


Σχήμα 1.1
Η φασματική πυκνότητα για τέσσερις διαφορετικές θερμοκρασίες.

Η επιτυχία αυτή του Πλανκ σημειώνει και την αρχή της κβαντομηχανικής. Η σταθερά h αποτελεί τον βασικό πυρήνα της κβαντομηχανικής, όπως ακριβώς και η ταχύτητα του φωτός για την θεωρία της σχετικότητας.

1.4 Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Οταν φως ή ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία πέσει πάνω σε μια μεταλλική πλάκα, τότε προκαλείται εκπομπή ηλεκτρονίων από την επιφάνεια της πλάκας. Αυτό που προκαλεί έκπληξη και δεν μπορεί να εξηγηθεί από την κλασσική φυσική, είναι το γεγονός ότι η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων που διαφεύγουν από την κάθοδο είναι ανεξάρτητη από την ένταση του φωτός. Εξαρτάται από την συχνότητα κατά ένα πολύ απλό τρόπο. Αυξάνει γραμμικά με την συχνότητα. Αν αυξήσουμε την ένταση του φωτός, απλώς αυξάνουμε τον αριθμό των ηλεκτρονίων που εκπέμπονται αλλά όχι την ενέργεια τους. Επίσης το φωτοηλεκτρικό ρεύμα εμφανίζεται μόνο όταν η συχνότητα ν είναι μεγαλύτερη από μια ελάχιστη τιμή ν_{min}, χαρακτηριστική της μεταλλικής πλάκας. Κάτω από αυτή την συχνότητα δεν εκπέμπεται κανένα ηλεκτρόνιο, όσο και αν αυξήσουμε την ένταση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.



Σχήμα 1.2
Η πειραματική διάταξη για την μελέτη του φωτοηλεκτρικού φαινομένου.

Το φαινόμενο εξηγήθηκε από τον Αϊνστάιν με την παραδοχή ότι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα αποτελείται από φωτόνια με ενέργεια

$$\mathrm{E} = h\nu$$

Ενα φωτόνιο απορροφάται από ένα ηλεκτρόνιο της πλάκας δίνοντας του ενέργεια. Ενα μέρος από την ενέργεια αυτή εξουδετερώνει το έργο εξαγωγής

w της μεταλλικής πλάκας και το υπόλοιπο μετατρέπεται σε κινητική ενέργεια του εξερχόμενου ηλεκτρονίου. Δηλαδή

$$\mathrm{E}_{\kappa\iota\nu} = \frac{1}{2}m\upsilon^2 = h\nu - w \quad \Longrightarrow \quad h\nu_{min} = w$$

Ετσι ο Αϊνστάιν επιβεβαίωσε ότι πρέπει να αποδοθεί και σωματιδιακός χαρακτήρας δίπλα στον κυματικό για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Οι σχέσεις

$$\mathrm{E} = h\nu \qquad\qquad p = \frac{h}{\lambda}$$

συνδέουν τα κυματικά χαρακτηριστικά του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου συχνότητα, μήκος κύματος, με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά ενέργεια, ορμή του φωτονίου.

Τέλος με την εξήγηση του φαινομένου Κόμπτον και οι τελευταίες αντιρρήσεις για το δυαδικό χαρακτήρα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας καταρρέουν. Κατά το φαινόμενο αυτό, το μήκος κύματος των ακτινών Χ και άλλων ηλεκτρομαγνητικών ακτινοβολιών με μεγάλη ενέργεια, αυξάνει μετά από την ελαστική σκέδαση των φωτονίων τους πάνω σε ηλεκτρόνια. Η υπόθεση του σωματιδιακού δυϊσμού της ακτινοβολίας αποκτά μια ακλόνητη πειραματική βάση.

1.5 Η σταθερότητα των ατόμων

Τα επόμενα χρόνια τα πειραματικά δεδομένα οδήγησαν τους φυσικούς στην αντίστροφη πορεία. Αφού η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και τα φωτεινά κύματα συμπεριφέρονται και σαν σωματίδια, γιατί δεν θα έπρεπε και τα σωματίδια να συμπεριφέρονται σαν κύματα.

Διαπιστώθηκε από τον Μπορ, ότι οι ενεργειακές καταστάσεις των ηλεκτρονίων μέσα στα άτομα είναι αναγκαστικά κβαντισμένες. Οι επιτρεπόμενες ενέργειες δίνονται από την σχέση

$$\mathrm{E}_n = -h\nu_n$$

και ορίζουν μια στάσιμη κατάσταση στην οποία το άτομο δεν ακτινοβολεί. Ακτινοβολία εκπέμπεται μόνο κατά την μετάβαση του ατόμου από μια ανώτερη σε μια κατώτερη ενεργειακή στάθμη. Η αρχή διατήρησης της ενέργειας προσδιορίζει την συχνότητα του εκπεμπόμενου φωτονίου

$$\mathrm{E} = \mathrm{E}_n - \mathrm{E}_m \quad \Longrightarrow \quad \nu = \nu_m - \nu_n$$

Επίσης επιτρέπονται μόνο εκείνες οι κυκλικές τροχιές, για τις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς του Πλανκ. Δηλαδή

$$l_n = \hbar n \quad \text{όπου} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{και} \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Με τις παραδοχές αυτές ο Μπορ κατάφερε να αποδείξει και τον δεύτερο εμπειρικό τύπο της φασματοσκοπίας, ότι δηλαδή η ακολουθία των φασματικών όρων είναι

$$\nu_n = \frac{R}{n^2} \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

όπου R μια εμπειρική σταθερά, γνωστή σαν σταθερά Ρύντμπεργκ.

Αργότερα ο ντε Μπρολί μπόρεσε να δει, ότι για να εξηγηθούν τα φαινόμενα αυτά πρέπει να αποδοθούν στα ηλεκτρόνια και κυματικές ιδιότητες δίπλα στις σωματιδιακές. Ετσι οι σχέσεις του Αϊνστάιν για τα φωτόνια αποκτούν παγκόσμιο χαρακτήρα.

Τις σχέσεις αυτές μπορούμε να τις γράψουμε με την μορφή

$$\mathrm{E} = \hbar\omega \qquad\qquad p = \hbar k \quad \text{ή διανυσματικά } \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

όπου έχουμε θέσει

$$\nu = \frac{1}{T} \qquad\qquad \omega = \frac{2\pi}{T} \qquad\qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Το ν είναι η συχνότητα το Τ η περίοδος και το ω η κυκλική συχνότητα του κύματος. Η τελευταία σχέση $k = 2\pi/\lambda$ ορίζει το κυματάνυσμα k και είναι ανάλογη με την προηγούμενη σχέση $\omega = 2\pi/\lambda$.

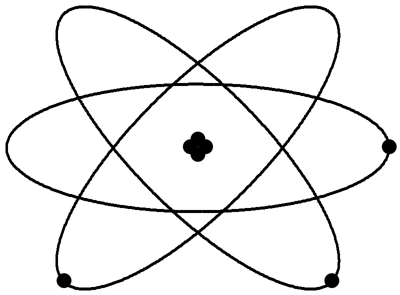
Οι σχέσεις αυτές συνδέουν τα σωματιδιακά με τα κυματικά χαρακτηριστικά της ύλης και είναι οι ίδιες τόσο για τα φωτόνια όσο και για τα σωματίδια της ύλης, όπως τα ηλεκτρόνια και τα πρωτόνια. Ετσι αν παραστήσουμε ένα ηλεκτρόνιο σαν ένα στάσιμο κύμα, η συνθήκη για να διατηρούνται στάσιμα κύματα με μήκος κύματος λ σε μια περιφέρεια ακτίνας r είναι

$$2\pi r = n\lambda \qquad\qquad n = 1, 2, \ldots$$

Αλλά ισχύει η σχέση $\lambda = \frac{h}{p}$ και επομένως βρίσκουμε

$$2\pi r = \frac{nh}{p} \qquad\qquad pr = \hbar n$$

Η τελευταία σχέση δείχνει ότι η στροφορμή pr είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς $\hbar$ και αποτελεί την δεύτερη συνθήκη της κβάντωσης του Μπορ.



Σχήμα 1.3
Σύμβολο της ατομικής φυσικής που δεν έχει καθόλου σχέση με την δομή των ατόμων.

Για την πληρέστερη κατανόηση των προβλημάτων που εμφανίζονται από τον κυματοσωματιδιακό δυϊσμό της ύλης, περιγράφουμε ένα νοητό πείραμα, που φαίνεται καθαρά η αδυναμία μας να το ερμηνεύσουμε με την κλασσική φυσική. Το πείραμα αυτό έχει γίνει από τους Ντέιβισον, Τόμσον με πιο πολύπλοκες διατάξεις από αυτή που περιγράφεται, με δέσμες ηλεκτρονίων που διασκορπίζονται από τα άτομα κάποιου κρύσταλλου.

1.6 Το πείραμα των δύο οπών

Θεωρούμε σε ένα σημείο Σ μια πηγή η οποία εκπέμπει κύματα ή σωματίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Σε κάποια απόσταση από την πηγή βρίσκεται ένα φράγμα με δύο οπές Α και Β. Από τις οπές αυτές περνούν κύματα ή σωματίδια πίσω από το φράγμα και φθάνουν στο επίπεδο Ε. Πάνω στο επίπεδο αυτό υπάρχει ένας κατάλληλος ανιχνευτής, που προσδιορίζει την ένταση του κύματος ή το πλήθος των σωματιδίων που πέφτουν σε κάθε περιοχή του επιπέδου Ε.

Θα κάνουμε τρία πειράματα. Στο ένα η πηγή εκπέμπει κλασσικά σωματίδια, στο δεύτερο εκπέμπει κλασσικά κύματα και στο τρίτο εκπέμπει σωματίδια του μικρόκοσμου. Θα καταγράφουμε τα αποτελέσματα και θα προσπαθήσουμε να τα ερμηνεύσουμε.

Αν η πηγή εκπέμπει σφαιρίδια μακροσκοπικών διαστάσεων, τότε το πλήθος των σφαιριδίων P_{12} που πέφτουν σε κάποια περιοχή του επιπέδου όταν και οι δύο οπές είναι ανοικτές, είναι ίσο με το άθροισμα του πλήθους των σφαιριδίων P_1 που πέφτουν στην ίδια περιοχή όταν μόνο η A είναι ανοικτή, συν το πλήθος P_2 όταν μόνο η B είναι ανοικτή

$$P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$$

Δεν υπάρχουν φαινόμενα συμβολής και η ενέργεια φθάνει στο επίπεδο E κατά ασυνεχή ποσά. Το αποτέλεσμα φαίνεται στο δεύτερο επίπεδο E του σχήματος.

Αν η πηγή εκπέμπει κύματα, τότε κατά την αρχή του Χόυχενς τα σημεία A και B γίνονται δευτερογενείς πηγές κυμάτων, περίθλαση. Τα κύματα αυτά συμβάλουν και δίνουν πάνω στο επίπεδο ένα σχηματισμό διαφορετικό από αυτόν που βρίσκουμε αθροίζοντας αυτό που βλέπουμε στην περίπτωση που ανοίγει η κάθε οπή ξεχωριστά. Συμβολίζουμε με

$$\xi_1(x,t) = |\xi_1(x)| e^{i\varphi_1(x,t)} \quad \text{και} \quad \xi_2(x,t) = |\xi_2(x)| e^{i\varphi_2(x,t)}$$

τα κύματα που πηγάζουν από τα σημεία A και B και με

$$\mathrm{I}_1(x) = |\xi_1(x)|^2 \quad \text{και} \quad \mathrm{I}_2(x) = |\xi_2(x)|^2$$

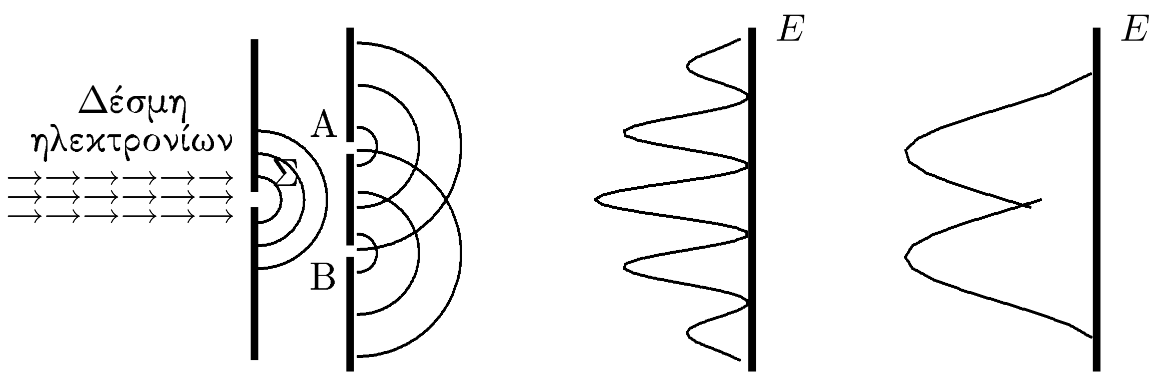
τις εντάσεις των κυμάτων αυτών. Η ένταση του κύματος που πέφτει στο επίπεδο E, όταν και οι δύο οπές είναι ανοικτές, είναι

$$\begin{aligned} I_{12}(x) =& |\xi_1(x,t)| + \xi_2(x,t)|^2 = \\ & |\xi_1(x)|^2 + |\xi_2(x)|^2 + 2|\xi_1(x)|\ |\xi_2(x)| \,\text{συν}\,(\varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned}$$

Δηλαδή είναι το άθροισμα των εντάσεων I_1, I_2 συν ένα ακόμα όρο

$$\mathrm{I}_{12} = \mathrm{I}_1 + \mathrm{I}_2 + 2\sqrt{\mathrm{I}_1 \mathrm{I}_2}\,\text{συν}\,(\varphi_1 - \varphi_2)$$

Ο τελευταίος αυτός όρος ονομάζεται όρος συμβολής και είναι συνάρτηση της διαφοράς φάσης των δύο κυμάτων. Επίσης η ενέργεια φθάνει στο επίπεδο E συνεχώς και μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή. Το αποτέλεσμα του πειράματος φαίνεται στο πρώτο επίπεδο Ε του σχήματος. Μέχρι εδώ το πείραμα μπορεί να εξηγηθεί με όρους της κλασσικής φυσικής.



Σχήμα 1.4
Οταν η πηγή εκπέμπει ηλεκτρόνια και οι δύο οπές είναι ανοικτές εμφανίζονται φαινόμενα συμβολής.

Υποθέτουμε τέλος ότι η πηγή εκπέμπει σωματίδια για παράδειγμα ηλεκτρόνια. Ο ανιχνευτής στο επίπεδο Ε είναι ένας απαριθμητής Γκάιγκερ, με τον οποίο προσδιορίζουμε το πλήθος των ηλεκτρονίων που πέφτουν σε κάποια περιοχή του επιπέδου Ε.

Το πείραμα δείχνει ότι η ενέργεια μεταφέρεται από διακεκριμένους στοιχειώδεις φορείς, όπως στην περίπτωση των κλασσικών σφαιριδίων αλλά εμφανίζονται φαινόμενα συμβολής, όπως στην περίπτωση των κλασσικών κυμάτων. Φαινόμενα συμβολής παρατηρούνται ακόμα και όταν η πηγή εκπέμπει ηλεκτρόνια σε τόσο αργό ρυθμό, ώστε ένα μόνο ηλεκτρόνιο να βρίσκεται σε κίνηση ανάμεσα στην πηγή και τον μετρητή. Ετσι το μοναδικό αυτό ηλεκτρόνιο φαίνεται να συμβάλλει με τον εαυτό του !

Η πρόταση λοιπόν που μας φαίνεται σαν προφανής ότι δηλαδή το ηλεκτρόνιο πέρασε ή από την οπή Α ή από την οπή Β, δεν μπορεί να είναι σωστή. Αν δεχτούμε μια από τις δύο αυτές δυνατότητες, δεν θα μπορέσουμε να ερμηνεύσουμε τα φαινόμενα της συμβολής που παρατηρούνται. Η πρόταση αυτή απλώς δεν έχει νόημα για την φυσική. Το να συμπεράνουμε ότι πέρασε από την μια ή την άλλη οπή, όταν δεν το παρατηρούμε, είναι σφάλμα και οδηγεί σε αποτέλεσμα αντίθετο από το πείραμα. Αν δοκιμάσουμε να προσδιορίσουμε από ποια οπή πέρασε το ηλεκτρόνιο, φωτίζοντας κατάλληλα τα ηλεκτρόνια, τότε τα φαινόμενα συμβολής εξαφανίζονται και η πρόταση ότι το ηλεκτρόνιο πέρασε από την Α ή την Β οπή είναι σωστή.

Το απλοποιημένο αυτό πείραμα είναι το καθαρότερο παράδειγμα της επίδρασης του παρατηρητή πάνω στο αντικείμενο που παρατηρούμε. Καμιά πρόταση δεν έχει νόημα για την κβαντομηχανική, αν δεν περιγράψουμε το πείραμα με το οποίο θα προσδιορίσουμε την αλήθεια ή όχι της πρότασης. Επίσης και τα φυσικά μεγέθη πρέπει να τα ορίζουμε περιγράφοντας το πείραμα, με το οποίο μπορούν να μετρηθούν "κατ' αρχήν". Το ηλεκτρόνιο του πειράματος εμφανίζεται σαν κλασσικό σωμάτιο στο σημείο Σ και σε ένα σημείο του επιπέδου Ε, οπότε δίνει ένα παλμό στον ανιχνευτή. Το φαινόμενο της συμβολής που παρατηρείται κάνει αδύνατο τον προσδιορισμό, έστω και θεωρητικά, οποιασδήποτε σαφώς καθορισμένης τροχιάς. Οποιοσδήποτε συλλογισμός που χρησιμοποιεί την γνώση κάποιας τροχιάς, δηλαδή τον προσδιορισμό της θέσης και της ορμής σε κάποια χρονική στιγμή, πρέπει να είναι εσφαλμένος.

Ο μόνος τρόπος για να κατανοήσουμε το πείραμα αυτό σύμφωνα με την άποψη των φυσικών της σχολής της Κοπεγχάγης είναι με βάση τις πιθανότητες.

Σύμφωνα με αυτή την ερμηνεία, τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν να υπάρχει ένα μέγεθος $\psi(x,t)$, τέτοιο ώστε η πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο στην περιοχή dx του χώρου να δίνεται από την σχέση

$$P(x) = |\psi(x)|^2 dx$$

Η ποσότητα $|\psi(x)|^2$ ονομάζεται πυκνότητα πιθανότητας. Εχουμε τότε κατ' αναλογία με τα κύματα την πυκνότητα πιθανότητας των δύο κυμάτων

$$P_1(x) = |\psi_1(x)|^2 \quad \text{και} \quad P_2(x) = |\psi_2(x)|^2$$

όταν η οπή Α ή η οπή Β είναι ανοικτές αντιστοίχως. Οταν και οι δύο είναι ανοικτές η πυκνότητα πιθανότητας δίνεται από την σχέση

$$P_{12}(x) = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = P_1(x) + P_2(x) + 2\sqrt{P_1(x)P_2(x)}\,\text{συν}\,(\varphi_1 - \varphi_2)$$

Ο τρίτος όρος του παραπάνω αθροίσματος εξηγεί τα φαινόμενα της συμβολής. Είναι συνεπώς σαφές γιατί ορίζουμε σαν πυκνότητα πιθανότητας το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης.

Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να προβλέψουμε με ακρίβεια την εικόνα της συμβολής που παρατηρούμε στο επίπεδο Ε, αλλά είναι αδύνατο να προβλεφθεί η πορεία κάποιου συγκεκριμένου ηλεκτρονίου. Υπάρχει μια συγκεκριμένη πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να περάσει από την μια οπή και μια πιθανότητα να περάσει από την άλλη. Αυτά τα κύματα πιθανότητας είναι που συμβάλλουν και δίνουν την εικόνα που παρατηρούμε με τον ανιχνευτή. Τα κύματα αυτά πιθανότητας είναι μια καθαρά μαθηματική έννοια, δεν εκφράζουν κανένα φυσικό μέγεθος και συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο όπως τα κύματα νερού για παράδειγμα. Σχετίζονται με τη γνώση μας για την κατάσταση του ηλεκτρονίου. Ετσι η φυσική δεν μας λέει τίποτα για τον κόσμο αυτόν καθ' αυτόν, μιλά μόνο για τις παρατηρήσεις αυτού του κόσμου που γίνονται από τον άνθρωπο. Τα σωμάτια φαίνονται "πραγματικά" μόνο όταν τα παρατηρούμε και ιδιότητες όπως ορμή ή θέση αποτελούν ίσως κατασκευάσματα της παρατήρησης.

Ορισμένοι από τους μεγάλους φυσικούς που συγκεντρώθηκαν την δεκαετία του 1920 στην Κοπεγχάγη και έδωσαν μαζί με τον Μπορ την ερμηνεία αυτή είναι ο Χάιζενμπεργκ, ο Πάουλι, ο Ερενφεστ, ο Μπλοχ, ο Λαντάου, ο Κράμερς, ο Γκαμόφ και άλλοι. Πολλοί φυσικοί προσπάθησαν να βρουν διεξόδους από την ερμηνεία αυτή της κβαντομηχανικής. Στους αντίπαλους της ερμηνείας της Κοπεγχάγης συγκαταλέγονται ο Αϊνστάιν, ο Σρέντινγκερ, ο ντε Μπρολί, ο Λάουε, ο Μπομ, ο Μποπ, ο Αλεξαντρόφ και άλλοι.

Ο Αϊνστάιν υπήρξε ο πλέον οξύς από τους πολέμιους του πιθανοθεωρητικού χαρακτήρα της θεωρίας. Χαρακτηριστική είναι η φράση του "Δεν μπορώ να πιστέψω ότι ο Θεός παίζει ζάρια με τον κόσμο". Κάθε όμως προσπάθεια που έγινε μέχρι σήμερα για να απαλλαγεί η φυσική από τις πιθανότητες οδήγησε μάλλον στην ενίσχυση αυτού του πιθανολογικού κόσμου της κβαντομηχανικής. Το φυσικό περιεχόμενο της κβαντικής θεωρίας δεν έχει αμφισβητηθεί ποτέ, έχει άλλωστε ένα τεράστιο όγκο πειραματικών επαληθεύσεων.

1.7 Οι σχέσεις απροσδιοριστίας

Οι σχέσεις που συνδέουν τα κυματικά με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά της ύλης

$$\mathrm{E} = \hbar\omega \qquad\qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

ισχύουν για όλα τα σωματίδια του μικρόκοσμου και έχουν επαληθευτεί από όλα τα πειράματα. Οι σχέσεις αυτές επιτρέπουν να δοθεί μια ποσοτική έκφραση στην ελάχιστη δυνατή απροσδιοριστία που προκαλεί η μέτρηση της θέσης στην μέτρηση της ορμής ενός σωματιδίου.

Υποθέτουμε ότι η μέτρηση ενός μεγέθους Α με ακρίβεια ΔΑ προκάλεσε μια διαταραχή στο σύστημα, έτσι ώστε αν μετρήσουμε αμέσως μετά ένα άλλο μέγεθος B, χωρίς να αφήσουμε το σύστημα να εξελιχθεί ως προς τον χρόνο, βρίσκουμε μια τιμή στο διάστημα (B+ΔB, B−ΔB). Το γινόμενο (ΔA)(ΔB) δίνει το μέτρο της απροσδιοριστίας του συστήματος.

Αναλύοντας το παρακάτω νοητό πειράματα, ο Χάιζενμπεργκ απέδειξε ότι για την θέση και την ορμή ενός συστήματος ισχύει η σχέση

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Η σχέση αυτή σημαίνει ότι θέση και ορμή είναι αδύνατο να μετρηθούν ταυτόχρονα.

Αν η θέση για παράδειγμα έχει μετρηθεί με ακρίβεια Δx που πλησιάζει το μηδέν, τότε η παραπάνω σχέση λέει ότι η ακρίβεια Δp_x για την μέτρηση της ορμής πλησιάζει το άπειρο εφόσον $(\Delta p_x) \geq \hbar/2(\Delta x)$. Αντίστροφα αν μετρήσουμε με ακρίβεια την ορμή $(\Delta p_x = 0)$ τότε η θέση του συστήματος είναι απροσδιόριστη

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2(\Delta p_x)} \to \infty$$

Αρα το σύστημα βρίσκεται σε μιά περιοχή του χώρου και όχι σε ένα σημείο. Ενα τέτοιο σύστημα είναι για παράδειγμα ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα.

Με την βοήθεια ενός μικροσκοπίου προσδιορίζουμε την θέση ενός ηλεκτρονίου που ηρεμεί σε ένα σημείο. Για την μέτρηση αυτή το ηλεκτρόνιο βομβαρδίζεται από μια δέσμη φωτονίων, με αποτέλεσμα το ηλεκτρόνιο να αποκτήσει κάποια ορμή. Αν το σωμάτιο είναι ένα μακροσκοπικό σώμα σίγουρα δεν θα κουνηθεί από την θέση του. Αντίθετα επειδή η μάζα του ηλεκτρονίου είναι συγκρίσιμη με αυτή του φωτονίου η ταχύτητα που θα αποκτήσει το ηλεκτρόνιο δεν είναι αμελητέα.

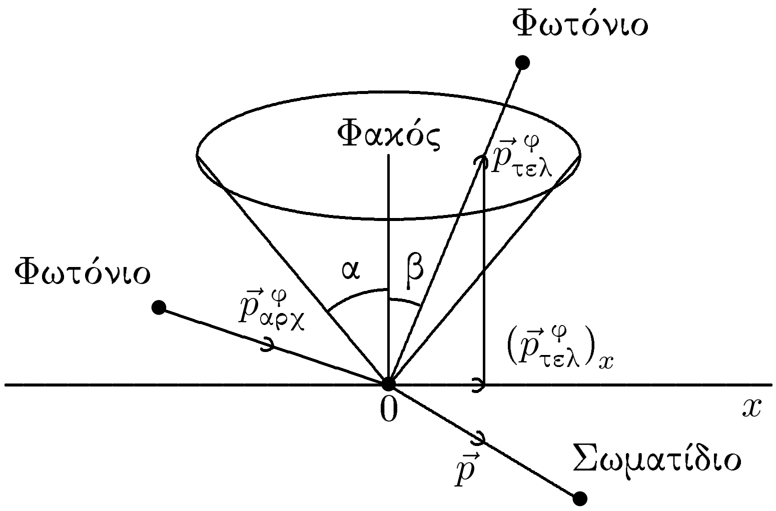
Το ελάχιστο σφάλμα που μπορεί να προσδιοριστεί η θέση του σωματιδίου στο πείραμα αυτό, εξαρτάται από την διακριτική ικανότητα του μικροσκοπίου και δίνεται από τον ακόλουθο τύπο της οπτικής

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\text{ημ}\,\alpha} \tag{1.1}$$

Το λ είναι το μήκος κύματος του φωτός και το α είναι η γωνία της κορυφής του κώνου με βάση τον αντικειμενικό φακό και κορυφή το παρατηρούμενο ηλεκτρόνιο όπως έχει σχεδιαστεί στο σχήμα.

Ας υποθέσουμε ότι ένα μόνο φωτόνιο σκεδάζεται πάνω στο ηλεκτρόνιο. Για να φθάσει το φωτόνιο αυτό στο μάτι του παρατηρητή, πρέπει το διάνυσμα $\vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}$ της ορμής του να βρίσκεται στο εσωτερικό του κώνου, με κορυφή το ηλεκτρόνιο και βάση τον φακό του μικροσκοπίου. Το φωτόνιο έδωσε μια ορμή στο ηλεκτρόνιο ίση με την διαφορά

$$\vec{p} = \vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda} - \vec{p}^{\,\varphi}_{\alpha\rho\chi} \tag{1.2}$$



Σχήμα 1.5
Το νοητό πείραμα για την απόδειξη
της σχέσης απροσδιοριστίας

Το διάνυσμα της τελικής ορμής του φωτονίου πρέπει να βρίσκεται μέσα στον κώνο του σχήματος δηλαδή

$$\beta \le \alpha$$

και επειδή οι γωνίες αυτές είναι μικρότερες του $\pi/2$, πρέπει να ισχύει η σχέση

$$\text{ημ}\,\beta \le \text{ημ}\,\alpha$$

Αν συμβολίσουμε με

$$(p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x = |\vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}|\,\text{ημ}\,\beta$$

την συνιστώσα της ορμής του φωτονίου στην x διεύθυνση έχουμε

$$-\,|\vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}|\,\text{ημ}\,\alpha \le (p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x \le |\vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}|\,\text{ημ}\,\alpha$$

Αλλά λόγω της (1.2) έχουμε

$$|\vec{p}^{\,\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}| \leq |\vec{p}^{\,\varphi}_{\alpha\rho\chi}|$$

Επί πλέον για το φωτόνιο ισχύει

$$|p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi}| = \frac{h}{\lambda}$$

και επομένως η παραπάνω σχέση γίνεται

$$-\frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha \leq (p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x \leq \frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha$$

Αρα η συνιστώσα $(p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x$ της ορμής του φωτονίου κυμαίνεται ανάμεσα στα δύο όρια $\pm(h/\lambda)\,\eta\mu\,\alpha$ της παραπάνω σχέσης. Η απροσδιοριστία Δp_x της x συνιστώσας της ορμής του ηλεκτρονίου είναι επομένως λόγω της (1.2)

$$2\Delta p_x = \left[\left(p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi}\right)_x - \left(-\frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha\right)\right] - \left[\left(p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi}\right)_\chi - \left(+\frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha\right)\right] = 2\frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha$$

Αρα τελικά βρίσκουμε την απροσδιοριστίας της ορμής του ηλεκτρονίου.

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda}\,\eta\mu\,\alpha$$

Πολλαπλασιάζουμε την σχέση αυτή με την σχέση (1.1) και βρίσκουμε

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

Παρατηρούμε ότι αν εκλέξουμε να μετρήσουμε με ακρίβεια την θέση του σωματίου, μεταβάλλοντας ανάλογα το μήκος κύματος ή την διακριτική ικανότητα α του μικροσκοπίου, το αναγκάζουμε να αναπτύξει μεγαλύτερη απροσδιοριστία ως προς την ορμή του και αντιστρόφως. Το γινόμενο όμως $\Delta x \Delta p_x$ είναι ίσο με μια σταθερά, που δεν είναι στο χέρι μας ούτε να την ελαττώσουμε ούτε να την αυξήσουμε.

Για την παραπάνω σχέση υποθέσαμε ότι ένα μόνο φωτόνιο σκεδάζεται πάνω στο ηλεκτρόνιο. Στην πραγματικότητα το πείραμα γίνεται με μια δέσμη φωτονίων. Η κατάσταση είναι πολύ χειρότερη και ισχύουν τελικά οι σχέσεις

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Οι σχέσεις αυτές ονομάζονται σχέσεις απροσδιοριστίας ή σχέσεις αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ.

Οι σχέσεις αυτές σημαίνουν ότι δεν μπορούμε να μετρήσουμε ταυτόχρονα την θέση και την ορμή ενός σωματιδίου του μικρόκοσμου. Η θέση είναι μια ιδιότητα των σωματιδίων, τα σωματίδια μπορούν να εντοπιστούν ακριβώς. Τα κύματα από την άλλη μεριά δεν έχουν συγκεκριμένη θέση, αλλά τείνουν να καταλάβουν όλο τον χώρο που του δίνεται, έχουν όμως συγκεκριμένη ορμή. Ετσι οι σχέσεις απροσδιοριστίας του Χάιζενμπεργκ είναι μια αναγκαστική συνέπεια της κυματικής συμπεριφοράς των σωματιδίων. Οσο περισσότερα γνωρίζουμε για την κυματική εκδοχή της πραγματικότητας, τόσο λιγότερα γνωρίζουμε για την σωματιδιακή και αντιστρόφως.

Η μέτρηση της θέσης σε κάποια διεύθυνση δεν επηρεάζει καθόλου την ορμή στις άλλες δύο διευθύνσεις. Για παράδειγμα ισχύουν οι σχέσεις

$$\Delta p_y \Delta x = 0 \qquad \text{και} \qquad \Delta p_z \Delta x = 0$$

Σχέσεις απροσδιοριστίας ισχύουν και για άλλα ζεύγη μεγεθών. Η ενέργεια και ο χρόνος για παράδειγμα ικανοποιούν την ακόλουθη σχέση απροσδιοριστίας

$$\Delta \mathrm{E} \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Η σχέση αυτή είναι τελείως διαφορετική από τις προηγούμενες, διότι ο χρόνος δεν είναι ένα δυναμικό μέγεθος αλλά μία παράμετρος.

Η σχέση θα πρέπει να ισχύει μόνο όταν ο χρόνος εμφανίζεται αναλυτικά στην ενέργεια, όπως για παράδειγμα όταν το δυναμικό εξαρτάται από τον χρόνο. Αν με Δt συμβολίσουμε τον χρόνο που χρειάζεται ένα σύστημα για να μεταβάλλει την κατάσταση του και να αλλάξει ενέργεια, τότε αυτή η αλλαγή της ενέργειας είναι της τάξης

$$(\Delta \mathrm{E}) \sim \hbar/2(\Delta t)$$

Δηλαδή όσο πιο γρήγορα μεταβάλλεται ένα σύστημα τόσο μεγαλύτερη είναι η αβεβαιότητα της ενεργείας του. Αντιστρόφως ένα στάσιμο σύστημα που δεν μεταβάλλεται καθόλου η ενέργεια του $\Delta \mathrm{E} = 0$, έχει άπειρο χρόνο ζωής $\Delta t \to \infty$.

Η σχέση της αβεβαιότητας ενεργείας και χρόνου, περιορίζει την ακρίβεια με την οποία μπορεί να επαληθευτεί πειραματικά η αρχή διατηρήσης της ενέργειας. Αν μετρηθεί η ενέργεια ενός συστήματος δύο φορές, τότε τα αποτελέσματα θα διαφέρουν κατά

$$\Delta \mathrm{E} \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

όπου Δt ο χρόνος που διέρρευσε μεταξύ των δύο μετρήσεων.

Παράδειγμα: Για την βασική κατάσταση του ηλεκτρονίου του ατόμου του υδρογόνου για παράδειγμα η ενέργεια είναι απολύτως ορισμένη και επομένως $\Delta \mathrm{E} = 0$. Η σχέση δίνει $\Delta t \rightarrow \infty$ δηλαδή το σύστημα παραμένει χρονικά αμετάβλητο.

Υποθέτουμε τώρα ότι η μετάβαση από μια διεγερμένη κατάσταση στην βασική έχει εύρος $\Delta \mathrm{v} = 10^{12} sec^{-1}$. Αυτό δίνει μια αβεβαιότητα της ενέργειας ίση με

$$\Delta \mathrm{E} = h \cdot \Delta \mathrm{v} = 6,625 \cdot 10^{-27} \cdot 10^{12} = 6,625 \cdot 10^{-15} erg$$

Ο μέσος χρόνος ζωής Δt αυτής της διεγερμένης κατάστασης δίνεται από την σχέση αβεβαιότητας και είναι πολύ μικρός. Βρίσκουμε

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{6,625 \cdot 10^{-27}}{6,625 \cdot 10^{-15}} = 10^{-12} sec$$

Το ηλεκτρόνιο μπορεί να βρεθεί σε αυτήν την διεγερμένη κατάσταση χωρίς καμία εξωτερική διαταραχή. Η ενέργεια που χρειάστηκε για την διαδικασία αυτή την "δανείστηκε" από το κενό. Αμέσως μετά την έδωσε πίσω και γύρισε στην βασική κατάσταση, τόσο γρήγορα ώστε να μην παραβιάζεται η σχέση απροσδιοριστίας της ενέργειας και του χρόνου. Επειδή τώρα η ενέργεια ισοδυναμεί με κάποια μάζα, μπορούμε να πούμε ότι η διέγερση αυτή προήλθε από την σύγκρουση του ηλεκτρονίου με κάποιο σωματίδιο, με μάζα που δίνεται από την σχέση $E = mc^2$. Το ενδιάμεσο αυτό σωματίδιο ονομάζεται εν δυνάμει (virtual) σωματίδιο.

Παράδειγμα: Θα προσπαθίσουμε τώρα να δούμε και ποσοτικά τις σχέσεις αβεβαιότητας θέσης και ορμής. Υποθέτουμε ότι έχουμε μετρήσει την θέση ενός σωματιδίου με σφάλμα $\Delta x = 10^{-13}$ cm. Η απροσδιοριστία για την ορμή του είναι

$$\Delta p \geq \frac{h}{\Delta x} = \frac{10^{-27}}{10^{-13}} = 10^{-14} \frac{erg \cdot sec}{cm}$$

Αν το σωμάτιο έχει μάζα 1 gr τότε το σφάλμα που κάνουμε μετρώντας την ταχύτητα του είναι της τάξης

$$\Delta \upsilon = \frac{1}{m} \Delta p = 10^{-14} \frac{cm}{sec}$$

Είναι δηλαδή αμελητέο και κανένα όργανο μέτρησης δεν μπορεί να μετρήσει τέτοιες ταχύτητες. Η σχέση αβεβαιότητας στην περίπτωση αυτή δεν έχει καμία επίπτωση στην ακρίβεια της μέτρησης. Αν όμως το σωμάτιο είναι ένα ηλεκτρόνιο με $m_e = 10^{-27} gr$, τότε η απροσδιοριστία της ταχύτητας του είναι τεράστια της τάξης

$$\Delta \upsilon = 10^{13} \frac{cm}{sec}$$

Η απροσδιοριστία στην ταχύτητα είναι μεγαλύτερη και από την ταχύτητα του φωτός. Αρα αν μετρήσουμε την ταχύτητα είναι δυνατόν να βρούμε οποιαδήποτε τιμή μεγαλύτερη από -10^{13} και μικρότερη από $+10^{13}$! Η πληροφορία αυτή μας είναι βεβαίως άχρηστη εφόσον ταχύτητα $\pm 10^{13}$ είναι μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός.

Η σχέση απροσδιοριστίας θέτει περιορισμούς στον *ταυτόχρονο* προσδιορισμό των δύο αυτών δυναμικών μεγεθών.

Σημειώνουμε ότι στην μή σχετικιστική κβαντομηχανική τα δυναμικά μεγέθη μόνα τους μπορούν να μετρηθούν ακριβώς. Η θέση για παράδειγμα μπορεί να μετρηθεί με οποιαδήποτε ακρίβεια θέλουμε. Αν μετρήσουμε την θέση δύο φορές τα αποτελέσματα δεν θα διαφέρουν καθόλου όσο μικρός και αν είναι ο χρόνος Δt που διέρρευσε ανάμεσα στις δυο μετρήσεις. Η παρατήρηση έχει μεγάλη σημασία διότι αλλιώς θα ήταν αδικαιολόγητη η χρησιμοποίηση της συνάρτησης $\psi(\vec{r}, t)$ της θέσης για την περιγραφή των συστημάτων. Το ίδιο συμβαίνει και για την ορμή μόνη της και στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιούμε την συνάρτηση $\Phi(\vec{p}, t)$. Οι συναρτήσεις και οι τελεστές της κβαντομηχανικής εξαρτώνται είτε από την θέση είτε από την ορμή.

Παρατήρηση: Η ύπαρξη ανώτατου ορίου στην ταχύτητα που θέτει η σχετικότητα προσθέτει καινούργιους περιορισμούς στην μέτρηση των δυναμικών μεγεθών. Για να απλοποιήσουμε τις σχέσεις υποθέτουμε ότι p, p' και Ε, Ε$'$ είναι η ορμή και η ενέργεια ενός σωματίου πριν και μετά μια μέτρηση. Η ορμή μπορεί να μετρηθεί ακριβώς ενώ η ενέργεια ικανοποιεί την σχέση αβεβαιότητας με τον χρόνο. Δηλαδή έχουμε

$$\Delta p = \Delta p' \qquad\qquad (\Delta E' - \Delta E)\, \Delta t \sim \hbar$$

Ισχύει όμως η σχέση $\Delta \mathrm{E} = (\partial E/\partial p)\,\Delta p = \upsilon \Delta p$ και άρα η παραπάνω σχέση γίνεται

$$(\upsilon' - \upsilon)\,\Delta p \Delta t \sim \hbar$$

Η σχέση σημαίνει ότι η μέτρηση της ορμής με ακρίβεια Δp συνεπάγεται μια αλλαγή της ταχύτητας. Η αλλαγή αυτή είναι μεγαλύτερη όσο μικρότερο είναι το διάστημα Δt του χρόνου που διέρρευσε ανάμεσα στις δύο μετρήσεις. Η διαφορά όμως στις ταχύτητες υ και υ' δεν μπορεί να υπερβαίνει την ταχύτητα c του φωτός. Αρα η παραπάνω σχέση γράφεται

$$\Delta p \Delta t \sim \frac{\hbar}{c}$$

που δίνει την ακρίβεια που μπορεί να μετρηθεί η ορμή. Επομένως η ορμή δεν είναι μια δυναμική μεταβλητή εφόσον για να μετρηθεί ακριβώς $\Delta p \to 0$ πρέπει να διαρρεύσει άπειρος χρόνος $\Delta t \to \infty$.

Παρόμοιες σχέσεις ισχύουν και για την θέση του σωματιδίου. Βρίσκουμε

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{mc} \qquad\qquad \Delta q \sim \frac{\hbar c}{\varepsilon}$$

όπου ε είναι η ενέργεια.

Από την παρατήρηση αυτή είναι φανερό ότι σε μια σχετικιστική θεωρία δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ με την έννοια της μη σχετικιστικής κβαντομηχανικής.

Ασκήσεις

Άσκηση 1.1

Να λυθεί η διαφορική εξίσωση του κύματος σε μια διάσταση

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) u(x,t) = 0$$

στις ακόλουθες δύο περιπτώσεις:

α) Με αρχικές συνθήκες

$$u(x,0) = f(x) \qquad \dot{u}(x,0) = g(x)$$

β) Με αρχικές και οριακές συνθήκες

$$u(x,0) = f(x) \qquad \dot{u}(x,0) = g(x) \qquad u(0,t) = u(L,t) = 0$$

Λύση: Στην πρώτη περίπτωση έχουμε μόνο αρχικές συνθήκες. Το κύμα δεν περιορίζεται στο χώρο και μπορεί να ταξιδέψει στο άπειρο.

Κάνουμε τον μετασχηματισμό

$$\xi = x + ct \qquad \eta = x - ct$$

Οι μερικές παράγωγοι ως προς x και t δίνονται από τις σχέσεις

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t}\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial t}\frac{\partial}{\partial \eta} = c\frac{\partial}{\partial \xi} - c\frac{\partial}{\partial \eta}$$

και η διαφορική εξίσωση του κύματος παίρνει την μορφή

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(c\frac{\partial}{\partial \xi} - c\frac{\partial}{\partial \eta} \right)^2 \right] u(x,t) = 4\frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} u(\xi,\eta) = 0$$

Ολοκληρώνουμε την εξίσωση ως προς η και βρίσκουμε

$$\frac{\partial}{\partial \xi} u(\xi, \eta) = c(\xi)$$

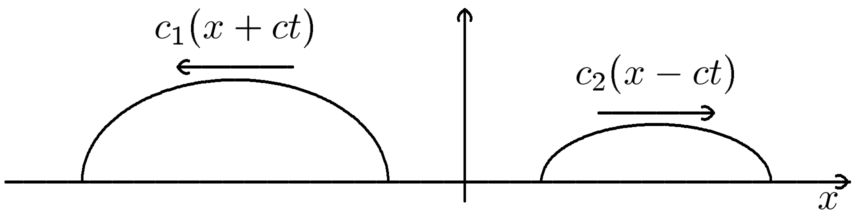
Ολοκληρώνουμε τώρα την παραπάνω σχέση ως προς ξ και βρίσκουμε

$$u(\xi, \eta) = c_1(\xi) + c_2(\eta) \qquad \text{όπου} \;\; c_1(\xi) = \int c(\xi) d\xi$$

Επομένως η γενική λύση της εξίσωσης του κύματος είναι

$$u(x, t) = c_1(x + ct) + c_2(x - ct)$$

όπου c_1 και c_2 είναι δύο αυθαίρετες συναρτήσεις με συνεχείς παραγώγους δεύτερης τάξης. Παρατηρούμε ότι ενώ η λύση μιας συνήθους διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης περιέχει δύο αυθαίρετες σταθερές εδώ έχουμε δύο αυθαίρετες συναρτήσεις.



Σχήμα 1.6
Η διάδοση της αρχικής διαταραχής

Η τυχούσα συνάρτηση $c_1(x + ct)$ είναι ένα κύμα που διαδίδεται προς τα αρνητικά x, ενώ το κύμα $c_2(x - ct)$ διαδίδεται προς την θετική διεύθυνση του άξονα των x.

Θα προσδιορίσουμε τώρα τις τυχούσες συναρτήσεις c_1 και c_2 έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι αρχικές συνθήκες του προβλήματος. Εχουμε για την αρχική θέση του κύματος

$$u(x, 0) = c_1(x) + c_2(x) = f(x)$$

και για την αρχική ταχύτητα

$$\dot{u}(x, 0) = \left[\dot{c}_1(x + ct) + \dot{c}_2(x - ct)\right]_{t=0} = cc_1'(x) - cc_2'(x) = g(x)$$

Ολοκληρώνουμε την σχέση αυτή και μαζί με την προηγούμενη σχέση σχηματίζουν ένα σύστημα δύο εξισώσεων με αγνώστους τις συναρτήσεις $c_1(x)$ και $c_2(x)$. Το σύστημα είναι

$$\begin{aligned} c_1(x) + c_2(x) =& f(x) \\ c_1(x) - c_2(x) =& \frac{1}{c}\int_{x_0}^{x} g(z)dz \end{aligned}$$

Η λύση του παραπάνω συστήματος δίνει

$$c_1(x) = \frac{1}{2}f(x) + \frac{1}{2c}\int_{x_0}^{x} g(z)dz \qquad\qquad c_2(x) = \frac{1}{2}f(x) - \frac{1}{2c}\int_{x_0}^{x} g(z)dz$$

και επομένως η γενική λύση της εξίσωσης του κύματος που ικανοποιεί και τις αρχικές συνθήκες είναι

$$u(x,t) = \frac{1}{2}\left[f(x+ct) + f(x-ct)\right] + \frac{1}{2c}\int_{x-ct}^{x+ct} g(z)dz$$

Παρατηρούμε ότι η λύση εξαρτάται από την τιμή της αρχικής θέσης $f(x)$ μόνο στα σημεία $x \pm ct$ και από τις τιμές της αρχικής ταχύτητας στο διάστημα από το σημείο $x+ct$ μέχρι το σημείο $x-ct$.

Για την δεύτερη περίπτωση που έχουμε επιπλέον και οριακές συνθήκες το πρόβλημα είναι τελείως διαφορετικό. θα λύσουμε την διαφορική εξίσωση με την μέθοδο του χωρισμού των ανεξάρτητων μεταβλητών.

Αναζητούμε λύσεις της μορφής

$$u(x,t) = X(x)T(t)$$

Αντικαθιστούμε την παραπάνω συνάρτηση στην διαφορική εξίσωση και διαιρούμε με το γινόμενο με $X(x)T(t)$ που βεβαίως υποθέτουμε ότι δεν είναι μηδέν. Βρίσκουμε

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = \frac{1}{c^2T(t)}\frac{d^2T(t)}{dt}$$

Το πρώτο μέλος της παραπάνω εξίσωσης εξαρτάται μόνο από το x και το δεύτερο μόνο από το t. Επειδή όμως οι δύο αυτές μεταβλητές είναι ανεξάρτητες πρέπει και τα δύο μέλη να ισούνται με μια σταθερά. Αρα έχουμε

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = \frac{1}{c^2T(t)}\frac{d^2T}{dt} = -\lambda$$

από την οποία προκύπτουν οι ακόλουθες δύο συνήθεις διαφορικές εξισώσεις

$$\frac{d^2}{dx^2}X(x) + \lambda X(x) = 0 \qquad \frac{d^2}{dt^2}T(t) + \lambda c^2 T(t) = 0$$

Θα λύσουμε πρώτα την πρώτη διαφορική εξίσωση. Από τις οριακές συνθήκες συμπεραίνουμε ότι η συνάρτηση $\mathrm{X}(x)$ πρέπει να μηδενίζεται στα σημεία 0 και L και άρα η συνάρτηση αυτή είναι λύση του ακόλουθου προβλήματος ιδιοτιμών.

$$\frac{d^2}{dx^2}X(x) + \lambda X(x) = 0 \qquad X(0) = X(L) = 0$$

Στα προβλήματα αυτά αναζητούμε τις τιμές του λ, αν υπάρχουν, για τις οποίες η εξίσωση έχει μη μηδενική λύση. Βρίσκουμε επίσης και την άγνωστη συνάρτηση $X(x)$. Η συνάρτηση $X(x)$ ονομάζεται ιδιοσυνάρτηση της διαφορικής εξίσωσης και το λ είναι η αντίστοιχη (μη μηδενική) ιδιοτιμή.

Η γενική λύση της εξίσωσης είναι

$$X(x) = c_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + c_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}$$

Υποθέτουμε τώρα ότι η ιδιοτιμή λ είναι αρνητική. θέτουμε $\lambda = -k^2$ και η λύση γίνεται

$$X(x) = c_1 e^{kx} + c_2 e^{-kx}$$

Είναι εύκολο να αποδειχτεί ότι η λύση αυτή είναι απαράδεκτη. Πραγματικά για να ικανοποιούνται οι οριακές συνθήκες πρέπει

$$c_1 + c_2 = 0 \qquad c_1 e^{kL} + c_2 e^{-kL} = 0$$

με μοναδική λύση $c_1 = c_2 = 0$ που οδηγεί στην τετριμμένη λύση του προβλήματος $X(x) = 0$.

Θα αναζητήσουμε λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών για θετικά λ. Θέτουμε $\lambda = k^2 > 0$ και βρίσκουμε την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\frac{d^2}{dx^2}X(x) + k^2 X(x) = 0 \qquad\qquad X(0) = X(L) = 0$$

Η λύση της παραπάνω εξισώσης είναι

$$X(x) = A\,\text{συν}\,(kx) + B\,\text{ημ}\,(kx)$$

Θα προσδιορίσουμε τώρα τις σταθερές Α, Β και k ώστε να ικανοποιούνται οι οριακές συνθήκες. Εχουμε

$$X(0) = B = 0 \qquad\qquad X(L) = A\,\text{ημ}\,(kL) + B\,\text{συν}\,(kx) = A\,\text{ημ}\,(kL) = 0$$

Η δεύτερη εξίσωση δίνει τις λύσεις $B = 0$ και $\text{ημ}\,(kL) = 0$. Η λύση Β = 0 είναι απαράδεκτη γιατί οδηγεί στην λύση $X(x) = 0$. Επομένως

$$\text{ημ}\,(kL) = 0 \quad\Longrightarrow\quad kL = n\pi \;\;\text{όπου}\;\; n = 0, 1, 2, \cdots$$

Παρατηρούμε ότι το πρόβλημα έχει λύση για ορισμένα μόνο k.

Το φαινόμενο αυτό που κάποιο μέγεθος παίρνει διακεκριμένες τιμές ονομάστηκε κβάντωση, μετά την ανάπτυξη της κβαντομηχανικής. Στην πρώτη περίπτωση που δεν είχαμε οριακές συνθήκες κανένα μέγεθος δεν ήταν κβαντισμένο.

Αν συμβολίσουμε με τον δείκτη n τις ιδιοτιμές και τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις έχουμε τελικά την λύση

$$X_n(x) = A_n\,\text{ημ}\,(k_n x) \qquad\qquad k_n = \frac{n\pi}{L} \;\;\text{όπου}\;\; n = 0, 1, 2, \cdots$$

Η συνάρτηση αυτή είναι μια μερική λύση της διαφορικής εξίσωσης. Η διαφορική εξίσωση είναι γραμμική και άρα η γενική λύση είναι ένας γραμμικός συνδυασμός όλων των παραπάνω μερικών λύσεων.

Η δεύτερη διαφορική εξίσωση με την παραπάνω τιμή του λ γράφεται

$$\frac{d^2}{dt^2}T(t) + k_n^2 c^2 T(t) = 0 \qquad\qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

που έχει λύση την συνάρτηση

$$T(t) = C_1 \,\text{συν}\,(k_n ct) + C_2 \,\text{ημ}\,(k_n ct)$$

Το γινόμενο των συναρτήσεων $X(t)$ και $T(t)$ είναι η λύση της αρχικής διαφορικής εξίσωσης του κύματος. Εχουμε

$$u_n(x,t) = X(x)T(t) = A_n \left[C_1 \,\text{συν}\,(k_n ct) + C_2 \,\text{ημ}\,(k_n ct)\right] \text{ημ}\,(k_n x)$$

Η συνάρτηση αυτή είναι μια μερική λύση της κυματικής εξίσωσης. Η γενική λύση της εξισώσης του κύματος είναι ο γραμμικός συνδυασμός όλων αυτών των ιδιολύσεων για όλα τα k_n.

Θέτουμε

$$A_n C_1 = a_n \quad \text{και} \quad A_n C_2 = b_n$$

και βρίσκουμε

$$u(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \text{ημ}\,(k_n x) \left[a_n \,\text{συν}\,(k_n ct) + b_n \,\text{ημ}\,(k_n ct)\right]$$

Εχουμε βρει μια λύση του προβλήματος που ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες. Θα προσδιορίσουμε τώρα τις σταθερές a_n και b_n έτσι ώστε να ικανοποιούνται και οι αρχικές συνθήκες του προβλήματος. Εχουμε για την αρχική θέση του κύματος την σχέση

$$u(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \,\text{ημ}\,(k_n x) = f(x)$$

και για την αρχική ταχύτητα την σχέση

$$\dot{u}(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n k_n c \,\text{ημ}\,(k_n x) = g(x)$$

Οι τιμές τον συντελεστών a_n και b_n που ικανοποιούν τις παραπάνω εξισώσεις είναι οι γνωστοί συντελεστές Φουριέ και δίνονται από τις σχέσεις

$$a_n = \frac{2}{L}\int_0^L f(y)\,\text{ημ}\,(k_n y) dy \qquad b_n = \frac{2}{c k_n L}\int_0^L g(y)\,\text{ημ}\,(k_n y) dy$$

Γράφουμε τέλος την πλήρη λύση της εξίσωσης του κύματος που ικανοποιεί όλες τις δεδομένες συνθήκες.

$$u(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \text{ημ}\,(k_n x) \cdot$$

$$\left[\frac{2}{L} \,\text{συν}\,(k_n ct) \int_0^L dy\, f(y)\,\text{ημ}\,(k_n y) + \frac{2}{ck_n L}\,\text{ημ}\,(k_n ct) \int_0^L dy\, g(y)\,\text{ημ}\,(k_n y) \right]$$

Για να απλοποιήσουμε την έκφραση αυτή ορίζουμε την συνάρτηση

$$G(x,y) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \text{ημ}\, k_n x\, \text{ημ}\, k_n y$$

και η τελική λύση γράφεται

$$u(x,t) = \text{συν}\, k_n ct \int_0^L f(y) G(x,y) dy + \frac{\text{ημ}\, k_n ct}{k_n c} \int_0^L g(y) G(x,y) dy$$

Άσκηση 1.2

Η ενέργεια ενός στάσιμου κύματος μέσα στην κοιλότητα ενός "μαύρου σώματος" δίνεται από την σχέση $\mathrm{E}_n = nh\nu$ όπου $n = 0, 1, 2, \cdots$. (παραδοχή του Πλανκ) Να υπολογίσετε το άθροισμα των καταστάσεων ή συνάρτηση διαμερισμού

$$Z(b) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-bE_n} \qquad\qquad b = \frac{1}{kT}$$

Ακολούθως να υπολογίσετε την μέση ενέργεια ανά στάσιμο κύμα και τέλος την φασματική πυκνότητα. Τα μεγέθη αυτά δίνονται από τις ακόλουθες σχέσεις.

$$\bar{E} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial b} \qquad\qquad u = \bar{E}\rho(\nu) \quad \text{όπου} \quad \rho(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$$

Να υπολογίσεται τέλος την τιμή του μήκους κύματος λ της ακτινοβολίας που η φασματική πυκνότητα γίνεται μέγιστη.

Λύση: Υπολογίζουμε πρώτα το άθροισμα των καταστάσεων. Εχουμε

$$Z(b) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nbh\nu} = 1 + e^{-bh\nu} + e^{-2bh\nu} + \cdots + e^{-nbh\nu} + \cdots$$

Το $Z(b)$ φαίνεται ότι είναι το άθροισμα μιας γεωμετρικής προόδου με λόγο το $\omega = e^{-bh\nu} < 1$. Το αποτέλεσμα δίνεται από τον τύπο $\Sigma = 1/(1-\omega)$. Βρίσκουμε

$$Z(b) = \frac{1}{1 - e^{-bh\nu}}$$

Αν γνωρίζουμε την συνάρτηση $Z(b)$ για ένα σύστημα μπορούμε να βρούμε όλα τα θερμοδυναμικά μεγέθη. Η μέση ενέργεια είναι

$$\bar{E} = -\left(1 - e^{-bh\nu}\right) \frac{\partial}{\partial b} \frac{1}{1 - e^{-bh\nu}} = \frac{h\nu e^{-bh\nu}}{1 - e^{-bh\nu}} = \frac{h\nu}{e^{bh\nu} - 1}$$

Υπολογίζουμε τέλος τη φασματική πυκνότητα. Βρίσκουμε

$$u(\nu) = \bar{E}\rho(\nu) = \frac{h\nu}{e^{bh\nu} - 1} \frac{8\pi\nu^2}{c^3} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Ο τύπος αυτός είναι ο γνωστός εμπειρικός τύπος με τον οποίο ο Πλανκ εξήγησε το φάσμα του μαύρου σώματος και ονομάστηκε μετά την επιτυχία του αυτή ο Πατέρας της κβαντομηχανικής.

Η συνάρτηση $u(\lambda)$ έχει ακρότατα στα σημεία όπου η παραγωγός της μηδενίζεται. Γράφουμε πρώτα την συνάρτηση $u(\nu)$ σαν συνάρτηση του μήκους κύματος λ με την βοήθεια του τύπου $c = \lambda/\mathrm{T} = \lambda\nu$. Επειδή η ενεργειακή πυκνότητα πρέπει να έχει την ίδια τιμή είτε περιγράφεται σαν συνάρτηση του ν είτε σαν συνάρτηση του λ έχουμε

$$u(\lambda)|d\lambda| = u(\nu)|d\nu|$$

$$u(\lambda) = u(\nu)\left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right| = u(\nu)\left|\frac{d}{d\lambda}\frac{c}{\lambda}\right| = u(\nu)\frac{c}{\lambda^2}$$

Βρίσκουμε

$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/kT\lambda} - 1}$$

και παραγωγίζουμε ως προς λ

$$\frac{d}{d\lambda}u(\lambda) = 8\pi hc \frac{-5\lambda^4\left(e^{hc/kT\lambda}-1\right) - \lambda^5 e^{hc/kT\lambda}\left(-\frac{1}{\lambda^2}\frac{hc}{kT}\right)}{\lambda^{10}\left(e^{hc/kT\lambda}-1\right)^2}$$

Μηδενίζουμε την παράγωγο αυτή και βρίσκουμε

$$-5\left(e^{hc/kT\lambda}-1\right) + e^{hc/kT\lambda}\left(\frac{1}{\lambda}\frac{hc}{kT}\right) = 0$$

Θέτουμε $x = hc/kT\lambda$ και η εξίσωση γίνεται

$$5 - 5e^{-x} - x = 0$$

η εξίσωση αυτή έχει την λύση $x = 4,965$ και επομένως βρίσκουμε

$$\lambda = \frac{hc}{4,965kT}$$

Επειδή η δεύτερη παράγωγος είναι αρνητική, η παραπάνω τιμή δίνει ένα μέγιστο. Θέτουμε $b = hc/4,965\,k$ και βρίσκουμε

$$\lambda_{max}T = b$$

Η σχέση αυτή είναι ο νόμος μετατόπισης του Βην και η σταθερά b ονομάζεται σταθερά Βην.

Άσκηση 1.3

Να αποδειχτεί ότι, τόσο το ηλεκτρικό πεδίο $\vec{\mathrm{E}}$ όσο και το μαγνητικό πεδίο $\vec{\mathrm{B}}$, ικανοποιούν την κλασσική κυματική εξίσωση

$$\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{E} = 0 \qquad \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{B} = 0$$

Χρησιμοποιήστε τις τέσσερις εξισώσεις του Μάξγουελ στο κενό.

Απόδειξη: Οι εξισώσεις του Μάξγουελ στο κενό είναι οι εξής

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = 0 \qquad \vec{\nabla}\times\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{dt}$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B} = 0 \qquad \vec{\nabla}\times\vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{dt}$$

Επιδρούμε τον τελεστή ανάδελτα στην δεύτερη εξίσωση και με την βοήθεια της τέταρτης βρίσκουμε

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{dt}\vec{\nabla} \times \vec{B} = -\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{B}}{dt^2}$$

Χρησιμοποιούμε την διανυσματική ταυτότητα

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E}$$

και η παραπάνω εξίσωση με την βοήθεια της πρώτης εξίσωσης του Μάξγουελ γίνεται

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E} = -\vec{\nabla}^2 \vec{E} = -\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{B}}{dt^2}$$

Από την οποία συνεπάγεται η προς απόδειξη. Με όμοιο τρόπο αποδεικνύεται και η δεύτερη κυματική εξίσωση.

Κεφάλαιο 2

Βασικές Μαθηματικές έννοιες

Στο κεφάλαιο αυτό θα περιγράψουμε ορισμένες απαραίτητες μαθηματικές έννοιες για την μαθηματική θεμελίωση της κβαντομηχανικής.

2.1 Ο διανυσματικός χώρος

Η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος περιγράφεται γενικά από μια συνάρτηση κύματος. Ενας γραμμικός συνδυασμός δύο ή περισσοτέρων καταστάσεων είναι επίσης μια κατάσταση κάποιου φυσικού συστήματος. Η ιδιότητα αυτή είναι γνωστή σαν αρχή της επιπρόσθεσης των κυμάτων. Την ίδια ιδιότητα έχουν και τα διανύσματα ενός διανυσματικού χώρου. Ενας γραμμικός συνδυασμός διανυσμάτων είναι επίσης διάνυσμα του ίδιου χώρου.

Οι κβαντικές καταστάσεις μπορούν επομένως να θεωρηθούν σαν διανύσματα ενός κατάλληλου διανυσματικού χώρου. Τα διανύσματα ονομάζονται καταστατικά διανύσματα και είναι συνήθως μιγαδικές συναρτήσεις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Οι μαθηματικές δομές της κβαντομηχανικής κτίζονται πάνω σε διανυσματικούς χώρους Χίλμπερτ που έχουν συνήθως άπειρη διάσταση. Η γεωμετρία των διανυσμάτων έχει τα ίδια μαθηματικά χαρακτηριστικά με την δομή των καταστάσεων.

Ορισμός: Ενα σύνολο V ονομάζεται διανυσματικός ή γραμμικός χώρος επί ενός σώματος $F(=\Re$ ή $C)$, όταν είναι δυνατόν να οριστούν δύο πράξεις σύνθεσης, η πρόσθεση

$$+ : V \times V \longmapsto V \qquad\qquad + : (\chi, \psi) \longmapsto \chi + \psi$$

και ο (εξωτερικός) πολλαπλασιασμός

$$\cdot : F \times V \longmapsto V \qquad \cdot : (\alpha, \chi) \longmapsto \alpha\chi$$

οι οποίες να ικανοποιούν τις εξής ιδιότητες

1. $\psi + (\varphi + \chi) = (\psi + \varphi) + \chi \qquad \forall \psi\ ,\ \varphi\ ,\ \chi \in V$
2. $\psi + \varphi = \varphi + \psi \qquad \forall \psi\ ,\ \varphi \in V$
3. Υπάρχει ένα μοναδικό διάνυσμα το 0 τέτοιο ώστε
   $\chi + 0 = 0 + \chi = \chi \qquad \forall \chi \in V$
4. $\forall \chi \in V$ Υπάρχει ένα μοναδικό διάνυσμα χ' τέτοιο ώστε
   $\chi + \chi' = \chi' + \chi = 0$
5. $\alpha(\beta\chi) = (\alpha\beta)\chi \qquad \forall \chi \in V$ και $\forall \alpha\ ,\ \beta \in F$
6. $1\varphi = \varphi \quad 0\varphi = 0 \qquad \forall \varphi \in V$
7. $\alpha(\psi + \varphi) = \alpha\psi + \alpha\varphi \qquad \forall \psi\ ,\ \varphi \in V$ και $\forall \alpha \in F$
8. $(\alpha + \beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi \qquad \forall \psi \in V$ και $\forall \alpha\ ,\ \beta \in F$

Αν το σώμα F είναι οι πραγματικοί ή οι μιγαδικοί αριθμοί, ο διανυσματικός χώρος ονομάζεται αντίστοιχα πραγματικός ή μιγαδικός διανυσματικός χώρος.

Ορισμός: Ενα υποσύνολο ενός διανυσματικού χώρου, που είναι το ίδιο διανυσματικός χώρος με τις ίδιες πράξεις σύνθεσης, ονομάζεται γραμμική πολλαπλότητα του διανυσματικού χώρου.

Ορισμός: Τα διανύσματα $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ ονομάζονται γραμμικά ανεξάρτητα, αν η σχέση

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i = 0$$

ισχύει τότε και μόνο όταν όλοι οι συντελεστές είναι μηδέν δηλαδή

$$\alpha_i = 0 \qquad \forall i = 1, 2, \cdots, n$$

Ορισμός: Ενα άπειρο σύνολο διανυσμάτων είναι γραμμικά ανεξάρτητο, αν κάθε πεπερασμένο υποσύνολο του είναι γραμμικά ανεξάρτητο.

Ορισμός: Ενα σύνολο διανυσμάτων $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι ένα σύνολο γεννητόρων, αν κάθε διάνυσμα χ του χώρου μπορεί να γραφεί σαν γραμμικός συνδυασμός των φ_i

$$\chi = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \cdots = \sum_i \alpha_i\varphi_i$$

Ορισμός: Ενα σύνολο B ονομάζεται βάση του χώρου, αν είναι γραμμικά ανεξάρτητο και σύνολο γεννητόρων. Το πλήθος των στοιχείων του B ονομάζεται διάσταση του χώρου. Ενας χώρος είναι δυνατόν να έχει περισσότερες από μία βάση. Κάθε βάση όμως έχει το ίδιο πλήθος στοιχείων. Ενας γραμμικός χώρος που δεν έχει πεπερασμένη διάσταση, ονομάζεται απείρων διαστάσεων.

Παράδειγμα: Το σύνολο των διατεταγμένων $n-$ άδων από αριθμούς

$$V = \{\chi \ / \ \chi = (\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_n), \quad \chi_i \in \Re\}$$

Οι πράξεις σύνθεσης ορίζονται από τις σχέσεις

$$\chi + \varphi = (\chi_1 + \varphi_1, \chi_2 + \varphi_2, \cdots, \chi_n + \varphi_n) \qquad \alpha\chi = (\alpha\chi_1, \alpha_2\chi, \cdots, \alpha\chi_n)$$

Ο χώρος αυτός ονομάζεται $n-$ διάστατος Ευκλείδειος χώρος.

Παράδειγμα: Το σύνολο των άπειρων ακολουθιών από αριθμούς

$$\ell^2(\infty) = \left\{\chi \ / \ \chi = (\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_n, \cdots) \quad \chi_i \in C \quad \text{με} \quad \sum_{k=1}^{\infty} |\chi_k|^2 < \infty\right\}$$

Η πρόσθεση και ο πολλαπλασιασμός ορίζονται όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα. Ο χώρος αυτός συμβολίζεται με $\ell^2(\infty)$.

Παράδειγμα: Το σύνολο των συνεχών συναρτήσεων μιας πραγματικής μεταβλητής t, με πράξεις ορισμένες από τις σχέσεις

$$1. \qquad (\varphi + \psi)(t) = \varphi(t) + \psi(t) \quad \forall\varphi \ , \ \psi \in C(\Re)$$

$$2. \qquad (\alpha\varphi)(t) = \alpha\varphi(t) \qquad \forall\varphi \in C(\Re) \quad \forall\alpha \in C$$

Το σύνολο αυτό συμβολίζεται με $C(\Re)$.

Παράδειγμα: Το σύνολο των συναρτήσεων μιας μεταβλητής t, για τις οποίες το ολοκλήρωμα κατά Λεμπέκ $\int_{\Re} |\psi(t)|^2 dt$ υπάρχει και είναι πεπερασμένο. Η πρόσθεση και ο πολλαπλασιασμός ορίζονται όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα. Ο χώρος αυτός συμβολίζεται με $L^2(\Re)$ και αναφέρεται συνήθως σαν ο χώρος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κατά Λεμπέκ συναρτήσεων.

Ομοίως ορίζονται και οι χώροι $L^p(\Re)$ για τους οποίους ισχύει

$$\left(\int_{\Re} |\psi(t)|^p \right)^{1/p} < \infty \quad \text{όπου} \quad p \geq 1$$

Οι συναρτησιακοί αυτοί χώροι ορίζονται και για συναρτήσεις περισσότερων μεταβλητών που μεταβάλλονται σε πεπερασμένες ή και άπειρες περιοχές.

2.2 Ο Διανυσματικός χώρος εσωτερικού γινομένου

Ορισμός: Ενας μιγαδικός διανυσματικός χώρος V ονομάζεται χώρος εσωτερικού γινομένου, τότε και μόνο τότε όταν είναι εφοδιασμένος με μια απεικόνιση

$$< | >: V \times V \longmapsto C$$

με τις ιδιότητες

1. $< \chi|\psi > = < \psi|\chi >^* \qquad \forall \chi\ ,\ \psi \in V$
2. $< \alpha\chi + \beta\psi|\varphi > = \alpha^* < \chi|\varphi > + \beta^* < \psi|\varphi > \qquad \forall \chi\ ,\ \psi \in V \quad \forall a\ ,\ \beta \in F$
3. $< \chi|\chi > \geq 0 \quad \forall \chi \in V \quad \text{και} \quad < \chi|\chi > = 0 \iff \chi = 0$

Με αστερίσκο συμβολίζουμε τον συζυγή του μιγαδικού αριθμού. Δηλαδή αν

$$< \chi|\psi > = a + i\beta = \rho e^{i\theta} \quad \Longrightarrow \quad < \psi|\chi > = < \chi|\psi >^* = a - i\beta = \rho e^{-i\theta}$$

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται προφανώς και για πραγματικούς διανυσματικούς χώρους, όπου ισχύουν οι ίδιες ιδιότητες χωρίς τους αστερίσκους.

Με τη βοήθεια του εσωτερικού γινομένου ορίζεται το μήκος ενός διανύσματος από την σχέση

$$\text{μήκος του } (\chi) \; = \; \|\chi\| = < \chi|\chi >^{1/2}$$

που είναι ένας πραγματικός αριθμός. Η γωνία μεταξύ δύο διανυσμάτων δίνεται από την σχέση

$$\text{συν}\,\theta = \frac{|<\chi|\psi>|}{\|\chi\|\|\psi\|} \leq 1$$

Η παραπάνω ανισότητα είναι γνωστή σαν ανισότητα του Σβαρτς.

2.3 Ο σταθμητός διανυσματικός χώρος

Ορισμός: Ενας διανυσματικός χώρος ονομάζεται σταθμητός διανυσματικός χώρος τότε και μόνο τότε, όταν είναι εφοδιασμένος με μια απεικόνιση

$$\|\cdot\cdot\| : V \longmapsto \Re$$

που ονομάζεται στάθμη και ικανοποιεί τις ιδιότητες

1. $\|\chi\| \geq 0 \quad \forall \chi \in V \quad$ και $\quad |\chi\| = 0 \iff \chi = 0$
2. $\|\alpha\chi\| = |\alpha|\|\chi\| \qquad \forall \chi \in V \quad \forall \alpha \in C$
3. $\|\chi + \psi\| \leq \|\chi\| + \|\psi\| \quad \forall \chi\ ,\ \psi \in V \qquad$ τριγωνική ιδιότητα

Θεώρημα: Ενας διανυσματικός χώρος εσωτερικού γινομένου μπορεί να γίνει σταθμητός χώρος. Η στάθμη ορίζεται από τη σχέση

$$\|\chi\| =< \chi|\chi >^{1/2}$$

Βέβαια ένας διανυσματικός χώρος μπορεί να εφοδιαστεί με στάθμη χωρίς να έχει αναγκαστικά εσωτερικό γινόμενο.

Παρατήρηση: Ενας χώρος εσωτερικού γινομένου είναι πλουσιότερος σε πληροφορίες από έναν σταθμητό διανυσματικό χώρο, διότι εκτός από το μήκος ενός διανύσματος, μας δίνει και την γωνία δύο διανυσμάτων.

Παράδειγμα: Ο $n -$ διάστατος Ευκλείδειος διανυσματικός χώρος γίνεται χώρος εσωτερικού γινομένου και το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται από τη σχέση

$$< \chi|\psi >= \sum_{j=1}^{n} \chi_j^* \psi_j$$

Με το ίδιο εσωτερικό γινόμενο μπορεί να εφοδιαστεί οποιοσδήποτε $n -$ διάστατος διανυσματικός χώρος, όπου $\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_n$ και $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ είναι οι συντελεστές ανάπτυξης των διανυσμάτων χ και ψ αντιστοίχως ως προς κάποια βάση.

Παράδειγμα: Στον χώρο $l^2(\infty)$ των άπειρων ακολουθιών το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ομοίως από τη σχέση

$$< \chi|\psi >= \sum_{j=1}^{\infty} \chi_j^* \psi_j$$

Στην περίπτωση όμως αυτή πρέπει να επιβάλλουμε την συνθήκη

$$\|\chi\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |\chi_j|^2 < \infty$$

που είναι αναγκαία ώστε η στάθμη του χώρου να είναι πεπερασμένη.

Παράδειγμα: Στον χώρο $L^2(\Re)$ το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται από την σχέση

$$< \chi|\psi >= \int_{\Re} \chi^*(t)\psi(t)dt$$

Η συνθήκη που ισχύει εδώ είναι

$$\|\chi\|^2 = \int_{\Re} |\chi(t)|^2 dt < \infty$$

που σημαίνει πάλι ότι το μήκος ενός διανύσματος είναι πεπερασμένο.

Παρατήρηση: Η στάθμη του χώρου αυτού, όπως ορίστηκε, δεν ικανοποιεί την σχέση $\|\chi\| = 0 \Rightarrow \chi = 0$. Μπορούμε να ξεπεράσουμε την δυσκολία αυτή αν θεωρήσουμε ότι ο χώρος $L^2(\Re)$ δεν περιέχει συναρτήσεις, αλλά κλάσεις ή τάξεις ισοδυναμίας από συναρτήσεις. Δύο συναρτήσεις $\chi(t)$ και $\psi(t)$ ανήκουν στην ίδια τάξη ισοδυναμίας δηλαδή παριστάνουν το ίδιο διάνυσμα, αν το μήκος της διαφοράς τους είναι μηδέν

$$\chi \equiv \psi \quad \Longleftrightarrow \quad \|\chi - \psi\|^2 = \int_{\Re} |\chi(t) - \psi(t)|^2 dt = 0$$

Δύο τέτοιες συναρτήσεις είναι ίσες εκτός από κάποια υποσύνολα μέτρου μηδέν, διότι τα υποσύνολα μέτρου μηδέν δεν προσφέρουν τίποτα στον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων. Οι συναρτήσεις $\chi(t)$ και $\psi(t)$ λέμε ότι είναι ίσες "σχεδόν παντού".

Το μηδενικό διάνυσμα για παράδειγμα είναι τώρα ένα υποσύνολο του χώρου, που περιέχει όχι μόνο την μηδενική συνάρτηση, αλλά και όλες τις συναρτήσεις που δεν μηδενίζονται μόνο σε υποσύνολα με μέτρο μηδέν. Ολες αυτές οι συναρτήσεις είναι ισοδύναμες με την μηδενική συνάρτηση.

Ορισμός: Μια ιδιότητα θα λέμε ότι ισχύει σχεδόν παντού, αν ισχύει παντού εκτός ίσως από κάποια υποσύνολα μέτρου μηδέν. Η ιδιότητα αυτή είναι μια σχέση ισοδυναμίας.

Θεώρημα: Σε έναν χώρο εσωτερικού γινομένου ισχύει η ανισότητα του Σβαρτς

$$|<\chi|\psi>| \leq \|\chi\|\|\psi\|$$

Η ισότητα στην παραπάνω σχέση ισχύει τότε και μόνο τότε όταν τα χ και ψ είναι γραμμικά εξαρτημένα.

Απόδειξη: Αν ένα από τα διανύσματα είναι μηδέν, τότε η σχέση είναι προφανής. Υποθέτουμε ότι $\|\psi\| \neq 0$ και θεωρούμε την ανισότητα

$$\|\chi + \alpha\psi\| \geq 0$$

που ισχύει για κάθε α. Η σχέση γράφεται

$$\|\chi + \alpha\psi\|^2 =< \chi + \alpha\psi|\chi + \alpha\psi >=$$

$$<\chi|\chi> + \alpha^* <\psi|\chi> + \alpha <\chi|\psi> + |\alpha|^2 <\psi|\psi> \geq \ 0$$

Θέτουμε τώρα στην παραπάνω εξίσωση

$$\alpha = -\frac{<\psi|\chi>}{<\psi|\psi>} \quad \Longrightarrow \quad \alpha^* = -\frac{<\chi|\psi>}{<\psi|\psi>}$$

και την πολλαπλασιάζουμε με τον θετικό αριθμό $<\psi|\psi>$. Βρίσκουμε

$$<\chi|\chi><\psi|\psi> - |<\chi|\psi>|^2 \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad |<\chi|\psi>| \leq \|\chi\|\|\psi\|$$

Σε όλες τις παραπάνω σχέσεις οι ισότητες ισχύουν αν $\chi + \alpha\psi = 0$ δηλαδή αν τα διανύσματα χ, ψ είναι γραμμικά εξαρτημένα.

Η ανισότητα του Σβαρτς στον χώρο των συναρτήσεων για παράδειγμα γράφεται

$$\left|\int f^*(t)g(t)dt\right|^2 \ \leq \ \left(\int |f(t)|^2\, dt\right)\ \left(\int |g(t)|^2\, dt\right)$$

Ορισμός: Ενα σύνολο διανυσμάτων $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ ονομάζεται ορθοκανονικό σύνολο, τότε και μόνο τότε όταν

$$< \varphi_i|\varphi_j >= \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{για } i \neq j \\ 1 & \text{για } i = j \end{cases}$$

Δηλαδή τα διανύσματα αυτά είναι ανά δύο ορθογώνια και έχουν μήκος την μονάδα. Τα διανύσματα ενός ορθοκανονικού συνόλου είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Το σύνολο είναι πλήρες αν περιέχει όλα τα διανύσματα του χώρου που είναι ορθογώνια προς τα διανύσματα του συνόλου.

Παρατήρηση: Μια ορθοκανονική βάση ενός διανυσματικού χώρου εσωτερικού γινομένου, είναι μια βάση που περιέχει ορθοκανονικά διανύσματα. Σε κάθε $n-$ διάστατο χώρο μπορούμε πάντα να κατασκευάσουμε μια ορθοκανονική βάση με την μέθοδο Γκραμ-Σμιτ.

Θεώρημα: Αν ένα διάνυσμα ψ αναλύεται σαν γραμμικός συνδυασμός των ορθοκανονικών διανυσμάτων $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$, δηλαδή

$$\psi = \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \varphi_i$$

τότε οι συντελεστές α_j δίνονται από την σχέση

$$\alpha_j =< \varphi_j|\psi >$$

και ονομάζονται συντελεστές Φουριέ. Πράγματι

$$< \varphi_i|\psi >=< \varphi_i| \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \varphi_j >= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j < \varphi_i|\varphi_j >= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \delta_{ij} = \alpha_i$$

Δηλαδή έχουμε την ανάπτυξη

$$\psi = \sum_{j=1}^{n} < \varphi_j|\psi > \varphi_j$$

Σύμφωνα με τον συμβολισμό που εισήγαγε ο Ντιράκ, ένα διάνυσμα συμβολίζεται με $|\varphi >$, οπότε η παραπάνω σχέση γράφεται

$$|\psi >= \sum_{j=1}^{n} < \varphi_j|\psi > |\varphi_j > \quad \text{ή} \quad |\psi >= \sum_{j=1}^{n} |\varphi_j >< \varphi_j|\psi >$$

Από την τελευταία ισότητα φαίνεται αμέσως ότι, αν "απλοποιήσουμε" με το διάνυσμα $|\psi>$, η παράσταση $\sum_{j=1}^{n} |\varphi_j><\varphi_j|$ είναι ο μοναδιαίος τελεστής. Δηλαδή

$$\sum_{j=1}^{n} |\varphi_j><\varphi_j| = \mathrm{I}$$

Η σχέση αυτή είναι η συνθήκη πληρότητας για τα διανύσματα $|\varphi_j>$ της βάσης.

Θεώρημα: Αν $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ είναι ένα ορθοκανονικό σύνολο ενός $n-$ διάστατου χώρου, τότε ισχύει η ανισότητα του Μπέσελ

$$\sum_{j=1}^{n} |<\varphi_j|\psi>|^2 \leq \|\psi\|^2$$

Απόδειξη: Για τυχόντες μιγαδικούς αριθμούς $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n$, έχουμε

$$\|\psi - \sum_{j=1}^{n} \beta_j\varphi_j\|^2 =<\psi - \sum_{j=1}^{n} \beta_j\varphi_j|\psi - \sum_{j=1}^{n} \beta_i\varphi_i>=$$

$$<\psi|\psi> - \sum_{j=1}^{n} \beta_j^* <\varphi_j|\psi> - \sum_{j=1}^{n} \beta_i <\psi|\varphi_i> + \sum_{i,j=1}^{n} \beta_j^*\beta_i <\varphi_j|\varphi_i>=$$

$$\|\psi\|^2 - \sum_{j=1}^{n} \beta_j^* <\varphi_j|\psi> - \sum_{j=1}^{n} \beta_i <\psi|\varphi_i> + \sum_{j=1}^{n} |\beta_j|^2$$

Το τελευταίο άθροισμα απλοποιήθηκε διότι τα διανύσματα φ_i είναι ορθοκανονικά και άρα ισχύει $<\varphi_i|\varphi_j>=\delta_{ij}$. Αν θέσουμε $\beta_j = \alpha_j =<\varphi_j|\psi>$ η σχέση γράφεται

$$\|\psi - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j\varphi_j\|^2 = \|\psi\|^2 - \sum_{j=1}^{n} |\alpha_j|^2 \geq 0$$

και άρα συνεπάγεται η ανισότητα Μπέσελ

$$\|\psi\|^2 \geq \sum_{j=1}^{n} |\alpha_j|^2 = \sum_{j=1}^{n} |<\varphi_j|\psi>|^2$$

Είναι προφανές ότι αν το ορθοκανονικό σύνολο $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ είναι και πλήρες, δηλαδή μια βάση του χώρου, τότε οι παραπάνω ανισότητες ισχύουν με το ίσον. Η σχέση που προκύπτει είναι γνωστή σαν ταυτότητα του Πάρσεβαλ.

Για να γράψουμε τις σχέσεις αυτές για χώρους άπειρων διαστάσεων είναι φανερό ότι χρειαζόμαστε κάποια κριτήρια για την σύγκλιση των απείρων αθροισμάτων. Στην επόμενη παράγραφο αναπτύσσουμε την συνοπτικά την ανάλογη θεωρία που είναι αντικείμενο της συναρτησιακής ανάλυσης. Πολλά από τα θεωρήματα δίνονται χωρίς απόδειξη. Σκοπός του βιβλίου δεν είναι να διδάξει συναρτησιακή ανάλυση, αλλά να την χρησιμοποιήσει για την διατύπωση της κβαντομηχανικής.

2.4 Ο χώρος Χίλμπερτ

Σε έναν διανυσματικό χώρο εσωτερικού γινομένου μπορούμε να ορίσουμε μια στάθμη και από τη στάθμη μια μετρική. Η μετρική του χώρου ορίζεται από την σχέση

$$d(\chi, \psi) = \|\chi - \psi\|$$

Βεβαίως η μετρική μπορεί να οριστεί ανεξάρτητα από τη στάθμη και σε χώρους που δεν είναι αναγκαστικά διανυσματικοί. Ενας σταθμητός διανυσματικός χώρος θεωρούμε ότι είναι εφοδιασμένος με την παραπάνω μετρική. Επειδή το μέτρο επάγει μια τοπολογία επί του χώρου, θεωρούμε ότι ο χώρος φέρει μια τοπολογική δομή. Η τοπολογία αυτή ονομάζεται ισχυρή τοπολογία. Ενα διανυσματικό χώρο μπορούμε να τον εφοδιάσουμε με μια τοπολογία, αν είναι συμβιβαστή με τους νόμους σύνθεσης του διανυσματικού χώρου.

Ορισμός: Ενας γραμμικός χώρος εφοδιασμένος με μια τοπολογία τέτοια ώστε, οι πράξεις σύνθεσης να είναι συνεχείς απεικονίσεις, ονομάζεται τοπολογικός γραμμικός χώρος. Η τοπολογία αυτή λέμε ότι είναι συμβιβαστή με τη δομή του χώρου.

Ενας χώρος με στάθμη γίνεται τοπολογικός γραμμικός χώρος με τη βοήθεια της μετρικής $d(\chi, \psi) = \|\chi - \psi\|$. Αποδεικνύετε ότι η στάθμη αυτή είναι μια συνεχής συνάρτηση. Με τη βοήθεια της μετρικής αυτής θα ορίσουμε την σύγκλιση και την πληρότητα που είναι απαραίτητες έννοιες για διανυσματικούς χώρους με άπειρη διάσταση.

Ορισμός: Μια ακολουθία $\chi_1, \chi_2, \cdots$ ενός μετρικού χώρου συγκλίνει σε ένα σημείο χ τότε και μόνο τότε, όταν

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \mathrm{N}(\varepsilon) \quad \text{τέτοιο ώστε} \quad d(\chi, \chi_n) = \|\chi - \chi_n\| < \varepsilon \qquad \forall n > \mathrm{N}(\varepsilon)$$

Ορισμός: Μια ακολουθία $\chi_1, \chi_2, \cdots$ ενός μετρικού χώρου είναι μια ακολουθία του Κωσύ τότε και μόνο τότε, όταν

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \mathrm{N}(\varepsilon) \quad \text{τέτοιο ώστε} \quad d(\chi_m, \chi_n) = \|\chi_n - \chi_m\| < \varepsilon \qquad \forall n, m > N(\varepsilon)$$

Ορισμός: Ενα άπειρο άθροισμα $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k$ είναι ορισμένο ή λέμε ότι συγκλίνει, αν η ακολουθία των μερικών αθροισμάτων

$$\chi_n = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k$$

συγκλίνει. Δηλαδή η έκφραση

$$\chi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k \quad \text{σημαίνει ότι} \quad \lim_{n \to \infty} \chi_n = \chi$$

Παρατήρηση: Αν μια ακολουθία συγκλίνει είναι μια ακολουθία Κωσύ. Μια ακολουθία Κωσύ από σημεία ενός χώρου Ε συγκλίνει σε ένα σημείο το οποίο είναι δυνατόν να μην ανήκει στον χώρο Ε.

Ορισμός: Ενας μετρικός χώρος (E, d) είναι πλήρης, αν κάθε ακολουθία Κωσύ συγκλίνει σε ένα σημείο του Ε.

Ορισμός: Ενας μετρικός χώρος $(\hat{\mathrm{E}}, \hat{d})$ ονομάζεται συμπλήρωμα ενός χώρου (E, d) τότε και μόνο τότε όταν

i) Ο χώρος (E, d) είναι υπόχωρος του $(\hat{\mathrm{E}}, \hat{d})$.

ii) Το σύνολο Ε είναι παντού πυκνό στο $\hat{\mathrm{E}}$, δηλαδή $\bar{\mathrm{E}} = \hat{\mathrm{E}}$.

iii) Ο χώρος $(\hat{\mathrm{E}}, \hat{d})$ είναι πλήρης.

Θεώρημα: Για κάθε μετρικό χώρο υπάρχει ένα και μόνο ένα συμπλήρωμα αυτού. Επομένως ένα μετρικό χώρο που δεν είναι πλήρης μπορούμε να τον επεκτείνουμε σε ένα πλήρη χώρο.

Παράδειγμα: Ο χώρος Q των ρητών αριθμών με μετρική

$$d(\alpha, \beta) = |\alpha - \beta|$$

δεν είναι πλήρης χώρος. Το σύνολο των πραγματικών αριθμών περιέχει το σύνολο των ρητών αριθμών και όλα τα όρια των ακολουθιών του Κωσύ από ρητούς αριθμούς. Ο χώρος $\Re$ είναι το συμπλήρωμα του χώρου Q από την κατασκευή του και είναι ένας πλήρης χώρος.

Ορισμός: Ενας πλήρης διανυσματικός χώρος εσωτερικού γινομένου ονομάζεται χώρος Χίλμπερτ. Ενας πλήρης σταθμητός διανυσματικός χώρος ονομάζεται χώρος Μπάναχ.

Θεώρημα: Κάθε χώρος Χίλμπερτ έχει μια ορθοκανονική βάση.

Παρατήρηση: Θα δεχτούμε ότι κάθε χώρος Χίλμπερτ περιέχει ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο, δηλαδή μια βάση από αριθμήσιμα, πεπερασμένα ή άπειρα, διανύσματα. Ενας τέτοιος χώρος Χίλμπερτ είναι διαχωρίσιμος, δηλαδή περιέχει ένα αριθμήσιμο σύνολο παντού πυκνό. Οι χώροι Χίλμπερτ που χρησιμοποιούμε στην κβαντομηχανική είναι συνήθως διαχωρίσιμοι και απείρων διαστάσεων.

Παράδειγμα: Κάθε $n-$ διάστατος χώρος εσωτερικού γινομένου είναι ένας χώρος Χίλμπερτ.

Απόδειξη: Θα αποδείξουμε μόνο την πληρότητα του χώρου.

Θεωρούμε μια ακολουθία Κωσύ ψ_m και $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ μια ορθοκανονική βάση του χώρου. Αναπτύσσουμε τα στοιχεία της ακολουθίας και έχουμε

$$\psi_m = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k^m \varphi_k$$

Επειδή η ακολουθία είναι Κωσύ ισχύει

$$\|\psi_m - \psi_l\|^2 = \sum_{k=1}^{n} |\alpha_k^m - \alpha_k^l|^2 \to 0 \quad \text{για} \quad m, l \to \infty$$

και επομένως για κάθε $k = 1, 2, \cdots, n$, έχουμε

$$|\alpha_k^m - \alpha_k^l| \to 0 \quad \text{για} \quad m, l \to \infty$$

Αρα η ακολουθία α_k^m είναι μια ακολουθία Κωσύ. Επειδή ο χώρος $\Re$ (ή C) είναι πλήρης η ακολουθία α_k^m συγκλίνει σε ένα σημείο που το συμβολίζουμε με α_k.

Θα αποδείξουμε ότι η ακολουθία των διανυσμάτων ψ_m συγκλίνει στο διάνυσμα

$$\psi = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k$$

Πράγματι επειδή $\alpha_k^m \to \alpha_k$ έχουμε

$$\|\psi - \psi_m\|^2 = \sum_{k=1}^{n} |\alpha_k - \alpha_k^m|^2 \to 0 \quad \text{για} \quad m \to \infty$$

Αρα ο χώρος είναι πλήρης.

Παράδειγμα: Ο χώρος των άπειρων ακολουθιών $\chi = (\chi_1, \chi_2, \cdots,)$ με

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\chi_k|^2 < \infty$$

είναι ένας χώρος Χίλμπερτ. Ο χώρος είναι άπειρων διαστάσεων και συμβολίζεται με $l^2(\infty)$. Τα διανύσματα

$$\varphi_1 = (1, 0, 0, \cdots), \quad \varphi_2 = (0, 1, 0, \cdots), \quad \cdots, \quad \varphi_n = (\overbrace{0, \cdots, 1}^{n}, 0, \cdots), \quad \cdots$$

είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου και κάθε διάνυσμα $\psi \in l^2(\infty)$ γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των φ_i. Οι συντελεστές α_i ονομάζονται συντελεστές Φουριέ και δίνονται από την σχέση $\alpha_i =< \varphi_i|\psi >$. Κατά τον συμβολισμό του Ντιράκ γράφουμε

$$|\psi >= \sum_{k=1}^{\infty} < \varphi_k|\psi > |\varphi_k > \quad \text{ή} \quad |\psi >= \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k|\psi >$$

Παράδειγμα: Ο χώρος $L^2(\Re)$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κατά Λεμπέκ συναρτήσεων είναι ένας χώρος Χίλμπερτ.

Ο χώρος $C[\alpha, \beta]$ των συνεχών συναρτήσεων επί του $[\alpha, \beta]$ με στάθμη ορισμένη από την σχέση

$$\|f\| = \max_{t \in [\alpha, \beta]} \{f(t)\}$$

είναι ένας πλήρης χώρος. Ο ίδιος χώρος με εσωτερικό γινόμενο

$$< \chi|\psi >= \int_{\alpha}^{\beta} \chi^*(t)\psi(t)dt$$

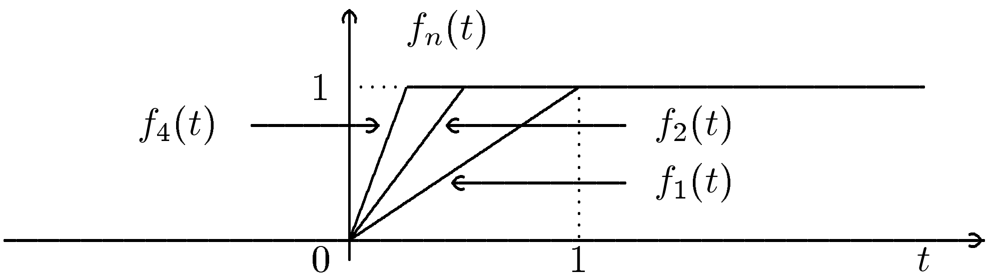
δεν είναι πλήρης χώρος. Για παράδειγμα η ακολουθία των συνεχών συναρτήσεων του χώρου $C[-1,1]$

$$f_n(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ nt & 0 < t \leq 1/n \\ 1 & 1/n < t \end{cases}$$

είναι μια ακολουθία Κωσύ. Ομως η οριακή συνάρτηση

$$f(t) \equiv H(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ 1 & t > 0 \end{cases}$$

δεν είναι συνεχής συνάρτηση και δεν ανήκει στον χώρο $C[-1,1]$.



Σχήμα 2.1
Η οριακή συνάρτηση δεν είναι συνεχής

Ο χώρος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κατά Λεμπέκ συναρτήσεων

$$L^2[\alpha,\beta] = \left\{ f/f : [\alpha,\beta] \mapsto \Re \quad \text{με} \quad \int_{\alpha}^{\beta} |f(t)|^2 dt \text{ υπάρχει κατά Λεμπέκ} \right\}$$

είναι το συμπλήρωμα του χώρου $C[\alpha,\beta]$ και επομένως ένας χώρος Χίλμπερτ από την κατασκευή του. Η εισαγωγή του ολοκληρώματος κατά Λεμπέκ είναι αναγκαία για την συμπλήρωση του χώρου των συνεχών συναρτήσεων.

Για το χώρο $L^2[-\pi,\pi]$ το σύνολο των συνεχών συναρτήσεων

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\text{συν}\,(nt), \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\text{ημ}\,(nt), \qquad n = 1, 2, \cdots$$

είναι μία ορθοκανονική βάση του χώρου. Κάθε συνάρτηση του χώρου είναι ένα άπειρο άθροισμα συνεχών συναρτήσεων της μορφής

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k\,\text{συν}\,(kt) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^{\infty} \beta_k\,\text{ημ}\,(kt)$$

Οι συντελεστές Φουριέ α_k και β_k δίνονται από τις σχέσεις

$$\alpha_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(t)\,\text{συν}\,(kt)dt, \qquad \beta_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(t)\,\text{ημ}\,(kt)dt$$

Το παραπάνω άπειρο άθροισμα σημαίνει ότι η ακολουθία f_n των μερικών αθροισμάτων

$$f_n(t) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k \varphi_k(t) + \sum_{k=1}^{n} \beta_k \psi_k(t)$$

συγκλίνει πάντα στην συνάρτηση $f(t)$ με την έννοια της στάθμης του χώρου δηλαδή

$$\lim_{n\to\infty} \|f_n(t) - f(t)\|^2 = \lim_{n\to\infty} \int_{-\pi}^{\pi} |f_n(t) - f(t)|^2 dt = 0$$

Θεώρημα: Αν $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι ένα ορθοκανονικό σύνολο ενός χώρου Χίλμπερτ H, τότε η σειρά $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k$ συγκλίνει στο H τότε και μόνο τότε όταν η σειρά $\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2$ συγκλίνει στο $\Re$. Δηλαδή

$$\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k \in H \iff \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2 < \infty$$

Απόδειξη: Επειδή το σύνολο $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι ορθοκανονικό ισχύει

$$\| \sum_{k=n+1}^{m} \alpha_k \varphi_k \|^2 = \sum_{k=n+1}^{m} |\alpha_k|^2 \quad \text{για κάθε} \;\; n, m$$

και άρα

$$\lim_{n,m\to\infty} \| \sum_{k=n+1}^{m} \alpha_k \varphi_k \|^2 = \lim_{n,m\to\infty} \sum_{k=n+1}^{m} |\alpha_k|^2 \tag{2.1}$$

Αν η σειρά $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k$ συγκλίνει στο H τότε η ακολουθία των μερικών αθροισμάτων

$$\psi_n = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k$$

συγκλίνει. Επομένως είναι μια ακολουθία Κωσύ δηλαδή

$$\lim_{n,m\to\infty} \| \sum_{k=n+1}^{m} \alpha_k \varphi_k \|^2 = 0$$

και άρα λόγω της (2.1) έχουμε

$$\lim_{n,m\to\infty} \sum_{k=n+1}^{m} |\alpha_k|^2 = 0$$

Η σχέση όμως αυτή σημαίνει ότι η ακολουθία

$$f_n = \sum_{k=1}^{n} |\alpha_k|^2$$

είναι μια ακολουθία Κωσύ πραγματικών αριθμών και επειδή ο χώρος $\Re$ είναι πλήρης η ακολουθία αυτή συγκλίνει στο $\Re$. Αυτό όμως σημαίνει ότι και η σειρά $\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2$ συγκλίνει στο $\Re$.

Το αντίστροφο αποδεικνύεται με όμοιο τρόπο.

Πόρισμα: Η ακόλουθη σειρά

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k | \chi >$$

συγκλίνει στο H, για κάθε $\chi \in H$.

Για την απόδειξη της πρότασης αυτής παίρνουμε το όριο στην ανισότητα Μπέσελ και βρίσκουμε

$$\sum_{k=1}^{\infty} | < \varphi_k|\chi > |^2 = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} | < \varphi_k|\chi > |^2 \leq \|\chi\|^2 \Longrightarrow$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} | < \varphi_k|\chi > |^2 \leq \|\chi\| < \infty$$

Επομένως η σειρά

$$\sum_{k=1}^{\infty} | < \varphi_k|\chi > |^2 \qquad\qquad \text{συγκλίνει στο } \Re$$

και άρα από το θεώρημα έπεται ότι και η σειρά

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi > \qquad\qquad \text{συγκλίνει στο } H$$

Θεώρημα: Ενα ορθοκανονικό σύνολο $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι πλήρες, δηλαδή μια βάση ενός χώρου Χίλμπερτ τότε και μόνο τότε, όταν ισχύουν οι ακόλουθες ισοδύναμες προτάσεις

α) $$< \varphi_k|\chi >= 0 \quad \forall k = 1, 2, \cdots \;\Longrightarrow\; |\chi >= 0$$

β) $$\lim_{n\to\infty} \|\chi - \sum_{k=1}^{n} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi > \| = 0 \qquad\qquad \forall\ |\chi >\in H$$

δηλαδή

$$|\chi >= \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi > \qquad\qquad \text{Ανάπτυγμα Φουριέ}$$

γ) $$< \chi|\psi >= \sum_{k=1}^{\infty} < \chi|\varphi_k >< \varphi_k|\psi > \qquad\qquad \forall|\chi >\ ,\ |\psi >\in H$$

που ονομάζεται ταυτότητα του Πάρσεβαλ, ή ισοδύναμα

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k| = \mathbf{I} \quad \text{ο μοναδιαίος τελεστής}$$

για $|\chi >= |\psi >$ η ταυτότητα του Πάρσεβαλ γράφεται

$$\|\chi\| = \sum_{k=1}^{\infty} | < \varphi_k|\chi > |^2$$

Απόδειξη: i) α $\Longrightarrow$ β. Θεωρούμε το διάνυσμα

$$|\psi >= |\chi > - \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi >$$

Για κάθε j ισχύει

$$< \varphi_j|\psi >=< \varphi_j|\chi > - \sum_{k=1}^{\infty} < \varphi_k|\chi >< \varphi_j|\varphi_k >=< \varphi_j|\chi > - < \varphi_j|\chi >= 0$$

και άρα το $|\psi >$ είναι κάθετο προς όλα τα $|\varphi_j >$. Αυτό όμως σημαίνει, από την σχέση α), ότι $|\psi >= 0$ δηλαδή

$$|\chi >= \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi >$$

ii) β $\Longrightarrow$ γ

$$< \chi|\psi >=< \left(\lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} |\varphi_k >< \varphi_k|\chi > \right) | \left(\lim_{n\to\infty} \sum_{j=1}^{n} |\varphi_j >< \varphi_j|\psi > \right) >=$$

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{k,j=1}^{n} < \varphi_k|\chi >^* < \varphi_j|\psi >< \varphi_k|\varphi_j >= \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} < \chi|\varphi_k >< \varphi_k|\psi >\Longrightarrow$$

$$< \chi|\psi >= \sum_{k=1}^{\infty} < \chi|\varphi_k > < \varphi_k|\psi >$$

iii) γ $\Longrightarrow$ α. Εάν $<\varphi_k|\chi>=0$ τότε από την σχέση

$$\|\chi\|^2=\sum_{k=1}^{\infty}|<\varphi_k|\chi>|^2$$

συνεπάγεται ότι $\|\chi\|=0$ δηλαδή

$$|\chi>=0$$

Ορισμός: Δύο χώροι Χίλμπερτ H_1 και H_2 ονομάζονται ισόμορφοι, εάν υπάρχει μία αμφιμονοσήμαντη απεικόνιση f η οποία να είναι γραμμική και ισομετρική, δηλαδή να διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο

1. $f(\alpha\chi+\beta\psi)=\alpha f(\chi)+\beta f(\psi) \qquad \forall\chi\ ,\ \psi\in H_1 \quad \forall\alpha\ ,\ \beta\in F$
2. $<\chi|\psi>_1=<f(\chi)|f(\psi)>_2 \qquad \forall\chi\ ,\ \psi\in H_1$

Θεώρημα: Ολοι οι χώροι Χίλμπερτ με την ίδια διάσταση είναι ισόμορφοι. Κατά συνέπεια όλοι οι απείρου διάστασης χώροι Χίλμπερτ είναι ισόμορφοι.

2.5 Ισχυρή και ασθενής σύγκλιση

Σε ένα χώρο εσωτερικού γινομένου μπορούμε να ορίσουμε δύο είδη σύγκλισης. Το ένα είδος αναφέρεται στη στάθμη του χώρου που προέρχεται από το εσωτερικό γινόμενο και το άλλο στο εσωτερικό γινόμενο.

Ορισμός: Μια ακολουθία $\chi_1,\chi_2,\cdots$ ενός χώρου Χίλμπερτ θα ονομάζεται ισχυρώς συγκλίνουσα στο $\chi_0\in H$ τότε και μόνο τότε όταν

$$\lim_{k\to\infty}\|\chi_k-\chi_0\|=0$$

Ορισμός: Μια ακολουθία $\chi_1,\chi_2,\cdots$ ενός χώρου Χίλμπερτ θα ονομάζεται ασθενώς συγκλίνουσα στο $\chi_0\in H$ τότε και μόνο τότε όταν

$$\lim_{k\to\infty}<\chi_k|\chi>=<\chi_0|\chi> \qquad \forall\chi\in H$$

Το όριο κάθε συγκλίνουσας ακολουθίας είναι μοναδικό.

Θεώρημα: Κάθε ισχυρώς συγκλίνουσα ακολουθία ενός χώρου Χίλμπερτ H συγκλίνει ασθενώς προς το ίδιο όριο. Το αντίστροφο δεν ισχύει γενικά.

Απόδειξη: Υποθέτουμε ότι η ακολουθία $\chi_1, \chi_2, \cdots$ συγκλίνει ισχυρά στο $\chi_0 \in H$. Δηλαδή

$$\lim_{k\to\infty} \|\chi_k - \chi_0\| = 0$$

Τότε για κάθε $\chi \in H$ ισχύει

$$| < \chi_k|\chi > - < \chi_0|\chi > | = | < \chi_k - \chi_0|\chi > | \leq \|\chi_k - \chi_0\|\|\chi\|$$

Παίρνουμε το όριο της σχέσης αυτής και έχουμε

$$\lim_{k\to\infty} | < \chi_k|\chi > - < \chi_0|\chi > | \leq \|\chi\| \lim_{k\to\infty} \|\chi_k - \chi_0\| = 0$$

Επομένως

$$\lim_{k\to\infty} < \chi_k|\chi > = < \chi_0|\chi >$$

Αρα η ακολουθία συγκλίνει ασθενώς στο ίδιο όριο.

Εάν η διάσταση του χώρου είναι πεπερασμένη τότε ισχύει και το αντίστροφο του προηγουμένου θεωρήματος. Το αντίστροφο δεν ισχύει γενικά σε χώρους απείρων διαστάσεων, όπως φαίνεται από το ακόλουθο παράδειγμα.

Θεωρούμε τον χώρο $l^2(\infty)$ και την ακολουθία $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ όπου

$$\varphi_1 = (1, 0, \cdots, 0, \cdots) \quad \varphi_2 = (0, 1, \cdots, 0, \cdots) \quad \cdots\cdots$$

$$\varphi_k = (\overbrace{0, 0, \cdots, 1}^{k}, \cdots) \quad \cdots\cdots \qquad k = 1, 2, \cdots$$

Για κάθε σημείο $\chi = (\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_k, \cdots)$ του χώρου αυτού ισχύει

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\chi_k|^2 < \infty$$

Επειδή η σειρά αυτή συγκλίνει ο τελευταίος όρος πρέπει να μηδενίζεται $\lim_{k\to\infty} |\chi_k|^2 = 0$. Επομένως $\lim_{k\to\infty} \chi_k = 0$ και άρα έχουμε

$$\forall \chi \in H \quad \lim_{k\to\infty} < \varphi_k|\chi > = \lim_{k\to\infty} \chi_k = 0 = < 0|\chi >$$

Επομένως η ακολουθία συγκλίνει ασθενώς στο μηδέν. Ομως η σχέση

$$\|\varphi_n - \varphi_m\| = \sqrt{2}\delta_{mn}$$

συνεπάγεται ότι η ακολουθία δεν είναι Κωσύ ως προς τη στάθμη και άρα δεν συγκλίνει ισχυρώς.

Παρατήρηση: Ενας χώρος Μπάναχ που κάθε ασθενώς συγκλίνουσα ακολουθία είναι και ισχυρώς συγκλίνουσα είναι ο χώρος $l^1(\infty)$ που ορίζεται ως εξής

$$l^1(\infty) = \left\{ \chi = (\chi_n)_{n\in N} \ : \ \chi_n \in \Re \quad \sum_{k=1}^{\infty} |\chi_n| < \infty \right\}$$

2.6 Υπόχωροι ενός χώρου Χίλμπερτ

Ορισμός: Μια κλειστή γραμμική πολλαπλότητα ονομάζεται υπόχωρος ενός χώρου Χίλμπερτ.

Παρατήρηση: Εάν μια γραμμική πολλαπλότητα περιέχει τα διανύσματα $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$, περιέχει επίσης και τα πεπερασμένα αθροίσματα της μορφής

$$\psi_n = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k$$

Εάν η πολλαπλότητα αυτή είναι υπόχωρος, τότε περιέχει και τα άπειρα αθροίσματα της μορφής

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k$$

διότι ο υπόχωρος είναι κλειστό υποσύνολο και συνεπώς περιέχει το όριο της ακολουθίας ψ_n των μερικών αθροισμάτων. Οι έννοιες γραμμική πολλαπλότητα και υπόχωρος συμπίπτουν μόνο για χώρους με πεπερασμένη διάσταση.

Θεώρημα: Ο υπόχωρος ενός χώρου Χίλμπερτ είναι επίσης χώρος Χίλμπερτ

Απόδειξη: Θα αποδείξουμε μόνο ότι ο υπόχωρος είναι πλήρης.

Αν $\chi_1, \chi_2, \cdots$ είναι μια ακολουθία Κωσύ από διανύσματα του υπόχωρου, τότε η ακολουθία αυτή σαν ακολουθία Κωσύ του χώρου Χίλμπερτ συγκλίνει σε ένα σημείο χ. Επειδή ο υπόχωρος είναι κλειστό σύνολο περιέχει κάθε οριακό σημείο του και κατά συνέπεια και το χ. Αρα ο υπόχωρος είναι πλήρης.

Θεώρημα: Αν M ένας υπόχωρος ενός χώρου Χίλμπερτ H τότε

α) Το υποσύνολο

$$\mathrm{M}^{\perp} = \{\psi \in H \quad / \quad <\psi|\chi>= 0 \ \ \forall \chi \in \mathrm{M}\ \}$$

είναι επίσης ένας υπόχωρος του M και

β) Κάθε διάνυσμα $\varphi \in H$ μπορεί να γραφεί μονοσήμαντα σαν άθροισμα $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2$ όπου $\varphi_1 \in \mathrm{M}$ και $\varphi_2 \in M^{\perp}$ δηλαδή

$$H = \mathrm{M} \ \oplus \ \mathrm{M}^{\perp}$$

Παράδειγμα: Για παράδειγμα στον χώρο $L^2[-\pi,\pi]$, το σύνολο M μπορεί να είναι το σύνολο όλων των γραμμικών συνδυασμών των ημιτόνων ημ(kt) (περιττές συναρτήσεις) και το σύνολο $\mathrm{M}^{\perp}$ το σύνολο όλων των γραμμικών συνδυασμών των συνημίτονων συν(kt) (άρτιες συναρτήσεις).

$$M = \left\{ f \ / \ f(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \,\text{ημ}\,(kt) \right\} \qquad M^{\perp} = \left\{ g \ / \ g(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \,\text{συν}\,(kt) \right\}$$

Παρατήρηση: Οι χώροι Χίλμπερτ είναι οι μοναδικοί χώροι για τους οποίους κάθε υπόχωρος M, έχει έναν συμπληρωματικό υπόχωρο $M^{\perp}$ τέτοιον ώστε να ισχύει $H = M \oplus M^{\perp}$. Η ιδιότητα αυτή δεν ισχύει για χώρους Μπάναχ.

2.7 Τα γραμμικά συναρτησιακά

Ορισμός: Θεωρούμε έναν διανυσματικό χώρο V επί του σώματος F $(= \Re$ ή $C)$. Μια απεικόνιση $f : V \mapsto F$ ονομάζεται γραμμικό συναρτησιακό επί του V τότε και μόνο τότε όταν

$$f(\alpha\chi + \beta\psi) = \alpha f(\chi) + \beta f(\psi) \quad \forall \chi\ ,\ \psi \in V \quad \text{και} \quad \forall \alpha\ ,\ \beta \in F$$

Θεώρημα: Το σύνολο V' των γραμμικών συναρτησιακών επί του V με τις ακόλουθες πράξεις σύνθεσης

1. $(f+g)(\chi) = f(\chi) + g(\chi) \qquad \forall f\ ,\ g \in V'$
2. $(\alpha f)(\chi) = \alpha f(\chi) \qquad \forall \chi \in V \ \ \forall \alpha \in F$

είναι ένας διανυσματικός χώρος επί του F και ονομάζεται αλγεβρικός δυϊκός χώρος του V.

Παρατήρηση: Για διανυσματικούς χώρους πεπερασμένης διάστασης κάθε γραμμικό συναρτησιακό είναι μια συνεχής απεικόνιση και ο παραπάνω χώρος V' συμβολίζεται με V^*. Για να επεκταθούμε σε χώρους άπειρων διαστάσεων, είναι απαραίτητο να εισάγουμε την έννοια της συνεχείας για τα γραμμικά συναρτησιακά.

Ορισμός: Ενα γραμμικό συναρτησιακό f είναι συνεχές τότε και μόνο τότε όταν το $f(\chi_n)$ συγκλίνει στο $f(\chi)$ για κάθε ακολουθία χ_n που συγκλίνει στο χ δηλαδή

$$\lim_{\chi_n \to \chi} f(\chi_n) = f(\chi)$$

Παρατήρηση: Αν f είναι ένα γραμμικό συναρτησιακό τότε ισχύει

$$f\left(\sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k\right) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k f\left(\varphi_k\right)$$

Είναι προφανές ότι για χώρους άπειρων διαστάσεων, η συνέχεια των συναρτησιακών είναι απαραίτητη για να μπορούμε να γράψουμε

$$f\left(\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k\right) = f\left(\lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k\right) = \lim_{n\to\infty} f\left(\sum_{k=1}^{n} \alpha_k \varphi_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k f\left(\varphi_k\right)$$

Η δεύτερη ισότητα ισχύει μόνο αν το συναρτησιακό f είναι συνεχές.

Ορισμός: Το σύνολο V^* των συνεχών γραμμικών συναρτησιακών επί του τοπολογικού γραμμικού χώρου V, είναι ένας γραμμικός υπόχωρος του V'. Ο χώρος

$$V^* = \{f \in V' : f \ \ \text{συνεχές}\}$$

ονομάζεται (τοπολογικός) δυαδικός χώρος του V.

Ορισμός: Εάν ο χώρος V είναι ένας σταθμητός διανυσματικός χώρος τότε ένα συναρτησιακό f ονομάζεται φραγμένο, τότε και μόνο τότε όταν υπάρχει πραγματικός αριθμός $m \in \Re^+$ τέτοιος ώστε να ισχύει

$$|f(\chi)| \leq m \, \|\chi\| \qquad\qquad \forall \chi \in V$$

Το m ονομάζεται φράγμα του f. Το μικρότερο φράγμα ενός φραγμένου γραμμικού συναρτησιακού συμβολίζεται με $\|f\|$. Αποδεικνύεται ότι

$$\|f\| = \sup_{\chi \neq 0} \frac{|f(\chi)|}{\|\chi\|}$$

Ο χώρος V είναι ένας χώρος Μπάναχ με στάθμη ορισμένη από την σχέση

$$\|f\| = \sup_{\chi \neq 0} \frac{|f(\chi)|}{\|\chi\|}$$

Θεώρημα: Το συναρτησιακό f είναι συνεχές επί του V, τότε και μόνο τότε όταν είναι συνεχές σε ένα σημείο του V συνήθως το $0 \in V$.

Θεώρημα: Το συναρτησιακό f είναι συνεχές επί του V, τότε και μόνο τότε όταν είναι φραγμένο.

Θεώρημα: (Χαν - Μπάναχ) Ενα συνεχές γραμμικό συναρτησιακό f επί ενός γραμμικού υπόχωρου ενός χώρου με στάθμη, μπορεί να επεκταθεί σε ένα συνεχές γραμμικό συναρτησιακό f' σε ολόκληρο τον χώρο, έτσι ώστε $\|f\| = \|f'\|$. Το θεώρημα είναι το βασικό θεώρημα της συναρτησιακής ανάλυσης.

Για τους χώρους Χίλμπερτ ισχύει το βασικό θεώρημα του Ριτζ ή θεώρημα αναπαράστασης. Κάθε συνεχές γραμμικό συναρτησιακό επί ενός χώρου Χίλμπερτ, είναι δυνατόν να παρασταθεί με το εσωτερικό γινόμενο του H. Επί πλέον υπάρχει αμφιμονοσήμαντος αντιστοιχία μεταξύ των συνόλων H και H^*.

Θεώρημα: (Ριτζ) Θεωρούμε ένα χώρο Χίλμπερτ H και ένα στοιχείο $f \in H^*$ τότε υπάρχει ένα και μόνο στοιχείο $\varphi \in H$ τέτοιο ώστε

$$f(\chi) = <\varphi|\chi> \qquad \forall \chi \in H \quad \text{και} \quad \|f\| = \|\varphi\|$$

Αποδεικνύεται ότι ο δυϊκός χώρος H^* ενός χώρου Χίλμπερτ είναι επίσης ένας χώρος Χίλμπερτ ισόμορφος με τον χώρο H.

Παρατήρηση: Σύμφωνα με το συμβολισμό του Ντιράκ ένα διάνυσμα συμβολίζεται με $|\chi>$ και ένα γραμμικό συναρτησιακό με $<\varphi|$

$$<\varphi| : V \longmapsto F \qquad <\varphi| : |\chi> \longmapsto <\varphi|\,(\,|\chi>)$$

Το θεώρημα λέει ότι μπορούμε να παραλείψουμε τις παρενθέσεις και να γράψουμε

$$<\varphi|\,(\,|\chi>) \equiv <\varphi|\chi>$$

Δεν είναι απαραίτητο να ξεχωρίσουμε την τιμή του συναρτησιακού $< \varphi|$ στο διάνυσμα $|\chi >$ από το εσωτερικό γινόμενο των διανυσμάτων $|\chi >$ και $|\varphi >$ και τα δύο συμβολίζονται με $< \varphi|\chi >$.

2.8 Οι κατανομές

Στη Φυσική συναντάμε πολλές φορές δυνάμεις που η χρονική διάρκεια τους είναι πολύ μικρή, ενώ το μέτρο τους πολύ μεγάλο. Ενα σύστημα για παράδειγμα τίθεται σε κίνηση από κάποιο κτύπημα που περιγράφεται από την δύναμη $F(t)$. Σε τέτοια προβλήματα δεν μας ενδιαφέρει να γνωρίζουμε τον συναρτησιακό τύπο της συνάρτησης $F(t)$, αλλά την ώθηση που θα δώσει η δύναμη αυτή στο σύστημα. Η ζητούμενη ώθηση δίνεται από το ολοκλήρωμα της δύναμης ως προς τον χρόνο, για όσο χρόνο διαρκεί η ώθηση.

Τέτοιες δυνάμεις περιγράφονται από κάποιες "ανώμαλες συναρτήσεις" όπως είναι για παράδειγμα η συνάρτηση του Ντιράκ $\delta(x-\xi)$. Αυτές οι ανώμαλες συναρτήσεις εμφανίζονται στα ενδιάμεσα στάδια ενός προβλήματος, μέσα σε ένα ολοκλήρωμα που έχουν πολλαπλασιαστεί με άλλες καλά ορισμένες συναρτήσεις. Συνεπώς δεν είναι απαραίτητο να πούμε τι ακριβώς είναι μία ανώμαλη συνάρτηση, είναι όμως ανάγκη να ξέρουμε πια είναι η έννοια της κάτω από κάποιο ολοκλήρωμα. Με άλλες λέξεις, με τον όρο ανώμαλη συνάρτηση εννοούμε ένα (γραμμικό) συναρτησιακό, που σχετίζει κάθε "καλή" συνάρτηση σε έναν καλά ορισμένο αριθμό.

Για παράδειγμα για την δέλτα συνάρτηση, ο αριθμός που αντιστοιχεί σε κάθε "καλή" συνάρτηση $\varphi(x)$ είναι ο αριθμός $\varphi(\xi)$. Γράφουμε συμβολικά

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-\xi)\varphi(x)dx = \varphi(\xi)$$

Θα δώσουμε παρακάτω τον αυστηρό μαθηματικό ορισμό αυτών των συναρτησιακών. Θα ορίσουμε πρώτα τον διανυσματικό χώρο πάνω στον οποίον θα επιδράσουν τα συναρτησιακά.

Ορισμός: Ονομάζουμε δοκιμαστική (test) συνάρτηση επί του $\Re^n$, μια συνάρτηση, πραγματική ή μιγαδική, $\varphi(x) \equiv \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ που είναι άπειρα παραγωγίσιμη, δηλαδή κάθε μερική παράγωγος κάθε τάξης υπάρχει και μηδενίζεται έξω από κάποια φραγμένη περιοχή. Το σύνολο των δοκιμαστικών συναρτήσεων το συμβολίζουμε με $C_c^{\infty}(\Re^n)$ και γίνεται ένας διανυσματικός χώρος με πρόσθεση και πολλαπλασιασμό ορισμένων ως συνήθως.

Η ιδιότητα ότι οι συναρτήσεις αυτές μηδενίζονται στο άπειρο είναι ένας πολύ περιοριστικός όρος για τα μαθηματικά, όχι όμως για την φυσική. Για παράδειγμα αν κάποια συνάρτηση περιγράφει ένα φυσικό πεδίο αυτή οφείλει να μηδενίζεται σε μεγάλες αποστάσεις από το κέντρο.

Επειδή ο φορέας μιας συνάρτησης είναι κλειστό σύνολο και κάθε κλειστό και φραγμένο υποσύνολο του $\Re$ είναι συμπαγές, ο χώρος $C_c^\infty(\Re^n)$ αναφέρεται και σαν χώρος των άπειρα παραγωγίσιμων συναρτήσεων με συμπαγή φορέα. Κατ' ανάλογο τρόπο ορίζεται και ο χώρος $C_c^k(\Re^n)$ των συναρτήσεων με παραγώγους μέχρι k τάξη και με συμπαγή φορές.

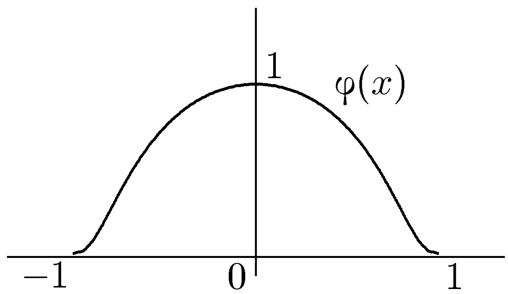
Παρατήρηση: Είναι δυνατόν τα συναρτησιακά να δράσουν και σε άλλες συναρτήσεις λιγότερο "καλές" από τις δοκιμαστικές συναρτήσεις. Διαλέγουμε τις συναρτήσεις αυτές, έτσι ώστε οποιαδήποτε ανωμαλία προκύψει να οφείλεται στην φύση των συναρτησιακών και όχι στο πεδίο ορισμού τους. Για το πεδίο ορισμού των συναρτησιακών αυτών έχουμε μια ποικιλία επιλογών.

Παράδειγμα: Ο διανυσματικός χώρος $C_c^\infty(\Re^n)$ περιέχει "πολύ καλές" συναρτήσεις. Μια τέτοια συνάρτηση είναι η εξής

$$\varphi(x) = \begin{cases} exp\left(\frac{1}{x^2-1}\right) & x < 1 \\ 0 & x \geq 1 \end{cases}$$

Η συνάρτηση αυτή έχει φορέα το διάστημα $[-1, +1]$

$$supp\varphi(x) = \{x \in \Re, \quad |x| \leq 1\}$$



Σχήμα 2.2
Γραφική παράσταση της δοκιμαστικής συνάρτησης $\varphi(x)$

Ορισμός: Μια ακολουθία $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots$ από δοκιμαστικές συναρτήσεις είναι μια μηδενική ακολουθία, τότε και μόνο τότε όταν υπάρχει μια κοινή φραγμένη περιοχή έξω από την οποία όλες οι συναρτήσεις $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots$ μηδενίζονται και

$$\lim_{n\to\infty} \max_{x\in\Re^n} \left| \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k_1} \cdots \partial x_n^{k_n}} \varphi_n(x) \right| = 0 \qquad k = k_1 + k_2 + \cdots + k_n$$

Δηλαδή και η ακολουθία $\varphi_m(x)$ και η ακολουθία όλων των μερικών παραγώγων $\partial^k \varphi_m(x)$, που είναι προφανώς δοκιμαστικές συναρτήσεις, συγκλίνουν στο μηδέν ομοιόμορφα. Η σύγκλιση στο μηδέν είναι πολύ ισχυρή.

Η ακολουθία

$$\varphi_m(x) = \frac{1}{m}\varphi(x) \qquad \varphi(x) \in C_c^\infty(\Re^n)$$

για παράδειγμα είναι μια μηδενική ακολουθία.

Ορισμός: Ενα γραμμικό συναρτησιακό επί του διανυσματικού χώρου $C_c^\infty(\Re^n)$ είναι συνεχές, τότε και μόνο τότε όταν

$$\lim_{n\to\infty} f(\varphi_n) = \lim_{n\to\infty} < f|\varphi_n >= 0$$

για κάθε μηδενική ακολουθία $\varphi_n(x)$ από δοκιμαστικές συναρτήσεις. Η συνέχεια του συναρτησιακού στο μηδέν εξασφαλίζει προφανώς την συνέχεια του σε όλο τον χώρο.

Ορισμός: Το σύνολο των συνεχών γραμμικών συναρτησιακών επί του $C_c^\infty(\Re^n)$ με τις συνηθισμένες πράξεις σύνθεσης, είναι ο δυαδικός διανυσματικός χώρος του $C_c^\infty(\Re^n)$ και τα στοιχεία του ονομάζονται κατανομές ή γενικευμένες συναρτήσεις.

Παράδειγμα: Μια μεγάλη κατηγορία κατανομών είναι οι ομαλές κατανομές. Μια τοπικά ολοκληρώσιμη πραγματική συνάρτηση $f(x)$ του $\Re^n$ ορίζει μια κατανομή F με την βοήθεια της σχέσης

$$F : C_c^\infty(\Re^n) \longmapsto \Re$$
$$F : \varphi(x) \longmapsto F\left(\,\varphi(x)\,\right) \stackrel{\text{ορσ}}{=} < f|\varphi >= \int_{\Re^n} f(x)\varphi(x)dx$$

Απόδειξη: Είναι σαφές ότι έχει οριστεί ένα γραμμικό συναρτησιακό επί του $C_c^\infty(\Re^n)$. Για να αποδείξουμε την συνέχεια θεωρούμε μια μηδενική ακολουθία $\varphi_m(x)$, που τα στοιχεία της μηδενίζονται έξω από την πεπερασμένη περιοχή Ω τότε

$$|<f|\varphi_m>| = \left|\int_{\Re^n} f(x)\varphi_m(x)dx\right| \leq \max_{x\in\Omega}|\varphi_m(x)|\int_\Omega |f(x)|dx$$

Αλλά η $\varphi_m(x)$ είναι μια μηδενική ακολουθία, δηλαδή $\lim_{m\to\infty}\max|\varphi(x)| = 0$ και η $f(x)$ είναι τοπικά ολοκληρώσιμη δηλαδή $\int_\Omega |f(x)|dx < \infty$.

Αρα έχουμε

$$\lim_{m\to\infty} <f|\varphi_m> = 0$$

που αποδεικνύει ότι το συναρτησιακό είναι συνεχές. Μια κατανομή ονομάζεται ομαλή αν μπορεί να γραφεί με την μορφή του παραπάνω ολοκληρώματος, άλλως ονομάζεται ανώμαλη.

Παρατήρηση: Κάθε τοπικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση μπορεί επίσης να θεωρηθεί και σαν κατανομή. Σαν συνάρτηση η f έχει κάποια τιμή $f(x)$ για κάθε σημείο $x \in \Re^n$, ενώ σαν κατανομή έχει μια τιμή $F(\varphi) =< F|\varphi >$ για κάποια συνάρτηση $\varphi(x)$ του $C_c^\infty(\Re^n)$.

Παράδειγμα: Αν $f(x) = \mathrm{I}_\Omega(x)$ η χαρακτηριστική συνάρτηση του Ω δηλαδή

$$\mathrm{I}_\Omega(x) = \begin{cases} 1 & x \in \Omega \\ 0 & x \notin \Omega \end{cases}$$

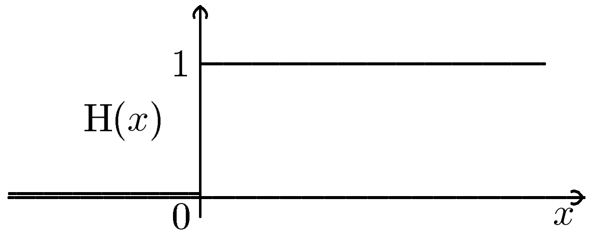
τότε η τοπικά ολοκληρώσιμη (κατά τμήματα συνεχής) συνάρτηση $\mathrm{I}_\Omega(x)$ ορίζει το εξής συναρτησιακό

$$F(\varphi) =< \mathrm{I}_\Omega|\varphi >= \int_{\Re^n} I_\Omega(x)\varphi(x)dx = \int_\Omega \varphi(x)dx$$

Μια ιδιαίτερη περίπτωση στο $\Re$ του παραπάνω συναρτησιακού, είναι το συναρτησιακό βήματος ή το συναρτησιακό του Χέβισαϊντ όπου για Ω παίρνουμε το διάστημα $(0, \infty)$.

Η συνάρτηση βήματος συμβολίζεται με $H(x)$ και ορίζεται από την σχέση

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$$



Σχήμα 2.3
Η γραφική παράσταση της συνάρτησης βήματος

Στο μηδέν η συνάρτηση αυτή δεν είναι συνεχής. Είναι όμως τοπικά ολοκληρώσιμη και άρα ορίζει μια κατανομή από τη σχέση

$$H\ (\ \varphi(x)\ ) =< H|\varphi >= \int_{\Re} H(x)\varphi(x) = \int_0^{\infty} \varphi(x)dx$$

Παρατήρηση: Η συνάρτηση αλλά και η κατανομή βήματος συμβολίζονται με το το ίδιο σύμβολο $H(x)$. Πρόκειται όμως σαφώς για δύο διαφορετικά πράγματα και δεν θα πρέπει να γίνεται σύγχυση. Η συνάρτηση έχει μια τιμή για κάθε πραγματική τιμή του x που είναι ή το 0 ή το 1 ενώ το συναρτησιακό έχει πεδίο ορισμού τις δοκιμαστικές συναρτήσεις $\varphi(x)$ και η τιμή του είναι ένας πραγματικός αριθμός ίσος με το ολοκλήρωμα της $\varphi(x)$ από το 0 έως ∞.

Παράδειγμα: Η πιο γνωστή ανώμαλη κατανομή είναι η κατανομή του Ντιράκ. Θεωρούμε ένα σταθερό σημείο ξ του $\Re$. Ορίζουμε το συναρτησιακό δ_ξ ή $\delta(x-\xi)$ από την σχέση

$$\delta_\xi\ (\ \varphi(x)\ ) =< \delta_\xi|\varphi(x) > \stackrel{\text{ορσ}}{=} \varphi(\xi)$$

Δηλαδή το συναρτησιακό δ_ξ απεικονίζει κάθε δοκιμαστική συνάρτηση στην τιμή της στο ξ. Αποδεικνύεται ότι το συναρτησιακό αυτό είναι μια κατανομή και ονομάζεται δέλτα "συνάρτηση" ή συναρτησιακό του Ντιράκ. Το συναρτησιακό αυτό είναι ανώμαλο και δεν μπορεί να γραφεί υπό μορφή κάποιου συνηθισμένου ολοκληρώματος, πολλές φορές όμως η έκφραση γράφεται συμβολικά. Δηλαδή έχουμε σαν ορισμό του συναρτησιακού του Ντιράκ την εξής συμβολική έκφραση

$$\delta_\xi\ (\ \varphi(x)\ ) = \int_{\Re} \delta(x-\xi)\varphi(x)dx \stackrel{\text{ορσ}}{=} \varphi(\xi)$$

Παράδειγμα: Ενα τρίτο παράδειγμα κατανομής είναι η κατανομή γινόμενο $\alpha(x)f(x)$. Το γινόμενο μιας κατανομής $f(x)$ με μια συνάρτηση $\alpha(x)$ παριστάνει μια κατανομή, τότε και μόνο τότε όταν η συνάρτηση $\alpha(x)$ είναι άπειρα παραγωγήσιμη. Η κατανομή αυτή ορίζεται από τη σχέση

$$< \alpha f|\varphi >=< f|\alpha\varphi >$$

Η συνάρτηση $\alpha(x)$ πρέπει να είναι άπειρα παραγωγήσιμη ώστε το γινόμενο $\alpha\varphi$ να είναι μια δοκιμαστική συνάρτηση. Δεν υπάρχει γενικός ορισμός για το γινόμενο δύο κατανομών.

Σαν ένα ιδιαίτερο παράδειγμα ισχύει η ισότητα

$$\alpha(x)\delta(x) = \alpha(0)\delta(x)$$

διότι προφανώς για κάθε δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x)$ βρίσκουμε

$$(\alpha(x)\delta(x))(\varphi(x)) =< \alpha(x)\delta(x)|\varphi(x) >=< \delta(x)|\alpha(x)\varphi(x) >= \alpha(0)\varphi(0) =$$

$$\alpha(0) < \delta(x)|\varphi(x) >=< \alpha(0)\delta(x)|\varphi(x) >= (\alpha(0)\delta(x))(\varphi(x))$$

2.9 Η Παράγωγος μιας κατανομής

Ορισμός: Η παράγωγος μιας κατανομής ως προς x ορίζεται από την σχέση

$$< f'|\varphi >= - < f|\varphi' >$$

Ο ίδιος ορισμός ισχύει και για τις μερικές παραγώγους

$$< \frac{\partial f}{\partial x_i}|\varphi >= - < f|\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} >$$

Αποδεικνύεται εύκολα ότι το f' όπως ορίστηκε είναι ένα συνεχές και γραμμικό συναρτησιακό δηλαδή μια κατανομή.

Πράγματι για την γραμμικότητα έχουμε

$$f'(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) =< f'|\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2 >= - < f|\left(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2\right)' >=$$

$$= - < f|\alpha\varphi_1' + \beta\varphi_2' >= -\alpha < f|\varphi_1' > -\beta < f|\varphi_2' >=$$

$$= \alpha < f'|\varphi_1 > +\beta < f'|\varphi_2 >= \alpha f'(\varphi_1) + \beta f'(\varphi_2)$$

Για την συνέχεια. Παρατηρούμε ότι αν $\varphi_n(x)$ είναι μια μηδενική ακολουθία τότε, από τον ορισμό της μηδενικής ακολουθίας είναι προφανές, ότι και η ακολουθία $-\varphi'_m(x)$ είναι επίσης μια μηδενική ακολουθία. Επειδή το συναρτησιακό f είναι συνεχές έχουμε

$$< f'|\varphi_m >= - < f|\varphi'_m > \to 0 \quad \text{για} \quad m \to \infty$$

Αρα το f' είναι συνεχές στο μηδέν και άρα συνεχές παντού.

Παρατήρηση: Αν η κατανομή είναι ομαλή ο ορισμός της παραγώγου προκύπτει εύκολα με μία κατά παράγοντες ολοκλήρωση.

$$< f'|\varphi >= \int_{\Re} f'(x)\varphi(x)dx =$$

$$f(x)\varphi(x)|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi'(x)dx = - < f|\varphi' >$$

Η τελευταία ισότητα ισχύει επειδή η συνάρτηση $\varphi(x)$ έχει συμπαγή φορές και άρα μηδενίζεται στο $\pm\infty$. Δηλαδή ισχύει $\varphi(\pm\infty) = 0$.

Παράδειγμα: Για παράδειγμα αποδεικνύεται ότι

$$H'(x) = \delta(x)$$

Σημειώνουμε ότι η συνάρτηση βήματος δεν έχει παράγωγο στο μηδέν.

θα βρούμε τις εικόνες των κατανομών $H'(x)$ και $\delta(x)$ σε μία τυχούσα δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x)$. Εχουμε

$$< H'(x)|\varphi(x) >= - < H(x)|\varphi'(x) >= - \int_0^{\infty} \varphi'(x)dx = \varphi(0)$$

Από την άλλη όμως μεριά ισχύει

$$< \delta(x)|\varphi(x) >= \varphi(0)$$

Τα δύο συναρτησιακά έχουν τις ίδιες εικόνες, άρα

$$\forall \varphi(x) \in C_c^{\infty}(\Re^n) \quad H'(x)(\ \varphi(x)\ ) = \delta(x)(\ \varphi(x)\ ) \quad \Longrightarrow \quad H'(x) = \delta(x)$$

Οι κατανομές έχουν παραγώγους πάσης τάξης, είναι δηλαδή άπειρα παραγωγήσιμες. Η k τάξης παράγωγος της $\delta(x-\xi)$ κατανομής για παράδειγμα ορίζεται από την σχέση

$$< \delta^{(k)}(x-\xi)|\varphi(x) >= (-1)^k \varphi^{(k)}(\xi)$$

Παρατήρηση: Παρατηρούμε ότι όλες οι κατανομές έχουν πάντα παράγωγο, ακόμα και αν ορίζονται από τοπικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις που δεν έχουν παράγωγο.

Ορισμός: Η κατανομή G ονομάζεται ολοκλήρωμα της F αν ισχύει $G' = F$ με την έννοια της κατανομής δηλαδή

$$< G'|\varphi >= - < G|\varphi' >=< F|\varphi >$$

Ορισμός: Η συναρτησιακή παράγωγος ενός συναρτησιακού $f(\varphi(x))$ ως προς την συνάρτηση $\varphi(y)$ ορίζεται από την σχέση

$$\frac{\delta f(\varphi(x))}{\delta\varphi(y)} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{f\left(\varphi(x) + \varepsilon\delta(x-y)\right) - f(\varphi(x))}{\varepsilon}$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι ισχύει

$$\frac{\delta\varphi(x)}{\delta\varphi(y)} = \delta(x-y)$$

Παράδειγμα: Σαν ένα απλό παράδειγμα θα υπολογίσουμε την συναρτησιακή παράγωγο του συναρτησιακού

$$f(\varphi(x)) = \int_{\Re} G(x,y)\varphi(y)dy$$

ως προς $\varphi(z)$. Βρίσκουμε

$$\frac{\delta f(\varphi(x))}{\delta\varphi(z)} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon} \left(\int_{\Re} G(x,y)[\varphi(y) + \varepsilon\delta(y-z)]dy - \int_{\Re} G(x,y)\varphi(y)dy \right) =$$

$$\int_{\Re} G(x,y)\delta(y-z)dy = G(x,z)$$

Στην ειδική περίπτωση που $G(x,y) = 1$ βρίσκουμε προφανώς

$$\frac{\delta f(\varphi(x))}{\delta\varphi(z)} = \frac{\delta}{\delta\varphi(z)} \int_{\Re} \varphi(y)dy = 1$$

2.10 Σύγκλιση ακολουθίας κατανομών

Ορισμός: Η οικογένεια f_α από κατανομές, θα λέμε ότι συγκλίνει με την έννοια της κατανομής στην κατανομή f για $\alpha \to \alpha_0$, τότε και μόνο τότε όταν

$$\lim_{\alpha\to\alpha_0} < f_\alpha|\varphi > = < f|\varphi > \qquad\qquad \forall\varphi \in C_c^\infty(\Re^n)$$

Η σύγκλιση των κατανομών εκφυλίζεται σε σύγκλιση αριθμών (ασθενής σύγκληση). Αν μια οικογένεια συγκλίνει τότε το όριο αυτό είναι μοναδικό.

Θεώρημα: Αν f_α μια οικογένεια κατανομών που συγκλίνει στην κατανομή f για $\alpha \to \alpha_0$ τότε

$$\lim_{\alpha\to\alpha_0} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

με την έννοια της κατανομής.

Η απόδειξη είναι απλή

$$\lim_{\alpha\to\alpha_0} < \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i}|\varphi > = -\lim_{\alpha\to\alpha_0} < f_\alpha|\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} > = - < f|\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} > = < \frac{\partial f}{\partial x_i}|\varphi >$$

Μπορούμε δηλαδή να παραγωγίσουμε κάθε συγκλίνουσα ακολουθία η σειρά από κατανομές όσες φορές θέλουμε όρο προς όρο.

Παρατήρηση: Για να παραγωγίσουμε μια σειρά από συναρτήσεις όρο προς όρο πρέπει να ισχύουν ορισμένες προϋποθέσεις. Η δυσκολία του προβλήματος στον χώρο των κατανομών μετατοπίζεται στον υπολογισμό της κατανομής παράγωγο.

Παράδειγμα: Θεωρούμε την ακολουθία των συνεχών κατά τμήματα συναρτήσεων

$$s_k(x) = \begin{cases} k & |x| < 1/2k \\ 0 & \text{αλλού} \end{cases}$$

Οι συναρτήσεις αυτές είναι τοπικά ολοκληρώσιμες και ορίζουν μια ακολουθία από κατανομές

$$< s_k(x)|\varphi(x) >= \int_{|x|<1/2k} k\varphi(x)dx \qquad \forall\varphi \in C_c^{\infty}(\Re^n)$$

Η ακολουθία αυτή συγκλίνει στην $\delta(x)$ συνάρτηση για $k \to \infty$ με την έννοια της κατανομής. Πράγματι

$$< s_k|\varphi >= \int_{I_k} k\varphi(x)dx = \varphi(0) + \int_{I_k} k\left[\varphi(x) - \varphi(0)\right] dx$$

όπου I_k το διάστημα $|x| < 1/2k$. Ισχύει όμως η σχέση

$$\left| \int_{I_k} k\left[\varphi(x) - \varphi(0)\right] dx \right| < k \int_{I_k} |\varphi(x) - \varphi(0)|\, dx \leq \max_{x\in I_k} |\varphi(x) - \varphi(0)| \cdot 1$$

που συγκλίνει στο μηδέν για $k \to \infty$ επειδή η $\varphi(x)$ είναι συνεχής στο μηδέν. Αρα

$$\lim_{k\to\infty} < s_k|\varphi >= \varphi(0) =< \delta(x)|\varphi(x) > \quad \Longrightarrow \quad \lim s_k(x) = \delta(x)$$

Το παρακάτω θεώρημα δίνει ένα τρόπο να κατασκευάσουμε ακολουθίες ομαλών κατανομών που να συγκλίνουν στην $\delta(x)$ συνάρτηση.

Θεώρημα: Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση $f(x)$ είναι μια μη αρνητική συνάρτηση του $\Re^n$ που ικανοποιεί την σχέση

$$\int_{\Re^n} f(x)dx = 1$$

Αν $\alpha > 0$ τότε η οικογένεια

$$f_\alpha(x) = \frac{1}{\alpha^n} f\left(\frac{x}{\alpha}\right)$$

συγκλίνει στην $\delta(x)$ συνάρτηση για $\alpha \to 0$.

Επίσης η ακολουθία $S_k(x) = k^n f(kx)$ συγκλίνει στην $\delta(x)$ συνάρτηση για $k \to \infty$.

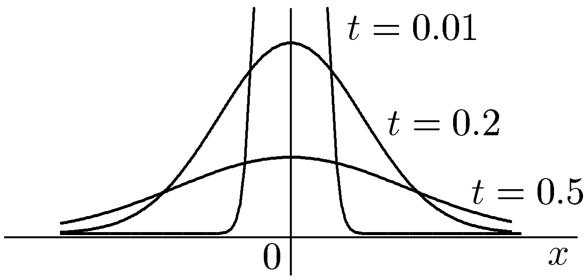
Παράδειγμα: Οι παρακάτω οικογένειες συγκλίνουν στην $\delta(x)$ συνάρτηση και είναι εφαρμογές του παραπάνω θεωρήματος.

$$f_y(x) = \frac{y}{\pi\left(y^2 + x^2\right)} \longrightarrow \delta(x) \quad \text{για} \quad y \to 0_+$$

$$f_R(x) = \frac{\eta\mu^2\left(Rx\right)}{\pi R x} \longrightarrow \delta(x) \quad \text{για} \quad R \to \infty$$

$$f_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-x^2/4t} \longrightarrow \delta(x) \quad \text{για} \quad t \to 0_+$$

Η τελευταία ακολουθία είναι μια ακολουθία από κανονικές κατανομές. Οι ομαλές αυτές κατανομές ορίζονται από τις παραπάνω τοπικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις που είναι οι γνωστές κανονικές κατανομές και έχουν σχεδιαστεί στο παρακάτω σχήμα. Η ακολουθία συγκλίνει στην $\delta(x)$ κατανομή όταν η σταθερά t τείνει στο μηδέν από θετικές τιμές.



Σχήμα 2.4
Γραφική παράσταση της κανονικής κατανομής για διάφορες τιμές της σταθεράς t

Είναι γνωστό ότι μια περιοδική συνάρτηση με περίοδο 2π, είναι δυνατό κάτω από ορισμένες συνθήκες να αναλυθεί σε σειρά Φουριέ. Στην συνέχεια θα αποδείξουμε ότι είναι δυνατό να αναλύσουμε σε σειρά Φουριέ και τις κατανομές. Η σύγκλιση των μερικών αθροισμάτων γίνεται τώρα με την έννοια της κατανομής, όπως έχει οριστεί πιο πάνω.

Με τον όρο σειρά Φουριέ εννοούμε την ανάλυση μιας συνάρτησης ως προς κάποιο ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων φ_k. Στην ειδική περίπτωση που το ορθοκανονικό σύνολο είναι το

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

όπου k ακέραιος τότε μια σειρά Φουριέ έχει την μορφή

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx}$$

Αν η σειρά συγκλίνει ομοιόμορφα στο διάστημα $-\pi < x < \pi$ στην συνάρτηση $f(x)$, δηλαδή

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx}$$

τότε οι συντελεστές Φουριέ C_k δίνονται από την σχέση

$$C_k =< \varphi_k | f >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-ikx} dx$$

Θεώρημα: Η σειρά Φουριέ με συντελεστές C_n που ικανοποιούν την σχέση

$$|C_n| < \mathrm{M} n^{\alpha} \qquad \text{όπου α ακέραιος}$$

συγκλίνει με την έννοια της κατανομής.

Απόδειξη: Η σειρά Φουριέ με συντελεστές $C'_n = (in)^{-(\alpha+2)} C_n$ συγκλίνει ομοιόμορφα διότι $|C'_n| \leq m/n^2$. Αρα συγκλίνει με την έννοια της κατανομής διότι η ισχυρή σύγκλιση συνεπάγεται την ασθενή. Δηλαδή

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (in)^{-(\alpha+2)} C_n e^{inx}$$

Παραγωγίζουμε την σειρά αυτή $(\alpha + 2)$ φορές με την έννοια της κατανομής και έχουμε

$$f^{(\alpha+2)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_n e^{inx}$$

Αρα μια σειρά Φουριέ με συντελεστές τέτοιους ώστε $|C_n| \leq \mathrm{M} n^{\alpha}, \;\; \alpha \in Z$ συγκλίνει με την έννοια της κατανομής στην κατανομή $f^{(\alpha+2)}$ όπου $f^{(\alpha+2)}$ είναι η $(\alpha + 2)$ τάξης παράγωγος με την έννοια της κατανομής της f.

Παράδειγμα: Η ανάλυση της $\delta(x-\xi)$ συνάρτησης σε σειρά Φουριέ είναι

$$\delta(x-\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx}$$

όπου οι σταθερές C_k δίνονται από την σχέση

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \delta(x-\xi) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik\xi}$$

Αντικαθιστούμε τις σταθερές αυτές στην ανάλυση της $\delta(x-\xi)$ και έχουμε

$$\delta(x-\xi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik(x-\xi)}$$

Η σειρά της παραπάνω ισότητας δεν συγκλίνει με καμιά κλασσική έννοια, διότι ο τελευταίος όρος της σειράς δεν μηδενίζεται. Στα πλαίσια όμως της θεωρίας κατανομών, τούτο σημαίνει ότι και τα δύο μέλη της παραπάνω ισότητας έχουν τις ίδιες εικόνες αν επιδράσουν σε οποιαδήποτε δοκιμαστική συνάρτηση με φορέα το $[-\pi, \pi]$.

Πράγματι για κάθε δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x)$, έχουμε

$$< \delta(x-\xi) | \varphi(x) >= \varphi(\xi)$$

Επί πλέον ισχύει η σχέση

$$< \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik(x-\xi)} | \varphi(x) >= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-\xi)} \varphi(x) dx$$

Αρα για να ισχύει η ισότητα των κατανομών πρέπει να ισχύει

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\xi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ikx} \varphi(x) dx$$

που είναι ακριβώς η ανάλυση της $\varphi(\xi)$ σε σειρά Φουριέ.

Εκτός από την ανάλυση μιας κατανομής σε σειρά Φουριέ μπορούμε να βρούμε και τον μετασχηματισμό Φουριέ μιας κατανομής. Για παράδειγμα ο μετασχηματισμός Φουριέ της συνάρτησης του Ντιράκ δίνεται από την σχέση

$$\delta(x-\xi) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-\xi)}dk$$

Η παραπάνω ισότητα είναι ισότητα κατανομών. Το ολοκλήρωμα δεν συγκλίνει με καμία κλασσική έννοια. Πράγματι βρίσκουμε

$$\delta(x-\xi) = \frac{1}{2\pi}\lim_{n\to 0}\int_{-n}^{n} e^{ik(x-\xi)}dk = \frac{1}{2\pi}\lim_{n\to 0}\frac{e^{in(x-\xi)}-e^{-in(x-\xi)}}{i(x-\xi)} =$$

$$\frac{1}{\pi}\lim_{n\to 0}\frac{\text{ημ}\, n(x-\xi)}{(x-\xi)}$$

Παρατήρηση: Η παραπάνω ανάπτυξη της κατανομής $\delta(x-\xi)$ είναι πολύ χρήσιμη στην κβαντομηχανική. Οπως θα δούμε αργότερα η κατάσταση του ελευθέρου σωματιδίου περιγράφεται από το (ιδιο)διάνυσμα

$$|\varphi(p)>= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$$

Το φάσμα των ιδιοτιμών είναι συνεχές. Το εσωτερικό γινόμενο δύο τέτοιων καταστάσεων είναι

$$<\varphi(p')|\varphi(p)>= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}dx = \delta(p'-p)$$

Η σχέση εκφράζει την ορθοκανονικότητα των διανυσμάτων με την βοήθεια της δέλτα συνάρτησης.

2.11 Παράγωγος κατανομής ως προς κάποια παράμετρο

Ορισμός: Θεωρούμε την κατανομή $f_\alpha(x)$ που εξαρτάται από την συνεχή παράμετρο α. Η έκφραση

$$\frac{1}{h}\left[f_{\alpha+h}(x)-f_\alpha(x)\right]$$

είναι μια κατανομή.

Το όριο του $h \to 0$, αν υπάρχει, ορίζει την κατανομή $df_\alpha/d\alpha$ δηλαδή

$$< \frac{\partial f_\alpha}{\partial \alpha}|\varphi >= \lim_{h\to 0}\frac{1}{h}\left(< f_{\alpha+h}|\varphi > - < f_\alpha|\varphi >\right) \qquad \forall\varphi \in C_c^\infty(\Re^n)$$

Παρατήρηση: Ενώ η παράγωγος μιας κατανομής ως προς το όρισμα της υπάρχει πάντα, η παράγωγος ως προς μία παράμετρο είναι δυνατόν να μην ορίζεται.

Παράδειγμα: Αν το t θεωρηθεί σαν παράμετρος η συνάρτηση

$$f_t(x) = H(t - |x|\,)$$

ορίζει μια κατανομή ως εξής

$$< f_t(x)|\varphi(x) >= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} H(t-|x|\,)\varphi(x)dx = \frac{1}{2}\int_{-t}^{t}\varphi(x)dx$$

Η πρώτη και η δεύτερη παράγωγος ως προς t της κατανομής αυτής υπάρχουν και δίνονται από τις σχέσεις

$$< \frac{\partial f}{\partial t}|\varphi >= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_{-t}^{t}\varphi(x)dx = \frac{1}{2}\varphi(t) + \frac{1}{2}\varphi(-t)$$

και

$$< \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}|\varphi >= \frac{1}{2}\varphi'(t) - \frac{1}{2}\varphi'(-t)$$

Η δεύτερη παράγωγος της κατανομής αυτής ως προς x δίνεται με την βοήθεια του ορισμού από την σχέση

$$< \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}|\varphi >=< f|\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} >= \frac{1}{2}\int_{-t}^{t}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}dx = \frac{1}{2}\varphi'(t) - \frac{1}{2}\varphi'(-t)$$

Αρα η κατανομή $H(t-|x|\,)$ ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση του κύματος

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \quad \text{για} \quad t > 0$$

Η κατανομή αυτή ικανοποιεί τις αρχικές συνθήκες

$$\lim_{t\to 0_+} f = 0 \quad \text{και} \quad \lim_{t\to 0+} \frac{\partial f}{\partial t} = \delta(x)$$

που αποδεικνύονται εύκολα.

Παράδειγμα: Σαν μία εφαρμογή για την χρησιμότητα των συναρτησιακών θα λύσουμε την εξής διαφορική εξίσωση με τις ακόλουθες οριακές συνθήκες

$$-\frac{d^2}{dx^2}u(x) = f(x) \quad 0 < x < 1 \qquad\qquad u(0) = u(1) = 0$$

Η εξίσωση αυτή περιγράφει την σταθερή, ανεξάρτητη από τον χρόνο, ροή θερμότητας σε μία λεπτή ράβδο και $f(x)$ είναι μία εξωτερική πηγή θερμότητας. Αντί να λύσουμε την εξίσωση αυτή λύνουμε την εξής διαφορική εξίσωση στο χώρο των κατανομών

$$-\frac{d^2}{dx^2}G(x,\xi) = \delta(x-\xi)$$

Η συνάρτηση $\delta(x-\xi)$ περιγράφει την μοναδιαία πηγή στο σημείο $x = \xi$.

Η εξίσωση έχει σαν λύση το συναρτησιακό $G(x,\xi)$ που ονομάζεται Γκρην συνάρτηση της διαφορικής εξίσωσης. Η δεύτερη αυτή εξίσωση είναι συνήθως πιο δύσκολη από την πρώτη, έχει όμως το πλεονέκτημα να μην περιέχει την εξωτερική πηγή. Η λύση της εξίσωσης αυτής είναι το συναρτησιακό

$$G(x,\xi) = x(1-\xi)H(\xi-x) + \xi(1-x)H(x-\xi)$$

Πράγματι αν παραγωγίσουμε ως προς x βρίσκουμε

$$\frac{d}{dx}G(x,\xi) = (1-\xi)H(\xi-x) - x(1-\xi)\delta(\xi-x) - \xi H(x-\xi) + \xi(1-x)\delta(x-\xi) =$$

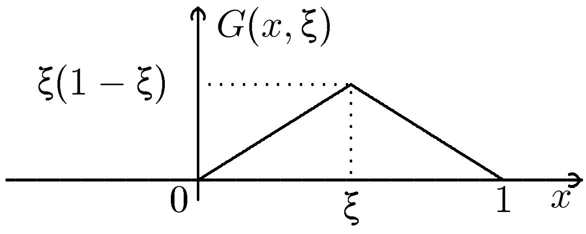
$$(1-\xi)H(\xi-x) - \xi H(x-\xi) + (x-\xi)\delta(x-\xi) = (1-\xi)H(\xi-x) - \xi H(x-\xi)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}G(x,\xi) = -(1-\xi)\delta(\xi-x) - \xi\delta(x-\xi) = -\delta(x-\xi)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις $(x-\xi)\delta(x-\xi) = 0$, και $\delta(x-\xi) = \delta(\xi-x)$.

Η κατανομή αυτή είναι μια ομαλή κατανομή που προκύπτει από την ακόλουθη τοπικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση.

$$G(x,\xi) = \begin{cases} x(1-\xi) & 0 \le x < \xi \\ \xi(1-x) & \xi < x \le 1 \end{cases}$$



Σχήμα 2.5
Η γραφική παράσταση της συνάρτησης Γκρην

Η λύση του προβλήματος δίνεται από την ολοκλήρωμα

$$u(x) = \int_0^1 G(x,\xi) f(\xi) d\xi$$

Η συνάρτηση αυτή φαίνεται αμέσως ότι ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες. Ικανοποιεί επίσης και την διαφορική εξίσωση. Η απόδειξη είναι απλή

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = \int_0^1 \left[-\frac{d^2}{dx^2} G(x,\xi) \right] f(\xi) d\xi = \int_0^1 \delta(x-\xi) f(\xi) d\xi = f(x)$$

Παράδειγμα: Θεωρούμε τώρα την αντίστοιχη εξίσωση ιδιοτιμών

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = \lambda u(x) \quad 0 < x < 1 \qquad\qquad u(0) = u(1) = 0$$

Η εξίσωση αυτή είναι η εξίσωση ενός αρμονικού ταλαντωτή. Για παράδειγμα το $u(x)$ είναι δυνατόν να παριστάνει το πλάτος της ταλάντωσης μιας χορδής, ενώ οι οριακές συνθήκες σημαίνουν ότι η χορδή είναι δεμένη στα δύο άκρα της. Αποδεικνύεται ότι οι μη μηδενικές λύσεις είναι δυνατές μόνο για τις παρακάτω τιμές του λ στις οποίες αντιστοιχεί μία μόνο ιδιοσυνάρτηση

$$\lambda_n = n^2\pi^2 \quad u_n(x) = \sqrt{2}\,\text{ημ}\,(n\pi x) \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Η Γκρην συνάρτηση έχει τώρα την μορφή

$$G(x,\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(\xi)u_n(x)}{\lambda_n} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\,\text{ημ}\,(n\pi x)\,\text{ημ}\,(n\pi\xi)}{n^2\pi^2}$$

η οποία ονομάζεται φασματική αναπαράσταση της Γκρην συνάρτησης.

Παρατηρούμε ότι η Γκρήν συνάρτηση είναι συμμετρική ως προς τις μεταβλητές της x και ξ. Γενικότερα ισχύει

$$G(x,\xi) = (G(\xi,x))^*$$

Θεωρούμε τώρα την μη ομογενή εξίσωση

$$-\frac{d^2}{dx^2}U(x) - \lambda U(x) = f(x) \quad 0 < x < 1 \qquad\qquad U(0) = U(1) = 0$$

όπου λ μια σταθερά.

Αναλύουμε τις συναρτήσεις $U(x)$ και $f(x)$ ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις $u_n(x)$

$$U(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) \qquad\qquad f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n u_n(x) \quad d_n =< u_n|f >$$

Αντικαθιστούμε τις εκφράσεις αυτές στην εξίσωση και βρίσκουμε

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - \lambda\right) \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\lambda_n - \lambda)\, c_n u_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n u_n(x)$$

Επειδή οι ιδιοσυναρτήσεις $u_n(x)$ είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους συνεπάγεται ότι

$$c_n = \frac{d_n}{\lambda_n - \lambda} = \frac{1}{\lambda_n - \lambda} < u_n|f >= \frac{1}{\lambda_n - \lambda} \int_0^1 u_n(y) f(y) dy$$

Αρα η λύση της μη ομογενούς διαφορικής εξίσωσης είναι

$$U(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n - \lambda} \int_0^1 u_n(y) f(y) dy u_n(x) = \int_0^1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(y) u_n(x)}{\lambda_n - \lambda} f(y) dy$$

Γράφουμε την παραπάνω έκφραση με την μορφή

$$U(x) = \int_0^1 G(x,y)f(y)dy$$

οπότε προφανώς η Γκρην συνάρτηση $G(x,y)$ δίνεται από την σχέση

$$G(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(y)u_n(x)}{\lambda_n - \lambda}$$

Είναι τέλος εύκολο να αποδειχτεί ότι η Γκρην συνάρτηση $G(x,y)$ ικανοποιεί την ίδια μη ομογενή διαφορική εξίσωση όπου $f(x) = \delta(x-y)$. Πραγματικά βρίσκουμε

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - \lambda\right) G(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} (\lambda_n - \lambda) \frac{u_n(y)u_n(x)}{\lambda_n - \lambda} = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(y)u_n(x) = \delta(x-y)$$

η τελευταία ισότητα είναι η γνωστή σχέση πληρότητας των ιδιοσυναρτήσεων u_n.

Παρατήρηση: Στις παραπάνω σχέσεις αλλού παραγωγίσαμε και αλλού ολοκληρώσαμε μια άπειρη σειρά όρο προς όρο χωρίς να εξετάσουμε αν οι σειρές αυτές συγκλίνουν. Στον χώρο όμως των κατανομών αυτό επιτρέπεται. Ολες οι άπειρες σειρές κατανομών συγκλίνουν, με την έννοια της κατανομής, σε μια καλά ορισμένη κατανομή. Δεχόμαστε ότι όλες οι παραπάνω συναρτήσεις είναι κατανομές εφόσον κάθε τοπικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση μπορεί να θεωρηθεί και σαν κατανομή.

Ασκήσεις

Άσκηση 2.1

Να αποδειχτεί ότι σε ένα διανυσματικό χώρο εσωτερικού γινομένου η πραγματική συνάρτηση $\|f\| =< f|f >^{1/2}$ ορίζει μια στάθμη και η συνάρτηση $d(\chi, \psi) = \|\chi - \psi\|$ ορίζει μια μετρική.

Απόδειξη: Θα πρέπει να αποδείξουμε ότι η συνάρτηση ικανοποιεί τις ιδιότητες της στάθμης. Εχουμε

$$\|\chi\| = \sqrt{< \chi|\chi >} \geq 0 \quad \text{και} \quad \|\chi\| = \sqrt{< \chi|\chi >} = 0 \;\Rightarrow\; \chi = 0$$

Αρα ισχύει η πρώτη ιδιότητα της στάθμης. Η δεύτερη ιδιότητα αποδεικνύεται ως εξής

$$\|\alpha\chi\|^2 =< \alpha\chi|\alpha\chi >= \alpha\alpha^* < \chi|\chi >= |\alpha|^2 < \chi|\chi > \Rightarrow \; \|\alpha\chi\| = |\alpha| < \chi|\chi >$$

Και τέλος για την απόδειξη της τρίτης έχουμε

$$\|\chi + \psi\|^2 =< \chi + \psi|\chi + \psi >=< \chi|\chi > + < \chi|\psi > + < \psi|\chi > + < \psi|\psi >=$$

$$\|\chi\|^2 + \|\psi\|^2 + < \chi|\psi > + < \chi|\psi >^* = \|\chi\|^2 + \|\psi\|^2 + 2Re < \chi|\psi > \Rightarrow$$

$$\|\chi + \psi\|^2 \leq \|\chi\|^2 + \|\psi\|^2 + 2| < \chi|\psi > |$$

όπου έχουμε συμβολίσει με $Re < \chi|\psi >$ το πραγματικό μέρος του μιγαδικού αριθμού $< \chi|\psi >$. Ισχύει όμως η ανισότητα του Σβάρτς $| < \chi|\psi > | \leq \|\chi\|\|\psi\|$ και επομένως η παραπάνω σχέση γράφεται

$$\|\chi + \psi\|^2 \leq \|\chi\|^2 + \|\psi\|^2 + 2\|\chi\|\|\psi\| = (\|\chi\| + \|\psi\|)^2$$

από την οποία συνεπάγεται ότι

$$\|\chi + \psi\| \leq \|\chi\| + \|\psi\|$$

Δηλαδή ισχύει και η τρίτη ιδιότητα της στάθμης.

Η απόδειξη της δεύτερη πρότασης είναι απλή. Εχουμε

$$d(\chi,\psi)=0 \;\Rightarrow\; \|\chi-\psi\|=0 \;\Rightarrow\; \chi-\psi=0 \;\Rightarrow\; \chi=\psi$$

$$d(\chi,\psi)=\|\chi-\psi\|=|(-1)|\|\psi-\chi\|=\|\psi-\chi\|=d(\psi,\chi)$$

$$d(\chi,\psi)=\|\chi-\psi\|=\|\chi-\zeta+\zeta-\psi\|\le\|\chi-\zeta\|+\|\zeta-\psi\|=d(\chi,\zeta)+d(\zeta,\psi)$$

Αρα ικανοποιούνται και οι τρεις ιδιότητες και επομένως η συνάρτηση $d(\chi,\psi)$ είναι μία μετρική.

ʹΑσκηση 2.2

Να αποδειχτεί ότι το εσωτερικό γινόμενο ικανοποιεί την σχέση

$$<\varphi|\alpha\chi+\beta\psi>=\alpha<\varphi|\chi>+\beta<\varphi|\psi>$$

Απόδειξη:

$$<\varphi|\alpha\chi+\beta\psi>=<\alpha\chi+\beta\psi|\varphi>^*=(\alpha^*<\chi|\varphi>+\beta^*<\psi|\varphi>)^*=$$

$$\alpha<\chi|\varphi>^*+\beta<\psi|\varphi>^*=\alpha<\varphi|\chi>+\beta<\varphi|\psi>$$

Με την σχέση αυτή μπορούμε να αντικαταστήσουμε την δεύτερη ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου. Η ιδιότητα που αντικαταστήσαμε συνεπάγεται από την ιδιότητα της άσκησης με όμοιο τρόπο.

ʹΑσκηση 2.3

Δίνονται τα γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα $\chi_1,\chi_2,\cdots$. Από τα διανύσματα αυτά κατασκευάζουμε τα διανύσματα

$$\begin{array}{ll}
\psi_1=\chi_1 & \varphi_1=\psi_1/\|\psi_1\| \\
\psi_2=\chi_2-<\varphi_1|\chi_2>\varphi_1 & \varphi_2=\psi_2/\|\psi_2\| \\
\quad\cdots\cdots & \quad\cdots\cdots \\
\psi_n=\chi_n-\sum_{k=1}^{n-1}<\varphi_k|\chi_n>\varphi_k & \varphi_n=\psi_n/\|\psi_n\|
\end{array}$$

Να αποδειχτεί ότι τα διανύσματα $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι ένα ορθοκανονικό σύνολο με την ιδιότητα ότι για κάθε m τα διανύσματα $\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_m$ και $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_m$ είναι δύο σύνολα γεννητόρων του ίδιου χώρου. (Η μέθοδος Γκραμ-Σμιτ).

Να εφαρμόσετε την μέθοδο για τις συναρτήσεις

$$\chi_n(t) = t^{n-1}$$

στον χώρο P_n που περιέχει πολυώνυμα βαθμού μικρότερο ή ίσο του n που ορίζονται στο διάστημα $(-1, +1)$. Το εσωτερικό γινόμενο του χώρου ορίζεται από την σχέση

$$< f(t)|g(t) >= \int_{-1}^{+1} f(t)g(t)dt$$

Απόδειξη: Η απόδειξη είναι κατασκευαστική δηλαδή θα υποθέσουμε ότι δίνονται τα διανύσματα $\chi_1, \chi_2, \cdots$ και θα κατασκευάσουμε την ορθοκανονική βάση.

Ξεκινάμε από το διάνυσμα χ_1 και κατασκευάζουμε το διάνυσμα

$$\varphi_1 = \frac{\psi_1}{\|\psi_1\|}$$

όπου $\chi_1 = \psi_1$ που είναι το πρώτο διάνυσμα της καινούργιας βάσης. Το διάνυσμα αυτό είναι μοναδιαίο. Πράγματι

$$\|\varphi_1\| = \|\frac{\chi_1}{\|\chi_1\|}\| = \frac{\|\chi_1\|}{\|\chi_1\|} = 1$$

Συνεχίζουμε με το διάνυσμα χ_2 που θα το αντικαταστήσουμε με ένα δεύτερο διάνυσμα που να είναι ορθογώνιο με το πρώτο και μοναδιαίο. Υποθέτουμε ότι το διάνυσμα αυτό είναι

$$\psi_2 = \chi_2 + a\chi_1$$

που είναι προφανώς μη μηδενικό εφόσον τα διανύσματα χ_2 και χ_1 είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Θα προσδιορίσουμε την σταθερά a. Εχουμε

$$< \chi_1|\psi_2 >=< \chi_1|\chi_2 + a\chi_1 >=< \chi_1|\chi_2 > +a < \chi_1|\chi_1 >=< \chi_1|\chi_2 > +a\|\chi_1\|^2$$

Θέλουμε $<\chi_1|\psi_2>=0$ επομένως έχουμε

$$<\chi_1|\chi_2>+a\|\chi_1\|^2=0 \quad \Longrightarrow \quad a=-\frac{<\chi_1|\chi_2>}{\|\chi_1\|^2}$$

Αρα το ζητούμενο διάνυσμα είναι

$$\psi_2=\chi_2-\frac{<\chi_1|\chi_2>}{\|\chi_1\|^2}\chi_1=\chi_2-<\varphi_1|\chi_2>\varphi_1$$

Διαιρούμε το διάνυσμα ψ_2 με το μέτρο του και παίρνουμε τελικά το δεύτερο διάνυσμα φ_2 της καινούργιας βάσης που θα αντικαταστήσει το διάνυσμα χ_2.

$$\varphi_2=\frac{\psi_2}{\|\psi_2\|}$$

Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία αυτή n φορές και βρίσκουμε τελικά όλα τα ζητούμενα διανύσματα.

Θα εφαρμόσουμε τώρα την μέθοδο στο χώρο των πολυώνυμων.

Θεωρούμε την βάση

$$\chi_1=1,\ \chi_2=t,\ \chi_3=t^2,\ \cdots,\ \chi_n=t^{n-1}$$

Βρίσκουμε

$$\psi_1=1 \qquad\qquad \|\psi_1\|^2=<\psi_1|\psi_1>=\int_{-1}^{+1}dt=2$$

Αρα το πρώτο διάνυσμα είναι

$$\varphi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Για το δεύτερο διάνυσμα θα υπολογίσουμε το $<\varphi_1|\chi_2>$. Βρίσκουμε

$$<\varphi_1|\chi_2>=\frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{+1}tdt=\left(\frac{t^2}{2}\right)_{-1}^{+1}=0$$

Επομένως το διάνυσμα ψ_2 είναι

$$\psi_2 = \chi_2 - < \varphi_1 | \chi_2 >= \chi_2 = t$$

Το μέτρο του διανύσματος αυτού είναι

$$\|\psi_2\|^2 =< \psi_2|\psi_2 >= \int_{-1}^{+1} t^2 dt = \left(\frac{t^3}{3}\right)_{-1}^{+1} = \frac{2}{3} \quad \Longrightarrow \quad \|\psi_2\| = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

και το δεύτερο διάνυσμα της ορθοκανονικής βάσης είναι

$$\varphi_2 = \sqrt{\frac{3}{2}}\, t$$

Συνεχίζουμε με τον ίδιο τρόπο και βρίσκουμε

$$\varphi_3 = \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{2}} \left(3t^2 - 1\right)$$

Τελικά το $n-$ διάνυσμα της ζητούμενης βάσης αποδεικνύεται ότι είναι

$$\varphi_n = \frac{1}{2^n} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{1/2} \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{k!(n-k)!(n-2k)!} t^{n-2k}$$

Τα πολυώνυμα αυτά ονομάζονται πολυώνυμα του Λεζάντρ.

Άσκηση 2.4

Να αποδειχτεί ότι

$$(af)' = a'f + af'$$

όπου η συνάρτηση $a(x)$ είναι μια άπειρα παραγωγήσιμη συνάρτηση. Να αποδειχτούν επίσης και παρακάτω ιδιότητες της δέλτα κατανομής

$$a(x)\delta(x) = a(0)\delta(x) \qquad \delta(\lambda x) = \frac{1}{\lambda}\delta(x) \qquad x\delta'(x) = -\delta(x)$$

$$\delta\left(x^2 - \alpha^2\right) = \frac{1}{2\alpha}\left[\delta(x-\alpha) - \delta(x+\alpha)\right]$$

Απόδειξη: Για κάθε δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x) \in C_c^\infty(\Re^n)$ έχουμε

$$(af)'(\varphi) =< (af)'|\varphi >= - < af|\varphi' >= - < f|a\varphi' >$$

Οι συναρτήσεις $a(x)$ και $\varphi(x)$ είναι άπειρα παραγωγήσιμες και επομένως ισχύει η σχέση $(a\varphi)' = a\varphi' + a'\varphi$. Αρα έχουμε

$$- < f|a\varphi' >= - < f|(a\varphi)' - a'\varphi >= - < f|(a\varphi)' > + < f|a'\varphi >=$$

$$< f'|a\varphi > + < a'f|\varphi >=< af'|\varphi > + < a'f|\varphi >= (af' + a'f)\,(\varphi)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις συνεπάγεται ότι

$$(af)'(\varphi) = (a'f + a'f)\,(\varphi) \quad \forall \varphi \in C_c^\infty(\Re^n) \quad \Longrightarrow$$

$$(af)' = a'f + a'f$$

Θα αποδείξουμε τώρα την ιδιότητα $a(x)\delta(x) = a(0)\delta(x)$. Μια γενικότερη ιδιότητα είναι

$$f(x)\delta(x - \alpha) = f(\alpha)\delta(x - \alpha)$$

Θεωρούμε πάλι μια δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x)$. Η εικόνα του πρώτου μέλους της εξίσωσης πάνω στην $\varphi(x)$ είναι

$$a(x)\delta(x)\,(\ \varphi(x)\ ) =< a(x)\delta(x)|\varphi(x) >=< \delta(x)|a(x)\varphi(x) >= a(0)\varphi(0)$$

Αφετέρου η εικόνα του δεύτερου μέλους είναι

$$a(0)\delta(x)\,(\ \varphi(x)\ ) =< a(0)\delta(x)|\varphi(x) >= a(0) < \delta(x)|\varphi(x) >= a(0)\varphi(0)$$

Οι δύο εικόνες είναι ίσες και άρα η ισότητα ισχύει.

Από την ιδιότητα αυτή φαίνεται εύκολα ότι ισχύει η σχέση

$$x\delta(x) = 0$$

από την οποία συνεπάγεται ότι η εξίσωση $(x - \alpha)f(x) = 0$ στο χώρο των κατανομών έχει την λύση $f(x) = \delta(x - \alpha)$ Με άλλα λόγια η ιδιοσυνάρτηση του τελεστή της θέσης είναι η δέλτα κατανομή.

$$xf(x) = \alpha f(x) \quad \Longrightarrow \quad f(x) = \delta(x - \alpha) \quad \alpha \in \Re$$

Η τρίτη ιδιότητα αποδεικνύεται εύκολα από της δύο προηγούμενες σχέσεις. Βρίσκουμε

$$0 = (x\delta(x))' = x'\delta(x) + x\delta'(x) = \delta(x) + x\delta'(x) \quad \Longrightarrow \quad x\delta'(x) = -\delta(x)$$

Για την απόδειξη των υπόλοιπων σχέσεων θα γράψουμε την δράση της δέλτα σαν ολοκλήρωμα. Για κάθε δοκιμαστική συνάρτηση $\varphi(x)$ έχουμε

$$\delta(\lambda x)(\ \varphi(x)\ ) =< \delta(\lambda x)|\varphi(x) > \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\lambda x)\varphi(x)dx$$

θέτουμε

$$\lambda x = y \quad \Longrightarrow \quad x = \frac{y}{\lambda} \quad \Longrightarrow \quad \frac{dx = dy}{\lambda}$$

και το ολοκλήρωμα γίνεται

$$\delta(\lambda x)(\ \varphi(x)\ ) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)\varphi(\frac{x}{\lambda})\frac{dy}{\lambda} = \frac{1}{\lambda}\varphi(0)$$

Επίσης προφανώς ισχύει

$$\frac{1}{\lambda}\delta(x)(\ \varphi(x)\ ) = \frac{1}{\lambda}\varphi(0)$$

και άρα

$$\delta(\lambda x) = \frac{1}{\lambda}\delta(x)$$

Θα αποδείξουμε τώρα την τελευταία ιδιότητα. Θα υπολογίσουμε την τιμή της κατανομής του πρώτου μέλους της ισότητας πάνω σε μια τυχούσα δοκιμαστική συνάρτηση. Εχουμε

$$\delta(x^2 - \alpha^2)(\ \varphi(x)\ ) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x^2 - \alpha^2)\varphi(x)dx =$$

$$\int_{0}^{+\infty} \delta(x^2 - \alpha^2)\varphi(x)dx + \int_{-\infty}^{0} \delta(x^2 - \alpha^2)\varphi(x)dx$$

Ακολούθως κάνουμε την αλλαγή $x^2 - \alpha^2 = y$.

Στο πρώτο ολοκλήρωμα όπου $x \geq 0$ η αλλαγή είναι η ακόλουθη

$$x^2 - \alpha^2 = y \quad \Longrightarrow \quad x = \sqrt{y + \alpha^2} \quad \Longrightarrow \quad dx = \frac{1}{2}\frac{dy}{\sqrt{y + \alpha^2}}$$

$$0 \leq x < +\infty \quad \Longrightarrow \quad -\alpha^2 \leq y < +\infty$$

Στο δεύτερο ολοκλήρωμα όπου $x \leq 0$ έχουμε

$$x^2 - \alpha^2 = y \quad \Longrightarrow \quad x = -\sqrt{y + \alpha^2} \quad \Longrightarrow \quad dx = -\frac{1}{2}\frac{dy}{\sqrt{y + \alpha^2}}$$

$$-\infty < x \leq 0 \quad \Longrightarrow \quad +\infty < y \leq -\alpha^2.$$

Με τους μετασχηματισμούς αυτούς τα παραπάνω ολοκληρώματα γίνονται

$$\delta(x^2 - \alpha^2)(\ \varphi(x)\ ) = \frac{1}{2}\int_{-\alpha^2}^{\infty} \delta(y)\varphi(\sqrt{y + \alpha^2})\frac{dy}{\sqrt{y + \alpha^2}} -$$

$$\frac{1}{2}\int_{\infty}^{-\alpha^2} \delta(y)\varphi(-\sqrt{y + \alpha^2})\frac{dy}{\sqrt{y + \alpha^2}} = \left[\frac{1}{2}\varphi(\sqrt{y + \alpha^2})\frac{1}{\sqrt{y + \alpha^2}}\right]_{y=0} -$$

$$\left[\frac{1}{2}\varphi(-\sqrt{y + \alpha^2})\frac{1}{\sqrt{y + \alpha^2}}\right]_{y=0} = \frac{1}{2}\varphi(\alpha)\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2}\varphi(-\alpha)\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{2\alpha}\left[\varphi(\alpha) - \varphi(-\alpha)\right]$$

Τα παραπάνω ολοκληρώματα δεν μπορούν προφανώς να υπολογιστούν στην περίπτωση που $\alpha = 0$. Κατά συνέπεια η κατανομή $\delta(x^2)$ δεν μπορεί να οριστεί.

Θα υπολογίσουμε τέλος την τιμή της κατανομής του δεύτερου μέλους της ισότητας πάνω σε μια δοκιμαστική συνάρτηση. Εχουμε

$$\frac{1}{2\alpha}\left[\delta(x - \alpha) - \delta(x + \alpha)\right](\ \varphi(x)\ ) = \frac{1}{2\alpha}\delta(x - \alpha)(\ \varphi(x)\ ) -$$

$$\frac{1}{2\alpha}\delta(x + \alpha)(\ \varphi(x)\ ) = \frac{1}{2\alpha}\left[\varphi(\alpha) - \varphi(-\alpha)\right]$$

Οι δύο εικόνες είναι ίσες και άρα η ισότητα αποδείχτηκε.

Οι δύο τελευταίες ιδιότητες της κατανομής δέλτα είναι μερικές περιπτώσεις της παρακάτω ιδιότητας

$$\delta(f(x)) = \sum_j \frac{\delta(x-\alpha_j)}{|f'(\alpha_j)|}$$

το άθροισμα εκτείνεται σε όλες της ρίζες της $f(x)$. Η συνάρτηση f(x) έχει απλές ρίζες στα σημεία α_j δηλαδή

$$f(\alpha_j) = 0 \qquad\qquad f'(\alpha_j) = \left[\frac{df}{dx}\right]_{x=\alpha_j} \neq 0$$

Η έκφραση αυτή δεν περιλαμβάνει για παράδειγμα την κατανομή $\delta(x^2)$ αφού η εξίσωση $f(x) = x^2 = 0$ έχει μια διπλή ρίζα στο μηδέν.

ʹΑσκηση 2.5

Να δειχτεί ότι η ακολουθία των ομαλών κατανομών που ορίζονται από τις τοπικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις

$$H_k(x) = \frac{1}{2}(1 + tanhkx)$$

συγκλίνει στην κατανομή του Χέβισαϊντ Η(x) για $k \to \infty$.

Απόδειξη: Από την γνωστή σχέση $H'(x) = \delta(x)$ είναι προφανές ότι μπορούμε να αποδείξουμε ότι η ακολουθία των ομαλών κατανομών που ορίζονται από τις τοπικά ολοκληρώσημες συναρτήσεις $\mathrm{H}_k{}'(x)$ συγκλίνει στην $\delta(x)$ συνάρτηση. Δηλαδή ισχύει

$$\lim_{k\to\infty} H_k(x) = H(x) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \lim_{k\to\infty} H_k{}'(x) = \delta(x)$$

Φαίνεται εύκολα ότι η συνάρτηση $f(x) = 1/2\, ch^2 x$ είναι μη αρνητική και επιπλέον ικανοποιεί την σχέση

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\, ch^2 x} dx = \left(\frac{1}{2} tanhx\right)_{-\infty}^{\infty} = 1$$

Με την βοήθεια της συνάρτησης αυτής και του γνωστού θεωρήματος που αναφέρεται στις προηγούμενες σελίδες, κατασκευάζουμε την ακολουθία $S_k(x)$

των ομαλών κατανομών που ορίζονται από τις τοπικά ολοκληρώσημες συναρτήσεις

$$S_k(x) = kf(kx) = \frac{k}{2\,ch^2 kx}$$

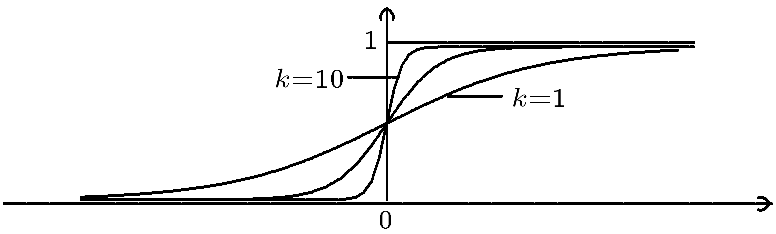
Η ακολουθία αυτή συγκλίνει (με την έννοια της κατανομής) στην $\delta(x)$ συνάρτηση.

Δηλαδή έχουμε

$$\lim_{k\to\infty} \frac{k}{2\,ch^2 kx} = \delta(x)$$

Ολοκληρώνουμε την σχέση αυτή (με την έννοια της κατανομής) και βρίσκουμε

$$\int_{-\infty}^{x} \lim_{k\to\infty} \frac{k}{2\,ch^2 kx} = \lim_{k\to\infty} \int_{-\infty}^{x} \frac{k}{2\,ch^2 kx} = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{2}(1 + tanhkx) = H(x)$$



Σχήμα 2.6
Η ακολουθία των συναρτήσεων $H_k(x)$ που συγκλίνουν στην συνάρτηση βήματος $H(x)$ για μεγάλα k

Κεφάλαιο 3

Η θεωρία των τελεστών

Το κεφάλαιο αυτό είναι μια συνοπτική ανάλυση την θεωρίας των τελεστών τα βασικά μαθηματικά εργαλεία της κβαντομηχανικής.

3.1 Οι γραμμικοί τελεστές

Οι τελεστές είναι απαραίτητα μαθηματικά εργαλεία για την κβαντική θεωρία. Ισως δεν είναι υπερβολή να πούμε ότι η κβαντική φυσική και η θεωρία των τελεστών είναι οι δύο όψεις του ίδιου νομίσματος. Τα παρατηρήσιμα μεγέθη της κβαντικής θεωρίας είναι ερμητιανοί τελεστές.

Η βασική διαφορά των τελεστών από τους αριθμούς είναι ότι το γινόμενο δύο τελεστών είναι πράξη μη αντιμεταθετική γενικά. Ενώ το γινόμενο δύο πραγματικών αριθμών δεν εξαρτάται από την σειρά των παραγόντων για τους τελεστές η διάταξη που εμφανίζονται οι τελεστές σε κάποιο γινόμενο είναι σημαντική. Το γινόμενο pq και το γινόμενο qp των τελεστών της θέσης και της ορμής για παράδειγμα είναι δύο διαφορετικοί τελεστές που διαφέρουν μεταξύ τους κατά μια σταθερά. Η μη αντιμεταθετικότητα των τελεστών αυτών οδηγεί στην σχέση της αβεβαιότητας.

Ορισμός: Θεωρούμε ένα διανυσματικό χώρο (V, F). Μια απεικόνιση

$$T : V \longmapsto V \qquad\qquad T : \chi \longmapsto T\chi$$

με την ιδιότητα

$$T(\alpha\chi_1 + \beta\chi_2) = \alpha T\chi_1 + \beta T\chi_2 \qquad\qquad \forall\alpha\ ,\ \beta \in F \quad \forall\chi_1\ ,\ \chi_2 \in V$$

ονομάζεται γραμμικός τελεστής. Το σύνολο των διανυσμάτων για τα οποία έχει έννοια η επίδραση του τελεστή, σχηματίζουν το πεδίο ορισμού D ενώ το σύνολο $\Delta = \{T\chi : \chi \in D\}$ είναι το πεδίο τιμών του τελεστή.

Παράδειγμα: Θεωρούμε τον διανυσματικό χώρο V των παραγωγίσιμων πραγματικών συναρτήσεων. Ορίζουμε την απεικόνιση $T = d/dx$

$$T : V \longmapsto V \qquad\qquad T : f(x) \longmapsto Tf(x)x = \frac{d}{dx}f(x)$$

Η απεικόνιση αυτή είναι ένας γραμμικός (διαφορικός) τελεστής.

Ορισμός: Ενας τελεστής T_2 ονομάζεται επέκταση του T_1 αν ισχύουν οι σχέσεις

$$D_{T_1} \subset D_{T_2} \quad \text{και} \quad T_1\chi = T_2\chi \quad \forall\chi \in D_{T_1}$$

Ορισμός: Δύο τελεστές είναι ίσοι $T_1 = T_2$ αν έχουν το ίδιο πεδίο ορισμού D και ισχύει

$$T_1\chi = T_2\chi \qquad\qquad \forall\chi \in D$$

Ορισμός: Το άθροισμα δύο τελεστών και ο πολλαπλασιασμός ενός τελεστή με ένα αριθμό, ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} (T_1 + T_2)\chi &= T_1\chi + T_2\chi \quad && \forall\chi \in D_{T_1} \cap D_{T_2} \neq \emptyset \\ (\alpha T_1)\chi &= \alpha T_1\chi && \forall\chi \in D_{T_1} \end{aligned}$$

Ορισμός: Το γινόμενο δύο τελεστών ορίζεται από την σχέση

$$(T_1T_2)\chi = T_1(T_2\chi) \quad \text{αν} \quad D_{T_1} \cap \Delta_{T_2} \neq \emptyset$$

Αν το πεδίο ορισμού του T_1 και το πεδίο τιμών του T_2 δεν έχουν κοινά σημεία το γινόμενο T_1T_2 δεν ορίζεται.

Ορισμός: Είναι προφανές ότι ο τελεστής T_1T_2 δεν συμπίπτει γενικά με τον τελεστή T_2T_1. Η διαφορά των δύο αυτών γινομένων, αν φυσικά ορίζονται και τα δύο, ονομάζεται μεταθέτης και συμβολίζεται με

$$[T_1, T_2] = T_1T_2 - T_2T_1$$

Ο μεταθέτης δύο τελεστών ικανοποιεί τις ακόλουθες σχέσεις

1. $[T_1 + T_2, T_3] = [T_1, T_3] + [T_2, T_3]$ Γραμμικότητα
2. $[T_1, T_2] + [T_2, T_1] = 0$ Αντισυμμετρικότητα
3. $[T_1, [T_2, T_3]] + [T_2, [T_3, T_1]] + [T_3, [T_1, T_2]] = 0$ Ταυτότητα Γιακόμπι

Υποθέτουμε ότι τα πεδία ορισμού και τιμών των τελεστών είναι τέτοια ώστε όλα τα παραπάνω γινόμενα να ορίζονται.

Ορισμός: Μια άλγεβρα εφοδιασμένη με μια πράξη που ονομάζεται Λη παρένθεση και είναι τέτοια ώστε να ικανοποιούνται οι τρεις παραπάνω σχέσεις ονομάζεται Λη άλγεβρα.

Παράδειγμα: Ο χώρος των τετραγωνικών $n \times n -$ μητρών για παράδειγμα γίνεται μια Λη άλγεβρα. Η Λη παρένθεση της άλγεβρας αυτής ορίζεται όπως και ο μεταθέτης δύο τελεστών.

$$[A, B] = AB - BA$$

όπου AB είναι το γνωστό γινόμενο των μητρών A και B.

Ορισμός: Ενας διανυσματικός χώρος (V, F) ονομάζεται άλγεβρα επί του F, όταν είναι δυνατόν για κάθε $T_1, T_2 \in V$ να οριστεί ένα γινόμενο T_1T_2 με τις ιδιότητες

$$(T_1T_2)T_3 = T_1(T_2T_3)$$

$$(T_1 + T_2)T_3 = T_1T_3 + T_2T_3, \quad T_3(T_1 + T_2) = T_3T_1 + T_3T_2$$

$$\alpha(T_1T_2) = (\alpha T_1)T_2 = T_1(\alpha T_2)$$

Ορισμός: Αν ο χώρος V έχει μια στάθμη (ή είναι Μπάναχ) και το γινόμενο έχει οριστεί έτσι ώστε να ισχύει

$$\|T_1T_2\| \leq \|T_1\|\|T_2\|$$

τότε το V ονομάζεται σταθμητή (ή Μπάναχ) άλγεβρα επί του F. Το σύνολο των μιγαδικών αριθμών C με στάθμη $\|c\| = |c|$ είναι μια Μπάναχ άλγεβρα.

Θεώρημα: Ενας τελεστής ορισμένος σε έναν $n-$ διάστατο Ευκλείδειο χώρο, παριστάνεται από μια $n \times n -$ μήτρα ως προς μια ορθοκανονική βάση. Τα στοιχεία A_{ij} της μήτρας αυτής δίνονται από την σχέση

$$A_{ij} =< \varphi_i|T\varphi_j >$$

Απόδειξη: Αν $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου τότε είναι γνωστό ότι το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων χ και ψ με συντεταγμένες α_i και β_i ορίζεται από την σχέση

$$< \chi|\psi >= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^* \beta_j \quad \text{όπου} \quad \chi = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \varphi_j \quad \text{και} \quad \psi = \sum_{j=1}^{n} \beta_j \varphi_j$$

Αν τώρα τα διανύσματα χ και ψ είναι τέτοια ώστε

$$\psi = T\chi$$

τότε έχουμε

$$\psi = \sum_{k=1}^{n} \beta_k \varphi_k = T\left(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \varphi_j\right) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j T\varphi_j = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \sum_{k=1}^{n} \mathrm{A}_{kj}\varphi_k$$

όπου τα στοιχεία της μήτρας A_{kj} δίνονται από την σχέση

$$T\varphi_j = \sum_{k=1}^{n} \mathrm{A}_{kj}\varphi_k \tag{3.1}$$

Αρα οι συντελεστές β_k του διανύσματος ψ είναι

$$\beta_k = \sum_{j=1}^{n} \mathrm{A}_{kj}\alpha_j \tag{3.2}$$

Επειδή η βάση είναι ορθοκανονική από την σχέση (3.1) έχουμε

$$< \varphi_i|T\varphi_j >=< \varphi_i| \sum_{k=1}^{n} \mathrm{A}_{kj}\varphi_k >= \sum_{k=1}^{n} \mathrm{A}_{kj} < \varphi_i|\varphi_k >= \sum_{k=1}^{n} \mathrm{A}_{kj}\delta_{ik} = \mathrm{A}_{ij}$$

Επομένως για κάθε γραμμικό τελεστή η παραπάνω σχέση προσδιορίζει μια μοναδική $n \times n$ − μήτρα και για κάθε $n \times n$ − μήτρα η σχέση (3.2) προσδιορίζει έναν μοναδικό τελεστή. Ετσι έχουμε μια αμφιμονοσήμαντη αντιστοιχία μεταξύ των γραμμικών τελεστών και των $n \times n$ − μητρών.

Σε έναν n − διάστατο Ευκλείδειο χώρο οι αλγεβρικές πράξεις μεταξύ των τελεστών γίνονται ισοδύναμα σαν πράξεις μεταξύ των αντίστοιχων μητρών. Αν A_{jk} και B_{jk} οι μήτρες που αντιστοιχούν αμφιμονοσήμαντα στους τελεστές T_1 και T_2, τότε το άθροισμα των τελεστών T_1 και T_2 είναι ο τελεστής T_3 με αντίστοιχη μήτρα των C_{jk} όπου

$$T_3 = T_1 + T_2 \qquad\qquad C_{jk} = \mathrm{A}_{jk} + \mathrm{B}_{jk}$$

Για το γινόμενο ενός τελεστή επί έναν αριθμό έχουμε

$$T_3 = cT_1 \qquad\qquad C_{jk} = c\mathrm{A}_{jk}$$

Τέλος για το γινόμενο μεταξύ δύο τελεστών, ισχύει

$$T_3 = T_1 T_2 \qquad\qquad C_{jk} = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{A}_{ji}\mathrm{B}_{ik}$$

Επίσης ο χαρακτηρισμός μιας μήτρας μεταφέρεται και στον αντίστοιχο τελεστή. Αν για παράδειγμα $\mathrm{A} = (\mathrm{A}_{ij})$ είναι μια μήτρα που αντιστοιχεί στον τελεστή T, τότε η μήτρα $\mathrm{A}^{+} = (\mathrm{A}_{ji})^{*}$ και ο αντίστοιχος τελεστής ονομάζεται συναφής (συζυγοανάστροφος).

Αν $\mathrm{A}^{+} = \mathrm{A}$ τότε η μήτρα και ο αντίστοιχος τελεστής ονομάζονται αυτοσυζυγείς. Αν $\mathrm{A}^{+}\mathrm{A} = \mathrm{A}\mathrm{A}^{+} = \mathrm{I}$ η μήτρα και ο τελεστής ονομάζονται μοναδιαίοι.

Παρατήρηση: Για να επεκτείνουμε τις έννοιες αυτές σε χώρους με άπειρη διάσταση είναι απαραίτητο να εισάγουμε κάποια έννοια συνεχείας για τους γραμμικούς τελεστές. Αν ο χώρος έχει βάση τα διανύσματα $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ τότε ένα διάνυσμα ψ του χώρου γράφεται

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n = \lim_{m\to\infty} \sum_{n=1}^{m} c_n \varphi_n$$

Το πρόβλημα εμφανίζεται από την ύπαρξη του ορίου στην παραπάνω σχέση.

Ορισμός: Ενας γραμμικός τελεστής T είναι συνεχής αν για κάθε ακολουθία διανυσμάτων ψ_n που συγκλίνει στο ψ η ακολουθία των διανυσμάτων $T\psi_n$ συγκλίνει στο διάνυσμα $T\psi$. Δηλαδή ισχύει

$$\lim_{\psi_n \to \psi} T\psi_n = T\psi$$

Θεώρημα: Ενας τελεστής είναι συνεχής τότε και μόνο τότε όταν είναι συνεχής σε ένα μόνο σημείο, συνήθως το μηδέν.

Απόδειξη: Αν $\psi_n \to \psi$ τότε η διαφορά $\psi_n - \psi \to 0$ και επειδή ο τελεστής T είναι συνεχής στο μηδέν έχουμε

$$T\left(\psi_n - \psi\right) \to 0 \Longrightarrow T\psi_n - T\psi \to 0 \Longrightarrow T\psi_n \to T\psi$$

Αρα ο τελεστής T είναι συνεχής. Το αντίστροφο είναι προφανές.

3.2 Οι φραγμένοι τελεστές

Ορισμός: Ενας τελεστής T ορισμένος σε ένα σταθμητό διανυσματικό χώρο V είναι φραγμένος, τότε και μόνο τότε όταν υπάρχει σταθερά c τέτοια ώστε

$$\|T\psi\| \leq c\|\psi\| \qquad \forall \psi \in V$$

Ο μικρότερος αριθμός c με την ιδιότητα αυτή, ονομάζεται στάθμη του φραγμένου τελεστή T και συμβολίζεται με $\|T\|$ δηλαδή

$$\|T\| = \inf\left\{c \in \Re^+ \ : \ \|T\psi\| \leq c\|\psi\| \quad \forall \psi \in V\right\}$$

Αποδεικνύεται ότι η στάθμη ενός τελεστή δίνεται από την σχέση

$$\|T\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|T\psi\|}{\|\psi\|}$$

Προφανώς ισχύει η ανισότητα

$$\|T\psi\| \leq \|T\|\|\psi\|$$

Θεώρημα: Το σύνολο των φραγμένων (γραμμικών) τελεστών επί ενός σταθμητού (ή Μπάναχ) διανυσματικού χώρου V, με τις πράξεις και τη στάθμη όπως ορίστηκαν, είναι μια σταθμητή (ή Μπάναχ) άλγεβρα.

Απόδειξη: Η απόδειξη είναι απλή. Σημειώνουμε μόνο ότι

$$\|(T_1T_2)\chi\| \ = \ \|T_1(T_2\chi)\| \leq \|T_1\|\|T_2\chi\| \leq T_2\|\|T_2\|\|\chi\|$$

Αρα ισχύει η σχέση

$$\|T_1T_2\| \leq \|T_1\|\|T_2\|$$

που είναι μια από τις ιδιότητες ώστε ο χώρος να είναι χώρος Μπάναχ.

Θεώρημα: Ενας τελεστής T είναι συνεχής τότε και μόνο τότε, όταν είναι φραγμένος.

Απόδειξη: Αν ο τελεστής T είναι φραγμένος και ψ_n μια ακολουθία διανυσμάτων που συγκλίνει στο διάνυσμα ψ τότε

$$\|T\psi_n - T\psi\| = \|T\left(\psi_n - \psi\right)\| \leq \|T\|\|\psi_n - \psi\| \longrightarrow 0$$

διότι $\|T\| < \infty$ και $\|\psi_n - \psi\| \longrightarrow 0$. Αρα

$$\|T\psi_n - T\psi\| \to 0 \Longrightarrow T\psi_n \to T\psi$$

και επομένως ο T είναι συνεχής.

Αντιστρόφως. Υποθέτουμε ότι ο τελεστής T είναι συνεχής και δεν είναι φραγμένος. Αρα υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα ψ_n τέτοιο ώστε

$$\|T\psi_n\| \geq n\|\psi_n\|$$

Επιλέγουμε την ακολουθία των διανυσμάτων

$$\chi_n = \frac{1}{n}\frac{1}{\|\psi_n\|}\psi_n$$

Για την ακολουθία αυτή ισχύουν οι σχέσεις

$$\|\chi_n - 0\| = \frac{1}{n}\frac{1}{\|\psi_n\|}\|\psi_n\| = \frac{1}{n} \quad \text{αρα} \quad \lim_{n\to\infty} \chi_n = 0$$

Επιπλέον έχουμε

$$\|T\chi_n\| = \frac{1}{n}\frac{1}{\|\psi_n\|}\|T\psi_n\| \geq \frac{1}{n}\frac{1}{\|\psi_n\|}n\|\psi_n\| = 1$$

Αποδείξαμε ότι για την ακολουθία χ_n που συγκλίνει στο μηδέν, η ακολουθία $T\chi_n$ δεν συγκλίνει στο μηδέν και άρα ο T δεν είναι συνεχής. Αυτό όμως είναι άτοπο.

Θεώρημα: Κάθε τελεστής πάνω σε έναν $n-$ διάστατο χώρο είναι φραγμένος και άρα συνεχής.

Απόδειξη: Συμβολίζουμε με T τον τελεστή και θεωρούμε μια ορθοκανονική βάση $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ του χώρου τότε για κάθε διάνυσμα

$$\psi = \sum_{k=1}^{n} \psi_k \varphi_k$$

έχουμε

$$\|T\psi\|^2 =< T\psi|T\psi >=< \sum_{k=1}^{n} \psi_k T\varphi_k | \sum_{i=1}^{n} \psi_i T\varphi_i >= \sum_{k,i=1}^{n} \psi_k \psi_i^* < T\varphi_k|T\varphi_i >$$

Αλλά λόγω της ανισότητας του Σβαρτς ισχύει

$$|\psi_j| = |<\varphi_j|\psi>| \leq \|\varphi_j\|\|\psi\| = \|\psi\|$$

και επομένως έχουμε

$$\|T\psi\|^2 \leq \left(\sum_{k,i=1}^{n} |<T\varphi_k|T\varphi_i>|\right)\|\psi\|$$

Αν c ο μεγαλύτερος από τους αριθμούς $\left(\sum_{k,i=1}^{n} |<T\varphi_k|T\varphi_i>|\right)$ τότε

$$\|T\psi\| \leq c\|\psi\|$$

και άρα ο τελεστής είναι φραγμένος.

Θεώρημα: Ενας φραγμένος τελεστής T ορισμένος σε ένα χώρο με άπειρη διάσταση, μπορεί να παρασταθεί από μια απείρου διάστασης μήτρα.

Απόδειξη: Για την απόδειξη σημειώνουμε ότι επειδή ο τελεστής T είναι φραγμένος και άρα συνεχής, μπορούμε να πάρουμε τα όρια του $n \to \infty$ στο αντίστοιχο θεώρημα για τους $n-$ διάστατους χώρους.

Ορισμός: Ενας τελεστής T θα λέμε ότι έχει τροχιά ή ίχνος, αν η σειρά $\sum_n <\varphi_n|T\varphi_n>$ συγκλίνει και έχει το ίδιο όριο για κάθε ορθοκανονικό βάση φ_n. Το άθροισμα

$$Tr(\,T\,) = \sum_n <\varphi_n|T\varphi_n>$$

ονομάζεται τροχιά του τελεστή T. Ενας τελεστής ορισμένος σε χώρο πεπερασμένης διάστασης έχει πάντα μια τροχιά.

Παρατήρηση: Στην κβαντομηχανική εργαζόμαστε συνήθως σε απειροδιάστατους χώρους και με πολλές φορές με μη φραγμένους τελεστές.

Παράδειγμα: Θεωρούμε τον χώρο $L^2(\Re)$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κατά Λεμπέκ συναρτήσεων $\psi(x)$. Θεωρούμε τον τελεστή Q της θέσης που ορίζεται από την σχέση

$$Q\psi(x) = x\psi(x)$$

Ο τελεστής αυτός δεν ορίζεται σε όλον τον χώρο διότι υπάρχουν διανύσματα $\psi(x) \in L^2(\Re)$ τέτοια ώστε το ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty} |x\psi(x)|^2 dx$ να μην είναι πεπερασμένο και επομένως

$$Q\psi(x) = x\psi(x) \notin L^2(\Re)$$

Ο τελεστής αυτός ορίζεται πάνω σε ένα υποσύνολο του χώρου. Το πεδίο ορισμού του τελεστή αυτού είναι

$$D_x = \left\{ \psi \in L^2(\Re) \quad \int_{\Re} |x\psi(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

Αποδεικνύουμε τώρα ότι ο τελεστής δεν είναι φραγμένος. Θεωρούμε την συνεχή συνάρτηση $f_0(x) \geq 0$ με φορέα μέσα στο διάστημα $[0, 1]$ που δεν μηδενίζεται ταυτοτικά δηλαδή $f_0(x) \in C_0(\Re)$. Για κάθε α η συνάρτηση $f_\alpha(x) = f_0(x - \alpha)$ έχει φορέα στο διάστημα $[\alpha, \alpha + 1]$ και $f_\alpha(x) \in C_0(\Re)$. Αλλά ισχύει

$$\|f_\alpha\| = \|f_0\| = \text{σταθερό}$$

και επομένως

$$\|Qf_\alpha\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f_0^2(x-\alpha) dx = \int_{\alpha}^{\alpha+1} x^2 f_0^2(x-\alpha) dx \geq \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} f_\alpha^2(x) dx$$

$$= \alpha^2 \|f_0\|^2 \underset{\alpha\to\infty}{\longrightarrow} \infty$$

Αρα

$$\|Q\| = \infty$$

Ο τελεστής Q με πεδίο ορισμού τον χώρο $L^2(\alpha, \beta)$ όπου $0 < \alpha < \beta$ είναι φραγμένος και άρα συνεχής.

Μια ανάλογη κατάσταση αντιμετωπίζουμε και για τον τελεστή της ορμής

$$P_x = -i\frac{d}{dx} \qquad D_{P_x} = \left\{ \psi \in L^2(\Re), \quad \int_{\Re} \left| \frac{d}{dx}\psi(x) \right|^2 dx < \infty \right\}$$

Ο τελεστής αυτός δεν είναι φραγμένος ούτε στον χώρο $L^2(\alpha, \beta)$.

3.3 Σύγκλιση ακολουθίας φραγμένων τελεστών

Η σύγκλιση μιας ακολουθίας φραγμένων τελεστών σε ένα χώρο Χίλμπερτ ορίζεται κατά τρεις τρόπους.

Ορισμός: Αν $T_n,\ n = 1, 2, \cdots$ μια ακολουθία συνεχών τελεστών επί ενός χώρου Χίλμπερτ H τότε
α) Η ακολουθία συγκλίνει ομοιόμορφα στον τελεστή T αν

$$\lim_{n\to\infty} \|T_n - T\| = 0$$

β) Η ακολουθία συγκλίνει ισχυρώς στον τελεστή T αν

$$\lim_{n\to\infty} \|T_n\psi - T\psi\| = 0 \qquad \forall \psi \in H$$

γ) Η ακολουθία συγκλίνει ασθενώς στον τελεστή T αν

$$\lim_{n\to\infty} < T_n\psi - T\psi|\chi >= 0 \qquad \forall \chi\ ,\ \psi \in H$$

Λόγω των σχέσεων

$$| < T_n\psi - T\psi|\chi > | \leq \|T_n\psi - T\psi\|\|\chi\| \leq \|T_n - T\|\|\psi\|\|\chi\|$$

φαίνεται αμέσως ότι η ομοιόμορφη σύγκλιση συνεπάγεται την ισχυρή και η ισχυρή σύγκλιση συνεπάγεται την ασθενή. Το αντίστροφο δεν ισχύει εν γένει.

3.4 Ο αντίστροφος τελεστής

Ορισμός: Ενας τελεστής T_1 έχει αντίστροφο, αν υπάρχει ένας τελεστής T_2 τέτοιος ώστε

$$T_1 T_2 = T_2 T_1 = \mathbf{I}$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος τελεστής.

Ο τελεστής T_2 συμβολίζεται με T_1^{-1} και είναι μοναδικός.

Θεώρημα: Ενας τελεστής T ορισμένος σε έναν $n-$ διάστατο χώρο έχει αντίστροφο τότε και μόνο τότε όταν

α) Δεν υπάρχει μη μηδενικό διάνυσμα ψ τέτοιο ώστε $T\psi = 0$.

β) Η αντίστοιχη μήτρα του τελεστή T έχει μη μηδενική ορίζουσα.

Θεώρημα: Ενας φραγμένος τελεστής T ορισμένος σε ένα χώρο Χίλμπερτ H, έχει αντίστροφο τότε και μόνο τότε, όταν για κάθε διάνυσμα ψ υπάρχει ένα μόνο διάνυσμα χ, τέτοιο ώστε $\psi = T\chi$ δηλαδή ο τελεστής T

είναι μια αμφιμονοσήμαντος απεικόνιση. Ο τελεστής T^{-1} ορίζεται από την σχέση $T^{-1}\psi = \chi$ και είναι φραγμένος.

3.5 Ο ερμητιανός τελεστής

Ορισμός: Ο τελεστής T^+ ονομάζεται συζυγής του T, αν ισχύει

$$< \psi|T\chi > = < T^+\psi|\chi > \qquad \forall \chi \ , \quad \psi \in H$$

Θεώρημα: Αν ο τελεστής T είναι φραγμένος, τότε υπάρχει ένας μόνο τελεστής T^+ ο οποίος είναι φραγμένος και ισχύει

$$\|T^+\| = \|T\|$$

Απόδειξη: Επειδή ο τελεστής T είναι φραγμένος (συνεχής) επί του χώρου Χίλμπερτ H, η απεικόνιση

$$f_\psi(\chi) = < \psi|T\chi > \qquad \forall \chi \in H$$

είναι ένα φραγμένο γραμμικό συναρτησιακό. Πράγματι είναι γραμμικό διότι

$$f_\psi(\alpha\chi_1 + \beta\chi_2) = < \psi|T(\alpha\chi_1 + \beta\chi_2) > = \alpha < \psi|T\chi_1 > + \beta < \psi|T\chi_2 > =$$
$$\alpha f_\psi(\chi_1) + \beta f_\psi(\chi_2)$$

και φραγμένο διότι

$$|f_\psi(\chi)| = | < \psi|T\chi > | \leq \|T\chi\|\|\psi\| \leq (\|T\|\|\psi\|)\,\|\chi\|$$

Αρα

$$\forall \psi \in H \Longrightarrow f_\psi \in H^*$$

Σύμφωνα με το θεώρημα του Ριτζ $\forall f_\psi \in H^*$ υπάρχει ένα μόνο $\varphi \in H$ τέτοιο ώστε

$$< \psi|T\chi > = f_\psi(\chi) = < \varphi|\chi >$$

Ορίζουμε τώρα τον τελεστή T^+ από την αντιστοιχία

$$T^+\psi = \varphi$$

Ο τελεστής T^+ είναι ο συζυγής τελεστής του T διότι προφανώς ισχύει

$$< \psi | T\chi > = < T^+\psi | \chi > \qquad \forall \chi \ , \quad \psi \in H$$

Η γραμμικότητα του τελεστή T^+ είναι προφανής από τον ορισμό του. Επίσης

$$\|T^+\psi\|^2 = < T^+\psi | T^+\psi > = < T(T^+\psi)|\psi > < \|T\| \|T^+\psi\| \|\psi\| \Longrightarrow$$

$$\|T^+\psi\| \leq \|T\| \|\psi\|$$

Αρα ο T^+ είναι φραγμένος και επομένως

$$\|T^+\| \leq \|T\|$$

Επί πλέον

$$\|T\psi\|^2 = < T\psi | T\psi > = < \psi | T^+(T\psi) > \leq \|\psi\| \|T^+\| \|T\psi\| \Longrightarrow$$

$$\|T\psi\| \leq \|T^+\| \|\psi\|$$

και άρα

$$\|T\| \leq \|T^+\|$$

Από τις παραπάνω σχέσεις έχουμε την ισότητα

$$\|T^+\| = \|T\|$$

Τέλος αν υποθέσουμε ότι υπάρχουν δύο τέτοιοι τελεστές T_1^+ και T_2^+ τότε

$$\begin{aligned}
\forall \chi \ , \ \psi \in H \quad & < \psi | T\chi > = < T_1^+\psi | \chi > = < T_2^+\psi | \chi > \Longrightarrow \\
& < T_1^+\psi | \chi > - < T_2^+\psi | \chi > = < T_1^+\psi - T_2^+\psi | \chi > = 0 \Longrightarrow \\
\forall \psi \in H \quad & T_1^+\psi = T_2^+\psi \quad \text{και άρα} \ \ T_1^+ = T_2^+
\end{aligned}$$

Για έναν μη φραγμένο τελεστή ισχύει το εξής θεώρημα.

Θεώρημα: Θεωρούμε ένα τελεστή T επί του H με πεδίο ορισμού D_T. Ορίζουμε το σύνολο D_{T^+} σαν το σύνολο των διανυσμάτων ψ, που είναι τέτοια ώστε να υπάρχει ένα μόνο διάνυσμα φ τέτοιο ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση

$$< \varphi | \chi > = < \psi | T\chi > \qquad \forall \chi \in D_T$$

Η απεικόνιση

$$\psi \longmapsto \varphi = T^{+}\psi \quad \text{όπου} \quad \psi \in D_{T^+}$$

αποδεικνύεται ότι είναι ένας γραμμικός τελεστής, ο συζυγής του T και υπάρχει, δηλαδή $D_{T^+} \neq \emptyset$ τότε και μόνο τότε, όταν το D_T είναι παντού πυκνό στο H. Δηλαδή

$$\bar{D}_T = H$$

Ορισμός: Ενας τελεστής ονομάζεται ερμητιανός (αυτοσυζυγής) τότε και μόνο τότε όταν

$$T^{+} = T$$

Ενας ερμητιανός τελεστής ικανοποιεί την εξίσωση

$$< \chi|T\psi > = < T\chi|\psi > \qquad \forall \chi,\ \psi \in D_T = D_{T^+}$$

Για ένα κβαντικό σύστημα που βρίσκεται στην κανονικοποιημένη κατάσταση χ ο αριθμός $< \chi|T\chi >$ είναι η μέση τιμή του μεγέθους που παριστάνει ο τελεστής T και άρα πρέπει να είναι ένας πραγματικός αριθμός. Από την παραπάνω σχέση αποδεικνύεται εύκολα ότι ο αριθμός αυτός είναι πραγματικός.

$$< \chi|T\chi > = < T\chi|\chi > = < \chi|T\chi >^{*} \in \Re \qquad \forall \chi \in D_T$$

Αυτός είναι ένας από του λόγους που οι τελεστές της κβαντομηχανικής πρέπει να είναι ερμητιανοί.

Αποδεικνύονται εύκολα οι ιδιότητες

$$(T^{+})^{+} = T \qquad (T_1 + T_2)^{+} = T_1^{+} + T_2^{+}$$
$$(\alpha T)^{+} = \alpha^{*} T^{+} \qquad (T_1 T_2)^{+} = T_2^{+} T_1^{+}$$

Ορισμός: Ενας ερμητιανός τελεστής ονομάζεται θετικά ορισμένος ή θετικός τελεστής αν ισχύει η σχέση

$$< \chi|T\chi > \geq 0 \qquad \forall \chi \in D_T$$

Αν ο τελεστής T είναι φραγμένος (ή ορίζεται σε $n-$ διάστατους χώρους) και $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου, τότε ο τελεστής T παρίσταται από μια μήτρα με στοιχεία $\mathrm{A}_{jk} = < \varphi_j|T\varphi_k >$. Αν B_{jk} η μήτρα που παριστάνει τον τελεστή T^{+} τότε

$$\mathrm{B}_{jk} = < \varphi_j|T^{+}\varphi_k > = < T\varphi_j|\varphi_k > = < \varphi_k|T\varphi_j >^{*} = \mathrm{A}^{*}_{kj}$$

Αρα τα στοιχεία μήτρας ενός φραγμένου ερμητιανού τελεστή χαρακτηρίζονται από την εξίσωση

$$\mathrm{A}_{jk} = \mathrm{A}^*_{kj}$$

Παρατήρηση: Ενας τελεστής T που ικανοποιεί την εξίσωση

$$< \chi|T\psi > = < T\chi|\psi > \qquad \forall\chi\ ,\ \psi \in D_T$$

είναι δυνατόν να μην είναι ερμητιανός. Πράγματι Αν το πεδίο ορισμού του D_T είναι ένα υποσύνολο παντού πυκνό στο H, τότε ορίζεται ο τελεστής T^+. Είναι όμως δυνατόν το πεδίο ορισμού του T^+ να είναι υπερσύνολο του πεδίου ορισμού του T. Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής T^+ είναι μια επέκταση του T και ο τελεστής T ονομάζεται συμμετρικός. Αν επί πλέον και τα πεδία ορισμού των T και T^+ συμπίπτουν, δηλαδή

$$D_T = D_{T^+}$$

τότε ο μη φραγμένος τελεστής T είναι ερμητιανός.

Παρατήρηση: Αν το πεδίο ορισμού D_T του τελεστή T είναι όλος ο χώρος δηλαδή ο τελεστής είναι παντού ορισμένος τότε ο τελεστής αποδεικνύεται ότι είναι φραγμένος και άρα ερμητιανός. Επομένως ένας συμμετρικός μη φραγμένος τελεστής δεν μπορεί να είναι παντού ορισμένος.

3.6 Ο μοναδιαίος τελεστής

Ορισμός: Ενας τελεστής U ονομάζεται μοναδιαίος (unitary), τότε και μόνο τότε όταν έχει αντίστροφο και ισχύει

$$\|U\psi\| = \|\psi\| \qquad \forall\psi \in H$$

Προφανώς $\|U\| = 1$ και άρα ένας μοναδιαίος τελεστής είναι φραγμένος. Για χώρους πεπερασμένης διάστασης η σχέση $\|U\psi\| = \|\psi\|$ συνεπάγεται ότι ο τελεστής U έχει αντίστροφο.

Θεώρημα: Αν U είναι ένας μοναδιαίος τελεστής, τότε ισχύει η σχέση

$$< U\chi|U\psi > = < \chi|\psi > \qquad \forall\chi\ ,\ \psi \in H$$

Ενας μοναδιαίος τελεστής διατηρεί τα μήκη των διανυσμάτων. Διατηρεί επίσης το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων και επομένως και την γωνία τους.

Παρατήρηση: Αν U είναι ένας μοναδιαίος τελεστής και $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου, τότε τα διανύσματα $U\varphi_1, U\varphi_2, \cdots$ είναι επίσης μια ορθοκανονική βάση του χώρου, όπως φαίνονται εύκολα από την σχέση

$$< U\varphi_i|U\varphi_j >=< \varphi_i|\varphi_j >= \delta_{ij}$$

Η πρόταση ισχύει και αντίστροφα, δηλαδή αν $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου και U ένας φραγμένος τελεστής, τέτοιος ώστε τα διανύσματα $U\varphi_1, U\varphi_2, \cdots$ να είναι μια ορθοκανονική βάση, τότε ο τελεστής U είναι μοναδιαίος. Τέλος ισχύει και το ακόλουθο θεώρημα:

Θεώρημα: Αν $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$ και $\varphi_1', \varphi_2', \cdots$ είναι δύο ορθοκανονικές βάσεις ενός χώρου Χίλμπερτ H τότε υπάρχει ένας μοναδιαίος τελεστής που απεικονίζει την μία βάση στην άλλη

$$\varphi_i' = U\varphi_i \qquad \forall i = 1, 2, \cdots$$

Απόδειξη: Για την απόδειξη θα κατασκευάσουμε τον ζητούμενο μοναδιαίο τελεστή. Για κάθε διάνυσμα

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k$$

ορίζουμε τον τελεστή U από την σχέση

$$U\psi = \chi \quad \text{όπου} \quad \chi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k'$$

Η σειρά $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k'$ συγκλίνει διότι $\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2 = \|\psi\|^2$ και επομένως ο τελεστής U είναι καλά ορισμένος. Επί πλέον ο τελεστής U είναι φραγμένος και μοναδιαίος. Πράγματι για κάθε $\psi_1, \psi_2 \in H$ έχουμε

$$< U\psi_1|U\psi_2 > \stackrel{\text{ορσ}}{=} < \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k' | \sum_{j=1}^{\infty} \beta_j \varphi_j' >= \sum_{k,j=1}^{\infty} \alpha_k^* \beta_j < \varphi_k'|\varphi_j' >=$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k^* \beta_j \delta_{kj} = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k^* \beta_k =< \psi_1|\psi_2 >$$

Τέλος από τον ορισμό φαίνεται αμέσως ότι ο τελεστής U ορίζεται σε όλο τον χώρο.

Επομένως ένας μοναδιαίος τελεστής προσδιορίζει μια αλλαγή μιας ορθοκανονικής βάσης και μια αλλαγή βάσης ορίζει ένα μοναδιαίο τελεστή.

Θεώρημα: Ενας τελεστής U είναι μοναδιαίος τότε και μόνο τότε όταν

$$U^{+}U = UU^{+} = \mathrm{I}$$

Απόδειξη: Αν ισχύει η παραπάνω σχέση, τότε ο τελεστής U έχει αντίστροφο $U^{-1} = U^{+}$. Επίσης για κάθε διάνυσμα ψ έχουμε

$$\|U\psi\|^{2} =< U\psi|U\psi >=< U^{+}U\psi|\psi >=< \psi|\psi >= \|\psi\|^{2}$$

Αρα ο U είναι μοναδιαίος.

Αντιστρόφως, αν U είναι ένας μοναδιαίος τελεστής τότε

$$< \psi_1|\psi_2 >=< U\psi_1|U\psi_2 >=< \psi_1|U^{+}\left(U\psi_2\right) > \implies U^{+}U = \mathrm{I}$$

Επιπλέον ισχύουν οι σχέσεις

$$U^{+} - U^{-1} = (U^{+} - U^{-1})UU^{-1} = (U^{+}U - U^{-1}U)U^{-1} = (1-1)U^{-1} = 0$$

Επομένως έχουμε

$$U^{+} = U^{-1}$$

Παρατήρηση: Σύμφωνα με το θεώρημα, ο τελεστής U είναι μοναδιαίος όταν ισχύει η σχέση $U^{+}U = UU^{+} = \mathbf{I}$. Την ίδια σχέση ικανοποιούν προφανώς και οι αντίστοιχες μήτρες δηλαδή έχουμε

$$\left(U^{+}U\right)_{ji} = \left(UU^{+}\right)_{ji} = (\mathbf{I})_{ji} = \delta_{ji}$$

Εκτελούμε τους πολλαπλασιασμούς των μητρών και βρίσκουμε

$$\sum_{k} \left(U^{+}\right)_{jk} (U)_{ki} = \sum_{k} (U)_{jk} \left(U^{+}\right)_{ki} = \delta_{ji}$$

Αν A_{jk} είναι τα στοιχεία μήτρας του τελεστή U τότε τα A^{*}_{kj} είναι τα στοιχεία μήτρας του τελεστή U^{+} και η σχέση γίνεται

$$\sum_{k} A^{*}_{kj} A_{ki} = \sum_{k} A_{jk} A^{*}_{ik} = \delta_{ji}$$

Η σχέση αυτή είναι η συνθήκη ώστε η μήτρα A και ο αντίστοιχος τελεστής U να είναι μοναδιαίος.

3.7 Ο προβολικός τελεστής

Ορισμός: Αν M ένας υπόχωρος ενός χώρου Χίλμπερτ H, τότε είναι γνωστό ότι $H = \mathrm{M} \oplus \mathrm{M}^{\perp}$ και αρα κάθε διάνυσμα $\psi \in H$ γράφεται μονοσήμαντα σαν άθροισμα ενός διανύσματος του χώρου M και ενός διανύσματος του χώρου $\mathrm{M}^{\perp}$

$$\psi = \psi_{\mathrm{M}} + \psi_{\mathrm{M}^{\perp}} \quad \text{όπου} \quad \psi_{\mathrm{M}} \in \mathrm{M} \quad \text{και} \quad \psi_{M^{\perp}} \in \mathrm{M}^{\perp}$$

Ορίζουμε τον τελεστή P_M από την σχέση

$$P_M\psi = \psi_M \qquad\qquad \forall\psi \in H$$

Ο τελεστής αυτός ονομάζεται προβολικός τελεστής επί του M.

Είναι προφανές ότι

$$\begin{aligned} P_M\psi &= \psi \quad \forall\psi \in \mathrm{M} \quad \text{και} \\ P_M\psi &= 0 \quad \forall\psi \in \mathrm{M}^{\perp} \end{aligned}$$

Επίσης ο τελεστής $P_{\mathrm{M}^{\perp}} = \mathrm{I} - P_{\mathrm{M}}$ είναι ο προβολικός τελεστής στο $\mathrm{M}^{\perp}$ διότι

$$P_{\mathrm{M}^{\perp}}\psi = (\mathrm{I} - P_{\mathrm{M}})\psi = \psi - P_M\psi = \psi - \psi_{\mathrm{M}} = \psi_{\mathrm{M}^{\perp}}$$

Ο τελεστής P_M είναι φραγμένος και επί πλέον $\|P_M\| = 1$. Πράγματι

$$\|P_M\psi\|^2 = \|\psi_M\|^2 = \|\psi - \psi_{\mathrm{M}^{\perp}}\|^2 \leq \|\psi\|^2 \Longrightarrow \|P_M\| \leq 1$$

και επειδή $\|P_{\mathrm{M}}\psi\| = \|\psi\|$ για κάθε διάνυσμα του M, συνεπάγεται ότι

$$\|P_{\mathrm{M}}\| = 1$$

Παρατήρηση: Θεωρούμε τον μονοδιάστατο χώρο M που κατασκευάζεται από το μοναδιαίο διάνυσμα $|\varphi_k>$, όπου $\|\varphi_k\| = 1$. Ο προβολικός τελεστής P_k πάνω στον χώρο αυτό, ορίζεται από την σχέση

$$P_k|\psi >= \alpha_k|\varphi_k > \qquad\qquad \forall\psi \in H$$

Αν $|\varphi_1>, |\varphi_2>, \cdots, |\varphi_k>, \cdots$ είναι μια ορθοκανονική βάση του χώρου H, τότε για κάθε στοιχείο $|\varphi_k>$ της βάσης ορίζουμε τους τελεστές P_k από τις σχέσεις

$$P_k|\psi> = \alpha_k|\varphi_k> \quad \text{όπου} \quad \alpha_k = <\varphi_k|\psi>$$

Επομένως

$$P_k|\psi> = |\varphi_k><\varphi_k|\psi> \qquad \forall|\psi>\in H$$

Αρα μπορούμε να γράψουμε τον προβολικό τελεστή P_k με την μορφή

$$P_k = |\varphi_k><\varphi_k|$$

Οι τελεστές αυτοί ικανοποιούν τις σχέσεις

$$P_j P_k = \delta_{jk} P_k$$

Πράγματι έχουμε

$$P_j P_k = |\varphi_j><\varphi_j|\varphi_k><\varphi_k| = |\varphi_j>\delta_{jk}<\varphi_k| = \delta_{jk}|\varphi_k><\varphi_k| = \delta_{jk}P_k$$

Επίσης, επειδή κάθε διάνυσμα του χώρου γράφεται

$$|\psi> = \sum_{k=1}^{\infty}|\varphi_k><\varphi_k|\psi> = \sum_{k=1}^{\infty}P_k|\psi>$$

αν "απλοποιήσουμε" την παραπάνω σχέση με το $|\psi>$ έχουμε

$$\sum_{k=1}^{\infty}|\varphi_k><\varphi_k| = \sum_{k=1}^{\infty}P_k = \mathbf{I}$$

Δηλαδή οι τελεστές P_k είναι ορθογώνιοι ανά δυο και ικανοποιούν την παραπάνω σχέση που ονομάζεται συνθήκη πληρότητας.

Θεώρημα: Ενας γραμμικός τελεστής ορισμένος σ'όλο τον χώρο Χίλμπερτ ή είναι φραγμένος, είναι ένας προβολικός τελεστής, τότε και μόνο τότε όταν

$$P^2 = P = P^+$$

Ο προβολικός τελεστής είναι ερμητιανός.

3.8 Ο κλειστός τελεστής

Οι μη φραγμένοι τελεστές δεν είναι συνεχείς. Μία χρήσιμη ιδιότητα γι'αυτούς του τελεστές είναι η κλειστότητα.

Ορισμός: Ενας τελεστής T με πεδίο ορισμού D_T ονομάζεται κλειστός, αν από την σύγκλιση των ακολουθιών, $\psi_n \in D_T$ και $T\psi_n$ όπου $\lim \psi_n = \psi$ και $\lim T\psi_n = \varphi$, συνεπάγεται ότι

$$\text{α) } \psi \in D_T \quad \text{και} \quad \text{β) } T\psi = \varphi$$

Παράδειγμα: Αν τα διανύσματα $\varphi_k \in D_T$, τότε τα μερικά αθροίσματα $\psi_n = \sum_{k=1}^{n} \chi_k \varphi_k$ ανήκουν επίσης στο D_T και ισχύει

$$T\left(\sum_{k=1}^{n} \chi_k \varphi_k\right) = \sum_{k=1}^{n} \chi_k T\varphi_k$$

Υποθέτουμε ότι η ακολουθία ψ_n των μερικών αθροισμάτων, συγκλίνει στο διάνυσμα $\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_k \varphi_k$ και ότι η ακολουθία $T\psi_n$ συγκλίνει στο διάνυσμα $\varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_k T\varphi_k$. Αν ο τελεστής T είναι κλειστός τότε το ψ ανήκει στο D_T και ισχύει

$$T\left(\sum_{k=1}^{\infty} \chi_k \varphi_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_k T\varphi_k$$

Θεώρημα: Αν ένας τελεστής T ορίζεται σ'ένα παντού πυκνό υποσύνολο τότε ο τελεστής T^+ είναι κλειστός τελεστής.

3.9 Το φάσμα των τελεστών

Ορισμός: Ενας μιγαδικός αριθμός α ονομάζεται ιδιοτιμή ενός τελεστή T, εάν υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα ψ, τέτοιο ώστε να επαληθεύεται η ακόλουθη εξίσωση ιδιοτιμών

$$T\psi = \alpha\psi$$

Το ψ ονομάζεται ιδιοδιάνυσμα του T με ιδιοτιμή α. Η ζητούμενη λύση πρέπει συνήθως να ικανοποιεί κάποιες οριακές συνθήκες. Το σύνολο των ιδιοτιμών ενός τελεστή ονομάζεται σημειακό φάσμα του τελεστή. Σημειώνουμε συνήθως την ιδιοσυνάρτηση με την αντίστοιχη ιδιοτιμή σαν δείκτη δηλαδή γράφουμε ψ_α.

Το παραπάνω πρόβλημα είναι βασικό για τις εφαρμογές της κβαντομηχανικής. Σε κάθε μέγεθος αντιστοιχεί ένας ερμητιανός τελεστής και οι ιδιοτιμές ενός τελεστή είναι οι μόνες τιμές που μπορεί να πάρει το αντίστοιχο μέγεθος. Η κάθε ιδιοτιμή είναι μια πιθανή τιμή του μεγέθους με κάποια πιθανότητα. Η πιθανή τιμή είναι μόνο μία αν το σύστημα περιγράφεται από μία ιδιοσυνάρτηση του τελεστή. Στην περίπτωση αυτή το αντίστοιχο μέγεθος παίρνει μόνο μία τιμή την αντίστοιχη ιδιοτιμή.

Ενας τελεστής δεν έχει κατ' ανάγκη ιδιοτιμές. Είναι επίσης δυνατόν οι ιδιοτιμές του τελεστή να σχηματίζουν ένα διακριτό σύνολο από πεπερασμένους ή και άπειρους αριθμούς $\alpha_1, \alpha_2 \cdots, \alpha_n, \cdots$. Στην περίπτωση αυτή έχουμε το φαινόμενο που στην κβαντομηχανική ονομάζουμε κβάντωση του μεγέθους. Είναι τέλος δυνατό η εξίσωση να έχει λύση για κάθε πραγματική τιμή του α οπότε λέμε ότι το φάσμα είναι συνεχές.

Είναι δυνατόν να υπάρχουν πολλά ιδιοδιανύσματα στην ίδια ιδιοτιμή. Η ιδιοτιμή αυτή ονομάζεται εκφυλισμένη. Τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή, σχηματίζουν μια γραμμική πολλαπλότητα M_α. Η διάστασης της πολλαπλότητας M_α, χαρακτηρίζει και τον βαθμό εκφυλισμού της ιδιοτιμής α. Το M_α είναι ένας (κλειστός) υπόχωρος, αν ο τελεστής είναι φραγμένος ή μη φραγμένος αλλά κλειστός.

Το πρόβλημα των ιδιοτιμών ενός τελεστή είναι γενικά δύσκολο. Εχει λυθεί αναλυτικά σε ορισμένες μόνο περιπτώσεις και τα θεωρήματα ύπαρξης είναι ελάχιστα. Σε πολλές περιπτώσεις καταφεύγουμε σε προσεγγιστηκές λύσεις με διάφορες μεθόδους διαταραχής του φάσματος.

Ορισμός: Θεωρούμε ένα τελεστή Τ ορισμένο στο σύνολο H. Το σύνολο $\rho(\mathrm{T})$ ορίζεται σαν το σύνολο που περιέχει τους μιγαδικούς αριθμούς λ για τους οποίους υπάρχει ο τελεστής

$$\mathrm{T}_\lambda = (\mathrm{T} - \lambda \mathbf{I})^{-1}$$

εχει πεδίο ορισμού παντού πυκνό στο σύνολο H και είναι φραγμένος. Το σύνολο $\rho(\mathrm{T})$ ονομάζεται επιλύον σύνολο του τελεστή Τ και τα σημεία του συνόλου αυτού ονομάζονται κανονικά ή ομαλά σημεία του Τ.

Ορισμός: Φάσμα ενός τελεστή Τ ονομάζεται το σύνολο

$$\sigma(\mathrm{T}) = C - \rho(\mathrm{T})$$

Δηλαδή το φάσμα ενός τελεστή περιέχει όλους τους μιγαδικούς αριθμούς που δεν είναι κανονικές τιμές του τελεστή Τ.

Από τον παραπάνω ορισμό φαίνεται εύκολα ότι έχουμε τρεις κατηγορίες φάσματος:

α) Αν ο τελεστής T_λ δεν έχει αντίστροφο τότε το λ ανήκει στο σημειακό φάσμα. Συμβολίζουμε το σύνολο αυτό με $P\sigma(\mathrm{T})$.

β) Αν ο τελεστής T_λ έχει αντίστροφο που δεν είναι φραγμένος αλλά το πεδίο ορισμού του είναι παντού πυκνό στο X τότε το λ ανήκει στο συνεχές φάσμα. Συμβολίζουμε το σύνολο αυτό με $C\sigma(\mathrm{T})$.

γ) Αν ο τελεστής T_λ έχει αντίστροφο αλλά το πεδίο ορισμού του δεν είναι παντού πυκνό στο X τότε το λ ανήκει στο υπόλοιπο φάσμα. Συμβολίζουμε το σύνολο αυτό με $R\sigma(\mathrm{T})$.

Παρατήρηση: Τα σύνολα $\sigma(\mathrm{T})$, $P\sigma(\mathrm{T})$, $C\sigma(\mathrm{T})$ και $R\sigma(\mathrm{T})$ είναι ξένα μεταξύ τους και η ένωση τους είναι όλο το σύνολο C των μιγαδικών αριθμών.

Θεώρημα: Η εξίσωση $\mathrm{T}\psi = \lambda\psi$ έχει μία μη μηδενική λύση εάν και μόνο εάν το λ ανήκει στο σημειακό φάσμα $P\sigma(\mathrm{T})$ του τελεστή T.

Θεώρημα: Αν ο τελεστής T ορίζεται σε $n-$ διάστατους χώρους το α είναι ιδιοτιμή του T τότε και μόνο τότε, όταν ο τελεστής $T - \alpha\mathbf{I}$ δεν έχει αντίστροφο. Η ορίζουσα της μήτρας που αντιστοιχεί στον τελεστή $T - \alpha\mathbf{I}$ είναι μηδέν.

Η τελευταία αυτή συνθήκη μας δίνει και ένα τρόπο να βρίσκουμε της ιδιοτιμές. Μηδενίζουμε την ορίζουσα της μήτρας $T - \alpha\mathbf{I}$ και βρίσκουμε μια αλγεβρική εξίσωση ως προς α βαθμού n

$$|\mathrm{T} - \alpha\mathbf{I}| = 0$$

Η λύση της εξίσωσης αυτής μας δίνει μια τουλάχιστον λύση και το πολύ n διαφορετικές λύσεις, τις ιδιοτιμές του προβλήματος.

Θεώρημα: Οι ιδιοτιμές ενός ερμητιανού ή ενός συμμετρικού τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί, οι ιδιοτιμές ενός μοναδιαίου τελεστή είναι μιγαδικοί αριθμοί με μέτρο την μονάδα και οι ιδιοτιμές ενός προβολικού τελεστή είναι ή το 0 ή το 1.

Απόδειξη: Υποθέτουμε ότι ο τελεστής H είναι ερμητιανός. Αν α είναι μια ιδιοτιμή με ιδιοσυνάρτηση ψ τότε $H\psi = \alpha\psi$ και

$$< \psi|H\psi > = < \psi|\alpha\psi > = \alpha < \psi|\psi >$$

$$< H\psi|\psi > = < \alpha\psi|\psi > = \alpha^* < \psi|\psi >$$

Ομως επειδή ο τελεστής H είναι ερμητιανός, τα πρώτα μέλη των παραπάνω ισοτήτων είναι ίσα, $<\psi|H\psi>=<H\psi|\psi>$ και επομένως

$$\alpha = \alpha^*$$

Αρα ο α είναι ένας πραγματικός αριθμός.

Υποθέτουμε ότι ο τελεστής U είναι μοναδιαίος. Αν α είναι μια ιδιοτιμή με ιδιοσυνάρτηση ψ τότε $U\psi = \alpha\psi$ και επομένως

$$<\psi|\psi>=<U\psi|U\psi>=<\alpha\psi|\alpha\psi>=\alpha\alpha^*<\psi|\psi>\Longrightarrow$$
$$|\alpha|^2 = 1$$

Τέλος υποθέτουμε ότι ο τελεστής P είναι ένας προβολικός τελεστής. Αν α είναι μια ιδιοτιμή με ιδοσυνάρτηση ψ τότε $P\psi = \alpha\psi$ και επομένως

$$P^2\psi = P(P\psi) = P\alpha\psi = \alpha^2\psi$$

Επειδή ο P είναι προβολικός ισχύει

$$P^2\psi = P\psi \quad \Longrightarrow \quad \alpha^2\psi = \alpha\psi \quad \Longrightarrow \quad \alpha^2 = \alpha$$

Δηλαδή $\alpha = 1$ ή $\alpha = 0$.

Παρατήρηση: Για τον προβολικό τελεστή αποδεικνύεται γενικότερα ότι

$$P\sigma(P) = \{0, 1\} \qquad\qquad C\sigma(P) = R\sigma(T) = \emptyset$$

Οι ιδιοτιμές είναι εκφυλισμένες.

Θεώρημα: Δυο ιδιοδιανύσματα ενός ερμητιανού ή ενός συμμετρικού τελεστή που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι μεταξύ τους ορθογώνια. Το ίδιο ισχύει και για τους μοναδιαίους τελεστές.

Απόδειξη: Υποθέτουμε ότι ο τελεστής H είναι ερμητιανός. Αν ψ_1, ψ_2 δυο ιδιοδιανύσματα με ιδιοτιμές α_1, α_2 αντιστοίχως όπου $\alpha_1\ \alpha_2 \in \Re$ και $\alpha_1 \neq \alpha_2$ τότε

$$(\alpha_1 - \alpha_2)<\psi_1|\psi_2>=<\alpha_1\psi_1|\psi_2>-<\psi_1|\alpha_2\psi_2>=$$
$$<H\psi_1|\psi_2>-<\psi_1|H\psi_2>=0 \quad \Longrightarrow \quad <\psi_1|\psi_2>=0$$

Υποθέτουμε ότι ο τελεστής U είναι ένας μοναδιαίος τελεστής. Αν ψ_1, ψ_2 είναι δυο ιδιοδιανύσματα με αντίστοιχες ιδιοτιμές α_1, α_2 με $\alpha_1 \neq \alpha_2$ τότε ισχύει $\alpha_1^{-1}\alpha_2 = \alpha_1^*\alpha_2 \neq 1$. Αρα έχουμε

$$\alpha_1^*\alpha_2<\psi_1|\psi_2>=<\alpha_1\psi_1|\alpha_2\psi_2>=<U\psi_1|U\psi_2>=<\psi_1|\psi_2>$$

Επειδή $\alpha_1^*\alpha_2 \neq 1$ έπεται ότι

$$<\psi_1|\psi_2>=0$$

και επομένως τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια.

Ασκήσεις

Άσκηση 3.1

Να αποδειχτεί ότι αν υπάρχει πλήρες σύνολο συναρτήσεων κάθε μια από τις οποίες είναι ιδιοσυνάρτηση των δύο παρατηρησίμων T_1 και T_2 τότε

$$[T_1, T_2] = 0$$

Να εξετάσετε αν ισχύει το αντίστροφο. Το φάσμα των ιδιοσυναρτήσεων των τελεστών δεν είναι εκφυλισμένο.

Λύση: Υποθέτουμε ότι υπάρχει ένα πλήρες σύνολο συναρτήσεων ψ_j κάθε μια από τις οποίες είναι ιδιοσυνάρτηση δύο τελεστών T_1 και T_2. Δηλαδή

$$T_1\psi_j = \alpha_j\psi_j \qquad\qquad T_2\psi_j = \beta_j\psi_j$$

Τότε για κάθε διάνυσμα $\psi = \sum_j c_j\psi_j$ έχουμε

$$T_1T_2\psi = T_1T_2\sum_j c_j\psi_j = T_1\sum_j c_jT_2\psi_j =$$

$$T_1\sum_j c_j\beta_j\psi_j = \sum_j c_j\beta_jT_1\psi_j = \sum_j c_j\beta_j\alpha_j\psi_j$$

Ομοίως για τον τελεστή T_2T_1 βρίσκουμε

$$T_2T_1\psi = T_2\sum_j c_jT_1\psi_j = \sum_j c_j\beta_jT_2\psi_j = \sum_j c_j\alpha_j\beta_j\psi_j$$

Από τις δύο παραπάνω σχέσεις συνεπάγεται ότι

$$[T_1, T_2]\psi = 0 \quad \forall\psi \quad \Longrightarrow \quad [T_1, T_2] = 0$$

Αντιστρόφως. Υποθέτουμε ότι οι τελεστές εναλλάσσονται $[T_1, T_2] = 0$. Ο τελεστής T_1 εναλλάσσεται με οποιαδήποτε αναλυτική συνάρτηση $f(T_2)$ του

T_2. Θεωρούμε τώρα ένα ιδιοδιάνυσμα ψ_1^α του τελεστή T_1 με ιδιοτιμή ίση με α. Τότε για οποιαδήποτε αναλυτική συνάρτηση $f(T_2)$ έχουμε

$$T_1 f(T_2)\psi_1^\alpha = f(T_2)T_1\psi_1^\alpha = f(T_2)\alpha\psi_1^\alpha \quad \Longrightarrow \quad (T_1 - \alpha)f(T_2)\psi_1^\alpha = 0$$

Αναλύουμε τώρα το διάνυσμα ψ_1^α ως προς ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο από ιδιοσυναρτήσεις $\psi_2^{\beta_m}$ του τελεστή T_2 με ιδιοτιμές β_m

$$\psi_1^\alpha = \sum_m c_m \psi_2^{\beta_m}$$

Η παραπάνω σχέση γίνεται

$$(T_1 - \alpha)f(T_2)\sum_m c_m\psi_2^{\beta_m} == \sum_m (T_1 - \alpha)f(\beta_m)c_m\psi_2^{\beta_m} = 0$$

Επειδή η σχέση αυτή ισχύει για κάθε αναλυτική συνάρτηση $f(\beta_m)$ συνεπάγεται ότι κάθε όρος του αθροίσματος πρέπει να είναι μηδέν δηλαδή

$$(T_1 - \alpha)\psi_2^{\beta_m} = 0 \quad \Longrightarrow \quad T_1\psi_2^{\beta_m} = \alpha\psi_2^{\beta_m}$$

Αρα οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_2^{\beta_m}$ του T_2 είναι και ιδιοσυναρτήσεις του T_1.

Άσκηση 3.2

Να αποδειχτούν οι σχέσεις

$$[\mathrm{AB}, \Gamma] = \mathrm{A}[\mathrm{B}, \Gamma] + [\mathrm{A}, \Gamma]\mathrm{B}$$

$$[\mathrm{A}, \mathrm{B}^n] = ncB^{n-1} \quad \text{όπου} \quad [A, B] = c \in C$$

Εφαρμόστε τον τύπο για να υπολογίζεται τους μεταθέτες

$$[q, p^2] \qquad\qquad [q^2, p] \qquad\qquad [q^2, p^3]$$

Απόδειξη: Η πρώτη ταυτότητα αποδεικνύεται εύκολα από το ορισμό του μεταθέτη. Εχουμε

$$\mathrm{A}[\mathrm{B}, \Gamma] + [\mathrm{A}, \Gamma]\mathrm{B} = \mathrm{A}(\mathrm{B}\Gamma - \Gamma\mathrm{B}) + (\mathrm{A}\Gamma - \Gamma\mathrm{A})\mathrm{B} =$$

$$\mathrm{AB\Gamma - A\Gamma B + A\Gamma B - \Gamma AB = AB\Gamma - \Gamma AB = [AB, \Gamma]}$$

Η δεύτερη ταυτότητα θα αποδειχτεί με την επαγωγική μέθοδο.

Το πρώτο βήμα της μεθόδου είναι να αποδειχτεί η ταυτότητα για $n = 1$.

Για $n = 1$ η σχέση γίνεται $[\mathrm{A}, \mathrm{B}] = c$ που ισχύει προφανώς.

Το δεύτερο βήμα της μεθόδου είναι το εξής:

Υποθέτουμε ότι η σχέση ισχύει για $n = k$ και θα αποδείξουμε ότι ισχύει για $n = k + 1$. Εχουμε

$$[\mathrm{A}, \mathrm{B}^{k+1}] = [\mathrm{A}, \mathrm{B}B^k] = B[A, B^k] + [A, B]B^k$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την πρώτη ταυτότητα της άσκησης. Για τον μεταθέτη $[A, B^k]$ όμως ισχύει η ταυτότητα από την υπόθεση. Επομένως έχουμε

$$[\mathrm{A}, \mathrm{B}^{k+1}] = \mathrm{B}kc\mathrm{B}^{k-1} + cB^k = kc\mathrm{B}^k + cB^k = (k+1)c\mathrm{B}^k$$

που είναι η προς απόδειξη σχέση για $n = k + 1$. Αρα η σχέση αποδείχτηκε.

Για να εφαρμόσουμε την σχέση θα υπολογίσουμε πρώτα τον μεταθέτη $\left[\frac{d}{dx}, x\right]$. Αν $f(x)$ μια παραγωγήσιμη συνάρτηση τότε έχουμε

$$\left[\frac{d}{dx}, x\right] f(x) = \left(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx}\right) f(x) = \frac{d}{dx}\left(xf(x)\right) - x\frac{df(x)}{dx} =$$

$$f(x) + x\frac{df(x)}{dx} - x\frac{df(x)}{dx} = f(x) \quad \Longrightarrow \quad \left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1$$

Επομένως ο μεταθέτης των τελεστών της θέσης και της ορμής είναι

$$[q, p] = \left[x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right] = -i\hbar\left[x, \frac{d}{dx}\right] = i\hbar = c$$

Οι ζητούμενοι μεταθέτες κατά συνέπεια είναι

$$[q, p^2] = 2cp = 2i\hbar p \qquad\qquad [q^2, p] = 2cq = 2i\hbar q$$

Για την απόδειξη της τρίτης σχέσης θα εφαρμόσουμε την ταυτότητα δυό φορές. Βρίσκουμε

$$\left[q^2, p^3\right] = q\left[q, p^3\right] + \left[q, p^3\right]q = 3i\hbar qp^2 + 3i\hbar p^2 q$$

Άσκηση 3.3

Να βρεθεί πότε ένας διαφορικός τελεστής β′ τάξης της μορφής

$$T = a(x)\frac{d^2}{dx^2} + b(x)\frac{d}{dx} + c(x)$$

είναι ερμητιανός.

Λύση: Θεωρούμε δύο παραγωγίσιμες συναρτήσεις ορισμένες στον χώρο $L^2(\alpha, \beta)$. Η απόδειξη είναι όμοια και για τον χώρο $L^2(-\infty, \infty)$. Θα υποθέσουμε επί πλέον, για την απλούστευση των εκφράσεων, ότι οι συναρτήσεις του πεδίου ορισμού του τελεστή αλλά και οι συντελεστές $\alpha(x)$, $b(x)$ και $c(x)$ είναι πραγματικές. Για την λύση του προβλήματος θα σχηματίσουμε το εσωτερικό γινόμενο $< f(x)|Tg(x) >$ και θα προσπαθήσουμε να μεταφέρουμε την δράση του τελεστή στην πρώτη συνάρτηση $f(x)$ του εσωτερικού γινομένου.

Θα χρησιμοποιήσουμε κατά παράγοντες ολοκλήρωση. Εχουμε

$$< f(x)|Tg(x) >=< f(x)| \left[a(x)\frac{d^2}{dx^2} + b(x)\frac{d}{dx} + c(x)\right] g(x) >=$$

$$< a(x)f(x)|\frac{d^2}{dx^2}g(x) > + < b(x)f(x)|\frac{d}{dx}g(x) > + < c(x)f(x)|g(x) >$$

Η δράση του διαφορικού τελεστή μεταφέρεται στην πρώτη συνάρτηση με ολοκλήρωση κατά παράγοντες. Για τον πρώτο όρο της παραπάνω σχέσης έχουμε

$$< af|\frac{d^2}{dx^2}g >= \int_\alpha^\beta af\frac{d^2}{dx^2}gdx = \left[af\frac{d}{dx}g\right]_\alpha^\beta - \int_\alpha^\beta \left(\frac{d}{dx}af\right)\frac{d}{dx}gdx =$$

$$[afg']_\alpha^\beta - \left[\left(\frac{d}{dx}af\right)g\right]_\alpha^\beta + \int_\alpha^\beta \left(\frac{d^2}{dx^2}af\right)gdx = [afg' - (a'f + af')\,g]_\alpha^\beta +$$

$$\int_\alpha^\beta \left(\frac{d^2}{dx^2}af\right)gdx = [afg' - a'fg - af'g]_\alpha^\beta + \int_\alpha^\beta \left(\frac{d^2}{dx^2}af\right)gdx$$

Ο δεύτερος όρος γίνεται

$$< bf|\frac{d}{dx}g >= \int_\alpha^\beta bf\frac{d}{dx}gdx = [bfg]_\alpha^\beta - \int_\alpha^\beta \left(\frac{d}{dx}bf\right)gdx$$

Μαζεύουμε τέλος όλους του όρους και βρίσκουμε

$$< f(x)|Tg(x) >= [afg' - a'fg - af'g]_\alpha^\beta + [bfg]_\alpha^\beta + \int_\alpha^\beta \left(\frac{d^2}{dx^2}af\right) gdx -$$

$$\int_\alpha^\beta \left(\frac{d}{dx}bf\right) gdx + \int_\alpha^\beta cfgdx = [afg' - a'fg - af'g + bfg]_\alpha^\beta +$$

$$\int_\alpha^\beta \left(\left(\frac{d^2}{dx^2}af\right) g - \left(\frac{d}{dx}bf\right) g + cfg\right) dx = [afg' - a'fg - af'g + bfg]_\alpha^\beta +$$

$$\int_\alpha^\beta \left(a\frac{d^2 f}{dx^2}g + (2a' - b)\frac{df}{dx}g + a''fg - b'fg + cfg\right) dx$$

Αν οι επιφανειακοί όροι είναι μηδέν τότε από τις παραπάνω σχέσεις συνεπάγεται ότι

$$< f|Tg >=< T^+ f|g > \quad \text{όπου} \quad T^+ = a\frac{d^2}{dx^2} + (2a' - b)\frac{d}{dx} + a'' - b' + c$$

Ενας τελεστής είναι ερμητιανός αν ισχύει η σχέση $T = T^+$ επομένως πρέπει

$$2a' - b = a \quad \text{και} \quad a'' - b' + c = c$$

Οι δύο παραπάνω σχέσεις ισχύουν όταν

$$a' = b$$

που είναι τελικά και η ζητούμενη σχέση. Ο επιφανειακός όρος γίνεται

$$[afg' - a'fg - af'g + bfg]_\alpha^\beta = [a(fg' - f'g)]_\alpha^\beta$$

Επομένως ο επιφανειακό όρος μηδενίζεται όταν οι συναρτήσεις $f(x)$ και $g(x)$ είναι τέτοιες ώστε

$$[fg' - f'g]_\alpha^\beta = 0$$

Η σχέση αυτή προσδιορίζει το πεδίο ορισμού του τελεστή.

Ο τελεστής μπορεί τέλος να γραφεί και με την ακόλουθη μορφή

$$T = a(x)\frac{d^2}{dx^2} + a'(x)\frac{d}{dx} + c(x) = \frac{d}{dx}\left(a(x)\frac{d}{dx}\right) + c(x)$$

που είναι η πιο γενική μορφή για ένα ερμητιανό διαφορικό τελεστή δεύτερης τάξης.

Άσκηση 3.4

Χρησιμοποιήστε την ακολουθία των συναρτήσεων

$$f_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\exp\left(-\frac{x}{n+1}\right) - \exp\left(-\frac{x}{n}\right)}\frac{1}{\sqrt{x}} & \text{για} \quad x > 0 \\ 0 & \text{για} \quad x = 0 \end{cases}$$

για να αποδείξετε ότι ο τελεστής $Q = x$ της θέσης δεν είναι φραγμένος και άρα ούτε συνεχής στον χώρο $L^2(-\infty, \infty)$. Αποδείξτε επίσης ότι και ο τελεστής της ορμής $P = -id/dx$ δεν είναι φραγμένος με την βοήθεια της ακολουθίας

$$f_n(x) = \exp\left(-n|x|\right)$$

Απόδειξη: Το πεδίο ορισμού του τελεστή $Q = x$ είναι το σύνολο των συναρτήσεων $f(x)$ που είναι τέτοιες ώστε οι συναρτήσεις $xf(x)$ να ανήκουν επίσης στον χώρο $L^2(-\infty, \infty)$.

Θα αποδείξουμε πρώτα ότι η ακολουθία των δοσμένων συναρτήσεων $f_n(x)$ ανήκει στο πεδίο ορισμού του τελεστή Q. Πραγματικά έχουμε

$$\|Qf_n(x)\|^2 = \|xf(x)\|^2 =< xf(x)|xf(x) >=$$

$$\int_0^\infty x^2 f_n(x) f_n(x) dx = \int_0^\infty \left[e^{-x/(n+1)} - e^{-x/n}\right] x dx =$$

$$\left[-(n+1)^2 e^{-x/(n+1)} - (n+1)xe^{-x/(n+1)} + n^2 e^{-x/n} + nxe^{-x/n}\right]_0^\infty =$$

$$(n+1)^2 - n^2 = 2n + 1 < \infty \qquad \forall n \in N$$

Επομένως η ακολουθία ανήκει στο πεδίο ορισμού του Q. Επί πλέον από την παραπάνω σχέση έχουμε $\|Qf_n\| = \sqrt{2n+1}$ που δεν συγκλίνει στο μηδέν όταν $n \to \infty$

Θα αποδείξουμε ακολούθως ότι η ακολουθία $f_n(x)$ είναι μια μηδενική ακολουθία. Εχουμε

$$\|f_n(x)\|^2 =< f_n(x)|f_n(x) >= \int_0^\infty f_n(x)f_n(x)dx =$$

$$\int_0^\infty \left[e^{-x/(n+1)} - e^{-x/n}\right] \frac{1}{x}dx = \ln(n+1) - \ln n = \ln \frac{n+1}{n} \to 0$$

όταν $n \to \infty$.

Επομένως η ακολουθία $f_n(x)$ είναι μια μηδενική ακολουθία ενώ η ακολουθία $Qf_n(x)$ δεν συγκλίνει στο μηδέν. Αρα ο τελεστής της θέσης δεν είναι συνεχής και βεβαίως ούτε φραγμένος.

Θεωρούμε σαν πεδίο ορισμού του τελεστή $P = -id/dx$ εκείνες της συναρτήσεις του $L^2(-\infty, \infty)$ που οι συναρτήσεις $Pf(x) = -idf(x)/dx$ ανήκουν επίσης στον χώρο $L^2(-\infty, \infty)$. Θα αποδείξουμε ότι η ακολουθία που μας δόθηκε ανήκει στο πεδίο ορισμού του τελεστή P. Εχουμε

$$Pf_n(x) = -i\frac{d}{dx}f_n(x) = \begin{cases} ine^{-n|x|} & \text{για} \quad x > 0 \\ \\ -ine^{-n|x|} & \text{για} \quad x < 0 \end{cases}$$

και συνεπώς βρίσκουμε

$$\|Pf_n(x)\| = n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2n|x|}dx = n < \infty \qquad\qquad \forall n \in N$$

Επομένως η ακολουθία ανήκει στο πεδίο ορισμού του P. Επί πλέον η ακολουθία $f_n(x)$ είναι μηδενική. Πραγματικά βρίσκουμε

$$\|f_n(x)\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2n|x|}dx = \frac{1}{n}$$

που συγκλίνει στο μηδέν για $n \to \infty$. Αρα για την ακολουθία που μας δόθηκε το όριο της ακολουθίας $\|Pf_n(x)\| = \sqrt{n}$ για $n \to \infty$ δεν είναι το μηδέν ενώ η ακολουθία είναι μηδενική. Επομένως ούτε αυτός ο τελεστής είναι συνεχής και ούτε φραγμένος.

Οι δύο παραπάνω τελεστές παίζουν κεντρικό ρόλο για την κβαντομηχανική είναι ερμητιανοί αλλά δεν είναι φραγμένοι. Μπορούμε να αποδείξουμε ότι ο τελεστής της θέσης Q είναι φραγμένος στον χώρο $L^2(\alpha, \beta)$ όπου $0 < \alpha < \beta$. Δυστυχώς δεν ισχύει το ίδιο για τον τελεστή της ορμής P.

Άσκηση 3.5

Ο τελεστής P της αρτιότητας (parity) ορίζεται από την σχέση

$$Pf(x) = f(-x) \qquad \forall f \in L^2(-\infty, \infty)$$

Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές του τελεστή αυτού. Να αποδειχτεί ότι είναι ερμητιανός.

Απόδειξη: Θα λύσουμε την εξίσωση των ιδιοτιμών Pf(x)=λf(x).

Εχουμε $P^2 f(x) = P[Pf(x)] = P[\lambda f(x)] = \lambda Pf(x) = \lambda^2 f(x)$.

Αλλά ισχύει επίσης $P^2 f(x) = P[Pf(x)] = P[f(-x)] = Pf(-x) = f(x)$ και επομένως βρίσκουμε

$$f(x) = \lambda^2 f(x) \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \pm 1$$

Παρατηρούμε ότι για την ιδιοτιμή $\lambda = 1$ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση ικανοποιεί την σχέση $Pf(x) = f(x) = f(-x)$. Είναι δηλαδή μια άρτια συνάρτηση. Ενώ για την ιδιοτιμή $\lambda = -1$ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση ικανοποιεί την σχέση $Pf(x) = -f(x) = f(-x)$. Είναι δηλαδή μια περιττή συνάρτηση.

Θα αποδείξουμε τώρα ότι ο τελεστής είναι ερμητιανός. Εχουμε

$$< f|Pg >= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)Pg(x)dx \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(-x)dx$$

Επιπλέον ισχύει

$$< Pf|g >= \int_{-\infty}^{\infty} (Pf(x))^* g(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(-x)g(x)dx$$

Στο ολοκλήρωμα αυτό εκτελούμε τον μετασχηματισμό $x = -y$ οπότε $dx = -dy$ και βρίσκουμε

$$< Pf|g >= -\int_{+\infty}^{-\infty} f^*(y)g(-y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(y)g(-y)dy =< f|Pg >$$

Αρα ο τελεστής είναι ερμητιανός.

Αν οι συναρτήσεις f και g αντιστοιχούν στις διαφορετικές ιδιοτιμές λ $= +1$ και λ $= -1$ αντιστοίχως τότε η μία είναι άρτια και η άλλη περιττή και άρα το γινόμενο τους fg είναι περιττή συνάρτηση και το ολοκλήρωμα τους που το συμβολίζουμε με $F(x)$ είναι άρτια συνάρτηση. Αρα έχουμε

$$< f|g >= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx = \lim_{a\to\infty} \int_{-a}^{a} f^*(x)g(x)dx = \lim_{a\to\infty} (F(a) - F(-a)) = 0$$

Δηλαδή οι ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνιες μεταξύ τους. Η πρόταση ισχύει προφανώς για κάθε ερμητιανό τελεστή.

Κεφάλαιο 4

Η θεμελίωση της κβαντομηχανικής

Στο κεφάλαιο αυτό θα διατυπώσουμε την κβαντομηχανική σαν λογισμό τελεστών σε έναν απείρων διαστάσεων χώρο Χίλμπερτ.

4.1 Μαθηματική περιγραφή των φυσικών συστημάτων

Για να περιγράψουμε μαθηματικά ένα φυσικό σύστημα πρέπει να ορίσουμε τρεις βασικές έννοιες. Την κατάσταση ενός φυσικού συστήματος, τα παρατηρήσιμα μεγέθη και τις εξισώσεις κίνησης που μας περιγράφουν την εξέλιξη του συστήματος ως προς τον χρόνο. Είναι επίσης απαραίτητο να ορίσουμε και την φυσική σημασία των μαθηματικών συμβόλων που χρησιμοποιούμε έτσι ώστε να μπορούμε να ελέγξουμε την ορθότητα της θεωρίας από τα πειραματικά δεδομένα.

Στην κλασσική φυσική, η φυσική σημασία των μαθηματικών συμβόλων είναι προφανής και δεν υπάρχουν αμφισβητήσεις. Για παράδειγμα τα μεγέθη $\vec{r}(t)$ και $m\vec{v}(t)$, παριστάνουν την θέση και την ορμή, του συστήματος ως προς κάποιο αδρανιακό σύστημα αναφοράς. Στην κβαντομηχανική το θέμα αυτό είναι περισσότερο σύνθετο και ίσως ακόμα και σήμερα ανοικτό. Η περισσότερο αποδεκτή ερμηνεία των μαθηματικών συμβόλων που χρησιμοποιεί η κβαντομηχανικής είναι η ερμηνεία της σχολής της "Κοπεγχάγης", η οποία είναι ουσιαστικά μια στατιστική θεωρία.

Στην κλασσική μηχανική, η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται με την βοήθεια των κανονικών μεταβλητών q και p, που παριστάνουν την θέση και την ορμή του συστήματος. Η δυναμική του συστήματος περιγράφεται από τις μεταβλητές $q(t)$ και $p(t)$, που είναι λύσεις των κανονικών εξισώσεων κίνησης του Χάμιλτον

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad\qquad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Η συνάρτηση $H(p,q,t)$ είναι χαρακτηριστική για το σύστημα που εξετάζουμε και ονομάζεται χαμιλτονιανή. Για τα συστήματα που θα εξετάσουμε εδώ, υποθέτουμε ότι υπάρχει μια τέτοια συνάρτηση και παριστάνει την συνολική ενέργεια του συστήματος

$$H(p,q,t) = \frac{p^2}{2m} + V(q,t)$$

Οι κανονικές εξισώσεις κίνησης είναι ένα σύστημα δύο διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης και είναι ισοδύναμες προς την γνωστή εξίσωση του Νεύτωνα και την εξίσωση του Λαγκράνζ

$$\vec{F} = m\vec{\gamma} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \qquad\qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

που είναι διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης.

Ετσι με την πάροδο του χρόνου το κλασσικό σύστημα διαγράφει μια σαφή και καθορισμένη τροχιά στον χώρο. Σε κάθε χρονική στιγμή το σύστημα έχει μια ορισμένη θέση και μια ορισμένη ορμή (ταχύτητα). Ο χώρος των κανονικών συντεταγμένων και των ορμών, που ονομάζεται χώρος των φάσεων.

Τα παρατηρήσιμα μεγέθη της κλασσικής μηχανικής είναι συναρτήσεις των κανονικών μεταβλητών και του χρόνου. Δεν υπάρχει ουσιώδης διαφορά ανάμεσα στα καταστατικά μεγέθη και στα παρατηρήσιμα μεγέθη της κλασσικής μηχανική. Ενα μέγεθος $f(p,q,t)$ μεταβάλλεται ως προς τον χρόνο σύμφωνα με την εξίσωση

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$$

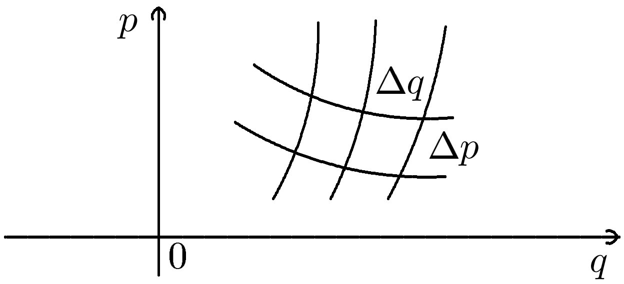
Η έκφραση $\{f,H\}$ είναι η αγκύλη Πουασόν των μεγεθών H και f και ορίζεται από την σχέση

$$\{f, H\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p}$$

Στην κβαντομηχανική μια τέτοια περιγραφή είναι αδύνατη. Η θέση και η ορμή των συστημάτων δεν είναι δυνατόν να οριστούν ταυτόχρονα εφ' όσον δεν είναι δυνατόν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Τα δύο αυτά μεγέθη είναι συμπληρωματικά και οι διασπορές τους ικανοποιούν την ανισότητα του Χάιζενμπεργκ

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$$

Αν επιμένουμε να διατηρήσουμε τον χώρο των φάσεων στην κβαντομηχανική τότε ο χώρος αυτός δεν είναι δυνατόν να περιέχει σημεία αλλά κυψελίδες με εμβαδόν $S \geq \hbar/2$.



Σχήμα 4.1
Το εμβαδόν των κυψελίδων στον χώρο των φάσεων είναι $\geq \hbar/2$

Η κατάσταση ενός κβαντομηχανικού συστήματος περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r}, t)$, που είναι ένα διάνυσμα ενός κατάλληλου χώρου Χίλμπερτ. Τα παρατηρήσιμα μεγέθη παρίστανται από ερμητιανούς τελεστές επί αυτού του χώρου Χίλμπερτ. Τα καταστατικά διανύσματα, οι κυματοσυναρτήσεις και οι τελεστές δεν είναι απευθείας παρατηρήσιμα μεγέθη. Τα μεγέθη εκείνα που υπόκεινται σε πειραματικές επαληθεύσεις είναι για παράδειγμα οι ιδιοτιμές των τελεστών και οι μέσες τιμές. Ετσι η κβαντομηχανική έχει την ιδιομορφία να υπάρχουν πολλές παραστάσεις, που όλες πρέπει φυσικά να οδηγούν στις ίδιες ιδιοτιμές και στις ίδιες μέσες τιμές.

Στην παράσταση του Σρέντινγκερ, ο δυναμικός νόμος αναφέρεται στην χρονική εξέλιξη της κατάστασης του συστήματος και ονομάζεται εξίσωση του Σρέντινγκερ. Αντίθετα στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ, ο δυναμικός νόμος αναφέρεται στην χρονική εξέλιξη των παρατηρήσιμων μεγεθών και ονομάζεται εξίσωση του Χάιζενμπεργκ. Υπάρχουν επίσης και άλλες "ενδιάμεσες" παραστάσεις, όπου η χρονική εξέλιξη αποδίδεται εν μέρει στις κυματοσυναρτήσεις και εν μέρει στους τελεστές.

4.2 Οι θεμελιώδεις προτάσεις της κβαντομηχανικής

1. *Η Μαθηματική περιγραφή των φυσικών καταστάσεων*
   Η κατάσταση ενός φυσικού συστήματος περιγράφεται από μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη μιγαδική συνάρτηση $\psi(\vec{r}, t)$. Η συνάρτηση αυτή ανήκει σε έναν κατάλληλο χώρο Χίλμπερτ και περιέχει όλες τις πληροφορίες για το σύστημα. Είναι λύση της κυματικής εξίσωσης τους Σρέντινγκερ και ονομάζεται κυματοσυνάρτηση.
2. *Η Μαθηματική περιγραφή των φυσικών μεγεθών*
   Σε ένα φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας γραμμικός και ερμητιανός τελεστής. Οι μόνες δυνατές τιμές που μπορούν να προκύψουν από τις μετρήσεις των μεγεθών είναι οι ιδιοτιμές των αντίστοιχων τελεστών.
3. *Ο Κβαντικός νόμος της κίνησης παράσταση του Σρέντινγκερ*
   Η χρονική εξέλιξη ενός συστήματος δίνεται από την εξίσωση του Σρέντινγκερ
   $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = H\psi(\vec{r}, t)$$
   όπου $H\left(-i\hbar\vec{\nabla}, \vec{r}, t\right)$ είναι ο τελεστής Χάμιλτον του συστήματος.
4. *Η Στατιστική ερμηνεία του Φορμαλισμού*
   Υποθέτουμε ότι η κατάσταση του συστήματος γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων ψ_n του αντίστοιχου τελεστή T του μεγέθους M της μορφής
   $$\psi = \sum_n \alpha_n\psi_n \quad \text{όπου} \quad \|\psi\|^2 = \sum_n |\alpha_n|^2 = 1$$
   Τότε κατά την μέτρηση του μεγέθους θα εμφανιστεί η ιδιοτιμή λ_k με πιθανότητα $|\alpha_k|^2$.
   Η μέση τιμή των μετρήσεων ενός μεγέθους δίνεται από τον τύπο
   $$\langle m\rangle =< \psi|T\psi >= \int \psi^* T\psi dV$$

5. *Ο Νόμος της κβαντικής μέτρησης*

   Η κατάσταση ενός συστήματος μετά την μέτρηση δίνεται από την ιδιοσυνάρτηση της ιδιοτιμής που μετρήθηκε. Η μέτρηση δηλαδή δρά σαν ένα φίλτρο που αφήνει να περάσουν μόνο τα συστήματα με την συγκεκριμένη τιμή του μεγέθους, αρχή του φιλτραρίσματος.

Παράδειγμα: Υποθέτουμε ότι θέλουμε να μετρήσουμε την τιμή ενός μεγέθους ας πούμε την ορμή ενός σωματιδίου. Το μέγεθος αυτό μπορεί να πάρει πολλές διακριτές τιμές που είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή. Κατά την στατιστική ερμηνεία το ένα σωματίδιο θεωρείται ότι είναι ισοδύναμο με πολλά άλλα εν δυνάμει σωματίδια, που το καθένα έχει ορμή ίση με μια από τις δυνατές τιμές. Υποθέτουμε ότι στα 100 αυτά σωματίδια τα 10 έχουν ορμή ίση με 2 μονάδες, τα 15 έχουν ορμή ίση με 3 μονάδες κ.λ.π. Κατά την μέτρηση γίνεται στην πραγματικότητα ένα πείραμα τύχης. Διαλέγουμε στην τύχη ένα από τα σωματίδια αυτά και επομένως υπάρχει κάποια πιθανότητα να διαλέξουμε το σωμάτιο με κάποια συγκεκριμένη ορμή. Για παράδειγμα η τιμή της ορμής του σωματιδίου αυτού είναι ίση με 2 μονάδες με πιθανότητα 10/100, ίση με 3 μονάδες με πιθανότητα 15/100, κ.λ.π.

4.3 Μαθηματική περιγραφή των φυσικών καταστάσεων

Στην παράσταση του Σρέντινγκερ της κβαντομηχανικής, η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από μια μιγαδική συνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$. Η συνάρτηση αυτή εξαρτάται μόνο από την θέση $\vec{r}$. Η συνάρτηση αυτή είναι ένα κύμα και ικανοποιεί μια κυματική εξίσωση, την εξίσωση του Σρέντινγκερ. Ετσι παρουσιάζονται τα φαινόμενα της συμβολής και της περίθλασης. Η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ δεν παριστάνει κανένα παρατηρήσιμο κλασσικό κύμα. Είναι ένα “ κύμα πιθανότητας ”. Η φυσική σημασία της καθορίζεται από την εξής παραδοχή του Μπορν (σχολή Κοπεγχάγης).

Το μέγεθος

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$$

είναι μια πυκνότητα πιθανότητας για την θέση του συστήματος. Δηλαδή η ποσότητα $|\psi(\vec{r},t)|^2dxdydz$ είναι ίση με την πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα που περιγράφεται από την $\psi(\vec{r},t)$ κατά την χρονική στιγμή t, στην περιοχή του χώρου μεταξύ x και $x+dx$, y και $y+dy$, z και $z+dz$. Το ολοκλήρωμα του $|\psi|^2$ σε όλο τον χώρο πρέπει να είναι ίσο με την μονάδα, διότι είναι ίσο με την πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα κάπου στον χώρο. Αρα η κυματοσυνάρτηση πρέπει να ικανοποιεί την ακόλουθη συνθήκη κανονικοποίησης.

$$\|\psi\|^2 = \int_{\Re^3} |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

Κατά συνέπεια από τις λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ, μόνο εκείνες που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες είναι φυσικά αποδεκτές. Κατά εξαίρεση για τα ελεύθερα σωμάτια χρησιμοποιούμε πολλές φορές κυματοσυναρτήσεις της μορφής των επιπέδων κυμάτων

$$\psi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

που δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις. Οι συναρτήσεις αυτές μπορούν να κανονικοποιηθούν με την βοήθεια του δέλτα συναρτησιακού του Ντιράκ.

Μία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ μπορεί να κανονικοποιηθεί αν την πολλαπλασιάσουμε με την σταθερά $1/\|\psi\|$. Η συνάρτηση

$$\psi' = \frac{1}{\|\psi\|}\psi$$

είναι προφανώς κανονικοποιημένη στην μονάδα.

Είναι τώρα φανερό ότι η $\psi(\vec{r},t)$ είναι ένα διάνυσμα ενός κατάλληλου χώρου Χίλμπερτ. Αν για παράδειγμα το σύστημα περιέχει Ν σωμάτια (χωρίς σπιν) που κινείται στον τρισδιάστατο χώρο, τότε η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι ένα διάνυσμα του χώρου $L^2(\Re^{3N})$. Επειδή αν πολλαπλασιάσουμε την κυματοσυνάρτηση ψ με μια σταθερά $c \in C$ όπου $|c| = 1$ δεν προσθέτουμε πληροφορίες για το σύστημα, λέμε συνήθως ότι η κατάσταση ενός συστήματος είναι μια διεύθυνση ενός χώρου Χίλμπερτ.

Ολες οι κυματοσυναρτήσεις της μορφής

$$e^{i\alpha}\psi(\vec{r},t), \qquad \alpha \in \Re$$

παριστάνουν το ίδιο φυσικό σύστημα.

Θα αποδείξουμε ότι η εξίσωση της κίνησης του Σρέντινγκερ είναι τέτοια ώστε, το ολοκλήρωμα

$$\|\psi(\vec{r},t)\|^2 = \int_{\Re^3} |\psi(\vec{r},t)|^2 dV$$

να διατηρείται ως προς τον χρόνο. Για την απόδειξη παραγωγίζουμε το $\|\psi\|^2$ ως προς τον χρόνο. Εχουμε

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\|^2 = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} <\psi|\psi> = <-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}|\psi> + <\psi|i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}>$$

Στην σχέση αυτή αντικαθιστούμε τις παραγώγους των κυματοσυναρτήσεων από την εξίσωση Σρέντινγκερ. Βρίσκουμε

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\|^2 = <-H\psi|\psi> + <\psi|H\psi> = <\psi|H\psi> - <H\psi|\psi>$$

Αλλά ο τελεστής H είναι ερμητιανός, άρα η παραπάνω σχέση είναι ίση με το μηδέν δηλαδή

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\|^2 = 0$$

Επομένως το $\|\psi(\vec{r},t)\|^2$ είναι ανεξάρτητο από τον χρόνο. Βλέπουμε για μια ακόμα φορά πόσο απαραίτητο είναι οι τελεστές που παριστάνουν παρατηρήσιμα μεγέθη να είναι ερμητιανοί.

4.4 Μαθηματική περιγραφή των φυσικών μεγεθών

Σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας γραμμικός και ερμητιανός τελεστής. Ο τελεστής αυτός κατασκευάζεται από την κλασσική έκφραση του μεγέθους με την αντικατάσταση των βασικών τελεστών

$$\vec{r} \longmapsto \vec{r} = (x, y, z) \qquad \vec{p} \longmapsto -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Επί πλέον στο φυσικό μέγεθος E ενέργεια αντιστοιχεί ο τελεστής

$$\mathrm{E} \longmapsto i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Αν θέλουμε να βρούμε τον τελεστή της χαμιλτονιανής τότε αντικαθιστούμε στην κλασσική έκφραση

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$

τους βασικούς τελεστές και έχουμε

$$H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)^2 + V(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)$$

Ο τελεστής αυτός εκφράζει την ενέργεια του συστήματος στην οποία αντιστοιχεί, επίσης και ο τελεστής $\mathrm{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, άρα έχουμε την εξής τυπική ισότητα των δύο αυτών τελεστών

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

η οποία είναι ισοδύναμη με την εξίσωση

$$H\psi = \mathrm{E}\psi$$

Η εξίσωση αυτή είναι η εξίσωση Σρέντινγκερ και γράφεται αναλυτικά

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r},t)$$

Θα δείξουμε τώρα ότι ένα επίπεδο κύμα είναι ιδιοσυνάρτηση των τελεστών $\vec{p}$ και E με αντίστοιχες ιδιοτιμές $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ και $\mathrm{E} = \hbar\omega$ δηλαδή τις γνωστές πειραματικές σχέσεις.

Πράγματι για την ορμή έχουμε

$$\vec{p}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)} = -i\hbar\vec{\nabla}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)} = \hbar\vec{k}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)}$$

και για την ενέργεια

$$Ee^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)} = \hbar\omega e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t)}$$

Επίσης οι τελεστές αυτοί όπως ορίστηκαν, ικανοποιούν τις σχέσεις εναλλαγής

$$[x,p_x] = [y,p_y] = [z,p_z] = i\hbar$$

που όπως θα δούμε οδηγούν στις σχέσεις αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ. Συνεπώς ο ορισμός τους δεν είναι ούτε τυχαίος ούτε αυθαίρετος.

Θα βρούμε ακολούθως τις ιδιοσυναρτήσεις και της ιδιοτιμές των τελεστών της θέσης.

Η εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή της θέσης στην x διεύθυνση είναι

$$x\psi_\xi(x) = \xi\psi_\xi(x) \Longrightarrow (x-\xi)\psi_\xi(x) = 0$$

Η εξίσωση αυτή δεν έχει λύση στον χώρο των συναρτήσεων. Θα αναζητήσουμε λύση στον χώρο των κατανομών. Η λύση της για κάθε $\xi \in \Re$ είναι το συναρτησιακό του Ντιράκ

$$\psi_\xi(x) = \delta_\xi(x) = \delta(x-\xi)$$

Το φάσμα των ιδιοτιμών του τελεστή της θέσης είναι συνεχές.

Η παραπάνω παράσταση των βασικών τελεστών $\vec{r}$ και $\vec{p}$ της κβαντομηχανικής ονομάζεται συνήθως $q-$ παράσταση ή παράσταση στον χώρο των θέσεων. Εκείνο όμως που μας ενδιαφέρει στην κβαντομηχανική είναι οι ιδιοτιμές, οι μέσες τιμές και όχι η αναλυτική παράσταση των διαφόρων τελεστών. Ετσι μπορεί κανείς να ορίσει διαφορετικά τους τελεστές αυτούς.

Μια άλλη ισοδύναμη παράσταση των τελεστών αυτών είναι και η εξής

$$\vec{r} \longmapsto i\hbar\vec{\nabla}_p = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z}\right), \qquad \vec{p} \longmapsto \vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$$

που ονομάζεται $p-$ παράσταση ή παράσταση στον χώρο των ορμών. Προφανώς και οι τελεστές αυτοί ικανοποιούν την ίδια σχέση εναλλαγής.

Στην παράσταση αυτή το φυσικό σύστημα περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\varphi(\vec{p},t)$ που εξαρτάται μόνο από την ορμή. Η αντίστοιχη εξίσωση κίνησης για την κυματοσυνάρτηση αυτή είναι

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{p},t) = \left[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V\left(i\hbar\vec{\nabla}_p, t\right)\right]\varphi(\vec{p},t)$$

που είναι πάλι μια εξίσωση Σρέντινγκερ. Οι κυματοσυναρτήσεις στις δύο παραστάσεις συνδέονται με τους εξής μετασχηματισμούς του Φουριέ

$$\varphi(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r},t)d^3\vec{r} \quad \psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\varphi(\vec{p},t)d^3\vec{p}$$

Η σχέσεις αυτές αποδεικνύουν και την ισοδυναμία των δύο παραστάσεων. Η κυματοσυνάρτηση $\varphi(\vec{p},t)$ πρέπει επίσης να είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα.

$$\|\varphi(\vec{p},t)\|^2 = \int_{\Re^3} |\varphi(\vec{p},t)|^2 d^3\vec{p} = 1$$

Παράδειγμα: Οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής στις δύο αυτές παραστάσεις με ιδιοτιμή p' είναι αντιστοίχως οι εξής

$$\psi(p) = e^{\frac{i}{\hbar}p'x} \quad \text{και} \quad \varphi(p) = \delta(p-p')$$

Οι δύο αυτές ιδιοσυναρτήσεις συνδέονται με το γνωστό μετασχηματισμό Φουριέ

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px}e^{\frac{i}{\hbar}p'x}dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}dx = \delta(p-p')$$

Θεώρημα: Αν T_1 και T_2 είναι οι ερμητιανοί τελεστές που αντιστοιχούν στα μεγέθη M_1 και M_2 αντιστοίχως, τότε ισχύει η ακόλουθη γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας

$$(\Delta m_1)(\Delta m_2) \geq \left|\left\langle \frac{1}{2i}\left[T_1, T_2\right]\right\rangle\right|$$

Θα συμβολίσουμε την μέση τιμή ενός μεγέθους m με $\langle m\rangle$, δεν πρέπει να γίνεται σύγχυση με το εσωτερικό γινόμενο.

Απόδειξη: Η μέση τιμή ενός μεγέθους m_1 δίνεται από την σχέση

$$\langle m_1\rangle =<\psi|T_1\psi>$$

Για την διασπορά του μεγέθους m_1 έχουμε

$$(\Delta m_1)^2 = \left\langle (T_1 - \langle m_1\rangle)^2\right\rangle =<\psi|(T_1-\langle m_1\rangle)^2\psi>$$

Επειδή ο τελεστής T_1 είναι ερμητιανός και φυσικά η μέση τιμή του είναι ένας πραγματικός αριθμός, συνεπάγεται ότι και ο τελεστής $T_1 - \langle m_1\rangle$ είναι ερμητιανός, άρα

$$(\Delta m_1)^2 =<(T_1-\langle m_1\rangle)\psi|(T_1-\langle m_1\rangle)\psi>= \|(T_1-\langle m_1\rangle)\psi\|^2$$

Παρατηρούμε ότι η μέση τιμή του μεγέθους εκφράζεται με την βοήθεια του εσωτερικού γινομένου του χώρου και η διασπορά εκφράζεται με την βοήθεια της στάθμης του διανυσματικού χώρου. Εχουμε τότε ότι

$$(\Delta m_1)^2(\Delta m_2)^2 = \|(T_1 - \langle m_1\rangle)\psi\|^2\|(T_2 - \langle m_2\rangle)\psi\|^2$$

Ορίζουμε τους ερμητιανούς τελεστές C_1 και C_2 από τις σχέσεις

$$C_1 = T_1 - \langle m_1\rangle \quad \text{και} \quad C_2 = T_2 - \langle m_2\rangle$$

τότε έχουμε

$$(\Delta m_1)^2(\Delta m_2)^2 = \|C_1\psi\|^2\|C_2\psi\|^2$$

Από την ανισότητα του Σβαρτς βρίσκουμε

$$(\Delta m_1)^2(\Delta m_2)^2 \geq | < C_1\psi|C_2\psi > |^2 = | < \psi|C_1C_2\psi > |^2$$

όπου μεταφέραμε τον τελεστή C_1 στο δεύτερο διάνυσμα του εσωτερικού γινομένου χωρίς να τον αλλάξουμε διότι είναι ερμητιανός. Αν θέσουμε

$$\begin{aligned} \mathrm{A} &= \frac{1}{2}\left(C_1C_2 + C_2C_1\right) \quad \text{και} \\ \mathrm{B} &= \frac{1}{2i}\left(C_1C_2 - C_2C_1\right) = \frac{1}{2i}\left[T_1, T_2\right] \end{aligned}$$

τότε βρίσκουμε

$$(\Delta m_1)^2(\Delta m_2)^2 \geq | < \psi|(\mathrm{A} + i\mathrm{B})\psi > |^2 = | \langle \mathrm{A}\rangle + i\langle \mathrm{B}\rangle |^2$$

Αλλά οι τελεστές Α και Β όπως ορίστηκαν είναι ερμητιανοί και συνεπώς οι μέσες τιμές τους είναι πραγματικοί αριθμοί. Επομένως έχουμε

$$(\Delta m_1)^2(\Delta m_2)^2 \geq \langle \mathrm{A}\rangle^2 + \langle \mathrm{B}\rangle^2 \geq \langle \mathrm{B}\rangle^2$$

από την οποία συνεπάγεται τέλος η ζητούμενη σχέση

$$(\Delta m_1)(\Delta m_2) \geq \left|\left\langle \frac{1}{2i}\left[T_1, T_2\right]\right\rangle\right|$$

Παράδειγμα: Σαν ένα παράδειγμα θα υπολογίσουμε την σχέση αβεβαιότητας για την θέση x και την ορμή p_x ενός συστήματος. Οι αντίστοιχοι τελεστές είναι

$$T_1 = x \qquad T_2 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Από την γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας έχουμε

$$\Delta x \Delta p_x \geq \left|\left\langle \frac{1}{2i}\left[x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\right\rangle\right| = \left|\left\langle \frac{1}{2i} i\hbar \right\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}$$

δηλαδή την σχέση αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ.

Παρατήρηση: Η μέση τιμή ενός μεγέθους T δίνεται ως γνωστόν από την σχέση

$$\langle T \rangle = \sum_n |\alpha_n|^2 \lambda_n$$

όπου λ_n είναι οι πιθανές τιμές που παίρνει ένα μέγεθος και $|\alpha_n|^2$ οι αντίστοιχες πιθανότητες τους. Θα αποδείξουμε ότι ο κλασσικός αυτός ορισμός της μέσης τιμής συμπίπτει με τον ορισμό της κβαντομηχανικής. Πράγματι

$$\langle T \rangle = <\psi|T\psi> = <\sum_n \alpha_n \psi_n | T \sum_m \alpha_m \psi_m > = \sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m <\psi_n|T\psi_m> =$$
$$\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \lambda_m <\psi_n|\psi_m> = \sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \lambda_m \delta_{nm} = \sum_n |\alpha_n|^2 \lambda_n$$

4.5 Η κβαντομηχανική μέτρηση

Οι μόνες τιμές που μπορεί να πάρει ένα φυσικό μέγεθος είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή. Για να είναι οι τιμές αυτές πραγματικοί αριθμοί είναι απαραίτητο οι τελεστές να είναι ερμητιανοί. Το γεγονός ότι ορισμένα μεγέθη παίρνουν ορισμένες μόνο τιμές μεταφέρεται στο γεγονός ότι ορισμένοι τελεστές έχουν διακεκριμένο φάσμα. Επίσης η ιδιότητα αυτή του ερμητιανού των τελεστών, εξασφαλίζει την ορθογωνιότητα των ιδιοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές. Αυτό όμως δεν είναι αρκετό για να προχωρήσουμε στην βασική πρόταση της παραγράφου αυτής. Θα κάνουμε την εξής παραδοχή για τις ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών αυτών.

"Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμητιανού τελεστή που παριστάνει ένα φυσικό μέγεθος αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων".

Ετσι κάθε συνάρτηση ψ που παριστάνει την κατάσταση ενός συστήματος μπορεί πάντα να γραφεί σαν ένας γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων αυτών. Υπενθυμίζουμε ότι ο τελεστής της θέσης δεν έχει καθόλου ιδιοσυναρτήσεις. Η λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών είναι το συναρτησιακό του Ντιράκ.

Η κατάσταση ενός συστήματος που παριστάνεται από μια κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ υπόκειται σε δύο είδη μεταβολών. Πρώτον σε συνεχείς και αιτιατές μεταβολές, που περιγράφονται από την εξίσωση της κίνησης του Σρέντινγκερ και δεύτερον σε απότομες και όχι αιτιατές μεταβολές, όταν εκτελείται μια μέτρηση.

Η μεταβολή της κατάστασης ως προς τον χρόνο, που περιγράφεται από την εξίσωση της κίνησης, είναι συνεχής και εξαρτάται συνεχώς από τις αρχικές συνθήκες. Αντιθέτως η αλλαγή που προκαλεί μια μέτρηση στο σύστημα δεν είναι συνεχής και δίνεται με την βοήθεια των πιθανοτήτων. Επί πλέον η διαδικασία δεν είναι αντιστρεπτή, δηλαδή δεν μπορούμε να ξέρουμε την κατάσταση του συστήματος πριν την μέτρηση από το αποτέλεσμα μιας μέτρησης. Οι δύο κατευθύνσεις του χρόνου προς το μέλλον και προς το παρελθόν δεν είναι ισοδύναμες.

Η πρώτη προσπάθεια για την μαθηματική θεμελίωση της μέτρησης έγινε από τον Νόυμαν. Πριν την ανάπτυξη της κβαντομηχανικής το θέμα μέτρηση δεν είχε απασχολήσει σοβαρά τους φυσικούς, διότι κατά την κλασσική μηχανική είναι πάντα δυνατό να υπολογίσουμε την διαταραχή της συσκευής μέτρησης στο σύστημα και να την παραλείψουμε από το τελικό αποτέλεσμα. Στην κβαντομηχανική κάτι τέτοιο είναι αδύνατο.

Θεωρούμε ένα φυσικό σύστημα που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση ψ. Θεωρούμε επίσης ένα παρατηρήσιμο μέγεθος m με αντίστοιχο τελεστή τον T. Κατά τα ήδη γνωστά οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_n του τελεστή T αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων. Μπορούμε λοιπόν να γράφουμε

$$\psi = \sum_n \alpha_n \psi_n \quad \text{όπου} \quad \alpha_n = <\psi_n|\psi> \quad \text{και} \quad T\psi_n = \lambda_n \psi_n$$

Αν τώρα μετρήσουμε το μέγεθος m θα βρούμε κάποια από τις ιδιοτιμές του T. Το $|\alpha_k|^2$ δίνει την πιθανότητα να βρούμε την ιδιοτιμή λ_k. Οι μιγαδικές σταθερές α_k ονομάζονται πλάτη πιθανότητας. Αν έχουμε πολλά συστήματα στην ίδια κατάσταση ψ και μετρήσουμε το μέγεθος m, τότε είναι δυνατόν στο καθένα να βρούμε διαφορετικές τιμές. Το γεγονός αυτό είναι απαράδεκτο για την κλασσική μηχανική. Στην κλασσική μηχανική μπορούμε να προβλέψουμε το αποτέλεσμα μιας μέτρησης από τις εξισώσεις της κίνησης πριν κάνουμε την μέτρηση. Εδώ η πρόβλεψη αυτή έχει στατιστικό χαρακτήρα.

Αν η κυματοσυνάρτηση είναι κανονικοποιημένη το άθροισμα όλων αυτών των πιθανοτήτων είναι ίσο με την μονάδα, όπως φαίνεται αμέσως από την ταυτότητα του Πάρσεβαλ

$$\|\psi\|^2 = \sum_n |\alpha_n|^2 = 1$$

Αν η κυματοσυνάρτηση δεν είναι κανονικοποιημένη τότε η πιθανότητα να πάρουμε την ιδιοτιμή λ_k είναι

$$\frac{|\alpha_k|^2}{\sum_n |\alpha_n|^2}$$

Στην ειδική περίπτωση όπου $\psi = \psi_i$ δηλαδή η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από μία ιδιοσυνάρτηση, τότε κατά την μέτρηση του μεγέθους θα προκύψει σίγουρα με πιθανότητα 1 η ιδιοτιμή λ_i.

Η μέτρηση είναι μια διαδικασία αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε μια συσκευή μέτρησης και στο μετρούμενο σύστημα. Κατά την μέτρηση η κατάσταση και της συσκευής και του μετρούμενου συστήματος αλλάζουν έτσι ώστε μια μέτρηση δίνει την κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά την μέτρηση. Στην κβαντομηχανική η κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά την μέτρηση δίνεται από την ιδιοσυνάρτηση της ιδιοτιμής που μετρήθηκε. Ετσι ώστε αν ξανακάνουμε μια δεύτερη μέτρηση του ίδιου μεγέθους αμέσως μετά την πρώτη, χωρίς να αφήσουμε το σύστημα να εξελιχθεί ως προς τον χρόνο, θα ξαναβρούμε την ίδια ιδιοτιμή.

Η κατάσταση περιγράφεται σχηματικά από το ακόλουθο διάγραμμα

$$\psi = \sum_n \alpha_n \psi_n \quad \xrightarrow[\text{πιθανό αποτέλεσμα } \lambda_k]{\text{μέτρηση του } m} \quad \psi_k \quad \xrightarrow[\text{αποτέλεσμα } \lambda_k]{\text{μέτρηση του } m} \quad \psi_k$$

Η πρώτη μέτρηση του m δίνει το λ_k με πιθανότητα $|\alpha_k|^2$ ενώ η δεύτερη δίνει πάλι το λ_k με πιθανότητα 1.

Σύμφωνα με την κλασσική φυσική μπορούμε, θεωρητικά τουλάχιστον, να βρούμε την κατάσταση του συστήματος πριν την μέτρηση, αν ξέρουμε την κατάσταση του συστήματος μετά την μέτρηση. Μια μέτρηση όμως της κβαντομηχανικής προκαλεί μια μη αμελητέα διαταραχή στο σύστημα. Είναι προφανές από το παραπάνω διάγραμμα ότι είναι αδύνατο να βρούμε την κατάσταση ψ του συστήματος πριν την μέτρηση, από την πληροφορία ότι βρήκαμε την τιμή λ_k και ότι το σύστημα βρίσκεται μετά την μέτρηση στην κατάσταση ψ_k. Χρειαζόμαστε ίσως άπειρες μετρήσεις.

Ορισμός: Δύο μεγέθη m_1 και m_2 λέμε ότι είναι ταυτοχρόνως μετρήσιμα με την εξής έννοια. Μετράμε το m_1 και ας πούμε ότι λ_k είναι το αποτέλεσμα, στην συνέχεια μετράμε το m_2 και ας πούμε ότι μ_n είναι το αποτέλεσμα, τέλος μετράμε πάλι το m_1. Αν το αποτέλεσμα είναι πάλι το λ_k τότε λέμε ότι τα μεγέθη m_1 και m_2 μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα ή ότι η μια μέτρηση δεν επηρεάζει την άλλη. Υποτίθεται ότι οι μετρήσεις γίνονται γρήγορα έτσι ώστε το σύστημα δεν εξελίσσεται ως προς τον χρόνο.

Θεώρημα: Δύο μεγέθη m_1 και m_2 είναι ταυτοχρόνως μετρήσιμα τότε και μόνο τότε, όταν υπάρχει ένα πλήρες σύνολο συναρτήσεων κάθε μία από τις οποίες είναι ιδιοσυνάρτηση των αντίστοιχων τελεστών T_1 και T_2 των μεγεθών m_1 και m_2. Η τελευταία αυτή πρόταση είναι γνωστό ότι είναι ισοδύναμη με την σχέση

$$[T_1, T_2] = 0$$

Απόδειξη: Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα σύστημα που βρίσκεται στην κατάσταση ψ και μετράμε το μέγεθος m_1. Αναλύουμε την κυματοσυνάρτηση ψ ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή T_1. Υποθέτουμε ότι μετράμε το μέγεθος και βρίσκουμε την (ιδιο)τιμή λ_k. Το σύστημα, μετά την μέτρηση, βρίσκεται στην (ιδιο)κατάσταση ψ_k της ιδιοτιμής που μετρήθηκε, όπου

$$T_1\psi_k = \lambda_k\psi_k$$

Η πρώτη μέτρηση περιγράφεται από το παρακάτω διάγραμμα

$$\psi = \sum_n \alpha_n\psi_n \quad \xrightarrow[\text{πιθανό αποτέλεσμα } \lambda_k]{\text{μέτρηση του } m_1} \quad \psi_k \quad \text{με πιθανότητα } |\alpha_k|^2$$

Ακολούθως μετράμε το μέγεθος m_2. Η μέτρηση αυτή θα γίνει στο σύστημα ψ_k και όχι στο ψ. Αναλύουμε το διάνυσμα ψ_k ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή T_2, που αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ορθογωνίων συναρτήσεων. Μετράμε ακολούθως το μέγεθος m_2 και ας πούμε ότι βρήκαμε την ιδιοτιμή μ_n με πιθανότητα $|b_n^k|^2$. Το σύστημα τώρα βρίσκεται στην ιδιοσυνάρτηση φ_n της ιδιοτιμής που μετρήθηκε δηλαδή

$$T_2\varphi_n = \mu_n\varphi_n$$

Η δεύτερη αυτή μέτρηση περιγράφεται από το παρακάτω διάγραμμα

$$\psi_k = \sum_m b_m^k \varphi_m \quad \xrightarrow[\text{πιθανό αποτέλεσμα } \mu_n]{\text{μέτρηση του } m_2} \quad \varphi_n \quad \text{με πιθανότητα } |b_n^k|^2$$

Τέλος μετρούμε πάλι το μέγεθος m_1. Αν τα m_1 και m_2 είναι ταυτοχρόνως μετρήσιμα μεγέθη, τότε με την τρίτη μέτρηση του m_1 θα βρούμε σίγουρα την τιμή λ_k που βρήκαμε στην πρώτη μέτρηση. Αρα το φ_n είναι ιδιοσυνάρτηση του T_1 με ιδιοτιμή λ_k. Το φ_n όμως είναι ήδη ιδιοσυνάρτηση του T_2 με ιδιοτιμή μ_n και επομένως τελικά οι ιδιοσυναρτήσεις φ_n είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών T_1 και T_2. Κατά συνέπεια το διάνυσμα ψ γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των κοινών αυτών κυματοσυναρτήσεων.

Αντιστρόφως αν δύο τελεστές έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων τότε τα αντίστοιχα μεγέθη είναι ταυτοχρόνως μετρήσιμα. Η απόδειξη είναι απλή και θα την παραλείψουμε.

Στην κβαντομηχανική για να πετύχουμε την πληρέστερη δυνατή περιγραφή ενός συστήματος, πρέπει να βρούμε τις ιδιοτιμές όλων των μεγεθών που μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Το σύνολο όλων των τελεστών $T_1, T_2, \ldots, T_n$ που εναλλάσσονται καθ' όλους τους δυνατούς τρόπους

$$[T_i, T_j] = 0 \quad \text{για} \quad i \neq j$$

αποτελούν ένα πλήρες σύνολο εναλλασσομένων παρατηρήσιμων μεγεθών για το σύστημα.

Το σύνολο αυτό δεν είναι μοναδικό. Ενα σύστημα που η κυματοσυνάρτησή του είναι ταυτόχρονα ιδιοσυνάρτηση όλων των τελεστών του παραπάνω συνόλου, λέμε ότι βρίσκεται σε "καθαρή κατάσταση" άλλως το σύστημα βρίσκεται σε ένα μείγμα καθαρών καταστάσεων. Ενα σύνολο εναλλασσομένων παρατηρησίμων είναι για παράδειγμα οι τρεις συνιστώσες της θέσης (x, y, z) ή οι τρεις συνιστώσες της ορμής p_x, p_y, p_z. Ενα άλλο σύνολο είναι οι δύο συνιστώσες της θέσης και η τρίτη της ορμής x, y, p_z.

4.6 Ο κβαντικός νόμος της κίνησης

Στην παράσταση του Σρέντινγκερ της κβαντομηχανικής η κατάσταση ενός συστήματος μεταβάλλεται ως προς τον χρόνο σύμφωνα με την εξίσωση του Σρέντινγκερ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t)$$

Οι τελεστές μένουν αναλλοίωτοι ως προς τον χρόνο εκτός βέβαια αν έχουν αναλυτική χρονική εξάρτηση, οπότε η μεταβολή τους ως προς τον χρόνο οφείλεται στην φύση τους και όχι στην χρονική εξέλιξη του συστήματος.

Το πρόβλημα αρχικών τιμών στην παράσταση του Σρέντινγκερ τίθεται ως εξής: Ζητείται η κατάσταση $\psi(\vec{r},t)$ σε κάποια χρονική στιγμή, όταν είναι γνωστή η κατάσταση του σε χρόνο $t=0$, δηλαδή να λυθεί η εξίσωση

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t) \qquad \text{με αρχική συνθήκη} \quad \psi(\vec{r},0) = \psi_0(\vec{r})$$

Επειδή η εξίσωση της κίνησης είναι πρώτης τάξης ως προς τον χρόνο το πρόβλημα έχει μια και μοναδική λύση. Η κυματοσυνάρτηση $\psi(t)$ μεταβάλλεται συνεχώς ως προς τον χρόνο. Από την άποψη αυτή το πρόβλημα δεν διαφέρει καθόλου από το αντίστοιχο κλασσικό. Εδώ όμως η λύση του προβλήματος είναι μια μαθηματική συνάρτηση που μας δίνει πληροφορίες για το σύστημα με την βοήθεια της στατιστικής.

Το πρόβλημα των αρχικών τιμών στην κβαντομηχανική παρουσιάζει την εξής δυσκολία.

Ο τελεστής H είναι βέβαια ερμητιανός αλλά είναι δυνατόν να μην είναι φραγμένος. Ετσι ορίζεται σε ένα υποσύνολο D_H του χώρου του Χίλμπερτ του συστήματος. Είναι λοιπόν δυνατόν η αρχική τιμή $\psi(\vec{r},0)$ να μην ανήκει στο D_H. Για να αποφύγουμε την δυσκολία αυτή, είναι καλύτερα να εργαζόμαστε με φραγμένους τελεστές που ορίζονται σε όλο το χώρο παρά με μη φραγμένους τελεστές.

Θα υποθέσουμε ότι η χαμιλτονιανή του συστήματος δεν εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο. Ορίζουμε τον τελεστή

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$$

Ο τελεστής αυτός ονομάζεται τελεστής χρονικής εξέλιξης του συστήματος και ικανοποιεί τις ιδιότητες

α) Επειδή ο H είναι ερμητιανός ο τελεστής $U(t, t_0)$ είναι μοναδιαίος και άρα φραγμένος.

β) $U(t_1, t_2)U(t_2, t_3) = U(t_1, t_3)$

γ) $U(t_0, t_0) = \mathbf{I}$ όπου $\mathbf{I}$ είναι ο μοναδιαίος τελεστής.

Το πρόβλημα αρχικών τιμών της κβαντομηχανικής έχει την λύση

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t, 0)\psi(\vec{r}, 0)$$

Πράγματι αν παραγωγίσουμε ως προς τον χρόνο, έχουμε

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial U(t, 0)}{\partial t}\psi(\vec{r}, 0) = HU(t, 0)\psi(\vec{r}, 0) = H\psi(\vec{r}, t)$$

άρα ικανοποιείται η διαφορική εξίσωση του Σρέντινγκερ. Επίσης ικανοποιείται και η αρχική συνθήκη

$$(\psi(\vec{r}, t))_{t=0} = U(0, 0)\psi(\vec{r}, 0) = \psi(\vec{r}, 0) = \psi_0(\vec{r})$$

Παρατηρούμε ότι ο τελεστής χρονικής εξέλιξης όπως ορίστηκε ικανοποιεί το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t, t_0) = HU(t, t_0) \qquad \text{με αρχική συνθήκη} \quad U(t_0, t_0) = \mathrm{I}$$

Αν η χαμιλτονιανή εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο τότε οι τελεστές $H(t_1)$, και $H(t_2)$ δεν εναλλάσσονται γενικά για $t_1 \neq t_2$. Το πρόβλημα γίνεται δύσκολο. Η λύση της παραπάνω διαφορικής εξίσωσης δεν έχει πιά την απλή εκθετική μορφή $U = e^{i(t-t_0)H/\hbar}$.

Μπορούμε να ορίσουμε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης από την ακόλουθη ολοκληρωτική εξίσωση

$$U(t, t_0) = \mathrm{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')U(t', t_0)dt'$$

Η ολοκληρωτική εξίσωση είναι ισοδύναμη με την διαφορική εξίσωση και την αρχική συνθήκη. Φαίνεται εύκολα ότι ο τελεστής αυτός είναι λύση του παραπάνω προβλήματος αρχικών τιμών.

4.7 Η παράσταση του Χάιζενμπεργκ

Μέχρι τώρα υποθέσαμε ότι η κυματοσυνάρτηση μεταβάλλεται ως προς τον χρόνο ενώ οι τελεστές παραμένουν αναλλοίωτοι. Στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ η κυματοσυνάρτηση παραμένει αναλλοίωτη ενώ οι τελεστές εξελίσσονται με τον χρόνο.

Η χρονική εξάρτηση της μέσης τιμής στις δύο παραστάσεις έχει την μορφή

$$\langle m \rangle (t) =< \psi(t)|T\psi(t) >$$

στην παράσταση του Σρέντινγκερ και την μορφή

$$\langle m \rangle (t) =< \psi|T(t)\psi >$$

στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ.

Φυσικά και στις δύο παραστάσεις οι μέσες τιμές των μεγεθών πρέπει να εξελίσσονται ως προς τον χρόνο κατά τον ίδιο τρόπο. Ξεκινώντας από αυτή την προϋπόθεση θα αναζητήσουμε την εξίσωση της κίνησης του τελεστή $T(t)$ στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ.

Στην παράσταση του Σρέντινγκερ έχουμε

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle m \rangle (t) =& i\hbar\frac{d}{dt} < \psi|T\psi >= \\ & < -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}|T\psi > + < \psi|i\hbar\frac{\partial T}{\partial t}\psi > + < \psi|Ti\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} > \end{aligned}$$

Αλλά στην παράσταση Σρέντινγκερ ισχύει η ακόλουθη εξίσωση της κίνησης

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

Αρα έχουμε

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle m \rangle (t) =& < -H\psi|T\psi > + < \psi|i\hbar\frac{\partial T}{\partial t}\psi > + < \psi|TH\psi >= \\ & < \psi| - HT\psi > + < \psi|i\hbar\frac{\partial T}{\partial t}\psi > + < \psi|TH\psi >= \\ & < \psi|\left(i\hbar\frac{\partial T}{\partial t} - HT + TH\right)\psi > \end{aligned}$$

Επομένως η εξέλιξη της μέσης τιμής στην παράσταση του Σρέντινγκερ δίνεται από την σχέση

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle m\rangle(t) =< \psi|\left(i\hbar\frac{\partial T}{\partial t}+[T,H]\right)\psi >$$

Στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ η παράγωγος της μέσης τιμής ως προς τον χρόνο δίνεται από την ακόλουθη σχέση

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle m\rangle(t) =< \psi|i\hbar\frac{dT(t)}{dt}\psi >$$

Οι δύο παραπάνω σχέσεις πρέπει να είναι ίσες άρα

$$i\hbar\frac{dT(t)}{dt} = i\hbar\frac{\partial T}{\partial t}+[T(t),H]$$

Η εξίσωση αυτή ονομάζεται εξίσωση της κίνησης του Χάιζενμπεργκ και δίνει την εξέλιξη του τελεστή $T(t)$ ως προς τον χρόνο.

Αν το μέγεθος περιγράφεται από τον τελεστή T που δεν εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο τότε η εξίσωση της κίνησης γράφεται

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H,T]$$

Ενας τελεστής και το αντίστοιχο μέγεθος είναι μια σταθερά της κίνησης όταν ισχύει η σχέση

$$\frac{dT(t)}{dt} = 0$$

Επομένως ένας τελεστής χωρίς αναλυτική χρονική εξάρτηση είναι μια σταθερά εάν εναλλάσσεται με την χαμιλτονιανή δηλαδή $[H,T]=0$.

Η ίδια η χαμιλτονιανή είναι προφανώς μια σταθερά της κίνησης εάν δεν περιέχει αναλυτικά χρονική εξάρτηση, διότι φυσικά $[H,H]=0$.

Αν η χαμιλτονιανή του συστήματος έχει την μορφή

$$H = \frac{p^2}{2m}+V(q,t)$$

τότε για τα μεγέθη p και q οι εξισώσεις της κίνησης γράφονται

$$\frac{dp}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H,p] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + V(q,t), p\right] = \frac{i}{\hbar}[V,p] = \frac{\partial}{\partial q}V$$
$$\frac{dq}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H,q] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + V(q,t), q\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m}, q\right] = \frac{p}{m}$$

Αρα για τις μέσες τιμές των μεγεθών αυτών ισχύουν οι σχέσεις

$$\frac{d}{dt}\langle q\rangle = \left\langle \frac{dq}{dt}\right\rangle = \left\langle \frac{p}{m}\right\rangle$$
$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \left\langle \frac{dp}{dt}\right\rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial q}V\right\rangle$$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι τα θεωρήματα του Ερενφεστ. Είναι όμοιες με τις κλασσικές εξισώσεις της κίνησης του Χάμιλτον

$$\dot{p} = -\frac{\partial}{\partial q}V \quad \text{και} \quad \dot{q} = \frac{p}{m}$$

μόνο που εδώ τα μεγέθη q και p, θέση και ορμή της κλασσικής μηχανικής, έχουν αντικατασταθεί με τις μέσες τιμές τους.

Το θεώρημα του Ερενφεστ διατυπώνεται ως εξής:

"Οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών θέση και ορμή ακολουθούν τις κλασσικές εξισώσεις της κίνησης".

Η παράσταση του Χάιζενμπεργκ της κβαντομηχανικής είναι εξαιρετικά χρήσιμη για να δούμε την τυπική ομοιότητα της κβαντικής και της κλασσικής μηχανικής. Πράγματι η εξίσωση της κίνησης του Χάιζενμπεργκ είναι όμοια με την αντίστοιχη κλασσική εξίσωση της κίνησης ενός μεγέθους $F(t)$

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{\partial F(t)}{\partial t} + \{F,H\} \quad \text{Κλασσική εξίσωση}$$
$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{\partial T(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[T,H] \quad \text{Κβαντική εξίσωση}$$

Η αγκύλη Πουασόν έχει αντικατασταθεί εδώ από τον μεταθέτη $\frac{1}{i\hbar}[T,H]$ των τελεστών T και H. Αποδεικνύεται ότι η κλασσική εξίσωση είναι το όριο της εξίσωσης του Χάιζενμπεργκ όταν το $\hbar$ τείνει στο μηδέν.

Αν και τα παραπάνω δεν αποτελούν πλήρη απόδειξη, φαίνεται όμως ότι η κλασσική μηχανική είναι το όριο της κβαντικής για $\hbar \to 0$. Το όριο όμως αυτό είναι τυπικό μαθηματικό και όχι ουσιαστικό φυσικό.

Υπάρχει μια ουσιώδης εννοιολογική διαφορά των δύο αυτών θεωριών. Υπάρχουν παρατηρήσιμα μεγέθη όπως για παράδειγμα το σπιν που εξαφανίζονται στο κλασσικό όριο και άρα δεν έχουν κλασσικό ανάλογο. Αφετέρου Το $\hbar$ είναι μια σταθερά της φύσης που δεν μπορούμε ούτε να την ελαττώσουμε ούτε να την αυξήσουμε σε κάποιο πείραμα. Απλώς υπάρχουν περιπτώσεις, όπως στην περιοχή των μακροσκοπικών σωμάτων, που δεν την "βλέπουμε" γι αυτό άλλωστε και μόλις το 1990 την ανακάλυψε ο Πλανκ.

Το πρόβλημα αρχικών τιμών στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ τίθεται ως εξής:

Ζητείται το μέγεθος $T(t)$ σε κάποια χρονική στιγμή όταν είναι γνωστό το μέγεθος $T(t)$ στην χρονική στιγμή $t = 0$.

Για την απλούστευση των σχέσεων θα υποθέσουμε ότι όλοι οι τελεστές δεν περιέχουν αναλυτική χρονική εξάρτηση. Φυσικά δεν καλύπτουμε όλες τις περιπτώσεις, όμως η χρονική εξέλιξη των μεγεθών που προκύπτει από την αναλυτική χρονική εξάρτηση των τελεστών από τον χρόνο, οφείλεται στην φύση των τελεστών και όχι στην χρονική εξέλιξη του συστήματος. Το πρόβλημα λοιπόν έχει ως εξής

Να λυθεί η εξίσωση

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, T(t)] \qquad \text{με αρχική συνθήκη} \quad T(t)_{|t=0} = T_0$$

Η λύση του προβλήματος δίνεται πάλι με την βοήθεια του τελεστή χρονικής εξέλιξης

$$U(t, 0) = exp\{-\frac{i}{\hbar}tH\}$$

Η λύση είναι

$$T(t) = U^{-1}(t, 0)T_0U(t, 0)$$

Ο τελεστής αυτός ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση. Πράγματι

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{dU^{-1}}{dt}T_0U + U^{-1}T_0\frac{dU}{dt} = \frac{i}{\hbar}HU^{-1}T_0U - \frac{i}{\hbar}U^{-1}T_0UH =$$

$$\frac{i}{\hbar}HT(t) - \frac{i}{\hbar}T(t)H = \frac{i}{\hbar}[H, T(t)]$$

Αλλά και την αρχική συνθήκη. Βρίσκουμε

$$T(t)_{|t=0} = U^{-1}(0,0)TU(0,0) = T_0$$

Επειδή ο τελεστής U είναι μοναδιαίος ($U^{-1} = U^{+}$), έπεται ότι ο τελεστής $T(t)$ διατηρεί τις ιδιότητες του κατά την χρονική εξέλιξη του. Αν για παράδειγμα ο τελεστής $T(t)$ είναι ερμητιανός την χρονική στιγμή $t = 0$, τότε ο τελεστής αυτός είναι επίσης ερμητιανός για κάθε t.

Θεώρημα: Αν με τους δείκτες S και H χαρακτηρίσουμε τα μεγέθη και τις καταστάσεις στις παραστάσεις του Σρέντινγκερ και Χάιζενμπεργκ αντιστοίχως, τότε οι δύο παραστάσεις συνδέονται με τις σχέσεις

$$\psi_S(t) = U\psi_H \qquad\qquad T_H(t) = U^{-1}T_S U$$

Ο τελεστής U είναι μοναδιαίος και άρα οι δύο παραστάσεις είναι ισοδύναμες.

θα αποδείξουμε ότι

$$\text{α)} \quad \langle T\rangle_S = \langle T\rangle_H \qquad \text{και} \qquad \text{β)} \quad [\mathrm{A}_S, \mathrm{B}_S] = iC_S \iff [\mathrm{A}_H, \mathrm{B}_H] = iC_H$$

Απόδειξη:

$$\text{α)} \ \langle T\rangle_S =< \psi_S(t)|T_S\psi_S(t) >=< U\psi_H|T_S U\psi_H >=< \psi_H|U^{+}T_S U\psi_H >=$$
$$< \psi_H|U^{-1}T_S U\psi_H >=< \psi_H|T_H(t)\psi_H >= \langle T\rangle_H$$

Δηλαδή οι μέσες τιμές των μεγεθών ταυτίζονται στις δύο παραστάσεις.

$$\text{β)} \ \mathrm{A}_S\mathrm{B}_S - \mathrm{B}_S\mathrm{A}_S = iC_S \iff U^{+}\left(A_S B_S - B_S A_S\right)U = iU^{+}C_S U \iff$$
$$U^{+}A_S B_S U - U^{+}B_S A_S U = iU^{+}C_S U \iff \qquad (\ \text{διότι} \quad UU^{+} = 1\ )$$
$$U^{+}\mathrm{A}_S UU^{+}\mathrm{B}_S U - U^{+}\mathrm{B}_S UU^{+}\mathrm{A}_S U = iU^{+}C_S U \iff$$
$$\mathrm{A}_H\mathrm{B}_H - \mathrm{B}_H\mathrm{A}_H = iC_H$$

Παρατηρούμε ότι αν δύο τελεστές εναλλάσσονται στην παράσταση του Σρέντινγκερ εναλλάσσονται επίσης και στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ.

4.8 Η εξίσωση συνεχείας

Από την κλασσική φυσική είναι γνωστό ότι για οποιοδήποτε μέγεθος με πυκνότητα $\rho(\vec{r},t)$ που διατηρείται, μπορούμε να γράψουμε μια εξίσωση συνεχείας της μορφής

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Για την υδροδυναμική η εξίσωση συνεχείας εκφράζει την διατήρηση της μάζας του ρευστού. Το $\rho(\vec{r},t)$ είναι η πυκνότητα μάζας και το διάνυσμα

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \rho\vec{\upsilon}$$

παριστάνει την ροή της μάζας του ρευστού και ονομάζεται πυκνότητα ρεύματος. Το $\vec{\upsilon}(\vec{r},t)$ είναι το πεδίο ταχυτήτων του υγρού.

Για να δούμε την φυσική σημασία της εξίσωσης συνεχείας ολοκληρώνουμε πάνω σε έναν όγκο V

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{J}\right) dV = 0$$

Από το θεώρημα του Γκάους έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV + \int_s \vec{J} \cdot d\vec{\sigma} = \frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV + \int_s f_n d\sigma = 0$$

όπου f_n είναι η κάθετη συνιστώσα στο στοιχείο επιφανείας $d\sigma$. Αρα η μεταβολή της μάζας ενός ρευστού μέσα στον όγκο V, οφείλεται στην ροή μάζας του ρευστού από την συνοριακή επιφάνεια s που περικλείει τον όγκο V. Αντίθετως, αν μέσα στον όγκο V υπάρχουν πηγές μάζας ή καταστροφείς μάζας τότε δεν ισχύει η εξίσωση συνεχείας.

Μια ανάλογη εξίσωση συνεχείας μπορούμε να γράψουμε και για την κβαντομηχανική. Η πυκνότητα $\rho(\vec{r},t)$ είναι τώρα η πυκνότητα πιθανότητας

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$$

Το ζητούμενο ρεύμα $\vec{J}$ περιγράφει πως γίνεται η μεταφορά πιθανότητας από την μια περιοχή του χώρου στην άλλη.

Για να βρούμε το διάνυσμα $\vec{J}$ παραγωγίζουμε την πυκνότητα πιθανότητας $\rho(\vec{r},t)$ ως προς τον χρόνο

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

Από την εξίσωση του Σρέντινγκερ έχουμε

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \psi^*\frac{1}{i\hbar}H\psi - \psi\frac{1}{i\hbar}H\psi^* =$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi - \psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^*\right] =$$

$$-\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right)$$

Χρησιμοποιούμε τώρα την διανυσματική ταυτότητα

$$\mathrm{A}\nabla^2\mathrm{B} = \vec{\nabla}\cdot(\mathrm{A}\vec{\nabla}\mathrm{B}) - (\vec{\nabla}\mathrm{A})\cdot(\vec{\nabla}\mathrm{B})$$

και βρίσκουμε

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = -\frac{\hbar}{2im}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

Αρα το ζητούμενο ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας θα είναι

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

Η εξίσωση συνεχείας της κβαντομηχανικής εκφράζει την διατήρηση της πιθανότητας. Αν η πιθανότητα να βρεθεί ένα σωμάτιο μέσα σε έναν όγκο V μεταβάλλεται ως προς τον χρόνο, αυτό οφείλεται σε διαρροή πιθανότητας από τα τοιχώματα s του όγκου V που προκαλεί ένα μη μηδενικό ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας $\vec{J}$.

4.9 Οι στάσιμες καταστάσεις

Ορισμός: Στάσιμες είναι οι καταστάσεις εκείνες για τις οποίες, τα μεγέθη πυκνότητα πιθανότητας και πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας, είναι ανεξάρτητα από τον χρόνο. Τέτοιες καταστάσεις περιγράφονται από κυματοσυναρτήσεις της μορφής

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}t}\psi(\vec{r})$$

Είναι προφανές ότι για τέτοιες κυματοσυναρτήσεις και το ρ και το $\vec{J}$ είναι ανεξάρτητα από τον χρόνο. Η μέση τιμή κάποιου μεγέθους, χωρίς αναλυτική εξάρτηση από τον χρόνο, είναι επίσης σταθερή ως προς τον χρόνο. Πράγματι

$$\langle m \rangle =< \Psi|T\Psi >=< e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}t}\psi(\vec{r})|Te^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}t}\psi(\vec{r}) >=< \psi(\vec{r})|T\psi(\vec{r}) >$$

Επίσης και πολλά άλλα χαρακτηριστικά του συστήματος παραμένουν αναλλοίωτα από τον χρόνο, για αυτό και η κατάσταση του συστήματος ονομάζεται στάσιμη.

Θεώρημα: Αν η χαμιλτονιανή του συστήματος δεν εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο, τότε η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι ένα άθροισμα ή ολοκλήρωμα στάσιμων καταστάσεων. Κάθε στάσιμη κατάσταση είναι μια ιδιοκατάσταση της ενέργειας με ιδιοτιμή που την συμβολίζουμε με Ε.

Απόδειξη: Η εξίσωση Σρέντινγκερ του συστήματος έχει την μορφή

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = H\Psi(\vec{r},t)$$

Επειδή ο τελεστής H δεν περιέχει αναλυτικά τον χρόνο η εξίσωση αυτή δέχεται μια λύση της μορφής

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{A}(t)\psi(\vec{r})$$

Η εξίσωση γράφεται

$$\psi(\vec{r})\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{A}(t)\right] = A(t)H\psi(\vec{r}) \Longrightarrow$$
$$\frac{1}{\mathrm{A}(t)}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{A}(t) = \frac{1}{\psi(\vec{r})}H\psi(\vec{r})$$

Το αριστερό μέρος της εξίσωσης αυτής εξαρτάται μόνο από το t, ενώ το δεξιό μόνο από το $\vec{r}$. Επομένως το καθένα πρέπει να είναι ίσο με μια σταθερά που την συμβολίζουμε με Ε. Αρα έχουμε

$$\frac{1}{A(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathrm{A}(t) = \mathrm{E} \qquad \Longrightarrow \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathrm{A}(t) = \mathrm{E}\mathrm{A}(t)$$
$$\frac{1}{\psi(\vec{r})} H\psi(\vec{r}) = \mathrm{E} \qquad \Longrightarrow \qquad H\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r})$$

Η πρώτη εξίσωση λύνεται αμέσως και δίνει

$$\mathrm{A}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}t}$$

Η λύση της δεύτερης μας δίνει την συνάρτηση $\psi(\vec{r})$ και τις ιδιοτιμές Ε του τελεστή της ενέργειας.

Αρα τελικά μια λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ είναι της μορφής

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}t}\psi(\vec{r})$$

όπου Ε και $\psi(\vec{r})$ είναι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ενέργειας. Δηλαδή είναι λύσεις της εξίσωσης

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r}) \tag{4.1}$$

που ονομάζεται εξίσωση Σρέντινγκερ ανεξάρτητη από τον χρόνο. Η σταθερά Ε, όπως φαίνεται από την παραπάνω σχέση, είναι ιδιοτιμή του τελεστή της ενέργειας και άρα παριστάνει την ενέργεια του συστήματος.

Η εξίσωση αυτή είναι δυνατόν να έχει λύση για κάθε Ε μέσα σε κάποιο διάστημα του πραγματικού άξονα, οπότε λέμε ότι το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές. Είναι επίσης δυνατό να έχει λύση για ορισμένα μόνο Ε, οπότε λέμε ότι το φάσμα είναι διακεκριμένο. Η εξίσωση έχει λυθεί αναλυτικά σε πολύ λίγες περιπτώσεις, ενώ για τις άλλες χρησιμοποιούμε προσεγγιστηκές μεθόδους.

Παρατήρηση: Από την μορφή του δυναμικού μπορούμε να συμπεράνουμε αν οι(ιδιο)τιμές της ενέργειας είναι συνεχείς ή διακεκριμένες.

Αν η ενέργεια και το δυναμικό του συστήματος είναι τέτοια ώστε, κατά την κλασσική μηχανική, το σύστημα να μπορεί να κινείται σε περιορισμένη περιοχή του χώρου, τότε το σύστημα ονομάζεται δέσμιο και οι ιδιοτιμές είναι διακεκριμένες. Αν το σύστημα μπορεί να κινηθεί είτε στο συν είτε στο πλην άπειρο, τότε οι ιδιοτιμές είναι συνεχείς. Η κατάσταση είναι όμοια με την περίπτωση ενός κύματος με οριακές συνθήκες, οπότε η συχνότητα του είναι κβαντισμένη και χωρίς οριακές συνθήκες, οπότε η συχνότητα του δεν είναι κβαντισμένη.

Αν $\mathrm{E}_1, \mathrm{E}_2, \cdots$ είναι οι ιδιοτιμές και $\psi_1, \psi_2, \cdots$ οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις της ανεξάρτητης από τον χρόνο της εξίσωσης του Σρέντινγκερ τότε, επειδή η εξίσωση είναι γραμμική, η γενική λύση της εξίσωσης θα είναι ένας γραμμικός συνδυασμός αυτών των ιδιολύσεων της μορφής

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}_n t} \psi_n(\vec{r})$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή δεν παριστάνει καμία στάσιμη κατάσταση. Αν επιπλέον πρέπει να ικανοποιείται και η αρχική συνθήκη

$$\Psi(\vec{r}, t)_{|t=0} = \Psi(\vec{r}, 0) = \psi_0(\vec{r})$$

τότε κατά τα γνωστά οι σταθερές c_n δίνονται από την σχέση

$$c_n = <\psi_n|\psi_0> = \iiint_{\Re^3} \psi_n^*(\vec{r}\,')\psi_0(\vec{r}\,')d^3\vec{r}\,'$$

Επομένως

$$\psi(\vec{r}, t) = \iiint_{\Re^3} \left[\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}_n t} \psi_n^*(\vec{r}\,')\psi_n(\vec{r})\right] \psi_0(\vec{r}\,')d^3\vec{r}\,'$$

Η συνάρτηση (Το συναρτησιακό) που είναι μέσα στην αγκύλη ονομάζεται Γκρην συνάρτηση της εξίσωσης (4.1). Αν συμβολίσουμε με $G(\vec{r}, \vec{r}\,', t, 0)$ την συνάρτηση αυτή έχουμε

$$G(\vec{r}, \vec{r}\,', t, 0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}_n t} \psi_n^*(\vec{r}\,')\psi_n(\vec{r})$$

Η Γκρην συνάρτηση έχει το πλεονέκτημα ότι δεν εξαρτάται από την αρχική συνθήκη $\psi_0(\vec{r}\,')$. Αν έχουμε υπολογίσει την Γκρην συνάρτηση τότε η λύση του προβλήματος δίνεται από την σχέση

$$\Psi(\vec{r}, t) = \iiint_{\Re^3} G(\vec{r}, \vec{r}\,' t, 0)\Psi(\vec{r}\,', 0)d^3\vec{r}\,'$$

Από την παραπάνω σχέση είναι προφανές ότι η συνάρτηση αυτή ικανοποιεί την αρχική συνθήκη

$$G(\vec{r},\vec{r}\,',t,0)|_{t=0} = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

Στην περίπτωση που το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές τότε τα παραπάνω αθροίσματα γίνονται ολοκληρώματα.

Παράδειγμα: Για παράδειγμα θα υπολογίσουμε την Γκρην συνάρτηση του ελευθέρου σωματιδίου.

Αν το σωμάτιο είναι ελεύθερο δηλαδή $V = 0$ τότε η ανεξάρτητη από τον χρόνο εξίσωση του Σρέντινγκερ γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r})$$

Η εξίσωση αυτή έχει λύση συναρτήσεις της μορφής των επίπεδων κυμάτων

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \mathrm{E}_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad k\in\Re$$

Επειδή το $\vec{k}$ παίρνει όλες τις πραγματικές τιμές, το φάσμα είναι συνεχές και η γενική λύση είναι το ολοκλήρωμα

$$\psi(\vec{r},t) = \mathrm{N}\iiint_{\Re^3} d^3\vec{k}c(\vec{k})\exp\left\{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\frac{E_kt}{\hbar}\right)\right\}$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή ονομάζεται κυματόδεμα ή κυματοπακέτο και είναι μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση.

Η Γκρην συνάρτηση δίνεται από την σχέση

$$G(\vec{r},\vec{r}\,',t,0) = \iiint_{\Re^3} d^3\vec{k}\psi_k^*(\vec{r}\,')e^{-\frac{iE_kt}{\hbar}}\psi_k(\vec{r}) =$$

$$\iiint_{\Re^3} d^3\vec{k}\exp\left\{i\left[\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')-\hbar\frac{k^2}{2m}t\right]\right\}$$

Εκτελούμε την ολοκλήρωση και βρίσκουμε

$$G(\vec{r},\vec{r}\,',t,0) = \left(\frac{-im}{2\pi\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left\{\frac{im(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}{2\hbar t}\right\}$$

Είναι δηλαδή μια κατανομή τύπου Γκάους.

Ασκήσεις

Άσκηση 4.1

Αν T_{mn} τα στοιχεία μήτρας ενός τελεστή T ως προς κάποια βάση που ο τελεστής H είναι διαγώνιος, δηλαδή $H_{mn} = \mathrm{E}_n \delta_{mn}$, τότε να αποδειχτεί ότι ισχύει

$$\dot{T}_{mn} = i\omega_{mn} T_{mn} \quad \text{όπου} \quad \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(\mathrm{E}_m - \mathrm{E}_n)$$

Να βρεθεί ακόμα και η δεύτερη παράγωγος των στοιχείων της μήτρας του τελεστή T.

Απόδειξη: Συμβολίζουμε με $|0>, |1>, |2>, \cdots, |n>, \cdots$ τα διανύσματα της βάσης. Τα διανύσματα αυτά είναι ιδιοδιανύσματα του τελεστή H της χαμιλτονιανής και σχηματίζουν μια ορθοκανονική βάση. Ισχύουν δηλαδή οι σχέσεις.

$$< m|n >= \delta_{mn} \qquad\qquad H|m >= E_m|m >$$

Ο τελεστής T ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση του Χάιζενμπεργκ

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, T(t)] = \frac{i}{\hbar}(HT - TH)$$

όπου υποθέσαμε ότι ο τελεστής $T(t)$ δεν έχει αναλυτική χρονική εξάρτηση δηλαδή $\partial T/\partial t = 0$. Από την σχέση αυτή συνεπάγεται ότι

$$\dot{T}_{mn} =< m|\frac{dT}{dt}n >=< m|\frac{i}{\hbar}(HT - TH)n >=$$

$$\frac{i}{\hbar}(< m|HTn > - < m|THn >) = \frac{i}{\hbar}(< Hm|Tn > - < m|THn >) =$$

$$\frac{i}{\hbar}(E_m < m|Tn > - E_n < m|Tn >) = i\frac{E_m - E_n}{\hbar} < m|Tn >= i\omega_{mn}T_{mn}$$

Στις παραπάνω εξισώσεις μεταφέραμε την δράση του τελεστή H από το δεύτερο διάνυσμα του εσωτερικού γινομένου στο πρώτο χωρίς να τον αλλάξουμε σε H^+ διότι ο τελεστής είναι ερμητιανός. Χρησιμοποιήσαμε δηλαδή τις σχέσεις

$$H|n>=E_n|n> \qquad\qquad <n|H=<n|E_n$$

Αν παραγωγίσουμε άλλη μια φορά την παραπάνω σχέση βρίσκουμε την δεύτερη παράγωγο του τελετή T.

$$\ddot{T}_{mn}=-\omega_{mn}^2 T_{mn} \qquad\qquad \ddot{T}_{mn}+\omega_{mn}^2 T_{mn}=0$$

Άσκηση 4.2

Γράψτε την κυματοσυνάρτηση με την "πολική της μορφή" δηλαδή

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r},t)e^{i\varphi(\vec{r},t)}$$

Να βρείτε το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας και να ερμηνεύσετε το αποτέλεσμα σύμφωνα με το ανάλογο πρόβλημα της υδροδυναμικής.

Λύση: Αν με $\rho(\vec{r},t)$ συμβολίσουμε την πυκνότητα της μάζας σε μια περιοχή του χώρου και με $\vec{J}(\vec{r},t)=\rho\vec{v}(\vec{r},t)$ την πυκνότητα ρεύματος τότε σύμφωνα με την υδροδυναμική ισχύει η εξίσωση συνεχείας

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{J}=0$$

Η ίδια σχέση ισχύει και στην κβαντομηχανική όπου ρ είναι η πυκνότητα πιθανότητας και $\vec{J}$ η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας.

Θα υπολογίσουμε την πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας για την δεδομένη κυματοσυνάρτηση. Βρίσκουμε

$$\vec{J}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\psi^*-\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\rho e^{i\varphi}\vec{\nabla}\rho e^{-i\varphi}-\rho e^{-i\varphi}\vec{\nabla}\rho e^{i\varphi}\right)=$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\left(\rho\vec{\nabla}\rho-i\rho^2\vec{\nabla}\varphi-\rho\vec{\nabla}\rho-i\rho^2\vec{\nabla}\varphi\right)=\frac{\hbar}{m}\rho^2\vec{\nabla}\varphi=\rho^2\frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

Το διάνυσμα

$$\vec{k}(\vec{r},t)=\vec{\nabla}\varphi(\vec{r},t)$$

είναι κάθετο στις ισοφασικές επιφάνειες $\varphi(\vec{r},t) = c$ και ονομάζεται κυματάνυσμα. Ορίζουμε το διάνυσμα της ταχύτητας από την σχέση

$$\vec{\upsilon}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{m}\vec{k}(\vec{r},t)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας και το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας γράφονται

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \qquad \vec{J}(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2\vec{\upsilon}(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)\vec{\upsilon}(\vec{r},t)$$

Οι παραπάνω εκφράσεις είναι ανάλογες με της εκφράσεις της κλασσικής υδροδυναμικής.

΄Ασκηση 4.3

Να αποδειχτεί ότι οι κυματοσυναρτήσεις της μορφής

$$\psi(x,t) = Ne^{-i\omega t}e^{-\lambda\frac{x^2}{2}}$$

έχουν την ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα, δηλαδή η ανισότητα του Χάιζενμπεργκ ισχύει με το ίσον της. Να βρεθεί η σταθερά Ν. Υπολογίστε επίσης την κυματοσυνάρτηση $\varphi(p)$ στον χώρο των ορμών.

Για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων χρησιμοποιήστε τις σχέσεις

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1}e^{-\lambda x^2}dx = 0 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-\lambda x^2}dx = \frac{1\cdot 3\cdots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Απόδειξη: Θα βρούμε πρώτα την σταθερά Ν από το ολοκλήρωμα κανονικοποίησης. Εχουμε

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx = |N|^2\int_{\infty}^{+\infty}e^{-\lambda x^2}dx = |N|^2\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad \Longrightarrow \quad |N| = \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}$$

Η κυματοσυνάρτηση παίρνει τώρα την μορφή

$$\psi(x,t) = e^{i\theta}\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}e^{-i\omega t}e^{-\lambda\frac{x^2}{2}}$$

Θα υπολογίσουμε τώρα τις μέσες τιμές της θέσης $\langle x\rangle$ και της ορμής $\langle p\rangle$. Βρίσκουμε

$$\langle x\rangle = |N|^2\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\lambda x^2}dx = 0$$

$$\langle p\rangle = -|N|^2 i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2/2}\frac{\partial}{\partial x}e^{-\lambda x^2/2}dx = |N|^2 i\hbar\frac{\lambda}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\lambda x^2}dx = 0$$

Το αποτέλεσμα φαίνεται χωρίς να υπολογίσουμε το παραπάνω ολοκλήρωμα διότι αν το ολοκλήρωμα αυτό δεν ήταν μηδέν τότε η μέση τιμή $\langle p\rangle$ θα ήταν ένας καθαρά μιγαδικός αριθμός πράγμα αδύνατο φυσικά επειδή ο τελεστής της ορμής είναι ερμητιανός.

Η διασπορά της θέσης είναι

$$(\Delta x)^2 = \left\langle x^2\right\rangle = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\lambda x^2}dx = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{1}{2\lambda} \quad \Longrightarrow$$

$$(\Delta x) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$$

Υπολογίζουμε ακολούθως την διασπορά της ορμής. Βρίσκουμε

$$(\Delta p)^2 = \left\langle p^2\right\rangle = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}(-\hbar^2)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2/2}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\lambda x^2/2}dx =$$

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}(-\hbar^2)\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\lambda+\lambda^2x^2\right)e^{-\lambda x^2}dx = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}(-\hbar^2)\left(-\lambda+\frac{\lambda^2}{2\lambda}\right)\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} =$$

$$\frac{\hbar^2\lambda}{2} \quad \Longrightarrow \quad (\Delta p) = \hbar\frac{\sqrt{2\lambda}}{2}$$

Αρα το γινόμενο των διασπορών είναι

$$(\Delta p)(\Delta x) = \hbar\frac{\sqrt{2\lambda}}{2}\frac{1}{\sqrt{2\lambda}} = \frac{\hbar}{2}$$

Είναι δηλαδή το ελάχιστο δυνατό. Γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων αυτών για τρεις διαφορετικές τιμές του λ έχουν σχεδιαστεί στο σχήμα (2.4).

Θα υπολογίσουμε τώρα την συνάρτηση $\varphi(p)$ στον χώρο των ορμών. Είναι γνωστό ότι η κυματοσυνάρτηση αυτή συνδέεται με την $\psi(x)$ με έναν μετασχηματισμό του Φουριέ. Εχουμε σε μια διάσταση

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x)dx = N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px - \lambda\frac{x^2}{2}}dx$$

Η παράσταση στο εκθετικό γίνεται

$$-\frac{i}{\hbar}px - \lambda\frac{x^2}{2} = -\frac{\lambda}{2}\left(x^2 + \frac{2i}{\lambda\hbar}px\right) = -\frac{\lambda}{2}\left(x^2 + \frac{2i}{\lambda\hbar}px - \frac{p^2}{\lambda^2\hbar^2} + \frac{p^2}{\lambda^2\hbar^2}\right) =$$

$$-\frac{\lambda}{2}\left(x + \frac{ip}{\lambda\hbar^2}\right) - \frac{p^2}{2\lambda^2\hbar^2}$$

Κάνουμε τώρα την ακόλουθη αλλαγή στην μεταβλητή της ολοκλήρωσης

$$x + \frac{ip}{\lambda\hbar} = y$$

και το ολοκλήρωμα Φουριέ γράφεται

$$\varphi(p) = Ne^{-\frac{p^2}{2\lambda\hbar^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda\frac{y^2}{2}}dy = N'e^{-\frac{p^2}{2\lambda\hbar^2}}$$

Το N′ είναι η σταθερά της. Μετά από απλούς υπολογισμούς βρίσκουμε $N' = 1/\sqrt{\hbar}\sqrt[4]{\lambda\pi}$. Επομένως τελικά βρίσκουμε

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{\hbar^2\lambda\pi}}e^{-p^2/2\lambda\hbar^2}$$

Η κατανομή αυτή είναι επίσης τύπου Γκάους.

′Ασκηση 4.4

Ενα σύστημα δύο σωματιδίων με μάζες m, M και θέση $\vec{r}_m$, $\vec{r}_M$ αντιστοίχως, αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και η αλληλεπίδραση περιγράφεται από το δυναμικό $V(\vec{r}_M - \vec{r}_m)$. Να αποδειχτεί ότι η εξίσωση Σρέντινγκερ διαχωρίζεται σε δύο άλλες εξισώσεις Σρέντινγκερ.

Απόδειξη: Η εξίσωση του Σρέντινγκερ του συστήματος των δύο σωματιδίων της άσκησης είναι

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{r_m} - \frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}^2_{r_M} + V(\vec{r}_m - \vec{r}_M)\right]\Psi(\vec{r}_m, \vec{r}_M) = E\Psi(\vec{r}_m, \vec{r}_M)$$

Θεωρούμε τις ακόλουθες νέες μεταβλητές

$$\vec{R} = \frac{m}{m+M}\vec{r}_m + \frac{M}{m+M}\vec{r}_M \qquad \vec{r} = \vec{r}_m - \vec{r}_M$$

Θα γράψουμε ακολούθως τους τελεστές $\vec{\nabla}^2_m$ και $\vec{\nabla}^2_M$ με τις νέες μεταβλητές. Θα υπολογίσουμε την αλλαγή μόνο στην x συνιστώσα.

Ο μετασχηματισμός είναι γραμμικός και γράφεται

$$X = \frac{m}{m+M}x_m + \frac{M}{m+M}x_M \qquad x = x_m - x_M$$

Επομένως έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial x_m} = \frac{\partial X}{\partial x_m}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_m}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_M} = \frac{\partial X}{\partial x_M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_M}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{M}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}$$

Επειδή ο μετασχηματισμός είναι γραμμικός για να βρούμε την δεύτερη παράγωγο ως προς X και x υψώνουμε στο τετράγωνο τις σχέσεις αυτές. Βρίσκουμε

$$\frac{\partial^2}{\partial x_m^2} = \left(\frac{m}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \left(\frac{m}{m+M}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2\frac{m}{m+M}\frac{\partial^2}{\partial x\partial X} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_M^2} = \left(\frac{M}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \left(\frac{M}{m+M}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2\frac{M}{m+M}\frac{\partial^2}{\partial x\partial X} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Με την βοήθεια των παραπάνω σχέσεων βρίσκουμε

$$\frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial x_m^2} + \frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial x_M^2} = \frac{1}{m+M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Ομοιες σχέσεις ικανοποιούν και οι υπόλοιπες δύο συνιστώσες οπότε βρίσκουμε

$$\frac{1}{m}\vec{\nabla}^2_{r_m} + \frac{1}{M}\vec{\nabla}^2_{r_M} = \frac{1}{m+M}\vec{\nabla}^2_R + \frac{1}{\mu}\vec{\nabla}^2_r$$

η σταθερά μ ονομάζεται ανηγμένη μάζα.

Εισάγουμε τις σχέσεις αυτές στην εξίσωση του Σρέντινγκερ του συστήματος και βρίσκουμε την εξίσωση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\vec{\nabla}^2_R - \frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2_r + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{R},\vec{r},t) = E\Psi(\vec{R},\vec{r},t)$$

Η διαφορική εξίσωση μπορεί να διαχωριστεί σε δύο άλλες διαφορικές εξισώσεις αν γράψουμε την κυματοσυνάρτηση με την μορφή του γινομένου

$$\Psi(\vec{r}_m,\vec{R}_M,t) = \psi(\vec{R},t)\varphi(\vec{r},t)$$

Αντικαθιστούμε την συνάρτηση αυτή στην εξίσωση και διαιρούμε με το γινόμενο ψφ. Βρίσκουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\frac{1}{\psi(\vec{R},t)}\vec{\nabla}^2_R\psi(\vec{R},t) + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}^2_r\varphi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\right] = E$$

Γράψαμε την εξίσωση σε μορφή τέτοια ώστε ο πρώτος όρος του πρώτου μέλους της εξίσωσης να εξαρτάται από τις μεταβλητές $\vec{R}$ και ο δεύτερος όρος από τις μεταβλητές $\vec{r}$ ενώ στο δεύτερο μέλος της εξισώσης υπάρχει μόνο η σταθερά Ε. Επειδή οι μεταβλητές αυτές είναι ανεξάρτητες μπορούμε να γράψουμε τον πρώτο όρο ίσο με μια σταθερά E_R και τον δεύτερο ίσο με μια άλλη σταθερά E_r. Οι ισότητες αυτές δίνουν τις σχέσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\vec{\nabla}^2_R\psi(\vec{R},t) = \mathrm{E}_R\psi(\vec{R},t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2_r + V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r},t) = E_r\varphi(\vec{r},t)$$

Φυσικά ισχύει η σχέση

$$\mathrm{E} = \mathrm{E}_R + \mathrm{E}_r$$

Τελικά αποδείξαμε ότι η εξίσωση Σρέντινγκερ διαχωρίζεται σε δύο εξισώσεις. Η μία περιγράφει την ελεύθερη κίνηση του κέντρου μάζας με διάνυσμα θέσης

$$\vec{R} = \frac{m\vec{r}_m + M\vec{r}_M}{m+M} \quad \text{και μάζα} \quad m+M$$

Η άλλη περιγράφει την κίνηση ενός νοητού σωματιδίου με μάζα μ, που ονομάζεται ανηγμένη μάζα, υπό την επίδραση του δυναμικού της αλληλεπίδρασης $V(\vec{r})$. Τα μ και $\vec{r}$ δίνονται από τις σχέσεις

$$\vec{r} = \vec{r}_m - \vec{r}_M \quad \text{και} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$$

Η ενέργεια του συστήματος είναι ίση με το άθροισμα των ενεργειών που αντιστοιχούν στις δύο αυτές κινήσεις.

ʹΑσκηση 4.5

Η κυματοσυνάρτηση ενός φυσικού συστήματος που κινείται στο διάστημα $-\alpha \leq x \leq \alpha$ είναι

$$\psi(x,t) = Ne^{-i\omega t}\,\text{συν}^2(3kx) \qquad k \in \Re$$

Να υπολογιστούν

Οι δυνατές τιμές του k, η σταθερά της κανονικοποίησης N και η μέση τιμή της θέσης του σωματιδίου.

Να υπολογιστούν επιπλέον τα ενδεχόμενα αποτελέσματα των μετρήσεων και οι αντίστοιχες πιθανότητες κάθε αποτελέσματος των μεγεθών ορμή, κινητική ενέργεια και συνολική ενέργεια, καθώς και οι μέσες τιμές όλων των παραπάνω μεγεθών.

Να λύσετε το ίδιο πρόβλημα και για άλλες κυματοσυναρτήσεις της ίδιας μορφής όπως για παράδειγμα

$$\psi(x,t) = Ne^{-i\omega t}\,\text{συν}(3kx)\,\text{ημ}^3(kx) \qquad k \in \Re$$

Λύση: Επειδή το σύστημα κινείται στο διάστημα $(-\alpha, +\alpha)$ η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται έξω από το διάστημα αυτό και επειδή επιπλέον είναι και συνεχής πρέπει να μηδενίζεται στα άκρα του διαστήματος. Ισχύει

$$\text{συν}(3k\alpha) = 0 \implies 3k\alpha = n\pi + \frac{\pi}{2} \implies k = \frac{\pi}{3\alpha}\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n \in N$$

Η σταθερά N υπολογίζεται από την απαίτηση η συνάρτηση να είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα δηλαδή

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = N^*N \int_{-\alpha}^{+\alpha} e^{-i\omega t} \,\text{συν}^2\,(3kx) e^{i\omega t} \,\text{συν}^2\,(3kx)dx =$$

$$|N|^2 \int_{-\alpha}^{+\alpha} \text{συν}^4\,(3kx)dx = |N|^2 \int_{-\alpha}^{+\alpha} \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{2}\,\text{συν}\,(6kx) + \frac{1}{8}\,\text{συν}\,(12kx)\right) dx$$

$$= |N|^2 \left[\frac{1}{8}x - \frac{1}{12k}\,\text{ημ}\,(6kx) - \frac{1}{96k}\,\text{ημ}\,(12kx)\right]_{-\alpha}^{+\alpha} = |N|^2 \frac{\alpha}{4} \qquad \Longrightarrow$$

$$|N| = \frac{2}{\sqrt{\alpha}}$$

Οι τριγωνομετρικοί όροι μηδενίζονται διότι $6\alpha k = \pi(2n+1)$ και $12\alpha k = \pi(4n+2)$.

Αν γράψουμε τον μιγαδικό αριθμό N στην μορφή $N = \rho e^{i\theta}$ τότε φαίνεται εύκολα ότι $|\mathrm{N}| = \rho$ και επομένως έχουμε υπολογίσει το μέτρο $|N|$ του μιγαδικού αριθμού ενώ το όρισμα του θ μένει απροσδιόριστο. Ο προσδιορισμός του ορίσματος δεν θα προσθέσει περισσότερες πληροφορίες για το σύστημα. Πραγματικά επειδή κατά τον υπολογισμών των φυσικών μεγεθών εμφανίζεται η κυματοσυνάρτηση πολλαπλασιασμένη με την συζυγή της δηλαδή γινόμενα της μορφής $\psi T \psi^*$ ο όρος $e^{i\theta}$ απλοποιείται και το όρισμα θ δεν υπάρχει στο τελικό αποτέλεσμα.

Κυματοσυναρτήσεις της μορφής

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{i\theta}\psi(\vec{r},t) \qquad\qquad \theta \in \Re$$

παριστάνουν τα ίδια συστήματα.

Θα βρούμε τώρα την μέση τιμή της θέσης του συστήματος. Εφαρμόζουμε τον τύπο της μέσης τιμής της κβαντομηχανικής και βρίσκουμε

$$\langle x \rangle = \int_{-\alpha}^{+\alpha} x\,\text{συν}^4\,(3kx)dx$$

Ο αναλυτικός υπολογισμός του ολοκληρώματος είναι απλός όμως δεν είναι απαραίτητος. Παρατηρούμε ότι η συνάρτηση κάτω από το ολοκλήρωμα είναι περιττή. Επομένως το ολοκλήρωμα είναι μια συνάρτηση $F(x)$ που είναι άρτια δηλαδή $F(x) = F(-x)$. Αρα έχουμε

$$\langle x \rangle = \int_{-\alpha}^{+\alpha} x\,\text{συν}^4\,(3kx)dx = [F(x)]_{-\alpha}^{+\alpha} = F(\alpha) - F(-\alpha) = 0$$

Για την υπόλοιπη άσκηση θα χρησιμοποιήσουμε την δεύτερη κυματοσυνάρτηση που παρουσιάζει περισσότερο ενδιαφέρον

Από τα αξιώματα της κβαντομηχανικής γνωρίζουμε ότι όταν μετρήσουμε ένα μέγεθος θα βρούμε κάποια ιδιοτιμή λ_j με πιθανότητα ίση με $|c_j|^2$ όπου c_j είναι ο αντίστοιχος συντελεστής ανάπτυξης της κυματοσυνάρτησης ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του μεγέθους. Για να απαντήσουμε λοιπόν στο ερώτημα της άσκησης "ποιες τιμές θα πάρει η ορμή" πρέπει να αναλύσουμε την δοσμένη κυματοσυνάρτηση ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις της ορμής.

Η εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή της ορμής είναι

$$pf(x) = \lambda f(x) \quad \Longrightarrow \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f(x) = \lambda f(x)$$

Η λύση της εξίσωσης αυτής δίνει τις ιδιοσυναρτήσεις και τις αντίστοιχες ιδιοτιμές της ορμής. Βρίσκουμε

$$f_\lambda(x) = Ne^{ikx} \qquad\qquad \lambda = \hbar k \quad k \in \Re$$

Θα αναλύσουμε τώρα την κυματοσυνάρτηση του συστήματος ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής με την βοήθεια των σχέσεων

$$\text{συν}\,(kx) = \frac{1}{2}\left(e^{ikx} + e^{-ikx}\right) \qquad\qquad \text{ημ}\,(kx) = \frac{1}{2i}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$$

Μετά από απλές πράξεις βρίσκουμε

$$\psi(x,t) = Ne^{-i\omega t}\frac{1}{2}\left(e^{i3kx} + e^{-i3kx}\right)\left(\frac{1}{2i}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)\right)^3 =$$

$$-Ne^{-i\omega t}\frac{1}{16i}\left(e^{i3kx} + e^{-i3kx}\right)\left(e^{i3kx} - 3e^{ikx} + 3e^{-ikx} - e^{-i3kx}\right) \quad \Longrightarrow$$

(4.2)

$$\psi(x,t) = \frac{-N}{16i}e^{-i\omega t}\left(e^{i6kx} + e^{-i6kx} - 3e^{i4kx} + 3e^{-i4kx} - 3e^{i2kx} + 3e^{-i2kx}\right)$$

Από την τελευταία σχέση μπορούμε να συμπεράνουμε τις πιθανές τιμές της ορμής του συστήματος και τις αντίστοιχες πιθανότητες τους. Η κυματοσυνάρτηση είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των ακόλουθων ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή της ορμής:

Ιδιοσυνάρτηση	με ιδιοτιμή	συντελεστή ανάπτυξης	και πιθανότητα
$\psi_1 = e^{i6kx}$	$\lambda_1 = 6\hbar k$	$c_1 = 1 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_1(\lambda_1) = 1/38$
$\psi_1 = e^{-i6kx}$	$\lambda_2 = -6\hbar k$	$c_2 = 3 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_2(\lambda_2) = 1/38$
$\psi_3 = e^{4ikx}$	$\lambda_3 = 4\hbar k$	$c_3 = 3 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_3(\lambda_3) = 9/38$
$\psi_4 = e^{-i4kx}$	$\lambda_4 = -4\hbar k$	$c_4 = 3 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_4(\lambda_4) = 9/38$
$\psi_5 = e^{i2kx}$	$\lambda_5 = 2\hbar k$	$c_5 = 3 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_5(\lambda_5) = 9/38$
$\psi_6 = e^{-i2kx}$	$\lambda_6 = -2\hbar k$	$c_6 = 3 \cdot e^{-i\omega t}(-N/16i)$	$P_6(\lambda_2) = 9/38$

Παρατηρούμε ότι το άθροισμα των πιθανοτήτων είναι φυσικά ίσο με την μονάδα.

$$P_1 + P_2 + P_3 + P_4 + P_5 + P_6 = \frac{1}{38} + \frac{1}{38} + \frac{9}{38} + \frac{9}{38} + \frac{9}{38} + \frac{9}{38} = 1$$

Υπολογίσαμε την πιθανότητα με τον τύπο

$$P_j = \frac{|c_j|^2}{|c_1|^2 + |c_1|^2 + |c_1|^2 + |c_1|^2 + |c_1|^2 + |c_1|^2}$$

Ο όρος

$$|c|^2 = c^* c = e^{-i\omega t}(\frac{-N}{16i})e^{i\omega t}(\frac{N}{16i}) = \frac{|N|^2}{16^2}$$

εμφανίζεται και στον αριθμητή και στον παρανομαστή και απλοποιείται. Για τον υπολογισμό της πιθανότητας P_4 για παράδειγμα βρίσκουμε

$$P_4 = \frac{3^2 \frac{|N|^2}{16^2}}{\frac{|N|^2}{16^2} + \frac{|N|^2}{16^2} + 3^2 \frac{|N|^2}{16^2} + 3^2 \frac{|N|^2}{16^2} + 3^2 \frac{|N|^2}{16^2} + 3^2 \frac{|N|^2}{16^2}} =$$

$$\frac{9}{1+1+9+9+9+9} = \frac{9}{38}$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή της ορμής από την τύπο της κβαντομηχανικής. Η μέση τιμή της ορμής υπολογίζεται ευκολότερα αν χρησιμοποιήσουμε τον κλασσικό ορισμό της μέσης τιμής από την θεωρίας των πιθανοτήτων. Βρίσκουμε

$$\langle p\rangle = \sum_{j=1}^{6} P_j \lambda_j = \frac{1}{38}6\hbar k - \frac{1}{38}6\hbar k + \frac{9}{38}4\hbar k - \frac{9}{38}4\hbar k + \frac{9}{38}2\hbar k - \frac{9}{38}2\hbar k = 0$$

Θα μελετήσουμε τώρα την κινητική ενέργεια

Ο τελεστής της κινητικής ενέργειας είναι

$$E_\kappa = \frac{1}{2m}p^2 = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές του τελεστή αυτού είναι η λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών

$$E_\kappa f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x) = \mu f(x)$$

Φαίνεται εύκολα ότι η εξίσωση έχει την ακόλουθη λύση

$$f(x) = Ne^{ikx} \qquad \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k \in \Re$$

Στην παραπάνω ιδιοτιμή αντιστοιχεί επίσης και η λύση $f(x) = Ne^{-ikx}$. Στην ίδια ιδιοτιμή αντιστοιχούν δύο διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις. Εχουμε δηλαδή εκφυλισμό στις ιδιοτιμές της κινητικής ενέργειας, τάξης 2.

Παρατηρούμε ότι ο τελεστής της ενέργειας και ο τελεστής της ορμής έχουν το ίδιο σύστημα ιδιοσυναρτήσεων πράγμα που το περιμέναμε αφού οι αντίστοιχοι τελεστές εναλλάσσονται

$$[E_\kappa, p] = \left[\frac{p^2}{2m}, p\right] = 0$$

Αρα από την ανάπτυξη της κυματοσυναρτήσης σχέση (4.2) συμπεραίνουμε ότι πιθανές τιμές μ_j της ενέργειας και οι αντίστοιχες πιθανότητες τους $P_j(\mu_j)$ είναι

$$\mu_1 = \frac{\hbar^2(6k)^2}{2m} = \frac{36\hbar^2 k^2}{2m} \qquad P_1(\mu_1) = \frac{1}{38} + \frac{1}{38} = \frac{2}{38}$$

$$\mu_2 = \frac{\hbar^2(4k)^2}{2m} = \frac{16\hbar^2 k^2}{2m} \qquad P_2(\mu_2) = \frac{9}{38} + \frac{9}{38} = \frac{18}{38}$$

$$\mu_3 = \frac{\hbar^2(2k)^2}{2m} = \frac{4\hbar^2 k^2}{2m} \qquad P_3(\mu_3) = \frac{9}{38} + \frac{9}{38} = \frac{18}{38}$$

Η μέση τιμή της ενέργειας είναι

$$\langle E_\varkappa \rangle = \sum_{j=1}^{3} P_j \mu_j = \frac{36\hbar^2 k^2}{2m}\frac{2}{38} + \frac{16\hbar^2 k^2}{2m}\frac{18}{38} + \frac{4\hbar^2 k^2}{2m}\frac{18}{38} = \frac{216\hbar^2}{38m}$$

Θα μελετήσουμε τέλος την συνολική ενέργεια με αντίστοιχο τελεστή

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Η ιδιοσυνάρτηση και η ιδιοτιμή του τελεστή αυτού είναι

$$f(t) = Ne^{-i\omega t} \qquad \varepsilon = \hbar\omega$$

Παρατηρούμε ότι η δοσμένη κυματοσυνάρτηση είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή αυτού με ιδιοτιμή $\varepsilon = \hbar\omega$. Επομένως η πιθανή τιμή της συνολικής ενέργειας είναι $\varepsilon = \hbar\omega$ με πιθανότητα ίση με 1.

Την τιμή $\hbar\omega$ έχει προφανώς και η μέση τιμή της ενέργειας.

Άσκηση 4.6

Αν ισχύει η σχέση

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{r}\cdot\vec{p}\rangle = 0$$

όπου $H = \mathrm{E}_{\varkappa\iota\nu} + V$, τότε να αποδειχτεί ότι

$$2\langle \mathrm{E}_{\varkappa\iota\nu}\rangle = \left\langle \vec{r}\cdot\vec{\nabla}V \right\rangle$$

Η πρόταση είναι γνωστή σαν βήριαλ (virial) θεώρημα.

Λύση: Θα υπολογίσουμε πρώτα τους μεταθέτες του τελεστή $\vec{r}\cdot\vec{p}$ με τους τελεστές της κινητικής και δυναμικής ενέργειας. Βρίσκουμε

$$[E_k, \vec{r}\cdot\vec{p}] = \left[\frac{p^2}{2m}, xp_1 + yp_2 + zp_3\right] = \frac{1}{2m}\left[p_1^2, xp_1\right] + \frac{1}{2m}\left[p_2^2, yp_2\right] +$$

$$\frac{1}{2m}\left[p_3^2, zp_1\right] = \frac{1}{2m}\left[p_1^2, x\right]p_1 + \frac{1}{2m}\left[p_2^2, y\right]p_2 + \frac{1}{2m}\left[p_3^2, z\right]p_3 =$$

$$\frac{1}{2m}2(-i\hbar)p_1p_1 + \frac{1}{2m}2(-i\hbar)p_2p_2 + \frac{1}{2m}2(-i\hbar)p_3p_3 =$$

$$-2i\hbar\frac{1}{2m}\left(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2\right) = -2i\hbar E_k$$

Για τον μεταθέτη με την δυναμική ενέργεια βρίσκουμε

$$[V(\vec{r}), \vec{r}\cdot\vec{p}] = [V(\vec{r}), xp_1] + [V(\vec{r}), yp_2] + [V(\vec{r}), zp_3] =$$

$$-i\hbar x\left[V(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x}\right] - i\hbar y\left[V(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial y}\right] - i\hbar z\left[V(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial z}\right] =$$

$$i\hbar x\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x} + i\hbar y\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} + i\hbar z\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z} = i\hbar\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

Μπορούμε τώρα να υπολογίσουμε την χρονική εξέλιξη του τελεστή $\vec{r}\cdot\vec{p}$. Από την εξίσωση του Χάιζενμπεργκ βρίσκουμε

$$\frac{d}{dt}\vec{r}\cdot\vec{p} = \frac{i}{\hbar}\left[H, \vec{r}\cdot\vec{p}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[E_k, \vec{r}\cdot\vec{p}\right] + \frac{i}{\hbar}\left[V(\vec{r}), \vec{r}\cdot\vec{p}\right] =$$

$$\frac{i}{\hbar}(-2i\hbar E_k) + \frac{i}{\hbar}i\hbar\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{r}) = 2E_k - \vec{r}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{r})$$

Παίρνουμε τις μέσες τιμές των παραπάνω μεγεθών και βρίσκουμε

$$\frac{d}{dt}\left\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\right\rangle = 2\left\langle E_k\right\rangle - \left\langle\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{r})\right\rangle = 0$$

Η παραπάνω σχέση είναι μηδέν από τα δεδομένα της άσκησης. Η τελευταία αυτή ισότητα συνεπάγεται την προς απόδειξη σχέση.

Κεφάλαιο 5

Προβλήματα Κβαντομηχανικής

Στο κεφάλαιο αυτό θα λύσουμε την εξίσωση κίνησης της κβαντομηχανικής για ορισμένα απλά δυναμικά.

5.1 Το ελεύθερο σωμάτιο

Ενα σωματίδιο θεωρείται ελεύθερο αν βρίσκεται μέσα σε σταθερό δυναμικό, οπότε δεν εξασκείται επάνω του καμιά δύναμη. Σύμφωνα με την κλασσική μηχανική το σωματίδιο αυτό εκτελεί ευθύγραμμη ομαλή κίνηση.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε το δυναμικό

$$V(\vec{r}, t) = 0$$

Η εξίσωση της κίνησης του Σρέντινγκερ είναι

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(\vec{r}, t)$$

Επειδή το δυναμικό δεν εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο, η κατάσταση του σωματιδίου είναι στάσιμη και άρα η λύση της εξίσωσης της κίνησης έχει την μορφή στάσιμου κύματος

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \psi(\vec{r})$$

Αν εισάγουμε την παραπάνω λύση στην διαφορική εξίσωση συνεπάγεται ότι η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r})$ είναι λύση της εξίσωσης

$$\left(\vec{\nabla}^2 + k^2 \right) \psi(\vec{r}) = 0 \qquad\qquad k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

όπου $\mathrm{E} = \hbar\omega$ είναι η ενέργεια του ελεύθερου σωματιδίου.

Η λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Αρα η κυματοσυνάρτηση του ελευθέρου σωματιδίου είναι

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ce^{-i\left(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r}\right)} \tag{5.1}$$

Επειδή δεν υπάρχουν οριακές συνθήκες, το $\vec{k}$ μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή και το φάσμα της ενεργείας είναι συνεχές

$$\mathrm{E} = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k_i \in \Re \quad i = 1, 2, 3 \tag{5.2}$$

Οι ισοφασικές επιφάνειες του κύματος αυτού είναι οι επιφάνειες που ικανοποιούν την σχέση

$$\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t = k_1 x + k_2 y + k_3 z - \omega t = C_o$$

Αρα είναι επίπεδα και συναρτήσεις του τύπου αυτού ονομάζονται επίπεδα κύματα.

Η κυματοσυνάρτηση (5.1) είναι ιδιοσυνάρτηση και του τελεστή της ενέργειας και του τελεστή της ορμής. Οι δύο τελεστές πράγματι εναλλάσσονται

$$[p_i, H] = \left[p_i, \frac{p^2}{2m}\right] = 0 \qquad i = 1, 2, 3$$

Επομένως η ορμή είναι μία σταθερά της κίνησης.

Η ορμή του σωματιδίου είναι πλήρως ορισμένη και επομένως η διασπορές των τριών συνιστωσών της ορμής είναι ίσες με μηδέν. Λόγω όμως των σχέσεων αβεβαιότητας, αυτό σημαίνει ότι η θέση του σωματιδίου είναι τελείως απροσδιόριστη. Τούτο φαίνεται και από την πυκνότητα πιθανότητας του ελεύθερου σωματιδίου που είναι σταθερή, ανεξάρτητη της θέσης

$$\rho(\vec{r}, t) = \Psi^*\Psi = |C|^2$$

Επομένως το σωματίδιο είναι εξίσου πιθανό να βρεθεί σε οποιαδήποτε περιοχή του χώρου.

Η κυματοσυνάρτηση αυτή δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και άρα δεν μπορεί να παριστάνει καμία φυσική κατάσταση. Επειδή το φάσμα είναι συνεχές, η κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων γίνεται με την βοήθεια της δέλτα συνάρτησης

$$\delta(\vec{k}-\vec{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{\Re^3} d^3\vec{r} e^{-i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\cdot\vec{r}}$$

Για να εντοπίσουμε το σωματίδιο γύρω από κάποιο σημείο του χώρου εργαζόμαστε ως εξής: Επειδή η εξίσωση Σρέντινγκερ είναι γραμμική, θεωρούμε ότι η γενική λύση της είναι ένας γραμμικός συνδυασμός όλων των λύσεων για κάθε $\vec{k}$. Το $\vec{k}$ όμως παίρνει όλες τις πραγματικές τιμές και άρα η λύση είναι τελικά το ολοκλήρωμα

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{\Re^3} e^{-i\left(\omega(\vec{k})t-\vec{k}\cdot\vec{r}\right)} C(\vec{k})\, d^3\vec{k} \tag{5.3}$$

Οι λύσεις της μορφής αυτής ονομάζονται κυματοδέματα ή κυματοπακέτα. Το $C(\vec{k})$ είναι το πλάτος του κύματος που αντιστοιχεί στην ορμή $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ και δίνεται από τον ακόλουθο αντίστροφο Φουριέ μετασχηματισμό

$$C(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{\Re^3} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r},0)\, d^3\vec{r} \tag{5.4}$$

Αν θέλουμε τα κυματοδέματα να ικανοποιούν την σχέση κανονικοποιήσης, τότε αποδεικνύεται ότι και τα $C(\vec{k})$ ικανοποιούν μία παρόμοια σχέση κανονικοποιήσης. Εχουμε

$$1 = \iiint_{\Re^3} \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) d^3\vec{r} =$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{\Re^3} d^3\vec{r} \iiint_{\Re^3} e^{i\left(\omega(\vec{k})t-\vec{k}\cdot\vec{r}\right)} C^*(\vec{k})\, d^3\vec{k} \iiint_{\Re^3} e^{-i\left(\omega(\vec{k}')t-\vec{k}'\cdot\vec{r}\right)} C(\vec{k}')\, d^3\vec{k}'$$

$$= \iiint_{\Re^3} \iiint_{\Re^3} e^{i\left[\omega(\vec{k})-\omega(\vec{k}')\right]t} C^*(\vec{k})C(\vec{k}')\delta(\vec{k}-\vec{k}') d^3\vec{k} d^3\vec{k}' =$$

$$\iiint_{\Re^3} C(\vec{k})C^*(\vec{k})\, d^3\vec{k} = 1$$

Η σχέση αυτή είναι η γνωστή ταυτότητα του Πάρσεβαλ.

Το σωματίδιο τώρα δεν έχει ορισμένη ορμή αλλά ούτε ορισμένη θέση. Τα δύο μεγέθη προσδιορίζονται με κάποιες πεπερασμένες απροσδιοριστίες. Η πυκνότητα πιθανότητας για την ορμή του σωματιδίου δίνεται από τη σχέση

$$C(\vec{k})^* C(\vec{k})$$

Η περιγραφή των ελευθέρων σωματιδίων με πολύ εντοπισμένα κυματοπακέτα που θα ταξιδεύουν σε καλά καθορισμένες τροχιές, δεν μπορεί να γίνει. Ο λόγος είναι ότι τα κυματοδέματα έχουν την ιδιότητα να απλώνονται στον χώρο όσο περνάει ο χρόνος. Η ιδιότητα αυτή είναι γενική και ισχύει για οποιοδήποτε δυναμικό με εξαίρεση τον αρμονικό ταλαντωτή. Η διασπορά των κυματοδεμάτων εξαρτάται από την σχέση

$$\omega = \omega(\vec{k})$$

που ονομάζεται σχέση διασποράς.

Θα αποδείξουμε τώρα ότι τα κυματοδέματα που παριστάνουν ελεύθερα σωματίδια, απλώνουν στο χώρο και διαλύονται σαν τα σύννεφα όσο περνάει ο χρόνος. Η σχέση διασποράς δίνεται από την σχέση (5.2)

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

που δεν είναι γραμμική συνάρτηση του $\vec{k}$ και η φασική ταχύτητα $\vec{\upsilon} = \vec{p}/m = \hbar\vec{k}/m$ δεν είναι σταθερή. Θα εργαστούμε σε μία διάσταση.

Υποθέτουμε ότι στον χρόνο $t = 0$ η κυματοσυνάρτηση έχει σε μία διάσταση την εξής κανονική μορφή

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta x)^2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}\right\}$$

Το Δx δίνει την αβεβαιότητα για την θέση του σωματιδίου.

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτής της μορφής περιγράφουν καταστάσεις με την ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα. Δηλαδή η σχέση αβεβαιότητας ισχύει με το ίσον.

Η σχέση (5.4) δίνει το πλάτος του κύματος. Μετά την ολοκλήρωση βρίσκουμε

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-k^2(\Delta x)^2}$$

Η σχέση (5.3) δίνει την μορφή του κυματοδέματος μετά από χρόνο t. Μετά από μία ακόμη ολοκλήρωση βρίσκουμε

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta x)^2 \lambda(t)}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2 \lambda(t)}\right\}$$

όπου

$$\lambda(t) = 1 + i\frac{\hbar t}{2m(\Delta x)^2}$$

Το παραπάνω κυματόδεμα έχει πάλι την κανονική μορφή. Η αβεβαιότητα όμως για την θέση του σωματιδίου δίνεται από την σχέση

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)^2 |\lambda(t)| = (\Delta x)^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2(\Delta x)^4}\right)^{1/2}$$

Παρατηρούμε ότι η αβεβαιότητα για την θέση του σωματιδίου μεγαλώνει ανάλογα με τον χρόνο t και αντιστρόφως ανάλογα, από την μάζα m του σωματιδίου και από την αρχική αβεβαιότητα Δx της θέσης του. Δηλαδή όσο πιο εντοπισμένο είναι αρχικά το σωματίδιο, τόσο πιο γρήγορα θα απλωθεί στον χώρο.

Τα μακροσκοπικά σωματίδια μπορούν να περιγραφούν με πολύ εντοπισμένα κυματοπακέτα και επομένως με την κλασσική μηχανική, διότι ο ρυθμός που απλώνουν τα κυματοπακέτα τους είναι πάρα πολύ μικρός. Για παράδειγμα για ένα σωμάτιο με μάζα $m = 1gr$ και με αρχική αβεβαιότητα για την θέση $\Delta x = 10^{-4} cm$, θα χρειαστεί χρόνος ίσος με $t = 10^{19} sec \approx 10^{12}$ χρόνια, για μία μικρή αύξηση του Δx.

Παρατήρηση: Μια τελείως διαφορετική κατάσταση θα αντιμετωπίζαμε αν η σχέση διασποράς ήταν γραμμική συνάρτηση του $\vec{k}$, δηλαδή

$$\omega = \vec{\upsilon} \cdot \vec{k}$$

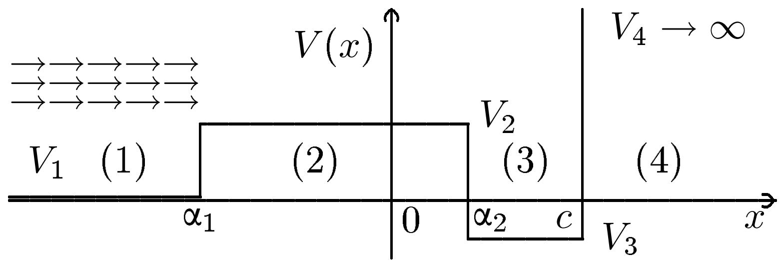
όπου η φασική ταχύτητα $\vec{\upsilon}$ είναι σταθερή, τότε το κυματόδεμα με την γραμμική αυτή σχέση διασποράς γίνεται

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{\Re^3} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{\upsilon}t - \vec{r})} C(\vec{k})\, d^3\vec{k} = \Psi(\vec{r} - \vec{\upsilon}t, 0)$$

Τούτο σημαίνει ότι τα κυματοδέματα κινούνται στον χώρο χωρίς να αλλάζουν μορφή. Σε κάποια χρονική στιγμή t το κυματόδεμα έχει την μορφή που είχε στον χρόνο $t = 0$, είναι όμως μετατοπισμένο στην θέση $\vec{r} + \vec{\upsilon}t$. Αρα αν η φασική ταχύτητα είναι σταθερή τα κυματοδέματα δεν απλώνουν.

5.2 Κατά τμήματα σταθερά δυναμικά

Θεωρούμε ένα σωμάτιο που κινείται σε μία διάσταση από τα αριστερά προς τα δεξιά, μέσα σε ένα κατά τμήματα σταθερό δυναμικό, όπως αυτό του σχήματος.



Σχήμα 5.1
Εξασκείται κάποια δύναμη μόνο στα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού.

Στο σωματίδιο επενεργεί μία δύναμη μόνο στα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού. Σε όλα τα άλλα σημεία το σωματίδιο είναι ελεύθερο. Στην φύση δεν υπάρχουν τέτοια δυναμικά. Είναι όμως χρήσιμα διότι οδηγούν σε εξισώσεις που μπορούν να λυθούν αναλυτικά. Από την άλλη μεριά με τα δυναμικά αυτά μπορούμε τα προσεγγίσουμε άλλα πιο φυσιολογικά δυναμικά.

Κλασσικά η κίνηση επιτρέπεται μόνο σε περιοχές όπου η ενέργεια είναι μεγαλύτερη από το δυναμικό. Ενα σωματίδιο που έρχεται από αριστερά με ενέργεια Ε θα επιβραδυνθεί στο σημείο α_1, θα επιταχυνθεί στο σημείο α_2 και τέλος θα κτυπήσει στο δυναμικό V_4 και θα γυρίσει πίσω. Οι ταχύτητες του σωματιδίου στις περιοχές 1, 2, και 3 μπορούν να βρεθούν από τον αρχή της διατήρησης της ενέργειας

$$\mathrm{E} = \frac{1}{2}m\upsilon_1^2 = \frac{1}{2}m\upsilon_2^2 + V_2 = \frac{1}{2}m\upsilon_2^2 - V_3$$

Για να λύσουμε τέτοιου είδους προβλήματα στην κβαντομηχανική εργαζόμαστε ως εξής:

1) Βρίσκουμε πρώτα τις λύσεις ψ_1, ψ_2 και ψ_3 στις περιοχές 1, 2, και 3, που το δυναμικό είναι συνεχές, λύνοντας την αντίστοιχη εξίσωση Σρέντινγκερ.

2) Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ και η παράγωγος της $\psi'(x)$ πρέπει να είναι συνεχείς συναρτήσεις. Η συνέχεια των συναρτήσεων αυτών είναι συνέπεια της φυσικής απαίτησης, ότι και η πυκνότητα πιθανότητας και η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας πρέπει να είναι συνεχείς συναρτήσεις.

Η κυματοσυνάρτηση και η παράγωγος της στο παράδειγμα μας είναι συνεχείς παντού, εκτός ίσως από τα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού. Στα σημεία αυτά επιβάλλουμε κατάλληλες συνθήκες, ώστε οι συναρτήσεις αυτές να είναι συνεχείς παντού.

Για παράδειγμα γράφουμε πιο κάτω τις σχέσεις που πρέπει να ισχύουν, ώστε η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ ενός σωματιδίου που κινείται στο δυναμικό του σχήματος να είναι συνεχής στα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού

$$\psi_1(\alpha_1) = \psi_2(\alpha_1) \qquad \psi_2(\alpha_2) = \psi_3(\alpha_2)$$

Για την συνέχεια της $\psi'(x)$ στα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού του σχήματος πρέπει να ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις

$$\psi_1'(\alpha_1) = \psi_2'(\alpha_2) \qquad \psi_2'(\alpha_2) = \psi_3'(\alpha_2)$$

3) Η συνάρτηση $\psi(x)$ δεν πρέπει για κανένα x να απειρίζεται, αν θέλουμε να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και άρα φυσικά αποδεκτή. Πιθανές τιμές για να απειρίζεται η κυματοσυνάρτηση είναι τα σημεία $\pm\infty$. Απαιτούμε λοιπόν να ισχύει η σχέση

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0$$

Στις περιπτώσεις όπου η παραπάνω απαίτηση δεν είναι δυνατόν να ισχύει, όπως για παράδειγμα συμβαίνει για στάσιμες καταστάσεις με συνεχές φάσμα, τότε η μη απόκλιση του ολοκληρώματος του $|\psi|^2$ αντιμετωπίζεται με τα κυματοπακέτα ή με άλλες μεθόδους.

Η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει επίσης να τείνει στο μηδέν όσο απομακρυνόμαστε από τις κλασσικά επιτρεπόμενες περιοχές.

4) Είναι δυνατόν το δυναμικό να απειρίζεται για κάποια τιμή του $x = c$. Επειδή δεν είναι δυνατόν να υπάρχει σωματίδιο για $x > c$, η κυματοσυνάρτηση στην περιοχή αυτή πρέπει να είναι μηδέν. Η κυματοσυνάρτηση όμως

πρέπει να είναι και συνεχής και άρα πρέπει να είναι μηδέν και στο σημείο $x = c$. Δηλαδή στο σημείο αυτό έχουμε την συνθήκη

$$(\psi(x))_{x=c} = 0$$

5) Τέλος και άλλες συνθήκες είναι δυνατόν να προκύψουν από τα δεδομένα και την φυσική των διαφόρων προβλημάτων.

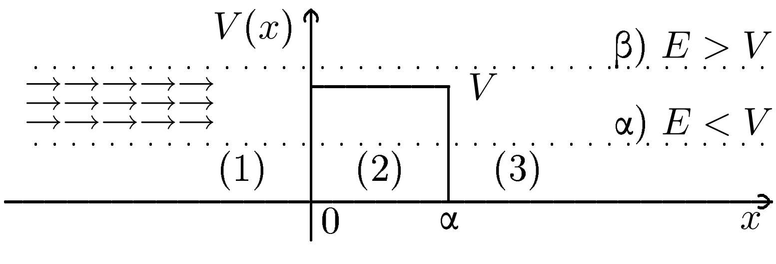
Το ενεργειακό φάσμα είναι διακεκριμένο αν το σωμάτιο είναι δέσμιο και συνεχές αν δεν είναι δέσμιο. Για το δυναμικό του σχήματος για παράδειγμα παρατηρούμε τα εξής:

Αν τα σωμάτια που βρίσκονται στην περιοχή (3) έχουν ενέργεια $E < V_2$, τότε κλασσικά κινούνται σε περιορισμένη περιοχή του χώρου. Το σύστημα ονομάζεται δέσμιο και οι ιδιοτιμές της ενεργείας τους είναι διακεκριμένες. Αντιθέτως αν έχουν ενέργεια $E > V_2$, τότε τα κλασσικά σωμάτια κτυπούν στο δυναμικό και κινούνται προς το $-\infty$. Οι ιδιοτιμές της ενεργείας τους είναι συνεχείς. Οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε αυτές τις λύσεις ονομάζονται καταστάσεις σκέδασης.

5.3 Φράγμα δυναμικού

θεωρούμε το δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} V & \text{για} \quad 0 \leq x \leq \alpha \\ 0 & \text{για} \quad x < 0 \quad x > \alpha \end{cases}$$



Σχήμα 5.2
Δέσμη σωματιδίων προσπίπτει από τα αριστερά στο φράγμα δυναμικού

Ενα σωματίδιο κινείται σε μία διάσταση με ενέργεια Ε από τα αριστερά προς τα δεξιά, και προσπίπτει στο δυναμικό του σχήματος. Το σωματίδιο και στις τρεις περιοχές του σχήματος, περιγράφεται από την λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ.

Επειδή το δυναμικό δεν εξαρτάται από τον χρόνο η λύση της εξίσωσης έχει την μορφή στασίμου κύματος της μορφής

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega t}\psi(x) \qquad \mathrm{E} = \hbar\omega$$

Η συνάρτηση $\psi(x)$ και η σταθερά E είναι η ιδιοσυνάρτηση και η ιδιοτιμή αντιστοίχως του τελεστή της ενέργειας. Δηλαδή είναι λύσεις της ακόλουθης εξισώσης ιδιοτιμών του Σρέντινγκερ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = \mathrm{E}\psi(x)$$

Το σωματίδιο δεν είναι δέσμιο και επομένως το φάσμα των ιδιοτιμών της ενεργείας είναι συνεχές.

Την εξίσωση αυτή θα λύσουμε παρακάτω στις τρεις περιοχές του σχήματος και θα επιβάλλουμε μετά τις κατάλληλες συνθήκες, ώστε να μην υπάρχουν ασυνέχειες στα σημεία 0 και α, δηλαδή στα σημεία ασυνεχείας του δυναμικού. Θα λύσουμε το πρόβλημα ξεχωριστά, για τις περιπτώσεις που η ενέργεια του συστήματος είναι μικρότερη και μεγαλύτερη του δυναμικού V.

α) Περίπτωση $\mathrm{E} < V$

Στην περιοχή 1, η ανεξάρτητη από τον χρόνο εξίσωση του Σρέντινγκερ είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1(x) = \mathrm{E}\psi_1(x)$$

και έχει λύση

$$\psi_1(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x} \qquad k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Το κύμα αυτό είναι άθροισμα δύο κυμάτων. Ο πρώτος όρος του παραπάνω αθροίσματος είναι ένα κύμα που διαδίδεται προς την θετική φορά του άξονα των x, δηλαδή από αριστερά προς τα δεξιά. Ο δεύτερος όρος είναι ενα κύμα που διαδίδεται προς την αρνητική φορά του άξονα των x, δηλαδή από τα δεξιά προς τα αριστερά.

Πράγματι προσθέτοντας και την χρονική εξάρτηση του κύματος έχουμε

$$\Psi_1(x,t) = C_1 e^{-i(\omega t - k_1 x)} + C_2 e^{i(\omega t + k_1 x)}$$

Για ένα τυχόν σημείο x οι ισοφασικές επιφάνειες του πρώτου κύματος ικανοποιούν την σχέση

$$kx - \omega t = C_o \quad \Longrightarrow \quad x = +\frac{\omega}{k} t + C_o$$

Αρα το x μεγαλώνει όσο περνάει ο χρόνος δηλαδή για $t \to +\infty$ και το κύμα πηγαίνει προς το $+\infty$. Ενώ για το δεύτερο κύμα έχουμε

$$kx + \omega t = C_o \Longrightarrow x = -\frac{\omega}{k} t + C_o$$

Στην περίπτωση αυτή το x πηγαίνει προς το $-\infty$ όσο περνάει ο χρόνος.

Στην περιοχή 2, η εξίσωση του Σρέντινγκερ είναι

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi_2(x) = \mathrm{E} \psi_2(x)$$

και έχει λύση

$$\psi_2(x) = D_1 e^{k_2 x} + D_2 e^{-k_2 x} \qquad k_2 = \left(\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \in \Re$$

Στην περιοχή αυτή κλασσικά δεν υπάρχουν σωμάτια, πράγματι η λύση δεν παριστάνει κανένα κύμα. Είναι άθροισμα δύο εκθετικών συναρτήσεων.

Στην περιοχή 3, η εξίσωση Σρέντινγκερ είναι ίδια με την περιοχή 1 και έχει την λύση

$$\psi_3(x) = F e^{ik_1 x} + G e^{-ik_1 x} \qquad k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Ο δεύτερος όρος της ψ_3 παριστάνει κύματα που κινούνται από τα δεξιά προς τα αριστερά στην περιοχή 3. Τέτοια σωματίδια δεν έχουν λόγο ύπαρξης, διότι εφ' όσον ξεπέρασαν το δυναμικό στο σημείο $x = 0$ δεν έχουν κανένα λόγο να γυρίσουν πίσω. Επομένως πρέπει να μηδενίσουμε την σταθερά G.

Συνοψίζουμε όλα τα αποτελέσματα και έχουμε

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x} & 0 > x \\ \psi_2(x) = D_1 e^{k_2 x} + D_2 e^{-k_2 x} & 0 < x < \alpha \\ \psi_3(x) = F\ e^{ik_1 x} & x > \alpha \end{cases}$$

Εφαρμόζουμε τώρα τις συνθήκες για την συνέχεια της κυματοσυναρτήσης και της παραγώγου της, στα σημεία 0 και α. Εχουμε

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{και} \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$\psi_2(\alpha) = \psi_3(\alpha) \quad \text{και} \quad \psi_2'(\alpha) = \psi_3'(\alpha)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει ένα σύστημα τεσσάρων εξισώσεων με πέντε αγνώστους, τις σταθερές $C_1,\ C_2,\ D_1,\ D_2,\ F$, το εξής

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= D_1 + D_2 \\ ik_1 \left(C_1 - C_2\right) &= k_2 \left(D_1 - D_2\right) \\ D_1 e^{k_2 \alpha} + D_2 e^{-k_2 \alpha} &= F e^{ik_1 \alpha} \\ k_2 \left(D_1 e^{k_2 \alpha} - D_2 e^{-k_2 \alpha}\right) &= ik_1 F e^{ik_1 \alpha} \end{aligned}$$

Λύνουμε το σύστημα και βρίσκουμε τις τέσσερις πρώτες σταθερές συναρτήσει της F, η οποία μπορεί να προσδιοριστεί από την σχέση κανονικοποιήσης. Η λύση του συστήματος είναι

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{1}{2} F e^{ik_1 \alpha} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{-\alpha k_2} \\ D_2 &= \frac{1}{2} F e^{ik_1 \alpha} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{\alpha k_2} \\ C_1 &= \frac{1}{2} F e^{ik_1 \alpha} \left(2 \cosh\left(a k_2\right) + \frac{k_1^2 - k_2^2}{ik_1 k_2} \sinh\left(\alpha k_2\right)\right) \\ C_2 &= \frac{1}{2} F e^{ik_1 \alpha} \frac{k_1^2 + k_2^2}{ik_1 k_2} \sinh\left(a k_2\right) \end{aligned}$$

Σύμφωνα με την κλασσική μηχανική όλα τα σωμάτια με ενέργεια μικρότερη από το V θα ανακλαστούν από το φράγμα δυναμικού. Κανένα σωματίδιο δεν είναι δυνατόν να βρεθεί στην περιοχή 3. Εδώ παρατηρούμε ότι υπάρχει ένα κύμα που διαδίδεται προς τα δεξιά στην περιοχή 3. Αρα αντίθετα από την κλασσική μηχανική ένα σωμάτιο που προσπίπτει στο φράγμα, έχει κάποια μη μηδενική πιθανότητα να διαπεράσει το φράγμα και να εξακολουθήσει να κινείται στην περιοχή 3. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται φαινόμενο σήραγγος.

Παρατήρηση: Το φαινόμενο της σήραγγος είναι το κλειδί για την κατανόηση του φαινομένου της διάσπασης των πυρήνων με ταυτόχρονη εκπομπή σωματιδίων άλφα.

Θα υπολογίσουμε στη συνέχεια την πιθανότητα της διέλευσης και της ανάκλασης στο φαινόμενο σήραγγος.

Ο όρος $C_1 e^{ik_1 x}$ στην κυματοσυνάρτηση ψ_1 παριστάνει το κύμα που προσπίπτει από τα αριστερά στο φράγμα. Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας για το κύμα αυτό είναι

$$J_1 = \upsilon_\pi |C_1|^2 \quad \text{όπου} \quad \upsilon_\pi = \frac{\hbar k_1}{m}$$

Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας για το κύμα που έχει διαπεράσει το δυναμικό και κινείται στην περιοχή 3 είναι

$$J_3 = \upsilon_\pi |F|^2$$

Η πιθανότητα διέλευσης ορίζεται από τον λόγο αυτών των δύο ρευμάτων. Βρίσκουμε

$$T = \frac{J_3}{J_1} = \frac{|F|^2}{|C_1|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + \left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \sinh^2(k_2 \alpha)}$$

Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας για το κύμα που έχει ανακλαστεί από το δυναμικό και κινείται στην περιοχή 1 προς τα αριστερά είναι

$$J_2 = \upsilon_\pi |C_2|^2$$

Η πιθανότητα της ανάκλασης ορίζεται από τον λόγο του ρεύματος του κύματος που ανακλάται προς το ρεύμα του κύματος που προσπίπτει στο δυναμικό. Βρίσκουμε

$$R = \frac{J_2}{J_1} = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{\left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \sinh^2(k_2 \alpha)}{4k_1^2 k_2^2 + \left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \sinh^2(k_2 \alpha)}$$

Το άθροισμα των δύο πιθανοτήτων είναι φυσικά ίσο με την μονάδα

$$R + T = 1$$

όπως μπορούμε εύκολα να αποδείξουμε.

β) **Περίπτωση** Ε $> V$

Στην περίπτωση αυτή, σύμφωνα με την κλασσική μηχανική, όλα τα σωμάτια θα περάσουν το φράγμα και θα συνεχίσουν να κινούνται προς τα δεξιά στην περιοχή 3.

Στην κβαντομηχανική το σωματίδιο περιγράφεται από την λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ. Το φάσμα των ιδιοτιμών της ενεργείας είναι και πάλι συνεχές. Οι ιδιοσυναρτήσεις στην περίπτωση αυτή είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = C_1' e^{ik_1' x} + C_2' e^{-ik_1' x} & 0 > x \\ \psi_2(x) = D_1' e^{ik_2' x} + D_2' e^{-ik_2' x} & 0 < x < \alpha \\ \psi_3(x) = F' \; e^{ik_1' x} & x > \alpha \end{cases}$$

Οι σταθερές k_1' και k_2' δίνονται από τις σχέσεις

$$k_1' = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} = k_1 \quad \text{και} \quad k_2' = \left(\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)^{1/2} = ik_2 \in \Re$$

Τα k_1 και k_2 ορίζονται όπως και στην προηγούμενη περίπτωση.

Η διαφορά από την περίπτωση Ε $< V$ είναι μόνο στην περιοχή 2. Εδώ στην περιοχή 2, η κυματοσυνάρτηση είναι ένα άθροισμα δύο κυμάτων, ενώ στην προηγούμενη περίπτωση η κυματοσυνάρτηση ήταν μια φθίνουσα συνάρτηση.

Εφαρμόζουμε τις σχέσεις συνεχείας για να προσδιορίσουμε τις σταθερές και βρίσκουμε τέλος τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης. Δεν χρειάζεται να επαναλάβουμε τις πράξεις, αντικαθιστούμε απλώς το k_2 με το $-ik_2$ στις ανάλογες σχέσεις της προηγούμενης περίπτωσης. Θα χρησιμοποιήσουμε τον γνωστό τύπο $sinh(ix) = i\,\text{ημ}\,x$. βρίσκουμε

$$T = \frac{J_3}{J_1} = \frac{|F'|^2}{|C_1'|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + \left(k_1^2 - k_2^2\right)^2 \text{ημ}^2\left(k_2 \alpha\right)}$$

$$R = \frac{J_2}{J_1} = \frac{|C_2'|^2}{|C_1'|^2} = \frac{\left(k_1^2 - k_2^2\right)^2 \text{ημ}^2\left(k_2 \alpha\right)}{4k_1^2 k_2^2 + \left(k_1^2 - k_2^2\right)^2 \text{ημ}^2\left(k_2 \alpha\right)}$$

Παρατήρηση: Η πιθανότητα της διέλευσης είναι 1, δηλαδή όλα τα σωμάτια θα περάσουν στην περιοχή 3, όταν ημ$(k_2\alpha) = 0$, δηλαδή όταν

$$k_2\alpha = n\pi \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Το μήκος κύματος του σωματιδίου στην περιοχή 2 είναι ως γνωστόν

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k_2}$$

και επομένως η συνθήκη γίνεται

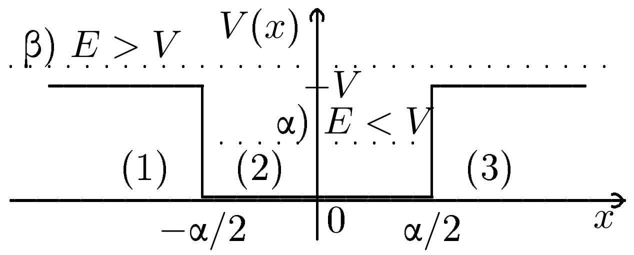
$$n\lambda = 2\alpha \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Η οποία είναι ακριβώς η συνθήκη για στάσιμα κύματα σε ένα διάστημα μήκους α.

5.4 Πηγάδι δυναμικού

Στην παράγραφο αυτή θα λύσουμε το πρόβλημα ενός συστήματος σωματιδίων που κινείται σε μία διάσταση, από τα αριστερά προς τα δεξιά, στο δυναμικό του σχήματος

$$V(x) = \begin{cases} V & \text{για} \quad x < -\alpha/2 \quad x > \alpha/2 \\ 0 & \text{για} \quad -\alpha/2 \le x \le \alpha/2 \end{cases}$$



Σχήμα 5.3
Τα σωμάτια με $E < V$ είναι δέσμια στο πηγάδι του δυναμικού και η ενέργεια τους είναι κβαντισμένη.

α) Περίπτωση $\mathrm{E} < V$

Ενα σωματίδιο που κινείται μέσα στο πηγάδι με $\mathrm{E} < V$ είναι δέσμιο, δηλαδή επιτρέπεται να κινηθεί σε περιορισμένη περιοχή του χώρου. Οι ιδιοτιμές της ενεργείας του είναι διακεκριμένες.

Η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ στις τρεις περιοχές είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = C\ e^{k_2 x} \ + C_2 e^{-k_2 x} & -\frac{\alpha}{2} > x \\ \psi_2(x) = D_1 e^{ik_1 x} + D_2 e^{-ik_1 x} & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ \psi_3(x) = F\ e^{-k_2 x} + F_2 e^{k_2 x} & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Οι σταθερές k_1 και k_2 δίνονται από τις σχέσεις

$$k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad \text{και} \quad k_2 = \left(\frac{2m(V-\mathrm{E})}{\hbar^2}\right)^{1/2} \in \Re$$

Η συνθήκη

$$\lim_{x\to\pm\infty} \Psi(x) = 0$$

που πρέπει να ισχύει ώστε η κυματοσυνάρτηση να μπορεί να κανονικοποιηθεί, ικανοποιείται αν μηδενίσουμε τους συντελεστές C_2 και F_2

$$C_2 = F_2 = 0$$

Η κυματοσυνάρτηση τώρα γίνεται

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = C\ e^{k_2 x} & -\frac{\alpha}{2} > x \\ \psi_2(x) = D_1 e^{ik_1 x} + D_2 e^{-ik_1 x} & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ \psi_3(x) = F\ e^{-k_2 x} & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Οι συνθήκες για την συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της, δίνουν τις εξισώσεις.

Στο σημείο $-\alpha/2$

$$\begin{aligned} Ce^{-k_2\frac{\alpha}{2}} &= D_1 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} + D_2 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} \\ k_2 Ce^{-k_2\frac{\alpha}{2}} &= ik_1\left(D_1 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} - D_2 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}}\right) \end{aligned}$$

Στο σημείο α/2

$$Fe^{-k_2\frac{\alpha}{2}} = D_1 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} + D_2 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}}$$
$$-k_2 F e^{-k_2\frac{\alpha}{2}} = ik_1\left(D_1 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} - D_2 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}}\right)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις είναι ένα ομογενές σύστημα τεσσάρων εξισώσεων με τέσσερις αγνώστους. Το σύστημα έχει μη μηδενική λύση, αν η ορίζουσα των συντελεστών των αγνώστων είναι μηδέν

$$\begin{vmatrix} e^{-k_2\frac{\alpha}{2}} & -e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} & -e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ k_2 e^{-k_2\frac{\alpha}{2}} & -ik_1 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} & ik_1 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & -e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} & -e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} & e^{-k_2\frac{\alpha}{2}} \\ 0 & -ik_1 e^{ik_1\frac{\alpha}{2}} & ik_1 e^{-ik_1\frac{\alpha}{2}} & -k_2 e^{-k_2\frac{\alpha}{2}} \end{vmatrix} = 0$$

Αναπτύσσουμε την ορίζουσα και μετά από κάποιες απλές πράξεις καταλήγουμε στις εξισώσεις

$$k_2\,\text{συν}\,(\frac{k_1\alpha}{2}) - k_1\,\text{ημ}\,(\frac{k_1\alpha}{2}) = 0$$
$$k_2\,\text{ημ}\,(\frac{k_1\alpha}{2}) + k_1\,\text{συν}\,(\frac{k_1\alpha}{2}) = 0$$

Οι εξισώσεις αυτές μας δίνουν τις ιδιοτιμές της ενέργειας και μπορούν να λυθούν με αριθμητικές μεθόδους.

Κατά συνέπεια έχουμε δύο κλάσεις λύσεων. Οι ιδιοτιμές τις ενεργείας της πρώτης κλάσης δίνονται από την λύση της πρώτης εξίσωσης ως προς Ε, η οποία αναλυτικά γράφεται

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \text{εφ}\left[\frac{\alpha}{2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right] = \left(\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} A\left[e^{k_1\frac{\alpha}{2}}\,\text{συν}\left(k_2\frac{\alpha}{2}\right)\right]e^{k_2 x} & -\frac{\alpha}{2} > x \\ A\,\text{συν}\,(k_1 x) & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ A\left[e^{k_1\frac{\alpha}{2}}\,\text{συν}\left(k_2\frac{\alpha}{2}\right)\right]e^{-k_2 x} & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Η κυματοσυνάρτηση είναι άρτια, δηλαδή

$$\psi(x) = \psi(-x)$$

Παρατηρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση δεν μηδενίζεται στις κλασσικά απαγορευμένες περιοχές 1 και 3. Πηγαίνει όμως προς το μηδέν πολύ γρήγορα όσο απομακρυνόμαστε από την κλασσικά επιτρεπόμενη περιοχή 2. Στις περιοχές αυτές η λύση δεν είναι κάποιο κύμα, αλλά μια φθίνουσα εκθετική συνάρτηση.

Για την δεύτερη κλάση οι ιδιοτιμές της ενέργειας δίνονται από την λύση της δεύτερης εξίσωσης ως προς E, η οποία αναλυτικά γράφεται

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sigma\varphi\left[\frac{\alpha}{2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right] = \left(\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} -B\left[e^{k_2\frac{\alpha}{2}}\,\eta\mu\left(k_2\frac{\alpha}{2}\right)e^{k_2 x}\right] & -\frac{\alpha}{2} > x \\ B\,\eta\mu\left(k_1 x\right) & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ B\left[e^{k_2\frac{\alpha}{2}}\,\eta\mu\left(k_2\frac{\alpha}{2}\right)\right]e^{-k_2 x} & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή είναι περιττή δηλαδή

$$\psi(x) = -\psi(-x)$$

Παρατήρηση: Οι κυματοσυναρτήσεις του προβλήματος έχουν ορισμένη αρτιότητα (parity) είναι δηλαδή ή άρτιες ή περιττές. Τούτο οφείλεται στο γεγονός ότι το δυναμικό είναι άρτια συνάρτηση του x

$$V(x) = V(-x)$$

Πράγματι λόγω της συμμετρίας του δυναμικού, είναι προφανές ότι οι πιθανότητες να βρεθεί το σωματίδιο σε συμμετρικές θέσεις γύρω από τον άξονα συμμετρίας του δυναμικού είναι ίσες. Δηλαδή πρέπει να ισχύει

$$\psi(x)\psi^*(x) = \psi(-x)\psi^*(-x)$$

η οποία συνεπάγεται την σχέση

$$\psi(x) = \pm\psi(-x)$$

Θα λύσουμε τώρα γραφικά τις εξισώσεις ιδιοτιμών της ενέργειας. θα χρησιμοποιήσουμε τις παρακάτω παραμέτρους, που οδηγούν σε απλές καμπύλες και επί πλέον μας επιτρέπουν να λύσουμε και τις δύο εξισώσεις μαζί.

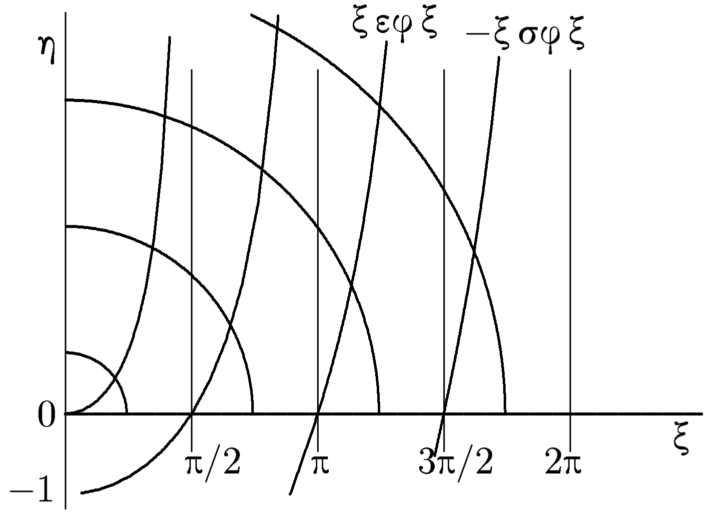
Θέτουμε $\xi = k_1\alpha$ και $\eta = k_2\alpha$ και έχουμε τις περιφέρειες

$$\xi^2 + \eta^2 = \left(\frac{2mV}{\hbar^2}\right)\alpha^2 = \rho^2$$

Οι εξισώσεις για τις ιδιοτιμές της ενέργειας γίνονται

$$\eta = \xi\,\text{εφ}\,\xi \qquad\qquad \eta = -\xi\,\text{σφ}\,\xi$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι οι τομές των περιφερειών με τις παραπάνω καμπύλες όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 5.4
Οι λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών για τις στάσιμες καταστάσεις ενός δυναμικού πηγαδιού.

Παρατηρούμε ότι για

$$\rho < \frac{\pi}{2} \quad \Longrightarrow \quad V\alpha^2 < \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

και επομένως υπάρχει μόνο μία ιδιοτιμή για την ενέργεια. Για

$$\frac{\pi}{2} < \rho < \pi \quad \Longrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} < V\alpha^2 < \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$$

και άρα υπάρχουν δύο ιδιοτιμές για την ενέργεια κ.λ.π. Το πλήθος των ιδιοτιμών της ενέργειας, είναι πεπερασμένο και εξαρτάται από τον παράγοντα $V\alpha^2$.

β) Περίπτωση $\mathrm{E} > V$

Το σωματίδιο κινείται πάλι από τα αριστερά προς τα δεξιά με ενέργεια Ε. Το σωματίδιο δεν είναι πιά δέσμιο και το φάσμα των ιδιοτιμών της ενεργείας του είναι συνεχές. Κλασσικά όλα τα σωματίδια εξακολουθούν να κινούνται στην περιοχή 3, με την ίδια ταχύτητα που είχαν και στην περιοχή 1. Σύμφωνα όμως με την κβαντομηχανική θα δούμε ότι μερικά σωματίδια ανακλώνται στο σημείο $\alpha/2$ και έτσι κάποια σωματίδια δεν φθάνουν στην περιοχή 3.

Η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ στην περίπτωση αυτή είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = C_1 e^{ik_2x} + C_2 e^{-ik_2x} & -\frac{\alpha}{2} > x \\ \psi_2(x) = D_1 e^{-ik_1x} + D_2 e^{ik_1x} & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ \psi_3(x) = F\ e^{ik_2x} & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Οι σταθερές k_1 και k_2 δίνονται από τις σχέσεις

$$k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{και} \quad k_2 = \left(\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Στην περιοχή 3 δεν υπάρχουν σωματίδια που να κινούνται από τα δεξιά προς τα αριστερά, γι αυτό υπάρχει μόνο ένας όρος στην κυματοσυνάρτηση. Οι εξισώσεις για την συνέχεια των συναρτήσεων $\psi(x)$ και $\psi'(x)$ οδηγούν σε ένα σύστημα τεσσάρων εξισώσεων με πέντε αγνώστους. Βρίσκουμε τις τέσσερις σταθερές συναρτήσει της F, που μπορεί να βρεθεί από την συνθήκη κανονικοποίησης.

Για τις σταθερές C_1 και C_2 βρίσκουμε

$$C_1 = Fe^{ik_2\alpha}\left[\text{συν}\,(k_1\alpha) - \frac{1}{2}i\left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)\text{ημ}\,(k_1\alpha)\right]$$

$$C_2 = \frac{1}{2}iF\ \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1}\right)\text{ημ}\,(k_1\alpha)$$

Η πιθανότητα της διέλευσης από την περιοχή 1 στην περιοχή 3 είναι

$$T = \frac{|F|^2}{|C_1|^2} == \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + \left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \text{ημ}^2\left(k_1 \alpha\right)}$$

Παρατήρηση: Κλασσικά, εφόσον η ενέργεια των σωματιδίων είναι μεγαλύτερη από το δυναμικό, όλα τα σωμάτια περνούν στην περιοχή 3 και εξακολουθούν να κινούνται από τα αριστερά προς τα δεξιά με την ίδια ταχύτητα. Στην κβαντομηχανική υπάρχουν σωμάτια που ανακλώνται από το δυναμικό. Ολα τα σωματίδια περνούν στην περιοχή 3, δηλαδή η διέλευση είναι πλήρης $T = 1$, όταν το ημίτονο του παρανομαστή είναι μηδέν. Δηλαδή

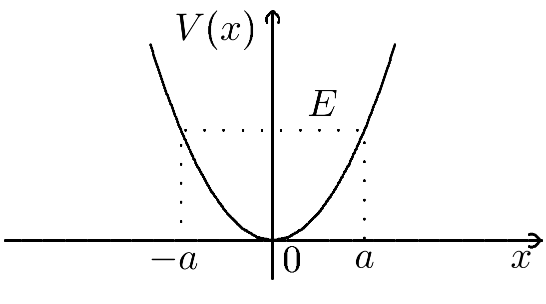
$$k_1 \alpha = n\pi \quad \Longrightarrow \quad \alpha = n\frac{\lambda}{2} \qquad\qquad n = 1, 2, \ldots$$

Το λ είναι το γνωστό μήκος κύματος ντε Μπρολί των σωματιδίων. Στην περίπτωση αυτή λέμε ότι έχουμε συντονισμό.

5.5 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Θεωρούμε ένα σωματίδιο που κινείται σε μία διάσταση υπό την επίδραση του παραβολικού δυναμικού

$$V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$



Σχήμα 5.5
Το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή

Η σταθερά $\omega = \sqrt{D/m}$ ονομάζεται κυκλική συχνότητα και η σταθερά m είναι η μάζα του σωματιδίου.

Στο σωματίδιο ασκείται μια δύναμη επαναφοράς ανάλογη προς την απόσταση από την θέση ισορροπίας $x = 0$

$$F = -\frac{dV}{dx} = -Dx$$

Κλασσικά το σωματίδιο εκτελεί αρμονικές ταλαντώσεις γύρω από το σημείο ισορροπίας $x = 0$.

Το δυναμικό αυτό είναι ένα από τα λίγα δυναμικά που οι εξισώσεις μπορούν να λυθούν ακριβώς. Το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί, σαν μία αρχική προσέγγιση για πολλά προβλήματα στα οποία ένα σωμάτιο εκτελεί μικρές ταλαντώσεις γύρω από ένα σημείο ισορροπίας. Επί πλέον η συμπεριφορά κάποιων φυσικών συστημάτων μπορεί να περιγραφεί αν τα εξισώσουμε με ένα άπειρο πλήθος αρμονικών ταλαντωτών. Ενα τέτοιο σύστημα είναι για παράδειγμα το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο.

Θα λύσουμε το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή και στις δύο παραστάσεις της κβαντομηχανικής.

5.6 Παράσταση του Σρέντινγκερ

Η κλασσική συνάρτηση του Χάμιλτον του αρμονικού ταλαντωτή σε μία διάσταση είναι

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

και η εξίσωση του Σρέντινγκερ είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = \mathrm{E}\psi(x)$$

Θα λύσουμε στη συνέχεια την διαφορική αυτή εξίσωση.

Κάνουμε τους μετασχηματισμούς

$$\xi = \frac{1}{x_0}x \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \tag{5.5}$$

και η εξίσωση Σρέντινγκερ γράφεται

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\psi(\xi) = 0 \tag{5.6}$$

Θα εξετάσουμε την λύση της εξίσωσης αυτής για μεγάλα ξ. Η εξίσωση για $\xi \to \pm\infty$ γράφεται

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = 0$$

και έχει λύση την συνάρτηση

$$\psi(\xi) = e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$$

Επειδή η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ πρέπει να μηδενίζετε στο άπειρο, αν θέλουμε να ισχύει η σχέση κανονικοποίησης, απορρίπτουμε την θετική ρίζα. Επομένως καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι πρέπει να αναζητήσουμε λύσεις της μορφής

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

Αντικαθιστούμε την λύση αυτή στην εξίσωση (5.6) και παίρνουμε την παρακάτω διαφορική εξίσωση για την συνάρτηση $H(\xi)$

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\lambda - 1)H(\xi) = 0 \tag{5.7}$$

Η εξίσωση αυτή θα λυθεί με την μέθοδο των σειρών.

Το μηδέν είναι ομαλό σημείο. Θεωρούμε ως λύση της εξίσωσης αυτής ένα άθροισμα της μορφής

$$H(\xi) = \sum_{p=0}^{\infty} \alpha_p \xi^p$$

Αρα έχουμε

$$H'(\xi) = \sum_{p=1}^{\infty} p\alpha_p \xi^{p-1} = \sum_{p=0}^{\infty}(p+1)\alpha_{p+1}\xi^p$$

$$H''(\xi) = \sum_{p=2}^{\infty} p(p-1)\alpha_p \xi^{p-2} = \sum_{p=0}^{\infty}(p+2)(p+1)\alpha_{p+2}\xi^p$$

Εισάγουμε τις εκφράσεις αυτές στην εξίσωση και γράφοντας μαζί τους όρους με την ίδια δύναμη του ξ, βρίσκουμε

$$\sum_{p=0}^{\infty} \left[(p+2)(p+1)\alpha_{p+2} - 2p\alpha_p + (\lambda - 1)\alpha_p\right] \xi^p = 0$$

Επειδή η παραπάνω σχέση είναι μία ταυτότητα ως προς ξ, κάθε όρος πρέπει να ισούται με το μηδέν

$$(p+2)(p+1)\alpha_{p+2} = (2p+1-\lambda)\alpha_p$$

Η οποία είναι μία αναδρομική σχέση που δίνει τους συντελεστές α_p του αθροίσματος

$$\alpha_{p+2} = \frac{2p+1-\lambda}{(p+1)(p+2)}\alpha_p \tag{5.8}$$

Από το κριτήριο του λόγου φαίνεται αμέσως ότι η σειρά αυτή συγκλίνει.

Στη συνέχεια Θα αποκλείσουμε τις μη πολυωνυμικές λύσεις, διότι οδηγούν σε λύσεις που δεν συγκλίνουν στο άπειρο. Για μεγάλες τιμές του p η παραπάνω αναδρομική σχέση γίνεται

$$\alpha_{p+2} = \frac{2}{p}\alpha_p$$

Η αναδρομική αυτή σχέση είναι η ίδια με αυτή που ισχύει και για τους συντελεστές της σειράς

$$e^{\xi^2} = \sum_{k=0,2,4,\cdots}^{\infty} \frac{1}{(k/2)!}\xi^k$$

Αρα αν υποθέσουμε ότι η συνάρτηση $H(\xi)$ είναι μία άπειρη σειρά, τότε για μεγάλα ξ συμπεριφέρεται όπως και η συνάρτηση e^{ξ^2} και άρα η λύση της εξίσωσης (5.6) του Σρέντινγκερ είναι

$$\psi(\xi) = e^{\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}$$

Η συνάρτηση αυτή προφανώς δεν μπορεί να κανονικοποιηθεί, εφόσον αποκλίνει στο άπειρο. Επομένως η συνθήκη κανονικοποιήσης επιβάλλει στην λύση $H(\xi)$ να είναι ένα πολυώνυμο ως προς ξ. Αυτό το συμπέρασμα θα μας οδηγήσει στις ιδιοτιμές της ενεργείας.

Υποθέτουμε ότι ο συντελεστής α_n είναι ο τελευταίος μη μηδενικός της σειράς και ότι $\alpha_p = 0$ για $p > n$. Αρα από την αναδρομική εξίσωση των συντελεστών (5.8) βρίσκουμε

$$\lambda = 2n+1$$

Αντικαθιστούμε την παράμετρο λ από τις σχέσεις (5.5) όπου είχαμε θέσει $\lambda = 2E/\hbar\omega$ και καταλήγουμε στις ιδιοτιμές της ενέργειας

$$\mathrm{E}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.9}$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας ισαπέχουν

$$\mathrm{E}_{n+1} - E_n = \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Το αποτέλεσμα διαφέρει από την υπόθεση του Πλανκ ο οποίος είχε υποθέσει ότι η ενέργεια του αρμονικού ταλαντωτή είναι ίση με $\mathrm{E}_n = n\hbar\omega$. Ο επιπλέον όρος οφείλεται στην αρχή της απροσδιοριστίας.

Πράγματι η ελάχιστη ενέργεια που μπορεί να έχει ένας αρμονικός ταλαντωτής είναι $\mathrm{E}_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ και όχι μηδέν, όπως επιτρέπει ο τύπος του Πλανκ. Από την έκφραση της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή, ενέργεια ίση με το μηδέν σημαίνει ότι $p = 0$ και $x = 0$. Αρα η θέση και η ορμή θα μπορούσαν να μετρηθούν ταυτόχρονα, πράγμα αντίθετο προς την αρχή της αβεβαιότητας.

Θα προσδιορίσουμε τώρα τις ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος. Εισάγουμε την σχέση $\lambda = 2n + 1$ στην εξίσωση (5.7) και έχουμε

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

Η εξίσωση αυτή είναι η εξίσωση του Ερμίτ και έχει σαν λύση τα πολυώνυμα του Ερμίτ. Η αναδρομική σχέση (5.8) για $\lambda = 2n + 1$ γράφεται

$$\alpha_{p+2} = \frac{2(p-n)}{(p+1)(p+2)}\alpha_p$$

Αν θέσουμε $\alpha_n = 2^n$ έχουμε

$$\begin{aligned} H_n(\xi) &= (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2\xi)^{(n-4)} - \cdots \\ &= \sum_{s=0}^{[n/2]}(-1)^s(2\xi)^{n-2s}\frac{n!}{(n-2s)!s!} \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι τα πολυώνυμα αυτά είναι μια άρτια ή περιττή συνάρτηση του ξ, ανάλογα με το n εφόσον υπάρχουν μόνο άρτιες ή μόνο περιττές δυνάμεις στην ανάπτυξη. Τούτο οφείλεται στο ότι η δυναμική συνάρτηση είναι άρτια και επομένως οι λύσεις πρέπει να έχουν ορισμένη αρτιότητα.

Τα πολυώνυμα του Ερμίτ μπορούν επίσης να τεθούν με την ακόλουθη μορφή του Ροντρίγκες

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

Τα πολυώνυμα του Ερμίτ είναι ορθογώνια και η σχέση ορθογωνιότητας είναι

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_k(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nk}$$

Συγκεντρώνουμε τέλος όλους τους όρους και βρίσκουμε ότι, η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ για τον αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} x_0} \right)^{1/2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right)$$

Οι πρώτες τρεις ιδιοσυναρτήσεις και οι αντίστοιχες ιδιοτιμές τους είναι

$$\psi_0 = (x_0 \sqrt{\pi})^{-1/2} exp \left(-\tfrac{1}{2} \tfrac{x^2}{x_0^2} \right) \qquad E_0 = \tfrac{1}{2} \hbar\omega$$

$$\psi_1 = (x_0 2 \sqrt{\pi})^{-1/2} \left(2 \tfrac{x}{x_0} \right) exp \left(-\tfrac{1}{2} \tfrac{x^2}{x_0^2} \right) \qquad E_1 = \tfrac{3}{2} \hbar\omega$$

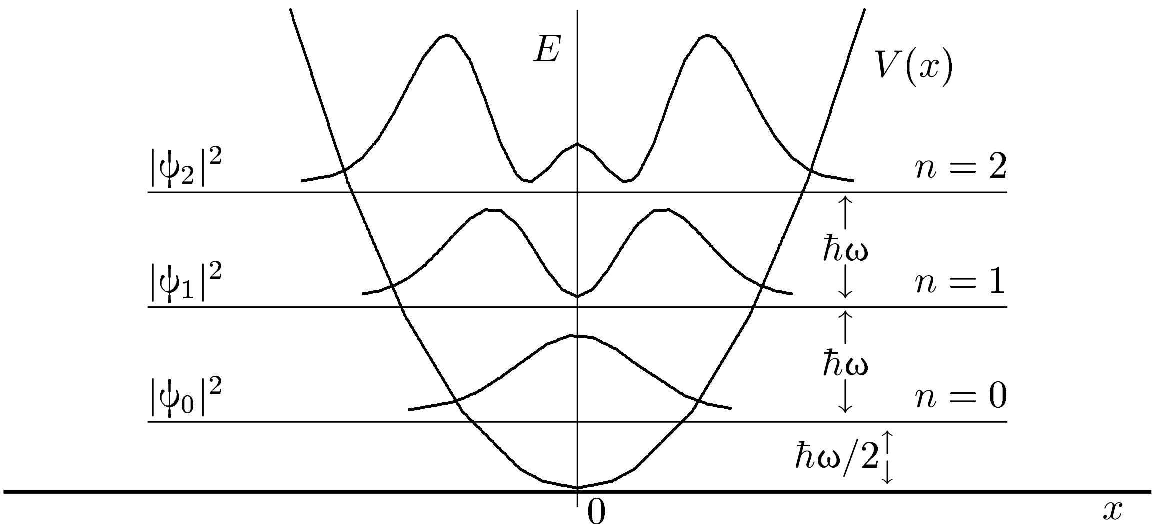
$$\psi_2 = (x_0 8 \sqrt{\pi})^{-1/2} \left(4 \tfrac{x^2}{x_0^2} - 2 \right) exp \left(-\tfrac{1}{2} \tfrac{x^2}{x_0^2} \right) \qquad E_2 = \tfrac{5}{2} \hbar\omega$$

Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης έχει την κανονική μορφή Γκάους που όπως ξέρουμε έχει την ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα. Το πλάτος της καθορίζεται από το χαρακτηριστικό μήκος x_0.

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{mD}}} \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{D}{m}}$$

Παρατηρούμε ότι στο κλασσικό όριο, δηλαδή όταν $\hbar \to 0$ ή $m \to \infty$, τότε και η ενέργεια αλλά και το χαρακτηριστικό μήκος x_0 μηδενίζονται και το σωματίδιο είναι απολύτως εντοπισμένο στον πυθμένα της παραβολής. Ανάλογες παρατηρήσεις μπορούμε να κάνουμε και για την σταθερά D. Οσο μεγαλώνει το D, τόσο η παραβολή γίνεται όλο και πιο στενή. Ετσι η θεμελιώδης στάθμη μεγαλώνει και το μήκος εντοπισμού μικραίνει.

Η πυκνότητα πιθανότητας για τον αρμονικό ταλαντωτή έχει σχεδιαστεί στο σχήμα. Παρατηρούμε ότι στην βασική ενεργειακή κατάσταση $n = 0$ η πυκνότητα πιθανότητας δεν μηδενίζεται μέσα στο δυναμικό. Η πρώτη ενεργειακή κατάσταση $n = 1$ έχει μία ρίζα στο $x = 0$, η δεύτερη $n = 2$ δύο ρίζες, η τρίτη τρεις κ.λ.π. Οι ρίζες οφείλονται στον πολυωνυμικό παράγοντα της λύσης, ενώ ο εκθετικός όρος e^{-x^2} μηδενίζει την πυκνότητα πιθανότητας στις κλασσικά απαγορευμένες περιοχές, στις περιοχές δηλαδή μακριά από το μηδέν έξω από την παραβολή.



Σχήμα 5.6
Η πυκνότητα πιθανότητας για τον αρμονικό ταλαντωτή.

Παρατήρηση: Θεωρούμε ως βασικά διανύσματα του χώρου τις συναρτήσεις ψ_n τα οποία συμβολίζουμε με $|n>$, δηλαδή

$$|n> \equiv \psi_n(x)$$

Με βάση τα διανύσματα αυτά μπορούμε να υπολογίσουμε τα στοιχεία μήτρας του τελεστή x. Εχουμε

$$x_{ln} = < l|x|n >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\ x\ \psi_n(x) dx =$$
$$\sqrt{\frac{\hbar}{\pi m \omega}} 2^{-(n+1)/2} (n!)^{-1/2} (l!)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi H_n(\xi) H_l(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

Η παραπάνω ολοκλήρωση δίνει

$$x_{ln} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} \delta_{l,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{l,n+1} \right)$$

Λόγω της ορθογωνιότητας των πολυώνυμων του Ερμίτ τα μη μηδενικά στοιχεία είναι μόνο τα $x_{n-1\, n}$ και $x_{n+1\, n}$. Την σχέση αυτή θα βρούμε πάλι, απ' ευθείας λύνοντας το πρόβλημα στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ.

5.7 Παράσταση του Χάιζενμπεργκ

Θα λύσουμε τώρα το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή στην παράσταση του Χάιζενμπεργκ. Στην παράσταση αυτή θα εργαστούμε ως εξής:

Θα βρούμε τους τελεστές της θέσης και της ορμής, λύνοντας τις αντίστοιχες εξισώσεις της κίνησης του Χάιζενμπεργκ για τους τελεστές αυτούς. Οι τελεστές αυτοί θα βρεθούν σε μορφή μήτρας, ως προς μία βάση που ο τελεστής της ενεργείας του Χάμιλτον είναι μία διαγώνιος μήτρα. Τα διαγώνια στοιχεία της μήτρας του τελεστή της ενέργειας είναι και οι ζητούμενες ιδιοτιμές της ενέργειας του προβλήματος.

Θεωρούμε ως βασικά διανύσματα τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή H τα οποία συμβολίζουμε με το σύμβολο $|n>$

$$|0>,\ |1>,\ |2>,\ \cdots,\ |k>,\ \cdots$$

Τα διανύσματα αυτά είναι ορθοκανονικά και ικανοποιούν την σχέση πληρότητας. Δηλαδή ισχύουν οι σχέσεις

$$< k|n >= \delta_{kn} \qquad\qquad \sum_{n=0}^{\infty} |n >< n| = 1$$

Με βάση τα διανύσματα αυτά ο τελεστής του Χάμιλτον παριστάνεται φυσικά από μία διαγώνια μήτρα. Τα διαγώνια στοιχεία της μήτρας αυτής, είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας

$$H_{kn} =< k|H|n >= \delta_{kn} \mathrm{E}_n$$

Είναι γνωστό ότι τα στοιχεία μήτρας της παραγώγου, ενός φυσικού μεγέθους, ως προς μία βάση που ο τελεστής του Χάμιλτον είναι μία διαγώνιος μήτρα, δίνονται από την σχέση

$$\dot{T}_{kn} =< k|\dot{T}|n >= i\omega_{kn} T_{kn} \quad \text{όπου} \quad \omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}\left(\mathrm{E}_k - \mathrm{E}_n\right)$$

Υποθέσαμε ότι ο τελεστής T δεν εξαρτάται αναλυτικά από τον χρόνο. Πράγματι από την εξίσωση της κίνησης του Χάιζενμπεργκ, έχουμε

$$\dot{T}_{kn} =< k|\dot{T}|n >= \frac{i}{\hbar} < k|[H,T]|n >= \frac{i}{\hbar}\left(< k|HT|n > - < k|TH|n >\right) =$$
$$\frac{i}{\hbar}(E_k - E_n) < k|T|n >= i\omega_{kn} T_{kn}$$

Για να βρούμε την δεύτερη παράγωγο του τελεστή T εφαρμόζουμε δύο φορές την παραπάνω σχέση και βρίσκουμε

$$\ddot{T}_{kn} + \omega_{kn}^2 T_{kn} = 0$$

Η ίδια σχέση ισχύει φυσικά και για τον τελεστή της θέσης.

$$\ddot{x}_{kn} + \omega_{kn}^2 x_{kn} = 0 \tag{5.10}$$

Η παραπάνω διαφορική εξίσωση ισχύει για οποιοδήποτε δυναμικό αρκεί η χαμιλτονιανή να έχει ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα.

Ακολούθως θα βρούμε την διαφορική εξίσωση των στοιχείων της μήτρας του τελεστή της θέσης x_{kn}, χρησιμοποιώντας την εξίσωση της κίνησης του τελεστή αυτού σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή.

Ο τελεστής του Χάμιλτον του αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Οι εξισώσεις κινήσης του Χάιζενμπεργκ για τους τελεστές αυτούς είναι

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar}\,[H, p] = -m\omega^2 x$$
$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar}\,[H, x] = \frac{1}{m}p$$

Οι εξισώσεις αυτές είναι ισοδύναμες με τις εξισώσεις

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad \text{και} \quad p = m\dot{x} \tag{5.11}$$

Οι σχέσεις αυτές σε μορφή μητρών γράφονται

$$\ddot{x}_{kn} + \omega^2 x_{kn} = 0 \quad \text{και} \quad p_{kn} = m\dot{x}_{kn} \tag{5.12}$$

Η δεύτερη παράγωγος του τελεστή της θέσης ικανοποιεί επίσης και την σχέση (5.10). Αφαιρούμε την παραπάνω σχέση από την σχέση (5.10) και βρίσκουμε

$$\left(\omega_{kn}^2 - \omega^2\right) x_{kn} = 0$$

Από την παραπάνω ισότητα συνεπάγεται ότι τα στοιχεία μήτρας του τελεστή x είναι όλα μηδέν, εκτός από εκείνα για τα οποία ισχύει η σχέση

$$\omega_{kn}^2 - \omega^2 = 0$$

Θεωρούμε ότι οι στάσιμες καταστάσεις με συχνότητα $\pm\omega$ είναι εκείνες που αντιστοιχούν σε μεταβάσεις $n \to n \pm 1$. Δηλαδή θεωρούμε ότι τα μη μηδενικά στοιχεία ω_{kn} είναι τα εξής

$$\omega_{n+1,n} = \omega_{n,n-1} = +\omega \qquad\qquad \omega_{n-1,n} = \omega_{n,n+1} = -\omega \tag{5.13}$$

Αρα τα μη μηδενικά στοιχεία της μήτρας x είναι τα στοιχεία: $x_{n\pm1,n}$.

Υποθέτουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα είναι πραγματικά και άρα και τα στοιχεία μήτρας του τελεστή x είναι πραγματικά. Επειδή η μήτρα είναι επί πλέον και ερμητιανή ισχύει η σχέση

$$x_{kn} = x_{nk}$$

Για να προχωρήσουμε στον υπολογισμό των μη μηδενικών στοιχείων της μήτρας x, θα χρησιμοποιήσουμε την σχέση εναλλαγής των τελεστών της θέσης και της ορμής.

$$px - xp = -i\hbar$$

Επειδή η ορμή είναι ανάλογη της ταχύτητας με σταθερά αναλογίας την μάζα δηλαδή $p = m\dot{x}$ η σχέση εναλλαγής γράφεται

$$\dot{x}x - x\dot{x} = -\frac{i\hbar}{m}$$

Υπό μορφή μητρών η παραπάνω σχέση γράφεται

$$(\dot{x}x)_{lk} - (x\dot{x})_{lk} = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{lk}$$

Εκτελούμε τώρα τον πολλαπλασιασμό των μητρών x και $\dot{x}$ όπως εμφανίζονται στην παραπάνω σχέση. Με την βοήθεια της σχέσης πληρότητας για τα διανύσματα $|n>$, έχουμε

$$(\dot{x}x)_{lk} - (x\dot{x})_{lk} =< l|\dot{x}x|k > - < l|x\dot{x}|k >=< l|\dot{x}Ix|k > - < l|xI\dot{x}|k >=$$

$$< l|\dot{x}\left(\sum_{n} |n >< n|\right) x|k > - < l|x\left(\sum_{n'} |n' >< n'|\right)\dot{x}|k >=$$

$$\sum_{n} < l|\dot{x}|n >< n|x|k > - \sum_{n'} < l|x|n' >< n'|\dot{x}|k >= -\frac{i\hbar}{m}\delta_{lk}$$

Η τελευταία εξίσωση γράφεται

$$\sum_{n} \dot{x}_{ln}x_{nk} - \sum_{n'} x_{ln'}\dot{x}_{n'k} = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{lk}$$

Αλλα τα στοιχεία μήτρας της παραγώγου του τελεστή x δίνονται από την σχέση

$$\dot{x}_{ln} = i\omega_{ln}x_{ln}$$

Αντικαθιστούμε τα στοιχεία αυτά στην παραπάνω σχέση και έχουμε

$$i\sum_{n} \omega_{ln}x_{ln}x_{nk} - i\sum_{n'} \omega_{n'k}x_{ln'}x_{n'k} = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{lk}$$

Επειδή $\omega_{lk} = -\omega_{kl}$, όπως φαίνεται εύκολα από τον ορισμό των στοιχείων αυτών και για $k = l$, η παραπάνω σχέση γράφεται

$$2i \sum_n \omega_{kn} x_{kn}^2 = -\frac{i\hbar}{m}$$

Στο άθροισμα αυτό όλοι οι όροι είναι μηδέν εκτός από εκείνους για τους οποίους $n = k+1$ και $n = k-1$. Αρα το παραπάνω άθροισμα γίνεται

$$2i\omega_{k,k+1} x_{k,k+1}^2 + 2i\omega_{k,k-1} x_{k,k-1}^2 = -\frac{i\hbar}{m}$$

Τέλος λόγω των σχέσεων (5.13) έχουμε

$$x_{k,k+1}^2 - x_{k,k-1}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Η σχέση αυτή είναι μία αναδρομική σχέση που μας δίνει τα στοιχεία της μήτρας του τελεστή x. Υποθέτουμε ότι $x_{0,-1} = 0$ και θέτοντας διαδοχικά $k = 0, 1, 2, \cdots$ στην σχέση αυτή παίρνουμε

$$x_{k,k+1} = x_{k+1,k} = \sqrt{k+1} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}$$

Αρα η μήτρα (x) του τελεστή της θέσης είναι

$$(x) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

Θα υπολογίσουμε τώρα την μήτρα (p) του τελεστή της ορμής. Προφανώς από την σχέση $p = m\dot{x}$ συνεπάγεται ότι

$$p_{kl} = m\dot{x}_{kl} = im\omega_{kl} x_{kl}$$

Η σχέση αυτή συνεπάγεται ότι όλα τα στοιχεία της μήτρας του τελεστή της ορμής είναι μηδέν, εκτός από εκείνα για τα οποία $k = l \pm 1$. Για τα στοιχεία αυτά έχουμε

$$p_{l\pm 1,l} = im\omega_{l+1,l} x_{l+1,l} = \pm i\sqrt{l+1} \left(\frac{1}{2}\hbar m\omega \right)^{1/2}$$

Επομένως η μήτρα (p) είναι

$$(p) = i\left(\frac{1}{2}\hbar m\omega\right)^{1/2}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

Τέλος η μήτρα του τελεστή του Χάμιλτον βρίσκουμε ότι είναι

$$(H) = \frac{1}{2m}(p)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x)^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

δηλαδή μια διαγώνιος μήτρα. Τα διαγώνια στοιχεία της μήτρας αυτής δίνουν και τις ιδιοτιμές της ενέργειας.

$$\mathrm{E}_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \qquad\qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

5.8 Αλγεβρική μέθοδος

Στην παράγραφο αυτή θα λύσουμε πάλι το ίδιο πρόβλημα με αλγεβρικές μεθόδους που μας επιτρέπουν να βρούμε διάφορα φυσικά μεγέθη της κβαντομηχανικής με ένα πιο γενικό τρόπο.

Ορισμός: Με την βοήθεια των τελεστών της θέσης και της ορμής x και p ορίζουμε τους ακόλουθους δύο τελεστές

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + i\frac{1}{m\omega}p\right) \qquad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - i\frac{1}{m\omega}p\right)$$

που ονομάζονται τελεστές εξαφάνισης και δημιουργίας.

Λύνουμε τις παραπάνω γραμμικές σχέσεις ως προς p και q και βρίσκουμε

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a) \qquad\qquad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^+ - a) \tag{5.14}$$

Οι τελεστές αυτοί προφανώς δεν είναι ερμητιανοί και άρα δεν αντιστοιχούν σε κανένα παρατηρήσιμο μέγεθος. Ο μεταθέτης των δύο αυτών τελεστών, όπως μπορεί εύκολα να αποδειχτεί από τον ορισμό τους, είναι ίσος με την μονάδα

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1$$

Με την βοήθεια των τελεστών αυτών ορίζουμε ένα νέο τελεστή

$$N = a^+a$$

Ο τελεστής N ονομάζεται αριθμητικός (number) τελεστής και είναι προφανώς ερμητιανός.

Ο τελεστής του Χάμιλτον του αρμονικού ταλαντωτή μπορεί να εκφραστεί με την βοήθεια του τελεστή αυτού. Αποδεικνύεται εύκολα ότι

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^+ + a^+a) = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \tag{5.15}$$

Θεωρούμε ως ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή N τα διανύσματα $|n>$ και τις αντίστοιχες ιδιοτιμές τις συμβολίζουμε με n, δηλαδή έχουμε

$$N|n>= n|n> \qquad a^+a|n>= n|n>$$

Τα διανύσματα $|n>$ είναι προφανώς και ιδιοδιανύσματα του τελεστή H.

Στην τελευταία εξίσωση ιδιοτιμών επιδρούμε από τα αριστερά τον τελεστή a^+ και κατόπιν τον τελεστή a. Εχουμε αντιστοίχως

$$a^+a^+a|n>= na^+|n> \qquad aa^+a|n>= na|n>$$

Λόγω των σχέσεων εναλλαγής των τελεστών a και a^+ οι σχέσεις αυτές γίνονται

$$a^+\left(aa^+ - 1\right)|n>= na^+|n> \qquad (a^+a + 1)a|n>= na|n>$$

Με την βοήθεια του αριθμητικού τελεστή γράφουμε

$$Na^+|n>= (n+1)a^+|n> \qquad Na|n>= (n-1)a|n>$$

Οι παραπάνω σχέσεις σημαίνουν ότι το διάνυσμα $a^+|n>$ είναι ιδιοδιάνυσμα του τελεστή N με ιδιοτιμή $n+1$ και το διάνυσμα $a|n>$ είναι επίσης ιδιοδιάνυσμα του τελεστή N με ιδιοτιμή $n-1$. Τα ιδιοδιανύσματα όμως του τελεστή N με ιδιοτιμές $n\pm 1$ τα συμβολίζουμε με $|n\pm 1>$. Επομένως έχουμε

$$a^+|n>=\lambda_1|n+1> \qquad\qquad a|n>=\lambda_2|n-1>$$

Οι σχέσεις αυτές είναι και ο λόγος που οι τελεστές a^+ και a ονομάζονται τελεστές δημιουργίας και εξαφάνισης αντιστοίχως.

Από τον ορισμό των τελεστών a και a^+ μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε την παράσταση των τελεστών αυτών σε μορφή μήτρας. Αντικαθιστούμε τις μήτρες (x) και (p) στις σχέσεις (5.14) που ορίσαμε του τελεστές αυτούς και βρίσκουμε

$$(a)=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix} \quad (a^+)=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

Τα μη μηδενικά στοιχεία των μητρών a και a^+ είναι τα εξής

$$a_{n-1,n}=<n-1|a|n>=\sqrt{n} \qquad\qquad a^+_{n.n+1}=<n|a|n-1>=\sqrt{n}$$

Από τις παραπάνω σχέσεις μπορούμε εύκολα να βρούμε τις σταθερές λ_1 και λ_2. Βρίσκουμε

$$a^+|n>=\sqrt{n+1}|n+1> \qquad\qquad a|n>=\sqrt{n}|n-1> \tag{5.16}$$

Αν με n_0 συμβολίσουμε την μικρότερη ιδιοτιμή του N με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα το $|0>$ τότε ορίζουμε ότι

$$a|0>=0 \tag{5.17}$$

Επομένως πάνω στο διάνυσμα αυτό ο αριθμητικός τελεστής δίνει επίσης το μηδέν

$$N|0>=0$$

Το διάνυσμα $|0>$ ονομάζεται θεμελιώδης κατάσταση και είναι ιδιοδιάνυσμα του τελεστή N με την μικρότερη ιδιοτιμή το $n_0=0$.

Αν επιδράσουμε διαδοχικά στο ιδιοδιάνυσμα αυτό τον τελεστή a^+ βρίσκουμε όλα τα διανύσματα $|n>$. Εχουμε

$$|n> = (n!)^{-1/2}(a^+)^n|0>$$

Ο τελεστής N παριστάνεται από την εξής διαγώνια μήτρα.

$$(N) = (a^+)\ (a) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots \\ . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

όπως φαίνεται αμέσως από τον ορισμό του αριθμητικού τελεστή. Οι ιδιοτιμές του τελεστή N είναι τα διαγώνια στοιχεία της παραπάνω μήτρας, δηλαδή οι αριθμοί $0, 1, 2, \cdots$. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας, λόγω της σχέσης (5.15), δίνονται από την ήδη γνωστή σχέση

$$\mathrm{E}_n = (2n+1)\hbar\omega/2$$

Παρατήρηση: Αν συμβολίσουμε με $\psi_n(x)$ τα διανύσματα $|n>$ τότε η σχέση (5.17) από τον ορισμό του τελεστή της εξαφάνισης γράφεται

$$\left(x + i\frac{p}{m\omega}\right)\psi_0(x) = 0$$

Αντικαθιστούμε τους τελεστές της θέσης και της ορμής και παίρνουμε την διαφορική εξίσωση

$$\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0$$

Η παραπάνω εξίσωση έχει λύση την συνάρτηση

$$\psi_0(x) = c_0 \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right\} \qquad x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

Η συνάρτηση αυτή είναι η ήδη γνωστή λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ για την θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή.

Ακολούθως η σχέση (5.16) για $n = 1$ δίνει την κυματοσυνάρτηση ψ_1.

$$a|1 >= |0 > \quad \Longrightarrow \quad \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right) \psi_1(x) = \psi_0(x)$$

Η λύση της εξίσωσης αυτής είναι η εξής

$$\psi_1(x) = c_1 \left(2\frac{x}{x_0}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right\}$$

Οι σταθερές υπολογίζονται από την σχέση κανονικοποιήσης.

Με τον τρόπο αυτό για $n = 2, 3, \cdots$ μπορούμε να υπολογίσουμε και τις υπόλοιπες κυματοσυναρτήσεις, ένα αποτέλεσμα ήδη γνωστό από την παράσταση του Σρέντινγκερ.

Οι δύο παραστάσεις είναι πράγματι ισοδύναμες.

5.9 Σύμφωνες καταστάσεις

Ορισμός: Σύμφωνες (coherent) καταστάσεις ονομάζουμε τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή της εξαφάνισης. Αν συμβολίσουμε με $|a>$ τα ιδιοδιανύσματα αυτά έχουμε

$$a|a >= \alpha|a > \tag{5.18}$$

Θα αναλύσουμε τώρα τα ιδιοδιανύσματα αυτά με βάση τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή της ενέργειας $|n>$. Εχουμε

$$|a >= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)|n >= \sum_{n=0}^{\infty} |n >< n|a >$$

Εισάγουμε την σχέση αυτή στην σχέση του ορισμού και βρίσκουμε

$$a|a >= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)a|n >= \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\alpha)\sqrt{n}|n-1 >= \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1}(\alpha)\sqrt{n+1}|n >$$

Πολλαπλασιάζουμε την σχέση αυτή από τα αριστερά με το διάνυσμα $< m|$ και επειδή τα διανύσματα $|n>$ αποτελούν μία ορθοκανονική βάση, δηλαδή $< m|n >= \delta_{mn}$, βρίσκουμε

$$\alpha C_n(\alpha) = C_{n+1}(\alpha)\sqrt{n+1}$$

Η σχέση αυτή είναι μία απλή αναγωγική σχέση που δίνει το C_n συναρτήσει του C_0. Βρίσκουμε τελικά

$$C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0$$

Θα υπολογίσουμε τώρα το C_0 έτσι ώστε οι σύμφωνες καταστάσεις να είναι κανονικοποιημένες στην μονάδα. Ο υπολογισμός γίνεται ως εξής

$$< a|a >= |C_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*m}\alpha^n}{\sqrt{n!m!}} < m|n >= |C_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(|\alpha|^2\right)^n}{n!} =$$

$$= |C_0|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad |C_0| = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}$$

Μπορούμε τελικά να γράψουμε το διάνυσμα $|a>$ σαν γραμμικό συνδυασμό των βασικών διανυσμάτων $|n>$. Η ζητούμενη ανάπτυξη είναι η εξής

$$|a >= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n >$$

Παρατήρηση: Οι σύμφωνες καταστάσεις δεν είναι ορθογώνιες δηλαδή $< b|a > \neq 0$. Αντιθέτως βρίσκουμε ότι ικανοποιούν την σχέση

$$< b|a >= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{1}{2}|\beta|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\beta^{*m}}{\sqrt{m!}} < n|m >=$$

$$e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\frac{1}{2}|\beta|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m \beta^{*m}}{m!} = e^{-\frac{1}{2}\left(|\alpha|^2+|\beta|^2\right)+\alpha\beta^*}$$

Είναι όμως πολύ χρήσιμες σε προβλήματα ακτινοβολίας. Επιπλέον παρουσιάζουν την ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα. Οι καταστάσεις αυτές φτιάχνουν ένα πλήρες σύνολο. Κάθε διάνυσμα αναπτύσσεται σαν γραμμικός συνδυασμός των συναρτήσεων αυτών, όμως ο τρόπος της ανάπτυξης δεν είναι μοναδικός.

Η σχέση πληρότητας γράφεται

$$\int |a >< a| \frac{d^2\alpha}{\pi} = 1$$

Η ολοκλήρωση γίνεται στο μιγαδικό επίπεδο.

Ενα τέτοιο σύνολο συναρτήσεων ονομάζεται υπερπλήρες.

Ασκήσεις

Άσκηση 5.1

Ενα σωματίδιο είναι δέσμιο σε ένα πηγάδι δυναμικού με άπειρα τοιχώματα

$$V(x) = 0 \quad \text{για} \quad -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \quad \text{και} \quad V\left(\pm\frac{\alpha}{2}\right) = \infty$$

Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές της ενεργείας του.

Λύση: Προφανώς το σωμάτιο είναι δέσμιο και επομένως έχουμε κβάντωση στην ενέργεια. Η κυματοσυνάρτηση είναι μη μηδενική μόνο στο διάστημα $-\alpha/2 < x < \alpha/2$ ενώ έξω από το διάστημα αυτό είναι μηδέν. Στα όρια του διαστήματος η κυματοσυνάρτηση είναι επίσης μηδέν έτσι ώστε να είναι συνεχής σε όλο το διάστημα. Αρα η κυματοσυνάρτηση είναι λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi x = E\psi(x)$$

που ικανοποιεί οριακές συνθήκες

$$\psi(-\frac{\alpha}{2}) = \psi(\frac{\alpha}{2}) = 0$$

Η γενική λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι της μορφής

$$\psi(x) = A\,\text{συν}\,(kx) + B\,\text{ημ}\,(kx) \qquad\qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Θα προσδιορίσουμε τώρα τις σταθερές ώστε να ικανοποιούνται οι οριακές συνθήκες. Εχουμε τις εξισώσεις

$$\begin{aligned}\psi(-\frac{\alpha}{2}) = A\,\text{συν}\left(-k\frac{\alpha}{2}\right) + B\,\text{ημ}\left(-k\frac{\alpha}{2}\right) =& A\,\text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) - B\,\text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) = 0\\ \psi(\frac{\alpha}{2}) =& A\,\text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) + B\,\text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) = 0\end{aligned}$$

που είναι ένα ομογενές σύστημα δύο εξισώσεων με δύο αγνώστους τα Α και Β. Το σύστημα έχει μη μηδενική λύση αν η ορίζουσα των συντελεστών των αγνώστων είναι μηδέν δηλαδή

$$\begin{vmatrix} \text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) & -\,\text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) \\ \text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) & \text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) \end{vmatrix} = 2\,\text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right)\text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) = 0$$

Επομένως οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι λύσεις των εξισώσεων

$$\alpha)\ \text{συν}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) = 0 \quad \text{ή} \quad \beta)\ \text{ημ}\left(k\frac{\alpha}{2}\right) = 0$$

Οι τελευταίες εξισώσεις δίνουν τις ενεργειακές καταστάσεις του συστήματος. Εχουμε συνεπώς δύο ομάδες λύσεων. Η πρώτη εξίσωση δίνει την λύση $B = 0$ και $\mathrm{A} \neq 0$ του συστήματος και η δεύτερη εξίσωση την λύση $\mathrm{B} \neq 0$ και $\mathrm{A} = 0$.

Για την πρώτη λύση βρίσκουμε της ακόλουθες ιδιοτιμές

$$k\frac{\alpha}{2} = n\pi + \frac{\pi}{2} \quad \Longrightarrow \quad k = \frac{\pi}{\alpha}(2n+1) \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\psi_n(x) = \mathrm{A}\,\text{συν}\,(k_n x)$$

Οι συναρτήσεις αυτές είναι άρτιες. Η σταθερά Α υπολογίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης. Βρίσκουμε

$$1 = \int_{-\alpha/2}^{\alpha/2} \psi_n^* \psi_n dx = |A|^2 \int_{-\alpha/2}^{\alpha/2} \text{συν}^2\,(k_n x) dx = |\mathrm{A}|^2 \frac{\alpha}{2} \quad \Longrightarrow |\mathrm{A}| = \sqrt{\frac{2}{\alpha}}$$

Για την δεύτερη λύση βρίσκουμε της ακόλουθες ιδιοτιμές

$$k\frac{\alpha}{2} = n\pi \quad \Longrightarrow \quad k = \frac{\pi}{\alpha}(2n) \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\psi_n(x) = \mathrm{B}\,\text{ημ}\,(k_n x)$$

Οι συναρτήσεις αυτές είναι περιττές. Η σταθερά Β υπολογίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης. Βρίσκουμε

$$1 = \int_{-\alpha/2}^{\alpha/2} \psi_n^* \psi_n dx = |\mathrm{B}|^2 \int_{-\alpha/2}^{\alpha/2} \eta\mu^2 (k_n x) dx = |\mathrm{B}|^2 \frac{\alpha}{2} \quad \Longrightarrow |\mathrm{B}| = \sqrt{\frac{2}{\alpha}}$$

Η τελική έκφραση των ιδιοσυναρτήσεων και των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεπώς

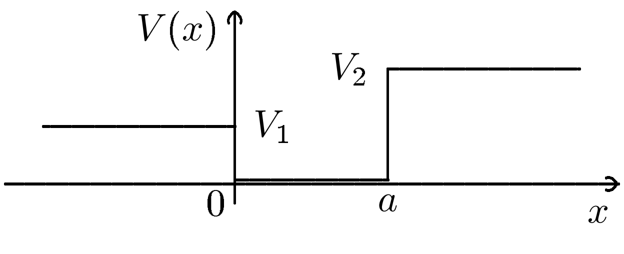
$$\begin{array}{lll} \psi_n = \sqrt{\frac{2}{\alpha}}\, \sigma\upsilon\nu\left((2n+1)\frac{\pi x}{\alpha}\right) & \mathrm{E}_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\alpha^2}(2n+1)^2 & n = 0,1,2,\cdots \\ \psi_n = \sqrt{\frac{2}{\alpha}}\, \eta\mu\left((2n)\frac{\pi x}{\alpha}\right) & \mathrm{E}_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\alpha^2}(2n)^2 & n = 1,2,\cdots \end{array}$$

Άσκηση 5.2

Να βρεθούν οι ενεργειακές καταστάσεις για ένα σωμάτιο που κινείται με ενέργεια $E < V_1$ από τα αριστερά προς τα δεξιά στο παρακάτω δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_2 & a > x \end{cases}$$

Το πρόβλημα μπορεί να λυθεί και στις περιπτώσεις που η ενέργεια έχει τιμές $V_2 > E > V_1$ και $e > v_2$. Το σωμάτιο στις περιπτώσεις αυτές δεν είναι δέσμιο. Οι καταστάσεις είναι καταστάσεις της σκέδασης και οι ιδιοτιμές της ενέργειας δεν είναι κβαντισμένες.



Σχήμα 5.7
Η γραφική παράσταση του δυναμικού

Λύση: Επειδή $E < V_1$ το σωμάτιο είναι δέσμιο στο δυναμικό. Η κυματοσυνάρτηση μέσα στο πηγάδι στην περιοχή $0 < x < a$ είναι ένα κύμα της μορφής

$$\psi_2(x) = c_2\, \eta\mu\,(kx + \delta) \qquad\qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Εξω από το πηγάδι η κυματοσυνάρτηση είναι εκθετικής μορφής. Επειδή επί πλέον πρέπει να μηδενίζεται για $x \to \pm\infty$ στην περιοχή $x < 0$ είναι

$$\psi_1(x) = c_1 e^{k_1 x} \qquad\qquad k_1 = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar$$

και στην περιοχή $x > a$ είναι

$$\psi_3(x) = c_3 e^{-k_3 x} \qquad\qquad k_3 = \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar$$

Η συνάρτηση και η παραγωγός της πρέπει να είναι συνεχείς. Οι συνθήκες συνεχείας στο σημείο 0 δίνουν τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \psi_1(0) = \psi_2(0) \quad &\Longrightarrow \quad c_1 = c_2\,\text{ημ}\,\delta \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \quad &\Longrightarrow \quad k_1 c_1 = k c_2\,\text{συν}\,\delta \end{aligned}$$

Οι συνθήκες συνεχείας στο σημείο a δίνουν τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \psi_2(0) = \psi_3(0) \quad &\Longrightarrow \quad c_2\,\text{ημ}\,(ka + \delta) = c_1 e^{ik_1 a} \\ \psi_2'(0) = \psi_3'(0) \quad &\Longrightarrow \quad k c_2\,\text{συν}\,(ka + \delta) = -k_2 c_3 e^{-ik_2 a} \end{aligned}$$

διαιρούμε τις παραπάνω εξισώσεις κατά μέλη και βρίσκουμε. Στο σημείο 0

$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{\psi_1'}{\psi_1} \quad \Longrightarrow \quad k\,\text{σφ}\,\delta = k_1$$

και στο σημείο a

$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{\psi_1'}{\psi_1} \quad \Longrightarrow \quad k\,\text{σφ}\,(ka + \delta) = -k_2$$

Επομένως για να είναι συνεχής η συνάρτηση στα σημεία 0 και a πρέπει να ισχύουν οι σχέσεις

$$\text{σφ}\,\delta = \frac{k_1}{k} = \sqrt{\frac{(V_1 - E)}{E}} \quad \Longrightarrow \quad \text{ημ}\,\delta = \frac{1}{\sqrt{1 + \text{σφ}^2\,\delta}} = \sqrt{\frac{E}{V_1}}$$

$$\text{σφ}\,(ka + \delta) = \frac{k_2}{k} = \sqrt{\frac{(V_2 - E)}{E}} \quad \Longrightarrow \quad \text{ημ}\,(ak + \delta) = -\sqrt{\frac{E}{V_2}}$$

Από τις δύο αυτές εξισώσεις θα απαλείψουμε την σταθερή δ και θα βρούμε την εξίσωση που δίνει τις ενεργειακές καταστάσεις.

$$\eta\mu\left[ak + \eta\mu^{-1}\left(\sqrt{\frac{E}{V_1}}\right)\right] = -\sqrt{\frac{E}{V_2}} \quad \Longrightarrow$$

$$a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = n\pi - \eta\mu^{-1}\left(\sqrt{\frac{E}{V_2}}\right) - \eta\mu^{-1}\left(\sqrt{\frac{E}{V_1}}\right) \qquad n = 1, 2, \cdots$$

Δεν θα προχωρήσουμε στην διερεύνηση της παραπάνω εξίσωσης ιδιοτιμών. Σημειώνουμε μόνο ότι για $V_1 \neq V_2$ η εξίσωση είναι δυνατόν να μην έχει καμία λύση αν διαλέξουμε το a αρκετά μικρό. Για $V_1 = V_2$ η εξίσωση ιδιοτιμών έχει πάντα μία λύση.

Άσκηση 5.3

Να λυθεί το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή στην $p-$ παράσταση και να βρεθεί η πυκνότητα πιθανότητας της ορμής.

Λύση: Η κλασσική συνάρτηση του Χάμιλτον για τον αρμονικό ταλαντωτή είναι

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ο τελεστής του Χάμιλτον στην $p-$ παράσταση βρίσκεται από την κλασσική αυτή συνάρτηση αν αντικαταστήσουμε τα p και x με του ακόλουθους τελεστές

$$p = p \qquad\qquad x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$$

Βρίσκουμε

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

Γράφουμε τώρα την εξίσωση του Σρέντινγκερ

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) - \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\varphi(p) = E\varphi(p) \quad \Longrightarrow$$

$$\frac{d^2}{dp^2}\varphi(p) + \frac{2}{m\omega^2\hbar^2}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\varphi(p) = 0$$

Θα κάνουμε τώρα τους παρακάτω απλούς μετασχηματισμούς

$$\xi = \frac{1}{p_0} p \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}$$

και η διαφορική εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\varphi(\xi) + \left(\lambda - \xi^2\right)\varphi(\xi) = 0$$

Η διαφορική εξίσωση είναι ίδια με την αντίστοιχη στην $q-$ παράσταση σχέση (5.6) και έχει την λύση

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi} p_0}\right)^{1/2} H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2\right)$$

Την ίδια λύση μπορούμε να βρούμε αν πάρουμε τον μετασχηματισμό Φουριέ της κυματοσυνάρτησης $\psi(x,t)$.

Άσκηση 5.4

Να γραφούν και να λυθούν οι εξισώσεις της κίνησης των τελεστών δημιουργίας και εξαφάνισης, της θέσης και της ορμής μέσα σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή

Λύση: Οι εξισώσεις της κίνησης είναι οι εξισώσεις του Χάιζενμπεργκ που στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή δίνουν

$$i\hbar\frac{da}{dt} = [a, H] = \left[a, \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a)\right] = \frac{\hbar\omega}{2}a[a, a^+] + \frac{\hbar\omega}{2}[a, a^+]a = \hbar\omega$$

Με όμοιο τρόπο βρίσκουμε την εξίσωση της κίνησης του τελεστή a^+.

$$i\hbar\frac{da^+}{dt} = [a^+, H] = \left[a^+, \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a)\right] =$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}[a^+, a]a^+ + \frac{\hbar\omega}{2}a^+[a^+, a] = -\hbar\omega$$

Επομένως οι εξισώσεις της κίνησης είναι

$$i\frac{da(t)}{dt} - \omega a(t) = 0 \qquad i\frac{da^+(t)}{dt} + \omega a^+(t) = 0$$

Οι παραπάνω εξισώσεις λύνονται εύκολα και δίνουν

$$a(t) = a_0 e^{-i\omega t} \qquad a^+(t) = a_0^+ e^{i\omega t}$$

όπου a_0 και a_0^+ οι αρχικές τιμές των τελεστών αυτών.

Για τις εξισώσεις της κίνησης των τελεστών της θέσης και της ορμής θα εργαστούμε με τον ίδιο τρόπο. Εχουμε

$$i\hbar\frac{dp}{dt} = [p, H] = \left[p, \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right] = \frac{1}{2}m\omega^2[p, q^2] =$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2(-2i\hbar)q = -i\hbar m\omega^2 q$$

$$i\hbar\frac{dq}{dt} = [q, H] = \left[q, \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right] = \frac{1}{2m}[q, p^2] = \frac{1}{2m}2i\hbar p = i\hbar\frac{1}{m}p$$

Επομένως οι εξισώσεις της κίνησης για τους τελεστές της θέσης και της ορμής μέσα σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$\frac{dp}{dt} = m\omega^2 q \qquad \frac{dq}{dt} = \frac{1}{m}p$$

Για να λύσουμε τις παραπάνω εξισώσεις παραγωγίζουμε την πρώτη εξίσωση άλλη μια φορά και με την βοήθεια της δεύτερης βρίσκουμε

$$\frac{d^2p}{dt^2} = -m\omega^2\frac{dq}{dt} = -m\omega^2\frac{1}{m}p = -\omega^2 p$$

Αν παραγωγίσουμε την δεύτερη μια ακόμα φορά και αντικαταστήσουμε το dp/dt από την πρώτη βρίσκουμε

$$\frac{d^2q}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{m}m\omega^2 p = -\omega^2 q$$

Επομένως οι εξισώσεις της κίνησης με τις αρχικές συνθήκες είναι

$$\ddot{p} + \omega^2 p = 0 \quad \ddot{q} + \omega^2 q = 0 \qquad\qquad p(0) = p_0 \quad q(0) = q_0$$

Οι εξισώσεις αυτές είναι όμοιες με τις κλασσικές εξισώσεις της κίνησης μόνο που εδώ τα $p(t)$ και $q(t)$ είναι τελεστές. Οι λύσεις των εξισώσεων αυτών είναι

$$q(t) = q_0 \,\text{συν}\,(\omega t) + \frac{1}{m\omega} p_0 \,\text{ημ}\,(\omega t) \qquad\qquad p(t) = p_0 \,\text{συν}\,(\omega t) - m\omega q_0 \,\text{ημ}\,(\omega t)$$

Από τις παραπάνω λύσεις φαίνεται αμέσως ότι οι μέσες τιμές της θέσης και της ορμής ικανοποιούν τις κλασσικές εξισώσεις της κίνησης

$$\langle q \rangle (t) = \langle q \rangle_0 \,\text{συν}\,(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \langle p \rangle_0 \,\text{ημ}\,(\omega t)$$

$$\langle p \rangle (t) = \langle p \rangle_0 \,\text{συν}\,(\omega t) - m\omega \langle q \rangle_0 \,\text{ημ}\,(\omega t)$$

Κεφάλαιο 6

Κεντρικά δυναμικά

Το κεφάλαιο αυτό θα μελετήσουμε την στροφορμή και το σπιν, και θα λύσουμε το πρόβλημα του ατόμου του υδρογόνου.

6.1 Οι τελεστές της στροφορμής

Κλασσικά η στροφορμή ενός σωματιδίου ορίζεται από το εξωτερικό γινόμενο

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Στο κεφάλαιο αυτό θα συμβολίσουμε τα διανύσματα της θέσης και της ορμής με τους δείκτες $(1, 2, 3)$. Ετσι ώστε οι διάφορες σχέσεις να βγαίνουν από μία με κυκλική εναλλαγή των δεικτών.

$$\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) \qquad \vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$$

Οι τρεις συντεταγμένες του διανύσματος της στροφορμής είναι

$$L_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2 \quad L_2 = x_3 p_1 - x_1 p_3 \quad L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1$$

Οι τελεστές της στροφορμής εκφράζονται σε διαφορική μορφή από την σχέση

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

Αναλυτικά έχουμε

$$L_1 = -i\hbar \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \qquad L_2 = -i\hbar \left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

$$L_3 = -i\hbar \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)$$

Αποδεικνύεται ότι οι σχέσεις της αντιμετάθεσης των τελεστών της στροφορμής είναι

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3 \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1 \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2$$

Οι τρεις παραπάνω σχέσεις γράφονται συνοπτικά

$$[L_k, L_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} L_m \qquad (k, l, m) = (1, 2, 3)$$

όπου εννοείται ότι γίνεται άθροιση ως προς κάθε επαναλαμβανόμενο δείκτη.

Το σύμβολο ε_{ijk} του Λεβί-Τσίβιτα παίρνει της τιμές ± 1 και 0 ως εξής

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1 \qquad \varepsilon_{321} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = -1$$

και την τιμή 0 σε όλες τις άλλες περιπτώσεις.

Ορίζουμε τον τελεστή της ολικής στροφορμής από την σχέση

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

Ο τελεστής αυτός εναλλάσσεται με όλες τις συνιστώσες τις στροφορμής

$$[L^2, L_j] = 0 \qquad j = 1, 2, 3$$

Πράγματι για την συνιστώσα L_1 για παράδειγμα έχουμε

$$[L^2, L_1] = [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] = L_2[L_2, L_1] + [L_2, L_1]L_2 +$$

$$+ L_3[L_3, L_1] + [L_3, L_1]L_3 = i\hbar L_2 L_3 + i\hbar L_3 L_2 - i\hbar L_3 L_2 - i\hbar L_2 L_3 = 0$$

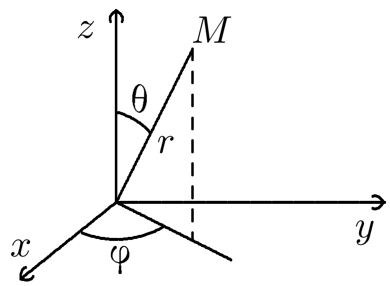
Η απόδειξη για τις άλλες συνιστώσες γίνεται με κυκλική εναλλαγή των δεικτών.

Από τις σχέσεις της αντιμετάθεσης προκύπτει ότι, από τα τέσσερα φυσικά μεγέθη L^2, L_1, L_2, L_3, μόνο το L^2 μαζί με ένα από τα υπόλοιπα μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Διαλέγουμε συνήθως το L_3 διότι σε σφαιρικές συντεταγμένες έχει την πιο απλή μορφή από τους άλλους.

Θα βρούμε ακολούθως τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές των τελεστών L^2 και L_3. Θα εργαστούμε σε σφαιρικές συντεταγμένες.

Οι σφαιρικές συντεταγμένες r, θ, φ συνδέονται με τις καρτεσιανές x, y, z με τις σχέσεις

$$
\begin{aligned}
&x = r\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\varphi \qquad && 0 \leq r < \infty \\
&y = r\,\text{ημ}\,\theta\,\text{ημ}\,\varphi && 0 \leq \theta \leq \pi \\
&z = r\,\text{συν}\,\theta && 0 \leq \varphi \leq 2\pi
\end{aligned}
$$



Σχήμα 6.1
Σφαιρικές και καρτεσιανές συντεταγμένες.

Σε σφαιρικές συντεταγμένες οι τελεστές της στροφορμής γράφονται

$$
\begin{aligned}
L_1 &= i\hbar\left(\text{ημ}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \text{σφ}\,\theta\,\text{συν}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_2 &= i\hbar\left(-\,\text{συν}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \text{σφ}\,\theta\,\text{ημ}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_3 &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}
$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\text{ημ}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{ημ}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\text{ημ}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Η εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή L_3 είναι

$$L_3\Phi(\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi) = \hbar m\Phi(\varphi)$$

και έχει την λύση

$$\Phi(\varphi) = \mathrm{A}e^{im\varphi}$$

Επειδή οι τιμές φ και $\varphi + 2\pi$ παριστάνουν το ίδιο σημείο οι συναρτήσεις αυτές πρέπει να ικανοποιούν την σχέση

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} \quad \Longrightarrow \quad e^{im2\pi} = 1$$

Η οποία ισχύει για $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \cdots$.

Η σταθερά Α υπολογίζεται από την συνθήκη της κανονικοποίησης. Ο υπολογισμός δίνει την τιμή $\mathrm{A} = 1/\sqrt{2\pi}$. Αρα οι ιδιοσυναρτήσεις του L_3 είναι

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

με αντίστοιχες ιδιοτιμές

$$\lambda = \hbar m \qquad\qquad m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \cdots$$

Επομένως η προβολή της στροφορμής στον z άξονα είναι κβαντισμένη, δηλαδή μπορεί να πάρει ορισμένες μόνο τιμές. Οι τιμές αυτές είναι το μηδέν και τα ακέραια πολλαπλάσια του $\hbar$.

Θα υπολογίσουμε τώρα τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές του τελεστή L^2 της ολικής στροφορμής. Η εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή αυτόν είναι

$$L^2 \Upsilon_{lm}(\theta, \varphi) = \lambda \hbar^2 \Upsilon_{lm}(\theta, \varphi) \quad \Longrightarrow$$

$$\left[\frac{1}{\eta\mu\,\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\eta\mu\,\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\eta\mu^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \lambda \right] \Upsilon_{lm}(\theta, \varphi) = 0$$

Επειδή οι τελεστές L^2 και L_3 εναλλάσσονται έχουν το ίδιο σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Δηλαδή έχουν την ίδια εξάρτηση ως προς φ και επομένως οι ιδιοσυναρτήσεις $\Upsilon(\theta, \varphi)$ του L^2 αναλύονται στο γινόμενο

$$\Upsilon_{lm}(\theta, \varphi) = P_{lm}(\theta)\Phi(\varphi) = P_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$$

Η συνάρτηση $\Phi(\varphi)$ είναι η ιδιοσυνάρτηση του τελεστή L_3. Οι άγνωστες συναρτήσεις $P_{lm}(\theta)$ ικανοποιούν την εξίσωση

$$\left[\frac{1}{\eta\mu\,\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\eta\mu\,\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\eta\mu^2\theta} \right) \right] P_{lm}(\theta) = 0$$

Η παραπάνω εξίσωση με τον μετασχηματισμό

$$\mu = \text{συν}\,\theta \qquad\qquad -1 \le \mu \le 1$$

γίνεται

$$(6.1) \qquad \left(1-\mu^2\right)\frac{d^2}{d\mu^2}P_{lm}(\mu) - 2\mu\frac{d}{d\mu}P_{lm}(\mu) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right)P_{lm}(\mu) = 0$$

Η διαφορική αυτή εξίσωση ονομάζεται γενικευμένη εξίσωση του Λεζάντρ. Για $\lambda \ge m \ge 0$ η εξίσωση έχει λύσεις της μορφής

$$P_{lm}(\mu) = \left(1-\mu^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{d\mu^m}P_l(\mu) = 0$$

Αντικαθιστούμε τις λύσεις αυτές στην διαφορική εξίσωση και μετά από κάποιες πράξεις, διαπιστώνουμε ότι οι συναρτήσεις $P_l(\mu)$ ικανοποιούν την ακόλουθη διαφορική εξίσωση

$$\left(1-\mu^2\right)\frac{d^2}{d\mu^2}P_l(\mu) - 2\mu\frac{d}{d\mu}P_l(\mu) + \lambda P_l(\mu) = 0$$

Η εξίσωση αυτή είναι η γενικευμένη εξίσωση του Λεζάντρ για $m = 0$. Θα λύσουμε την διαφορική αυτή εξίσωση με την μέθοδο των σειρών.

Το σημείο μηδέν είναι ομαλό σημείο για την εξίσωση αυτή και επομένως η λύση είναι ένα ανάπτυγμα της μορφής

$$P_l(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \mu^n$$

Εισάγουμε την ανάλυση αυτή στην διαφορική εξίσωση και τελικά βρίσκουμε την ακόλουθη αναδρομική σχέση για τους συντελεστές α_n της σειράς.

$$\alpha_{n+2} = \frac{n(n+1)-\lambda}{(n+1)(n+2)}\alpha_n$$

Επειδή η αναγωγική αυτή σχέση συνδέει το α_{n+2} με το α_n, η συνάρτηση θα περιέχει μόνο άρτιες ή μόνο περιττές δυνάμεις του μ. Αν η σειρά είναι ένα άπειρο άθροισμα, τότε για $\mu = \pm 1$ η σειρά αποκλίνει, πράγμα φυσικά απαράδεκτο. Το γεγονός αυτό μπορούμε να το αποφύγουμε αν αναγκάσουμε την σειρά να τελειώνει κάπου. Να είναι δηλαδή ένα πολυώνυμο όπως κάναμε και για τον αρμονικό ταλαντωτή.

Αν υποθέσουμε ότι το πολυώνυμο είναι l βαθμού τότε ισχύει

$$\alpha_l \neq 0 \quad \text{και} \quad \alpha_{l+2} = 0$$

Αυτό συμβαίνει μόνο όταν

$$\lambda = l(l+1) \qquad\qquad l = 0, 1, 2, \cdots$$

όπως φαίνεται εύκολα από την αναδρομική σχέση των συντελεστών. Η σχέση αυτή δίνει της ιδιοτιμές του προβλήματος.

Αντικαθιστούμε την ιδιοτιμή λ στον αναγωγικό τύπο για τους συντελεστές του πολυώνυμου και βρίσκουμε

$$\alpha_{n+2} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+1)(n+2)}\alpha_n = \frac{(n-l)(n+l+1)}{(n+1)(n+2)}\alpha_n$$

Με το αναγωγικό αυτό τύπο βρίσκουμε όλους τους συντελεστές του αναπτύγματος. Θέτουμε για ευκολία $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$ και βρίσκουμε

$$\alpha_n = \frac{(-1)^{(l-n)/2}(l+n)(l+n-1)\ \cdots\ (n+2)(n+1)}{2^l l!}\binom{l}{\frac{1}{2}(l+n)}$$

Αν θέσουμε $n = l - 2k$ μετά από ορισμένες πράξεις βρίσκουμε τελικά τα πολυώνυμα του Λεζάντρ

$$P_l(\mu) = \sum_{k=0}^{[l/2]}(-1)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k)!}\mu^{l-2k}$$

Τα απλά πολυώνυμα του Λεζάντρ αποδεικνύεται ότι δίνονται επίσης και από την τύπο του Ροντρίγκες

$$P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\mu^l}\left(\mu^2 - 1\right)^l$$

Για $m < 0$ η διαφορική εξίσωση δεν αλλάζει και άρα η λύση είναι πάλι τα πολυώνυμα του Λεζάντρ πολλαπλασιασμένα με μία κατάλληλη σταθερά. Αποδεικνύεται ότι

$$P_{l-m}(\mu) = (-1)^m P_{lm}(\mu)$$

Αν θέλουμε τα γενικευμένα πολυώνυμα του Λεζάντρ να πληρούν μία σχέση ορθοκανονικότητας, πρέπει να τα πολλαπλασιάσουμε με την ακόλουθη σταθερά

$$\mathrm{N}_{lm} = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}\right]^{1/2}$$

Τέλος μαζεύοντας όλους τους όρους μαζί έχουμε τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή L^2 της ολικής στροφορμής, που ονομάζονται σφαιρικές αρμονικές. Εχουμε

$$\Upsilon_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right]^{1/2} (-1)^m e^{im\varphi} P_{lm}(\text{συν}\,\theta)$$

Για αρνητικά m έχουμε

$$\Upsilon_{l-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\Upsilon_{lm}(\theta, \varphi)\right]^*$$

Οι ακέραιοι m και l παίρνουν τις τιμές

$$l = 0, 1, 2, \cdots \quad \text{και} \quad -l \leq m \leq l$$

Το m είναι δυνατόν να πάρει τις τιμές

$$-l, -l+1, \cdots, -1, 0, +1, \cdots, l-1, l$$

δηλαδή 2l+1 συνολικά τιμές. Τούτο σημαίνει ότι οι σφαιρικές αρμονικές, σαν ιδιοσυναρτήσεις του L^2, είναι $2l+1$ φορές εκφυλισμένες στην ιδιοτιμή $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$ με εξαίρεση την κατάσταση με μηδενική στροφορμή $l = 0$.

Για $l = 0$ οι ιδιοτιμές και του L^2 και του L_3 είναι μηδέν και προφανώς από την σχέση $L^2 - L_z^2 = L_1^2 + L_2^2$ και οι ιδιοτιμές των L_1 και L_2 γίνονται μηδέν. Η κατάσταση είναι η μοναδική που και οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Για $l \neq 0$ δεν μπορούμε να βρούμε τις τιμές που παίρνουν οι άλλες δύο συνιστώσες της στροφορμής L_1

και L_2, μπορούμε όμως να βρούμε τις μέσες τιμές τους και τις διασπορές τους.

Οι διαφορές καταστάσεις του L^2 συνηθίζεται να χαρακτηρίζονται με τα ακόλουθα σύμβολα αντιστοίχως

$$\begin{array}{rl} \text{για} & l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ \cdots \\ \text{σύμβολο κατάστασης} & s,\ p,\ d,\ f,\ g,\ h,\ \cdots \end{array}$$

Οι τρεις πρώτες σφαιρικές αρμονικές για $l = 0,\ 1,$ και 2 δίνονται από τον παρακάτω πίνακα

$$\begin{array}{ll} \Upsilon_{00} = \sqrt{1/4\pi} & \Upsilon_{10} = \sqrt{3/4\pi}\,\text{συν}\,\theta \\ \Upsilon_{1\pm1} = \mp\sqrt{3/8\pi}\,\text{ημ}\,\theta e^{\pm im\varphi} & \Upsilon_{20} = \frac{1}{2}\sqrt{5/4\pi}\left(3\,\text{συν}^2\theta - 1\right) \\ \Upsilon_{2\pm1} = \mp\sqrt{15/8\pi}\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\theta e^{\pm i\theta} & \Upsilon_{2\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{15/2\pi}\,\text{ημ}^2\theta e^{\pm 2i\varphi} \end{array}$$

Οι σφαιρικές αρμονικές αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων. Κάθε "καλή" συνάρτηση $f(\theta,\varphi)$ ορισμένη στην επιφάνεια μιας μοναδιαίας σφαίρας, μπορεί να αναλυθεί σε μια ομοιομόρφως συγκλίνουσα διπλή σειρά από σφαιρικές αρμονικές

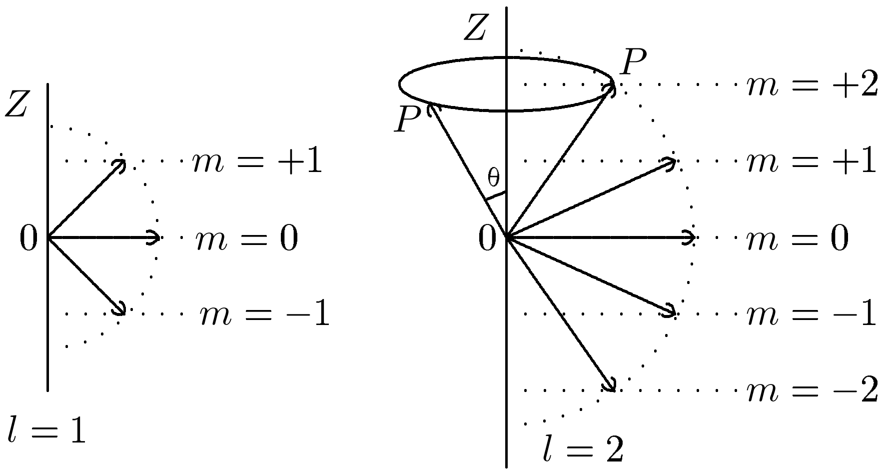
$$f(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \alpha_{lm}\Upsilon_{lm}(\theta,\psi)$$

Ο εκφυλισμός των ιδιοσυναρτήσεων του L^2 ως προς m έχει μία ενδιαφέρουσα φυσική ερμηνεία. Οταν το λ πάρει μία ορισμένη τιμή τότε το μέτρο της στροφορμής καθορίζεται πλήρως. Παίρνει την τιμή $\hbar\sqrt{l(l+1)}$. Η συνιστώσα L_3 της στροφορμής τότε μπορεί να πάρει μία από τις $2l+1$ τιμές $\hbar m$ όπου $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \cdots, \pm l$. Κατά συνέπεια το διάνυσμα της ολικής στροφορμής L μπορεί να έχει ορισμένους μόνο προσανατολισμούς στον χώρο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται κβάντωση κατεύθυνσης.

Η γωνία θ του διανύσματος της στροφορμής και του άξονα OZ δίνεται από την σχέση

$$\text{συν}\,\theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Οι καταστάσεις για $l = 1$ και $l = 2$ φαίνονται στο παρακάτω σχήμα. Το διάνυσμα OP του σχήματος για παράδειγμα είναι το διάνυσμα που έχει μέτρο ίσο με $\hbar\sqrt{2(2+1)}$ και η προβολή του πάνω στον άξονα των z έχει τιμή $2\hbar$.



Σχήμα 6.2
Πιθανοί προσανατολισμοί του διανύσματος της στροφορμής για $l = 1$ και $l = 2$.

Παρατήρηση: Λόγω της ισοτροπίας του χώρου η διεύθυνση του $z-$ άξονα του σχήματος είναι αυθαίρετη. Για να σχηματιστεί μια διεύθυνση που να διαφέρει από τις άλλες χρησιμοποιούμε συνήθως ένα μαγνητικό πεδίο με ένταση παράλληλη προς τον $z-$ άξονα. Το L_3 τότε είναι παράλληλο προς την ένταση του μαγνητικού πεδίου. Αυτός είναι ο λόγος που ο αριθμός m ονομάζεται μαγνητικός κβαντικός αριθμός.

6.2 Αλγεβρική μέθοδος

Στην παράγραφο αυτή θα λύσουμε το ίδιο πρόβλημα με αλγεβρικές μεθόδους. Η μέθοδος μας επιτρέπει να υπολογίσουμε ιδιοτιμές μέσες τιμές και άλλα παρατηρήσιμα μεγέθη χωρίς ιδιαίτερη αναφορά στην μορφή των ιδιοσυναρτήσεων.

Συμβολίζουμε τις σφαιρικές αρμονικές με το διάνυσμα $|m, l>$. Με τον συμβολισμό αυτό γράφουμε τις εξισώσεις ιδιοτιμών των τελεστών L^2 και L_3 ως εξής

$$L^2|m, l>= \hbar^2 l(l+1)|m, l> \quad \text{και} \quad L_3|m, l>= \hbar m|m, l>$$

Ορίζουμε τους ακόλουθους τελεστές της μετατόπισης.

$$L_+ = L_1 + iL_2 = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\sigma\varphi\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_- = L_1 - iL_2 = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\sigma\varphi\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Οι τελεστές αυτοί προφανώς δεν είναι ερμητιανοί, αλλά ο ένας είναι συζυγής του άλλου. Δηλαδή ισχύει η σχέση

$$< m,l|L_\pm = L_\mp|m,l >$$

Οι τελεστές αυτοί ικανοποιούν τις εξής σχέσεις της αντιμετάθεσης με τους τελεστές L_3 και L^2

$$[L_3, L_+] = \hbar L_+ \quad [L_3, L_-] = -\hbar L_- \qquad\qquad [L^2, L_\pm] = 0$$

Επιδρούμε τώρα τους τελεστές της παραπάνω σχέσης στην σφαιρική αρμονική $|m,l >$. Βρίσκουμε κατά σειρά

$$\begin{aligned}
[L_3, L_\pm]|m,l > =& L_3L_\pm|m,l > - L_\pm L_3|m,l >= \\
& L_3L_\pm|m,l > - L_\pm\hbar m|m,l >= \pm\hbar L_\pm|m,l > \\
[L^2, L_\pm]|m,l > =& L^2L_\pm|m,l > - L_\pm L^2|m,l >= \\
& L^2L_\pm|m,l > - L_\pm\hbar^2 l(l+1)|m,l >= 0
\end{aligned}$$

Από τις σχέσεις αυτές έχουμε

$$L_3\left(L_\pm|m,l >\right) = \hbar\left(m \pm 1\right)\left(L_\pm|m,l >\right)$$

$$L^2\left(L_\pm|m,l >\right) = \hbar^2 l(l+1)\left(L_\pm|m,l >\right)$$

Οι δύο παραπάνω σχέσεις σημαίνουν ότι τα διανύσματα $L_\pm|m,l >$ είναι ιδιοδιανύσματα του τελεστή L_3 με ιδιοτιμές $\hbar(m \pm 1)$ και ταυτόχρονα ιδιοδιανύσματα του L^2 με ιδιοτιμή $\hbar^2 l(l+1)$. Επομένως τα διανύσματα αυτά είναι ανάλογα με τα διανύσματα $|m \pm 1, l >$. Δηλαδή ισχύουν οι σχέσεις

$$L_+|m,l >= C_+|m+1,l > \qquad\qquad L_-|m,l >= C_-|m-1,l > \tag{6.2}$$

Παρατηρούμε ότι ο τελεστής L_+ ανεβάζει την τιμή του m κατά μία μονάδα ενώ η τιμή του l παραμένει σταθερή. Ομοίως ο τελεστής L_-κατεβάζει την τιμή του m κατά ένα. Δεδομένου ότι το m μεταβάλλεται από το $-l$ που είναι η κατώτερη τιμή μέχρι το $+l$ που είναι η ανώτερη τιμή οι τελεστές αυτοί πρέπει να ικανοποιούν τις σχέσεις

$$L_+|l,l>=0 \qquad\qquad L_-|-l,l>=0$$

Οι μέσες τιμές των τελεστών $L_\pm$ είναι μηδέν προφανώς λόγω της ορθογωνιότητας των σφαιρικών αρμονικών. Για να βρούμε τις σταθερές $C_\pm$ θα χρησιμοποιήσουμε την συνθήκη της κανονικοποίησης των διανυσμάτων $|m,l>$.

Το γινόμενο των τελεστών L_+ και L_- ικανοποιεί την σχέση

$$L_\mp L_\pm = (L_1 \mp iL_2)(L_1 \pm iL_2) =$$

$$= L_1^2 + L_2^2 \pm i(L_1L_2 - L_2L_1) = L^2 - L_3^2 \mp \hbar L_3$$

Επομένως έχουμε

$$|C_\pm|^2 =<(L_\pm|m,l>)\,|\,(L_\pm|m,l>)>=<m,l|L_\mp L_\pm|m,l>=$$

$$<m,l|\left(L^2 - L_3^2 \mp \hbar L_3\right)|m,l>= \hbar^2 <m,l|\left(l(l+1) - m^2 \mp m\right)|m,l>=$$

$$\hbar^2(l \mp m)(l \pm m + 1)$$

Κατά συνέπεια οι ζητούμενες σταθερές είναι

$$C_\pm = \hbar\ \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}$$

Αντικαθιστούμε τις σταθερές αυτές στις σχέσεις (6.2) και Βρίσκουμε

$$L_+|m,l>=\hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}|m+1,l>$$

$$L_-|m,l>=\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}|m-1,l>$$

Τα μη μηδενικά στοιχεία μήτρας των τελεστών της μετατόπισης $L_\pm$ με βάση τις σφαιρικές αρμονικές είναι

$$(L_\pm)_{m\pm1,m} = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}$$

Τέλος θα βρούμε τις μέσες τιμές και τις διασπορές των L_1 και L_2. Από τον ορισμό των τελεστών $L_\pm$ βρίσκουμε

$$L_1 = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \qquad\qquad L_2 = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

Από τις σχέσεις αυτές και από τις σχέσεις (6.2) βλέπουμε ότι η δράση των τελεστών L_1 και L_2 πάνω στις σφαιρικές αρμονικές δίνεται από τις σχέσεις.

$$L_1|m,l> = \frac{1}{2}C_+|m+1,l> + \frac{1}{2}C_-|m-1,l>$$

$$L_2|m,l> = \frac{1}{2i}C_+|m+1,l> - \frac{1}{2i}C_-|m-1,l>$$

Επειδή τα διανύσματα $|m,l>$ είναι ορθοκανονικά από τις παραπάνω σχέσεις φαίνεται αμέσως ότι οι μέσες τιμές των τελεστών L_1 και L_2 είναι μηδέν. Πραγματικά

$$< L_1 > = < m,l|L_1|m,l> = 0 \qquad\qquad < L_2 > = < m,l|L_2|m,l> = 0$$

Οι διασπορές των μεγεθών L_1 και L_2 είναι ως γνωστόν τα μήκη των διανυσμάτων $L_1|m,l>$ και $L_2|m,l>$. Βρίσκουμε εύκολα ότι

$$\|L_1|m,l>\|^2 = \frac{1}{4}C_+^2 + \frac{1}{4}C_-^2 = \frac{\hbar^2}{4}(l-m)(l+m+1) +$$

$$\frac{\hbar^2}{4}(l+m)(l-m+1) = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$$

Με όμοιο τρόπο βρίσκουμε

$$\|L_2|m,l>\|^2 = \frac{1}{4}C_+^2 + \frac{1}{4}C_-^2 = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$$

Αποδείξαμε επομένως ότι οι διασπορές των μεγεθών L_1 και L_2 είναι

$$\Delta L_1 = \Delta L_2 = \hbar\sqrt{\frac{l(l+1) - m^2}{2}}$$

Παρατηρούμε ότι η έκφραση $l(l+1)-m^2$ που εμφανίζεται στους παραπάνω τύπους είναι η ιδιοτιμή του μεγέθους $L^2 - L_z^2$. Για κάθε m αυτή η διαφορά είναι θετική εκτός αν $l=0$ που είναι ίση με το μηδέν.

Γράφουμε τέλος τα μη μηδενικά στοιχεία μήτρας των τελεστών L_1 και L_2 με βάση τις σφαιρικές αρμονικές. Εχουμε

$$(L_1)_{m\,m-1} = (L_1)_{m-1\,m} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

$$(L_2)_{m\,m-1} = -\,(L_1)_{m-1\,m} = -\frac{\hbar}{2i}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

Παρατήρηση: Το διάνυσμα $|l,l>$ ικανοποιεί τις εξισώσεις

$$L_z|l,l>=l|l,l>=0 \qquad\qquad L_+|l,l>$$

Από τις δύο αυτές εξισώσεις μπορούμε να υπολογίσουμε το διάνυσμα $|l,l>$. Γράφουμε τις εξισώσεις αυτές σε σφαιρικές συντεταγμένες και έχουμε

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}|l,l>=l|l,l> \qquad\qquad \left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\,\sigma\varphi\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)|l,l>=0$$

Προφανώς η λύση έχει την μορφή του γινομένου

$$|l,l>\equiv\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Με την λύση αυτή η πρώτη διαφορική εξίσωση γίνεται

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi)=l\Phi(\varphi)$$

και έχει λύση την συνάρτηση $\Phi(\varphi)=ce^{il\varphi}$. Αρα η ζητούμενη λύση είναι της μορφής

$$|l,l>\equiv\Theta(\theta)e^{il\varphi}$$

Αντικαθιστούμε την λύση αυτή στην δεύτερη διαφορική εξίσωση και βρίσκουμε

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\,\sigma\varphi\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\Theta(\theta)e^{il\varphi}=0 \quad\Longrightarrow\quad \left(\frac{\partial}{\partial\theta}-l\,\sigma\varphi\,\theta\right)\Theta(\theta)=0$$

και έχει λύση την συνάρτηση $\Theta(\theta) = \text{ημ}^l\,\theta$. Επομένως έχουμε αποδείξει ότι

$$|l, l > \equiv c e^{il\varphi}\, \text{ημ}^l\, \theta$$

Μπορούμε να υπολογίζουμε τις υπόλοιπες σφαιρικές αρμονικές αν επιδράσουμε τον τελεστή L_- διαδοχικά πάνω στο διάνυσμα $|l, l>$.

6.3 Το σπιν

Διάφορα πειραματικά δεδομένα μας οδήγησαν στην παραδοχή ότι τα στοιχειώδη σωματίδια έχουν και άλλες "εσωτερικές ιδιότητες" εκτός από την μάζα και το φορτίο τους για παράδειγμα. Μία τέτοια εσωτερική ιδιότητα του ηλεκτρονίου είναι και το σπιν.

Το κλασσικό πείραμα που έδειξε την παρουσία του σπιν, είναι το πείραμα των Στερν - Γκέρλαχ. Μία δέσμη από άτομα με $L = 0$ εκτοξεύονται μέσα σε ένα μη ομογενές μαγνητικό πεδίο. Αποτέλεσμα η δέσμη διασπάται σε δύο μέρη. Το γεγονός αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μια εσωτερική ιδιότητα των ηλεκτρονίων με δύο τιμές. Η ιδιότητα αυτή ονομάστηκε σπιν. Η παραδοχή του σπιν είχε μεγάλη επιτυχία στην κατανόηση του φαινομένου Ζέιμαν. Πολλά σωματίδια όπως για παράδειγμα τα ηλεκτρόνια έχουν σπιν $\frac{1}{2}\hbar$ με δύο προσανατολισμούς στον χώρο.

Το σπιν είναι ένα φυσικό μέγεθος που παριστάνεται από τον διανυσματικό τελεστή $\vec{S}$ με συντεταγμένες τους τελεστές S_1, S_2, S_3. Οι τελεστές αυτοί εναλλάσσονται με όλους τους τελεστές που έχουμε γνωρίσει μέχρι τώρα.

Οι τελεστές του σπιν ικανοποιούν τις ίδιες σχέσεις της αντιμετάθεσης που ικανοποιούν και οι τελεστές της στροφορμής

$$[S_k, S_l] = i\hbar\varepsilon_{klm} S_m$$

$$[S^2, S_k] = 0 \qquad\qquad \text{για} \quad k = 1, 2, 3$$

Η κατάσταση ενός σωματιδίου δεν μπορεί να προσδιοριστεί πλήρως από την κυματοσυνάρτηση του $\psi(\vec{r})$ εκτός αν δεν έχει σπιν. Η κατάσταση του σωματιδίου με σπιν περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\Psi(\vec{r}, \vec{S}) = \psi(\vec{r}) U(\vec{S})$$

Το σπιν των σωματιδίων παίζει σπουδαίο ρόλο στην στατιστική των στοιχειωδών σωματιδίων. Τα συστήματα σωματιδίων με ακέραιο σπιν περιγράφονται με συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις. Τα σωματίδια αυτά ονομάζονται μποζόνια. Τα συστήματα σωματιδίων με ημιακέραιο σπιν περιγράφονται με αντισυμμετρικές κυματοσυναρτήσεις και τα σωματίδια ονομάζονται φερμιόνια. Τα σωματίδια - φορείς όλων των πεδίων είναι μποζόνια. Τα φωτόνια για παράδειγμα έχουν σπιν 1. Αντιθέτως τα βασικά πυρηνικά σωματίδια όπως για παράδειγμα τα πρωτόνια και τα νετρόνια είναι φερμιόνια. Τα ηλεκτρόνια που έχουν σπιν $\pm 1/2$ είναι επίσης φερμιόνια.

Για τα φερμιόνια ισχύει η απαγορευτική αρχή του Πάουλι που λέει ότι, δεν υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο με τους ίδιους ακριβώς κβαντικούς αριθμούς.

Αντιθέτως, για τα μποζόνια που δεν ισχύει τέτοια απαγορευτική αρχή, είναι δυνατόν να συνυπάρχουν σε μία και μοναδική κατάσταση πολλά σωματίδια. Αυτή η συνύπαρξη είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την δημιουργία ενός κλασσικού πεδίου όπως για παράδειγμα το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο.

Θα περιοριστούμε στην περίπτωση σωματιδίου που η προβολή του σπιν τους στην z διεύθυνση παίρνει δύο μόνο τιμές, τις $\pm\frac{1}{2}\hbar$ και θα βρούμε την παράσταση των τελεστών S_1, S_1 και S_3 του σπιν σε μορφή μητρών.

Συμβολίζουμε με U_+ και U_- τις ιδιοσυναρτήσεις του S_3 με ιδιοτιμές $+\frac{1}{2}\hbar$ και $-\frac{1}{2}\hbar$ αντιστοίχως. Ισχύουν δηλαδή οι εξισώσεις ιδιοτιμών

$$S_3 U_+ = \frac{1}{2}\hbar U_+ \qquad\qquad S_3 U_- = -\frac{1}{2}\hbar U_-$$

Αν το σπιν είναι παράλληλο ή αντιπαράλληλο προς τον άξονα των z, τότε η κατάσταση του είναι U_+ ή U_- αντίστοιχα. Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις, η κατάσταση σπιν είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των δύο αυτών καθαρών καταστάσεων U_+ και U_-. Δηλαδή

$$\text{Κατάσταση σπιν} \quad U(S) = \quad c_+ U_+ + c_- U_-$$

όπου $c_\pm$ είναι τα πλάτη πιθανότητες για παράλληλο και αντιπαράλληλο σπιν. Προφανώς πρέπει να ισχύει η σχέση

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$$

Οι καταστάσεις $U_\pm$ ονομάζονται καταστάσεις σπίνορς.

Θεωρούμε τα U_+ και U_- σαν βάσεις του χώρου οπότε οι ιδιοσυναρτήσεις U_+ και U_- ως προς την βάση (U_+, U_-) έχουν την μορφή στήλης διανυσμάτων

$$U_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad U_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν σωματίδια με σπιν $\pm\hbar/2$ γράφονται με την μορφής στήλης διανυσμάτων

$$\psi(\vec{r})U(S) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Η αντίστοιχη μήτρα του S_3 είναι προφανώς μία διαγώνιος μήτρα με διαγώνια στοιχεία τις ιδιοτιμές του S_3. Δηλαδή

$$S_3 = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Οι υπόλοιπες μήτρες μπορούν να υπολογιστούν από τις σχέσεις εναλλαγής των τελεστών S_1, S_2, S_3. Υποθέτουμε ότι

$$S_1 = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} \qquad S_2 = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}$$

και θα υπολογίσουμε τις άγνωστες σταθερές.

Από την σχέση εναλλαγής: $S_1S_3 - S_3S_1 = -i\hbar S_2$, έχουμε

$$\frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & -b_1 \\ c_1 & 0 \end{pmatrix} = -i\frac{1}{2}\hbar^2 \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}$$

Η παραπάνω ισότητα των δύο μητρών δίνει τις εξισώσεις

$$a_2 = d_2 = 0 \qquad\qquad b_1 = ib_2 \quad \text{και} \quad c_1 = -ic_2$$

Από την σχέση εναλλαγής: $S_2S_3 - S_3S_2 = i\hbar S_1$, έχουμε

$$\frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & -b_2 \\ c_2 & 0 \end{pmatrix} = i\frac{1}{2}\hbar^2 \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}$$

Η παραπάνω ισότητα των δύο μητρών δίνει τις εξισώσεις

$$a_1 = d_1 = 0 \qquad\qquad -b_2 = ib_1 \quad \text{και} \quad c_2 = ic_1$$

Η τελευταία σχέση της αντιμετάθεσης $S_1S_2 - S_2S_1 = i\hbar S_3$ δίνει

$$\frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & b_1 \\ c_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_2 \\ c_2 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & b_2 \\ c_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_1 \\ c_1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} b_1c_2 - b_2c_1 & 0 \\ 0 & -b_1c_2 + b_2c_1 \end{pmatrix} = i\frac{1}{2}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

από την οποία συνεπάγεται η εξίσωση

$$b_1c_2 - b_2c_1 = 2i$$

Η σχέση αυτή λόγω των σχέσεων $b_1 = ib_2$ και $c_1 = -ic_2$ γίνεται

$$ib_2c_2 - b_2(-ic_2) = 2ib_2c_2 = 2i \quad \Longrightarrow b_2c_2 = 1$$

και έχει λύση $b_2 = 1$ και $c_2 = 1$.

Αρα η τελική λύση του προβλήματος είναι

$$a_1 = a_2 = d_1 = d_2 = 0 \qquad\qquad b_1 = c_1 = 1 \qquad\qquad -b_2 = c_2 = i$$

Γράφουμε τώρα τις μήτρες των τελεστών του σπιν με την μορφή

$$S_j = \frac{1}{2}\hbar\sigma_j$$

όπου οι μήτρες σ_j είναι οι παρακάτω μήτρες του Πάουλι

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad\qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad\qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Οι μήτρες του Πάουλι ικανοποιούν τις σχέσεις

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk} \qquad\qquad \sigma_i^2 = 1 \quad i = 1, 2, 3$$

Για τον τελεστή S^2 βρίσκουμε την διαγώνιο μήτρα

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ο τελεστής αυτός έχει μία ιδιοτιμή δύο φορές εκφυλισμένη την $\frac{3}{4}\hbar^2$. Κατ' αναλογία με την στροφορμή γράφουμε

$$\frac{3}{4}\hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$$

Επειδή το σπιν ικανοποιεί σχέσεις εναλλαγής όμοιες με εκείνες της στροφορμής, το σπιν αναφέρεται συνήθως και σαν εσωτερική στροφορμή. Η μορφή της ιδιοτιμής είναι όμοια με την ιδιοτιμή της στροφορμής, με την διαφορά όμως ότι εδώ έχουμε την τιμή $l = \frac{1}{2}$ και όχι ακέραιες τιμές. Από την παρατήρηση αυτή είναι φυσικό να γράφουμε πολλές φορές τις καταστάσεις σπιν με την μορφή των διανυσμάτων.

$$U_+ \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2} > \qquad\qquad U_- \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} >$$

Παρατηρούμε ότι το σπιν δεν μπορεί να είναι η στροφορμή που έχει το ηλεκτρόνιο γυρίζοντας γύρω από τον άξονα του, διότι η στροφορμή παίρνει ακέραιες τιμές. Η “σβούρα” αυτή που λέγεται ηλεκτρόνιο πρέπει να περιστραφεί δύο φορές γύρω από τον άξονα του για να φθάσει στην αρχική του θέση. Από την άλλη μεριά, στο κλασσικό όριο του $\hbar \to 0$, το σπιν μηδενίζεται και επομένως δεν υπάρχει κλασσικό ανάλογο για να περιγράφουμε τι ακριβώς είναι το σπιν.

6.4 Δυναμικά σφαιρικώς συμμετρικά

Σφαιρικώς συμμετρικό ονομάζεται το δυναμικό που εξαρτάται από το μήκος του διανύσματος $\vec{r}$. Ενα τέτοιο δυναμικό είναι της μορφής

$$V(\vec{r}) = V(r) \qquad\qquad r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

Οι ισοδυναμικές επιφάνειες $V(r) = C$ είναι ομόκεντρες σφαίρες με κέντρο το σημείο $\vec{r} = 0$. Η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο μέσα σε ένα τέτοιο δυναμικό είναι κεντρική. Περνάει δηλαδή από το σημείο 0. Βρίσκουμε

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(r) = -\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{r}$$

Τέτοιου είδους δυναμικό είναι για παράδειγμα το δυναμικό Κουλόμπ και το δυναμικό Γιουκάβα

$$V(r) = -\frac{\lambda}{r} \qquad\qquad V(r) = g\frac{e^{-\mu r}}{r}$$

Θα υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές της ενεργείας ενός σωματιδίου μέσα σε ένα τέτοιο δυναμικό.

Η εξίσωση του Σρέντινγκερ είναι

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r})$$

Μεταφέρουμε όλους του όρους στο πρώτο μέλος και έχουμε

$$\left[\vec{\nabla}^2 + \frac{2m}{\hbar^2}[\mathrm{E} - V(r)]\right]\psi(\vec{r}) = 0$$

Επειδή το δυναμικό παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία, θα εργαστούμε σε σφαιρικές συντεταγμένες. Η εξίσωση σε σφαιρικές συντεταγμένες γράφεται

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Lambda(\theta,\varphi) + \frac{2m}{\hbar^2}[\mathrm{E} - V(r)]\right]\psi(r,\theta,\varphi) = 0$$

Με $\Lambda(\theta,\varphi)$ συμβολίζουμε τον τελεστή

$$\Lambda(\theta,\varphi) = \frac{1}{\eta\mu\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\eta\mu^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Ο τελεστής αυτός είναι ο ήδη γνωστός τελεστής της στροφορμής L^2.

Μπορούμε να διαχωρίσουμε την εξίσωση αυτή ως προς τις ανεξάρτητες μεταβλητές. Ζητούμε λύσεις της μορφής γινομένου. Ο πρώτος όρος του γινομένου εξαρτάται μόνο από το ακτινικό μέρος και ο άλλος μόνο από τις γωνίες

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)$$

Θέτουμε την λύση αυτή στην διαφορική εξίσωση και διαιρούμε με τον όρο

$$R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)/r^2$$

τον όποιον υποθέτουμε φυσικά διάφορο του μηδενός. Η εξίσωση γίνεται

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r)+\frac{2mr^2}{h^2}[\mathrm{E}-V(r)]=-\frac{1}{\Upsilon(\theta,\varphi)}\Lambda\,\Upsilon(\theta,\varphi)$$

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης αυτής εξαρτάται μόνο από το r και το δεξιό μόνο από τις γωνίες θ και φ. Επειδή οι μεταβλητές είναι ανεξάρτητες, κάθε μέλος της εξίσωσης αυτής πρέπει να είναι ίσο με μία σταθερά. Η σταθερά αυτή ονομάζεται σταθερά διαχωρισμού. Εξισώνουμε τα δύο μέλη με την σταθερά αυτή, που την συμβολίζουμε με λ και έχουμε

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}[\mathrm{E}-V(r)]-\frac{\lambda}{r^2}\right]R(r)=0$$

$$\Lambda\Upsilon(\theta,\varphi)+\lambda\Upsilon(\theta,\varphi)=0$$

Η δεύτερη εξίσωση είναι ανεξάρτητη από το κεντρικό δυναμικό και έχει ήδη λυθεί. Οι ιδιοσυναρτήσεις $\Upsilon(\theta,\varphi)$ είναι οι γνωστές ιδιοσυναρτήσεις της στροφορμής L^2 δηλαδή οι σφαιρικές αρμονικές

$$\Upsilon(\theta,\varphi)=\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)\qquad |m|<l\qquad l=0,1,2,\cdots$$

$$\Upsilon_{l-m}(\theta,\varphi)=(-1)^m\left[\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)\right]^*$$

Οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda=l(l+1)\qquad l=0,1,2,\cdots$$

Η ακτινική εξίσωση γράφεται

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}[\mathrm{E}-V(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0 \tag{6.3}$$

Αν θέσουμε

$$R(r)=\frac{\sigma(r)}{r}$$

η εξίσωση γράφεται

$$\frac{d}{dr^2}\sigma(r)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}[\mathrm{E}-V(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\sigma(r)=0$$

Η εξίσωση αυτή είναι ισοδύναμη με μία μονοδιάστατη εξίσωση του Σρέντινγκερ στο διάστημα $D = \{0 \leq r < \infty\}$ υπό την επίδραση του φαινομενικού δυναμικού

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

Ο πρόσθετος όρος όπως θα δείξουμε παρακάτω, οφείλεται στην στροφορμή του σωματιδίου και ονομάζεται φυγοκεντρικό δυναμικό. Πράγματι ο όρος αυτός αντιστοιχεί στο φυσικό μέγεθος $L^2/2mr^2$ εφόσον το $\hbar^2 l(l+1)$ είναι η ιδιοτιμή του τετραγώνου της στροφορμής. Ενα κλασσικό σωμάτιο που κινείται μέσα σε κεντρικό δυναμικό κινείται στο επίπεδο των διανυσμάτων $\vec{r}$ και $\vec{\theta}$.

Η κινητική ενέργεια του είναι

$$\mathrm{T} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(v_r^2 + v_\theta^2\right)$$

Το μέτρο της στροφορμής του σωματιδίου είναι

$$L = |\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = m\,|\vec{r} \times \vec{v}| = mrv_\theta$$

και επομένως

$$v_\theta = \frac{L}{mr}$$

Η κινητική ενέργεια γίνεται

$$T = \frac{1}{2}mv_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2}$$

Ο δεύτερος όρος της κινητικής ενέργειας οφείλεται στην περιφορά του σωματιδίου γύρω από το σημείο $r = 0$. Η δύναμη που απορρέει από τον πρόσθετο όρο του δυναμικού είναι

$$F_\varphi = -\frac{\partial}{\partial r}\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{L^2}{mr^3} = m\frac{v_\theta^2}{r}$$

Η δύναμη αυτή είναι η γνωστή φυγόκεντρος δύναμη.

Μία πολύ ειδική περίπτωση σωματιδίου κινούμενου σε σφαιρικώς συμμετρικό δυναμικό είναι το ελεύθερο σωματίδιο. Θα λύσουμε την ακτινική εξίσωση για το ελεύθερο σωμάτιο.

Η ακτινική εξίσωση (6.3) για το δυναμικό $V(r) = 0$ γίνεται

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r) = 0$$

Η σταθερά k είναι

$$k = \left(\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Εκτελούμε τους μετασχηματισμούς

$$\rho = kr \qquad\qquad R(r) = \rho^{-1/2}J(\rho)$$

και η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2J(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dJ(\rho)}{d\rho} + \left(1 - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}\right)J(\rho) = 0$$

Η τελευταία εξίσωση είναι η γνωστή εξίσωση Μπέσελ και έχει λύσεις τις ακόλουθες συναρτήσεις Μπέσελ.

$$J_{\pm\left(l+\frac{1}{2}\right)}(\rho)$$

Για οποιονδήποτε δείκτη ν οι συναρτήσεις Μπέσελ δίνονται από τον τύπο

$$J_\nu(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(m+1)\Gamma(\nu+\rho+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}$$

Είναι πιο βολικό να εκφράσουμε την λύση που βρήκαμε συναρτήσει των σφαιρικών Μπέσελ συναρτήσεων και των συναρτήσεων του Νόυμαν, που ορίζονται από τις σχέσεις

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \qquad\qquad n_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{-\left(l+\frac{1}{2}\right)}(\rho)$$

Οι συναρτήσεις του Νόυμαν παρουσιάζουν ανωμαλία στο μηδέν και πρέπει να απορριφθούν για προβλήματα που περιέχουν το μηδέν, όπως συμβαίνει εδώ.

Παρατήρηση: Σε ορισμένα προβλήματα είναι χρήσιμο η κυματοσυνάρτηση να μην ικανοποιεί τις συνηθισμένες οριακές συνθήκες. Στην συγκεκριμένη περίπτωση μια λύση του προβλήματος δίνεται από τις συναρτήσεις Χάνκελ πρώτου και δεύτερου είδους

$$H_l^{(\pm)}(\rho) = j_l(\rho) \pm i\, n_l(\rho)$$

Οι συναρτήσεις αυτές απειρίζονται στο μηδέν.

Οι σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσελ δίνονται από τον τύπο

$$j_l(kr) = (-1)^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\text{ημ}\,(kr)}{r}$$

Από τον παραπάνω τύπο βρίσκουμε εύκολα τις τρεις πρώτες σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσελ.

$$j_0(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \frac{\text{ημ}\,(kr)}{kr} \qquad j_1(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \left[\frac{\text{ημ}\,(kr)}{(kr)^2} - \frac{\text{συν}\,(kr)}{kr} \right]$$

$$j_2(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \left[\left(\frac{3}{(kr)^3} - \frac{1}{kr} \right) \text{ημ}\,(kr) - \frac{3}{(kr)^2}\, \text{συν}\,(kr) \right]$$

Προσεγγιστικές εκφράσεις των συναρτήσεων αυτών για μεγάλα r και κοντά στην αρχή είναι αντιστοίχως οι ακόλουθες

$$j_l(kr) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{\text{ημ}\,(kr - l\pi/2)}{r} \qquad j_l(kr) \xrightarrow[r\to 0]{} \frac{k^{l+1}}{(2l+1)!!} r^l$$

Τελικά προσθέτοντας και τον γωνιακό όρο η κυματοσυνάρτηση του ελευθέρου σωματιδίου είναι

$$\psi_{klm} = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή περιγράφει ένα ελεύθερο σωματίδιο με καθορισμένη ενέργεια $\mathrm{E} = k^2/2m$ και καθορισμένη στροφορμή, ορισμένη από τους κβαντικούς αριθμούς l και m. Η κυματοσυνάρτηση είναι ταυτόχρονη ιδιοσυνάρτηση των τελεστών H, L^2 και L_z που φυσικά εναλλάσσονται μεταξύ τους. Δεν μας δίνει πληροφορίες για την ορμή του σωματιδίου.

Αντίθετα η κυματοσυνάρτηση που βρήκαμε στην αρχή του κεφαλαίου δηλαδή

$$\psi_k = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

μας δίνει την ορμή $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, ενώ δεν δίνει πληροφορίες για την στροφορμή του.

Επειδή οι κυματοσυναρτήσεις $j_l(kr)\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)$ του ελευθέρου σωματιδίου είναι ένα πλήρες σύστημα συναρτήσεων, μπορούμε να αναλύσουμε το επίπεδο κύμα $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ως προς τις κυματοσυναρτήσεις αυτές. Για τον λόγω αυτό τα κύματα $j_l(kr)\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)$ ονομάζονται "επί μέρους κύματα" (partial waves). Η σχέση είναι η ακόλουθη

$$\psi_k = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l,m} C_{lm} j_l(kr)\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)$$

Συνεπώς κάθε επίπεδο κύμα που χαρακτηρίζεται από ορισμένη ορμή είναι το άθροισμα άπειρου πλήθους επί μέρους κυμάτων που το καθένα τους χαρακτηρίζεται από ορισμένη στροφορμή. Θα διαλέξουμε τον άξονα των z παράλληλο προς το διάνυσμα $\vec{k}$. Ετσι το πρώτο μέλος της παραπάνω εξίσωσης γίνεται ίσο με $e^{ikr\,\sigma\upsilon\nu\,\theta}$. Το σωματίδιο κινείται τώρα παράλληλα προς τον z άξονα. Η προβολή της στροφορμής στον z άξονα είναι προφανώς ίση με το μηδέν. Το δεύτερο μέλος της εξίσωσης γίνεται ανεξάρτητο του φ.

Η ανάπτυξη μετά και τον υπολογισμό των και σταθερών είναι

$$\psi_k = e^{ikr\,\sigma\upsilon\nu\,\theta} = \sum_l i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\,j_l(kr)\Upsilon_{l0}(\theta)$$

Παρατήρηση: Αν θέλουμε η κυματοσυνάρτηση με $l=0$ να παριστάνει ένα προσερχόμενο ή απερχόμενο από το κέντρο σφαιρικό κύμα τότε η λύση του προβλήματος εκφράζεται με την βοήθεια των συναρτήσεων Χάνκελ. Ενα απερχόμενο ή εισερχόμενο σφαιρικό κύμα περιγράφονται αντιστοίχως από συναρτήσεις της μορφής

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{e^{-i(\omega t - kr)}}{r} \qquad \psi(\vec{r},t) = \frac{e^{-i(\omega t + kr)}}{r}$$

Πραγματικά οι συναρτήσεις Χάνκελ δίνουν

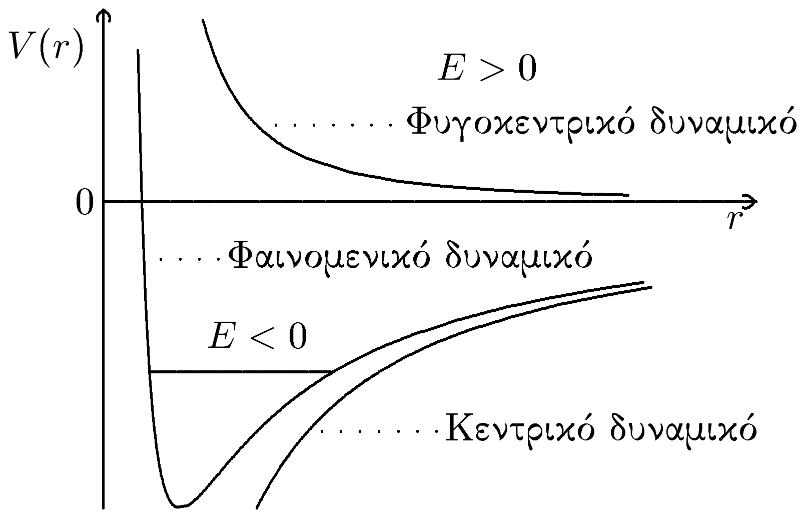
$$H_0^{(\pm)}(kr) = j_0(kr) \pm i\, n_0(kr) = A\, \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

Οι συναρτήσεις αυτές απειρίζονται στο μηδέν.

6.5 Το δυναμικό Κουλόμπ

Ενα σφαιρικό δυναμικό που έχει μεγάλη σημασία είναι το δυναμικό του Κουλόμπ. Η αλληλεπίδραση ενός ηλεκτρονίου με φορτίο $-e$ και ενός πυρήνα με φορτίο $+Ze$ περιγράφεται σε πρώτη προσέγγιση από το δυναμικό

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$



Σχήμα 6.3
Ενα σωματίδιο με Ε < 0 *είναι δέσμιο και έχει ενέργεια κβαντισμένη.*
Η περιοχή Ε > 0 *είναι περιοχή της σκέδασης*

Με αυτό το δυναμικό η ακτινική εξίσωση (6.3) γίνεται

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0$$

Την εξίσωση αυτή θα λύσουμε στην παράγραφο αυτή.

Παρατηρούμε ότι για $r \to 0$ το φυγοκεντρικό δυναμικό, στην περίπτωση φυσικά που $l \neq 0$, τείνει στο άπειρο. Επομένως στην περιοχή του μηδενός δεν υπάρχουν σωματίδια και άρα η κυματοσυνάρτηση για $r \to 0$ θα πρέπει να μηδενίζεται. Επίσης για $\mathrm{E} < 0$ το σωματίδιο είναι δέσμιο και άρα θα πρέπει να έχουμε κβάντωση της ενεργείας. Η περίπτωση $\mathrm{E} > 0$ είναι κατάσταση σκέδασης και θα την εξετάσουμε σε άλλο κεφάλαιο.

Θα λύσουμε στην παράγραφο αυτή την διαφορική εξίσωση στην περίπτωση που $\mathrm{E} < 0$. Στο εξής θα χαρακτηρίσουμε με τους δείκτες n και l την λύση της ακτινικής εξίσωσης όπου n είναι ο κβαντικός αριθμός της ενεργείας και θα προσδιοριστεί στην συνέχεια.

Στην διαφορική εξίσωση κάνουμε τις αντικαταστάσεις

$$k = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} > 0 \quad \text{και} \quad \beta = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \tag{6.4}$$

και έχουμε

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R_{nl} + \left(-k^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{nl} = 0$$

Το k είναι φυσικά πραγματικός αριθμός. Μην ξεχνάτε ότι $\mathrm{E} < 0$. Για

$$R_{nl} = \frac{1}{r}\sigma_{nl}$$

η εξίσωση αυτή γίνεται

$$\frac{d^2}{dr^2}\sigma_{nl} + \left(-k^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\sigma_{nl} = 0 \tag{6.5}$$

Θα αναζητήσουμε την λύση της εξίσωσης αυτής για μεγάλα r. Η εξίσωση αυτή για μεγάλα r γίνεται

$$\frac{d^2}{dr^2}\sigma_{nl} - k^2\sigma_{nl} = 0$$

και έχει λύση την συνάρτηση

$$\sigma_{nl}(r) = e^{\pm kr}$$

Για να μπορεί η κυματοσυνάρτηση να κανονικοποιηθεί θα πρέπει να διαλέξουμε το αρνητικό σημείο της λύσης αυτής, έτσι ώστε η λύση της εξίσωσης να μηδενίζεται στο άπειρο. Από την παραπάνω παρατήρηση είναι προφανές ότι πρέπει να αναζητήσουμε λύσεις της μορφής

$$\sigma_{nl}(r) = f_{nl}(r)e^{-kr}$$

Η εξίσωση (6.5) με την παραπάνω αντικατάσταση γίνεται

$$\frac{d^2}{dr^2}f_{nl} - 2k\frac{d}{dr}f_{nl} + \left(\frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)f_{nl} = 0$$

Η εξίσωση αυτή θα λυθεί με την μέθοδο των σειρών.

Το μηδέν είναι κανονικό ανώμαλο σημείο για την εξίσωση αυτή. Αρα δέχεται λύση της μορφής

$$f_{nl} = \sum_{p=0}^{\infty} \alpha_p r^{p+\nu}$$

Εισάγουμε την έκφραση αυτή στην διαφορική εξίσωση και παίρνουμε το άθροισμα

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_p \left[(p+\nu)(p+\nu-1) - l(l+1)\right] r^{p+\nu-2} -$$
$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_p \left[2k(p+\nu) - \beta\right] r^{p+\nu-1} = 0$$

Επειδή το άθροισμα αυτό πρέπει να μηδενίζεται ταυτοτικά, απαιτούμε οι συντελεστές των δυνάμεων του r να μηδενίζονται. Καταλήγουμε συνεπώς στις εξισώσεις

$$\alpha_0 \left[\nu(\nu-1) - l(l+1)\right] = 0$$

(6.6) $$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\alpha_{p+1}\left[(p+\nu)(p+\nu+1) - l(l+1)\right] - \alpha_p\left[2k(p+\nu) - \beta\right] = 0$$

Η πρώτη από τις εξισώσεις αυτές ονομάζεται εξίσωση των δεικτών. Φυσικά το α_0 δεν θα πρέπει να είναι μηδέν και άρα πρέπει να εξισώσουμε με το μηδέν την παράσταση μέσα στις αγκύλες. Εχουμε κατά συνέπεια δύο λύσεις

$$\nu(\nu-1)-l(l+1)=0 \quad \Longrightarrow \quad \nu=l+1 \quad \text{και} \quad \nu=-l$$

Επειδή η συνάρτηση πρέπει να μηδενίζεται για $r\to 0$ είναι προφανές ότι πρέπει να απορρίψουμε την δεύτερη λύση. Αντίθετα η πρώτη λύση είναι φυσικά αποδεκτή. Αντικαθιστούμε την λύση αυτή στην τελευταία των σχέσεων (6.6) και παίρνουμε την ακόλουθη αναδρομική σχέση των συντελεστών του ζητούμενου αθροίσματος

$$\alpha_{p+1}=\frac{2k(p+l+1)-\beta}{(p+l+2)(p+l+1)-l(l+1)}\alpha_p \tag{6.7}$$

Αν η σειρά δεν τερματίζεται τότε για μεγάλα r η λύση συμπεριφέρεται όπως και η συνάρτηση e^{2kr}. Πράγματι η συνάρτηση e^{2kr} γράφεται αναλυτικά

$$e^{2kr}=1+(2kr)+\cdots+\frac{(2kr)^p}{p!}+\frac{(2kp)^{p+1}}{(p+1)!}+\cdots$$

και ο λόγος δύο διαδοχικών όρων της σειράς αυτής είναι

$$\frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_p}=\frac{2k}{p}$$

είναι δηλαδή ίσος με τον λόγο των διαδοχικών όρων της λύσης για μεγάλα p. Κατά συνέπεια η κυματοσυνάρτηση γίνεται

$$R_{nl}=\frac{1}{r}e^{-kr}e^{2kr}=\frac{1}{r}e^{kr}$$

η οποία φυσικά αποκλίνει για μεγάλα r. Αρα πρέπει όπως και για τον αρμονικό ταλαντωτή έτσι και εδώ να δεχτούμε μόνο τις πολυωνυμικές λύσεις σαν φυσικά παραδεκτές.

Υποθέτουμε ότι το ζητούμενο πολυώνυμο είναι βαθμού p όπου φυσικά $p\geq 0$. Από την αναδρομική σχέση (6.7) φαίνεται αμέσως ότι για να ισχύουν οι σχέσεις $\alpha_{p+1}=0$ και $\alpha_p\neq 0$ πρέπει να ισχύει η παρακάτω σχέση

$$2k(p+l+1)-\beta=0$$

θέτουμε $n = p + l + 1$ και βρίσκουμε

$$2kn = \beta$$

Αντικαθιστούμε τα β και τα k από τις σχέσεις (6.4) και παίρνουμε τελικά τις ιδιοτιμές της ενέργειας

$$\mathrm{E}_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Ο αριθμός n ονομάζεται κύριος κβαντικός αριθμός.

Από την σχέση $n = p + l + 1$ επειδή το p παίρνει τις τιμές $0, 1, 2, \cdots$, συνεπάγεται ότι $n \geq l + 1$ και επομένως τα όρια μεταβολής του κβαντικού αριθμού l είναι

$$l = 0, 1, 2, \cdots, n - 1$$

δηλαδή το l παίρνει n διαφορετικές τιμές. Αρα η ιδιοτιμή της ενέργειας λόγω του κβαντικού αριθμού l είναι n φορές εκφυλισμένη. Εξαίρεση φυσικά είναι η θεμελιώδης κατάσταση $n = 1$ και $l = 0$ όπου δεν υπάρχει εκφυλισμός. Ο εκφυλισμός αυτός ονομάζεται συμπτωματικός και είναι μια ιδιαίτερη ιδιότητα του πεδίου Κουλόμπ.

Θα βρούμε τώρα τις ζητούμενες συναρτήσεις. Η αναγωγική σχέση (6.7) γίνεται

$$\alpha_{p+1} = -2k\frac{n - p - l - 1}{(p + 1)(p + 2l + 2)}\alpha_p$$

Η οποία δίνει όλους τους όρους του αναπτύγματος συναρτήσει του πρώτου. Βρίσκουμε τελικά

$$\alpha_p = \frac{(-2k)^p}{p!}\frac{(n - l - 1)!(2l + 1)!}{(n - l - p - 1)!(2l + p + 1)!}\alpha_0$$

Η πολυωνυμική λύση γίνεται

$$f_{nl} = \alpha_0 r^{l+1}\sum_{p=0}^{n-l-1}\frac{(-2k_n r)^p}{p!}\frac{(n - l - 1)!(2l + 1)!}{(n - l - p - 1)!(2l + p + 1)!} =$$

$$= C_{kl} r^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(2k_n r)$$

Τα πολυώνυμα L_n^k ονομάζονται γενικευμένα πολυώνυμα του Λαγκέρ και δίνονται από την σχέση

$$L_n^k(r) = \sum_{m=0}^{n} \frac{(-r)^m}{m!} \frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!}$$

Μία χρήσιμη έκφραση για τα πολυώνυμα του Λαγκέρ είναι ο εξής τύπος του Ροντρίγκες

$$L_n^k(r) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x} x^{n+k}\right)$$

Μαζεύουμε τέλος όλους τους όρους και έχουμε την εξής λύση

$$R_{nl}(r) = C_{nl} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2k_n r) e^{-k} n^r$$

Η σταθερά C_{nl} είναι η σταθερά κανονικοποιήσης.

Τα πρώτα πολυώνυμα δίνονται στον παρακάτω πίνακα, όπου έχουμε θέσει

$$\alpha_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \rho = \frac{Z}{\alpha_1} r \quad \text{και} \quad \sigma = \left(\frac{Z}{\alpha_1}\right)^{3/2}$$

$$R_{10}(r) = 2\sigma e^{-\rho} \qquad R_{20}(r) = \tfrac{1}{2\sqrt{2}} \sigma (2-\rho) e^{-\rho/2}$$

$$R_{21}(r) = \tfrac{1}{2\sqrt{6}} \sigma\rho e^{-\rho/2} \qquad R_{30}(r) = \tfrac{1}{9\sqrt{3}} \sigma \left(6 - 6\rho + \rho^2\right) e^{-\rho/3}$$

$$R_{31}(r) = \tfrac{1}{9\sqrt{6}} \sigma\rho(4-\rho) e^{-\rho/3} \qquad R_{32}(r) = \tfrac{1}{9\sqrt{30}} \sigma\rho^2 e^{-\rho/3}$$

6.6 Το άτομο του υδρογόνου

Το άτομο του υδρογόνου αποτελείται από ένα πυρήνα με θετικό φορτίο e και μάζα M και από ένα ηλεκτρόνιο με αρνητικό φορτίο $-e$ και μάζα m. Η αλληλεπίδραση των δύο σωματιδίων περιγράφεται από το δυναμικό Κουλόμπ

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{|\vec{r}_p - \vec{r}_e|}$$

όπου $\vec{r}_p$ και $\vec{r}_e$ τα διανύσματα θέσης του πυρήνα και του ηλεκτρονίου αντιστοίχως.

Η εξίσωση Σρέντινγκερ των δύο σωματιδίων μπορεί να χωριστεί σε δύο εξισώσεις. Η μία περιγράφει την κίνηση του κέντρου μάζας. Το κέντρο μάζας κινείται σαν ένα ελεύθερο σωματίδιο με μάζα $\mathrm{M} + m$. Η δεύτερη εξίσωση παρουσιάζει το ενδιαφέρον, διότι δίνει τις ιδιοτιμές της ενέργειας για το άτομο του υδρογόνου. Η εξίσωση αυτή περιγράφει την κίνηση ενός σωματιδίου με μάζα την ανηγμένη μάζα μ των δύο σωματιδίων που δίνεται από την σχέση

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mathrm{M}} + \frac{1}{m} \quad \Longrightarrow \quad \mu = \frac{mM}{m+M}$$

Η θέση του σωματιδίου αυτού είναι η σχετική θέση του ενός ως προς το άλλο

$$\vec{r} = \vec{r}_p - \vec{r}_e$$

Η εξίσωση που περιγράφει την κίνηση του σωματίου αυτού είναι

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r}\right)\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r})$$

Η μάζα m του ηλεκτρονίου είναι μικρή συγκριτικά με την μάζα M του πυρήνα και επομένως ή ανηγμένη μάζα μ είναι περίπου ίση με την μάζα m του ηλεκτρονίου.

Η εξίσωση αυτή έχει ήδη λυθεί στις προηγούμενες παραγράφους. Στην παράγραφο αυτή θα επαναλάβουμε τα κυριότερα συμπεράσματα.

Αν συμβολίσουμε με $\psi_{nmls}(\vec{r})$ την λύση του ατόμου του υδρογόνου τότε αυτή δίνεται από την σχέση

$$\psi_{nmls}(\vec{r}) = \psi(\vec{r})U_{\pm}$$

όπου $\psi(\vec{r})$ είναι η λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ και $U_{\pm}$ είναι η κατάσταση σπιν του ηλεκτρονίου.

Εχει ήδη αποδειχτεί ότι

$$\psi_{nlms}(\vec{r}) = C_{nl} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2k_n r)e^{-k_n r}P_{lm}(\sigma\upsilon\nu\,\theta)e^{im\varphi}U_{\pm}$$

όπου C_{nl} είναι η σταθερές της κανονικοποίησης.

Παρατηρούμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας $\psi\psi^*$ εξαρτάται μόνο από την γωνία θ και δεν εξαρτάται από την γωνία φ.

Η κυματοσυνάρτηση είναι ταυτόχρονη ιδιοσυνάρτηση των εξής τελεστών

1) Της ενέργειας H με ιδιοτιμές

$$\mathrm{E}_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2\alpha_1}\frac{1}{n^2} \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

όπου $\alpha_1 = \hbar^2/\mu e^2 = 0.529\times 10^{-8}$ cm είναι η ακτίνα της θεμελιώδους τροχιάς. Για το άτομο του υδρογόνου $Z = 1$.

2) Της στροφορμής L^2 με ιδιοτιμές

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1) \qquad\qquad l = 0, 1, 2, 3, \cdots, n-1$$

3) Της προβολής της στροφορμής στον z άξονα με ιδιοτιμές

$$\lambda = \hbar m \qquad\qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots, \pm l$$

4) Της προβολής του σπιν στον z άξονα με ιδιοτιμές

$$s = +\frac{1}{2}\hbar \quad \text{ή} \quad s = -\frac{1}{2}\hbar$$

Παρατήρηση: Η έννοια του σπιν φαίνεται ότι έχει εισαχθεί εδώ αυθαίρετα με σκοπό να εξηγήσει κάποιες φυσικές ιδιομορφίες του ηλεκτρονίου. Μια πιο αυστηρή δικαιολογία για την εισαγωγή του σπιν εμφανίζεται στην σχετικιστική κβαντική θεωρία του Ντιράκ.

Στον παρακάτω πίνακα έχουμε συνοψίσει τα αποτελέσματα για τις τρεις πρώτες ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου, όπου έχουμε θέσει

$$\alpha_1 = \hbar^2/\mu e^2 \qquad \rho = r/\alpha_1 \qquad \sigma = (1/\alpha_1)^{3/2}$$

n l m s	Κατάσταση	$\psi_{nlms}(\vec{r}) = R_{nl}(\vec{r})\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)U_\pm$
1 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sigma e^{-\rho}$
2 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	2s	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\sigma(\rho-2)e^{-\rho/2}$
2 1 0 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{συν}\,\theta$
2 1 1 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{ημ}\,\theta e^{i\varphi}$
2 1 -1 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{ημ}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	3s	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\sigma(21-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}$
3 1 0 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{συν}\,\theta$
3 1 1 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta e^{i\varphi}$
3 1 -1 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 2 0 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}(3\,\text{συν}^2\,\theta-1)$
3 2 1 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\theta e^{i\varphi}$
3 2 -1 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 2 2 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}^2\,\theta e^{2i\varphi}$
3 2 -2 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}^2\,\theta e^{-2i\varphi}$

Ολα τα ηλεκτρόνια που έχουν την ίδια ενέργεια λέμε ότι βρίσκονται στον ίδιο φλοιό. Το πλήθος των ηλεκτρονίων αυτών ισούται με τον βαθμό εκφυλισμού της ιδιοτιμής E_n της ενέργειας. Θα βρούμε τώρα τον βαθμό εκφυλισμού της n ιδιοτιμής της ενέργειας.

Το l παίρνει n διαφορετικές τιμές. Ολες οι καταστάσεις με διαφορετικό l αλλά το ίδιο n έχουν την ίδια ενέργεια. Επομένως η ιδιοτιμή της ενέργειας είναι n φορές εκφυλισμένη. Υπάρχει επίσης και ο εκφυλισμός του μαγνητικού κβαντικού αριθμού m. Επειδή ο κβαντικός αριθμός m μπορεί να πάρει συνολικά $2l+1$ τιμές, ο βαθμός εκφυλισμού κάθε ενεργειακής κατάστασης δίνεται από το παρακάτω άθροισμα, το οποίο έχουμε πολλαπλασιάσει με δύο λόγω των δύο ιδιοτιμών του σπιν S_3.

$$\text{(βαθμός εκφυλισμού του } \mathrm{E}_n \text{)} \quad = \quad 2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2$$

Λόγω της απαγορευτικής αρχής του Πάουλι δεν υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο με τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς. Αυτό σημαίνει ότι στην ενεργειακή στάθμη E_n βρίσκονται το πολύ $2n^2$ ηλεκτρόνια.

Στην βασική κατάσταση όπου $n=1$ το πλήθος των ηλεκτρονίων είναι $2 \cdot 1 = 2$. Τα δύο αυτά ηλεκτρόνια διαφέρουν μόνο ως προς τον προσανατολισμό του σπιν. Αν ένα άτομο έχει τρία ηλεκτρόνια τότε το επιπλέον ηλεκτρόνιο θα καταλάβει αναγκαστικά την δεύτερη ενεργειακή στάθμη $n=2$. Η δεύτερη ενεργειακή στάθμη μπορεί να περιέχει $2 \cdot 2^2 = 8$ το πολύ διαφορετικά ηλεκτρόνια και τα επιπλέον ηλεκτρόνια που ενδεχομένως θα υπάρχουν σε ένα άτομο, θα πρέπει να καταλάβουν την επόμενη ενεργειακή στάθμη κ.λ.π.

Ενα άτομο με περισσότερα από ένα ηλεκτρόνια είναι ένα σύνθετο σύστημα από ηλεκτρόνια μέσα στο δυναμικό του πυρήνα που όμως αλληλεπιδρούν και μεταξύ τους. Αυτή η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων μεταξύ τους κάνει αδύνατη την ακριβή λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ.

Μια καλή προσέγγιση είναι να θεωρήσουμε ότι κάθε ηλεκτρόνιο κινείται ανεξάρτητα από τα άλλα μέσα σε ένα ενεργό κεντρικό δυναμικό που δημιουργείται από την έλξη του πυρήνα και από τις απωστικές δυνάμεις όλων των άλλων ηλεκτρονίων. Με την παραδοχή αυτή Μπορούμε να δεχτούμε την παραπάνω ανάπτυξη και να περιγράψουμε έτσι τις διαδοχικές στάσιμες καταστάσεις των ατόμων.

Ετσι η κβαντομηχανική εξήγησε με απλό τρόπο το περιοδικό σύστημα των στοιχείων που είχε επινοήσει πριν περίπου εκατό χρόνια εμπειρικά ο Μεντελέγεφ.

Η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στην περιοχή γύρω από το σημείο (r, θ, φ) είναι $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)\psi^*_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. Η πυκνότητα αυτή δεν εξαρτάται από την γωνία φ. Εξαρτάται μόνο από την γωνία θ από την συνάρτηση $P_{lm}(\theta)P^*_{lm}(\theta)$. Η έκφραση αυτή μηδενίζεται για ορισμένες τιμές της γωνίας θ και κατά συνέπεια η πυκνότητα πιθανότητας μηδενίζεται σε κάποιες κωνικές επιφάνειες. Η επιφάνειες αυτές δεν μπορούν να προσδιοριστούν εφόσον η διεύθυνση του άξονα OZ είναι αυθαίρετη. Δεν υπάρχει προνομιούχος διεύθυνση στον χώρο διότι το δυναμικό $V = -Ze/r$ παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία.

Η πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο στη κατάσταση $\psi_{nlm}(\vec{r})$ μεταξύ r και $r + dr$, δίνεται από το ολοκλήρωμα της πυκνότητας πιθανότητας του ως προς τις γωνίες θ και φ. Επειδή οι σφαιρικές αρμονικές είναι κανονικοποιημένες στην μονάδα βρίσκουμε

$$\Pi_{nl}(\vec{r})dr = \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\Upsilon_l^m(\theta, \varphi)\right]^* \Upsilon_l^m(\theta, \varphi)\, \eta\mu\, \theta\; r^2 \left(R_{nl}\right)^* R_{nl}dr$$

$$= r^2 \left(R_{nl}\right)^* R_{nl}dr$$

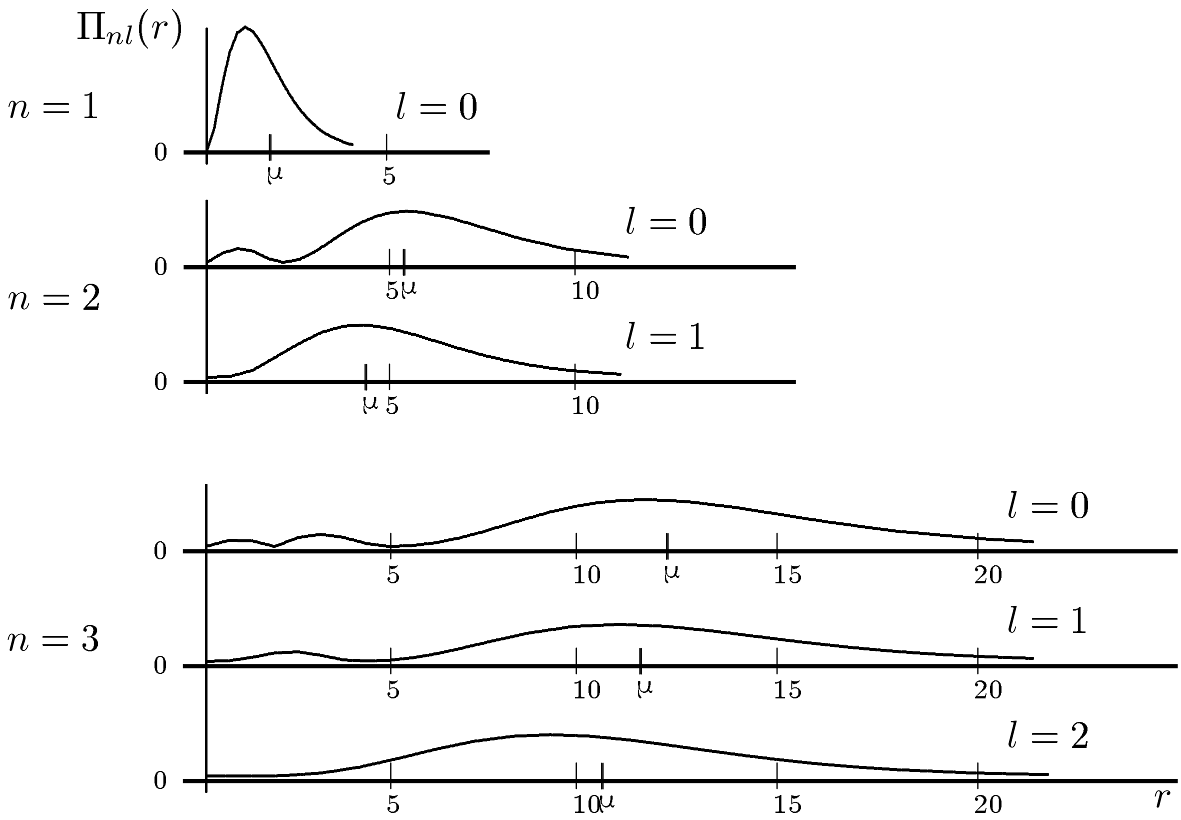
Η πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητη του κβαντικού αριθμού m. Παρατηρούμε ότι η πιθανότητα αυτή μηδενίζεται σε $n-l-1$ σημεία που είναι οι ρίζες του πολυώνυμου $L^{2l+1}_{n-l-1}(r)$. Η πυκνότητα πιθανότητας μηδενίζεται σε κάποιες σφαιρικές επιφάνειες.

Η περιοχή του r που επιτρέπεται να κινηθεί το ηλεκτρόνιο ενός φλοιού εξαρτάται κυρίως από τον κβαντικό αριθμό n ενώ ο αριθμός l επηρεάζει ελαφρά την μορφή της καμπύλης. Η μέση τιμή είναι η πιο πιθανή τιμή που μπορούμε να παρατηρήσουμε το σωμάτιο. Παρατηρούμε ότι τα ηλεκτρόνια του ίδιου ενεργειακού φλοιού έχουν την ίδια περίπου μέση τιμή. Η μέση τιμή υπολογίζεται από το ολοκλήρωμα

$$\mu = < r > = \int_0^{\infty} r\Pi_{nl}(\vec{r})dr = \frac{n^2\alpha_1}{2}\left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right)\right]$$

Για τον ίδιο φλοιό, πιο κοντά στο σημείο $r = 0$ είναι η μέση τιμή των ηλεκτρονίων που έχουν μεγαλύτερη στροφορμή $l = n - 1$.

Η πιθανότητα ένα σωμάτιο να βρίσκεται κοντά στο σημείο $r = 0$ είναι σημαντική για τις καταστάσεις $l = 0$. Κλασσικά οι καταστάσεις αυτές αντιστοιχούν σε ευθύγραμμες κινήσεις. Η πιθανότητα είναι μικρότερη για $l = 1$ και ακόμα μικρότερη για $l = 2$. Για τις καταστάσεις με μεγάλη στροφορμή η πιθανότητα αυτή είναι πρακτικά μηδενική. Ο λόγος είναι ότι στις καταστάσεις αυτές το φυγοκεντρικό δυναμικό είναι ισχυρό ενώ για $l = 0$ το φυγοκεντρικό δυναμικό είναι μηδέν και το ενεργό δυναμικό συμπίπτει με το δυναμικό Κουλόμπ.



Σχήμα 6.4

Η "ακτινική" πιθανότητα για ένα ηλεκτρόνιο που κινείται σε δυναμικό Κουλόμπ, μ είναι η μέση τιμή.

Παρατήρηση: Το άτομο του Ηλίου αποτελείται από ένα πυρήνα και δύο ηλεκτρόνια. Η μελέτη ενός τέτοιου συστήματος είναι δύσκολη γιατί τα δύο αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια απωθούνται μεταξύ τους απο την δύναμη Κουλόμπ. Εμφανίζεται έτσι στην Χαμιλτονιανή του συστήματος ένα επιπλέον δυναμικό της μορφής $U = e^2/r_{12}$ όπου r_{12} είναι η απόσταση μεταξύ των δυο ηλεκτρονίων. Το πρόβλημα αντιμετωπίζεται με προσεγγιστικές μεθόδους.

Ασκήσεις

Άσκηση 6.1

Να λυθεί το πρόβλημα του ομογενούς μαγνητικού πεδίου παράλληλου προς τον $z-$ άξονα.

Λύση: Θεωρούμε ένα ηλεκτρόνιο με φορτίο e και μάζα m να κινείται μέσα σε ένα σταθερό, ανεξάρτητο από τον χρόνο, ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Από την κλασσική φυσική είναι γνωστό ότι στο σωματίδιο επενεργεί μια δύναμη, γνωστή σαν δύναμη Λόρεντς

$$\vec{F} = e\vec{\mathrm{E}} + \frac{e}{c}\left(\vec{\mathrm{v}} \times \vec{H}\right)$$

Η δύναμη αυτή είναι κάθετη στην ταχύτητα του ηλεκτρονίου και κάθετη στην ένταση του μαγνητικού πεδίου. Η κλασσική συνάρτηση του Χάμιλτον του ηλεκτρονίου, χωρίς σπιν είναι

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\mathrm{A}(\vec{r})\right)^2 + e\varphi(\vec{r})$$

όπου c είναι η ταχύτητα του φωτός.

Το διανυσματικό δυναμικό $\mathrm{A}(\vec{r})$ και το βαθμωτό δυναμικό $\varphi(\vec{r})$ συνδέονται με τις εντάσεις των πεδίων με τις σχέσεις

$$\vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathrm{A}}(\vec{r}) \quad \text{και} \quad \vec{\mathrm{E}} = -\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})$$

Το διανυσματικό δυναμικό υποθέτουμε ότι ικανοποιεί επίσης και την συνθήκη

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{A}}(\vec{r}) = 0$$

Η συνάρτηση του Χάμιλτον είναι ίδια με την συνάρτηση του Χάμιλτον ενός σωματιδίου κινούμενου στο δυναμικό $e\varphi(\vec{r})$ με ορμή

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{\mathrm{A}}(\vec{r})$$

Θα λύσουμε την εξίσωση του Σρέντινγκερ για την περίπτωση ομογενούς μαγνητικού πεδίου, παράλληλου προς τον άξονα των z, δηλαδή

$$\vec{H} = (0, 0, H)$$

Τα δυναμικά στην περίπτωση αυτή είναι

$$\vec{\mathrm{A}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{H} \times \vec{r} = \frac{1}{2}H(-y, x, 0) \qquad\qquad \varphi(\vec{r}) = 0$$

Η συνάρτηση του Χάμιλτον γίνεται

$$H = \frac{1}{2m}\left(\pi_x^2 + \pi_y^2\right) + \frac{1}{2m}p_x^2 = H_{xy} + H_z$$

Η συνάρτηση H_z είναι η συνάρτηση Χάμιλτον ενός ελευθέρου σωματιδίου στην z διεύθυνση. Οι ορμές π_x και π_y δίνονται από τις σχέσεις

$$\pi_x = p_x + \frac{eH}{2c}y \qquad\qquad \pi_y = p_y - \frac{eH}{2c}x$$

Οι παραπάνω ορμές δεν εναλλάσσονται μεταξύ τους, αλλά ικανοποιούν την ακόλουθη σχέση αντιμετάθεσης

$$[\pi_x, \pi_y] = i\hbar\frac{eH}{c}$$

Αν θέσουμε

$$\pi_x = \left(\frac{eH}{c}\right)^{1/2} Q \qquad\qquad \pi_y = \left(\frac{eH}{c}\right)^{1/2} P$$

τότε βρίσκουμε ότι το τμήμα H_{xy} της συνάρτησης του Χάμιλτον γίνεται

$$H_{xy} = \frac{eH}{2mc}\left(P^2 + Q^2\right)$$

Επομένως ο τελεστής H_{xy} είναι ο τελεστής Χάμιλτον του αρμονικού ταλαντωτή με συχνότητα

$$\omega_c = \frac{1}{m} = \frac{eH}{mc}$$

Οι ιδιοτιμές του τελεστή του Χάμιλτον κατά συνέπεια είναι

$$\mathrm{E}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 \qquad\qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Άσκηση 6.2

Να αποδειχτεί ότι αν $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ όπου σ_j είναι οι μήτρες του Πάουλι τότε ισχύει

$$\vec{\sigma} \times \vec{\sigma} = 2i\vec{\sigma}$$

Να αποδειχτούν επίσης οι σχέσεις

$$\exp\left(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right) = \text{συν}\,\theta + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\ \text{ημ}\,\theta \qquad\qquad \exp\left(i\vec{\alpha}\cdot\vec{S}\right) = \text{συν}\,(\frac{\alpha}{2}) + i\vec{\alpha}\cdot\vec{S}\ \text{ημ}\,(\frac{\alpha}{2})$$

όπου το διάνυσμα $\vec{n}$ είναι μοναδιαίο. Να αποδειχτεί τέλος ότι

$$\frac{d^2}{d\theta^2}\exp\left(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right) = -\exp\left(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right)$$

Απόδειξη: Για τον υπολογισμό των γινομένων πρέπει να προσέξουμε διότι τα σ_j είναι μήτρες και δεν εναλλάσσονται μεταξύ τους. Για τις μήτρες αυτές ισχύουν οι σχέσεις

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = -i\sigma_3 \qquad \sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = -i\sigma_1 \qquad \sigma_3\sigma_1 = \sigma_3\sigma_1 = -i\sigma_2$$

$$\sigma_1^1 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$$

Η απόδειξη της πρώτης σχέσης είναι απλή. Εχουμε

$$\vec{\sigma} \times \vec{\sigma} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 \end{vmatrix} =$$

$$(\sigma_2\sigma_3 - \sigma_3\sigma_2, \sigma_3\sigma_1 - \sigma_1\sigma_3, \sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_1) = (2i\sigma_1, 2i\sigma_2, 2i\sigma_3) = 2i\vec{\sigma}$$

Για να αποδείξουμε την επόμενη σχέση θα χρησιμοποιήσουμε την ανάπτυξη του εκθετικού σε σειρά Τέυλορ. Για οποιονδήποτε τελεστή T ορίζουμε

$$e^{\alpha\mathrm{T}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\mathrm{T}^n = 1 + \frac{\alpha}{1}\mathrm{T} + \frac{\alpha^2}{1\cdot 2}\mathrm{T}^2 + \frac{\alpha^3}{1\cdot 2\cdot 3}\mathrm{T}^3 + \cdots +$$

Θα βρούμε τις διαδοχικές δυνάμεις του $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$. Εχουμε

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = (n_1\sigma_1 + n_2\sigma_2 + n_3\sigma_3)^2 = n_1^2 s_1^2 + n_2^2 s_2^2 + n_3^2 s_3^2 +$$

$$n_1n_2(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_1)+n_2n_3(\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_2)+n_3n_1(\sigma_3\sigma_1+\sigma_1\sigma_3) = n_1^2+n_2^1+n_3^2 = 1$$

Η τρίτη δύναμη του $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$ είναι

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^3 = \vec{n}\cdot\vec{\sigma}(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = \vec{n}\cdot\vec{\sigma}$$

Η τέταρτη δύναμη είναι

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^4 = (\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2\cdot(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = 1$$

Με το ίδιο τρόπο υπολογίζονται όλες οι δυνάμεις. Συμπεραίνουμε ότι όλες οι άρτιες δυνάμεις του $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$ είναι ίσες με την μονάδα και όλες οι περιττές δυνάμεις ίσες με το $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$. Επομένως έχουμε

$$(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n} = \left(-\theta^2\right)^n \qquad (i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n+1} = \left(-\theta^2\right)^n(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})$$

Υπολογίζουμε τώρα το εκθετικό. Βρίσκουμε

$$\exp(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n+1}}{(2n+1)!} =$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i(-1)^n\theta^{2n+1}}{(2n+1)!}\vec{n}\cdot\vec{\sigma} = \text{συν}\,\theta + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\ \text{ημ}\,\theta$$

Για να αποδείξουμε την επόμενη σχέση θέτουμε

$$\vec{\alpha} = \alpha\vec{n} \qquad \vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$$

όπου α είναι το μέτρο του $\vec{a}$ και βρίσκουμε

$$U(\alpha) = exp(i\vec{\alpha}\cdot\vec{S}) = exp(i\frac{\alpha}{2}\vec{n}\cdot\vec{S}) = \text{συν}\,(\frac{\alpha}{2}) + i\vec{\alpha}\cdot\vec{S}\,\text{ημ}\,(\frac{\alpha}{2})$$

Παρατηρούμε ότι για $\alpha = 2\pi$ και για $\alpha = 4\pi$ η σχέση δίνει

$$U(2\pi) = -1 \qquad U(4\pi) = +1$$

Το σπιν πρέπει να περιστραφεί δύο φορές γύρω από τον άξονα του δηλαδή κατά 4π για να δώσει την μονάδα.

Η τελευταία σχέση αποδεικνύεται εύκολα αν χρησιμοποιήσουμε την παραπάνω ισότητα. Παραγωγίζουμε δύο φορές και βρίσκουμε

$$\frac{d^2}{d\theta^2}\exp\left(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right)=\frac{d^2}{d\theta^2}\left(\sigma\upsilon\nu\,\theta+i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\,\eta\mu\,\theta\right)=-\,\sigma\upsilon\nu\,\theta-i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\,\eta\mu\,\theta=$$
$$-\exp\left(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right)$$

Άσκηση 6.3

Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές για ένα σωμάτιο που κινείται σε μία διάσταση

α) στο δυναμικό

$$V=-\frac{V_0}{cosh^2(ax)}$$

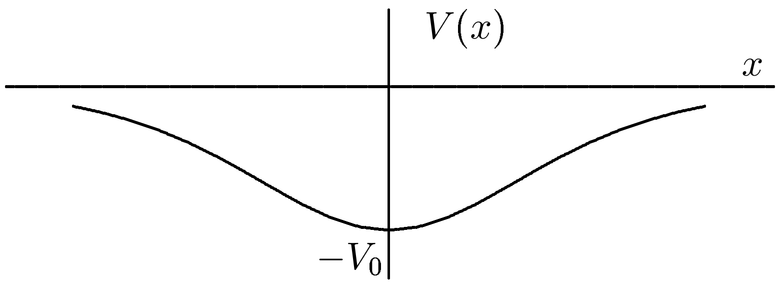
με ενέργεια $V_0 < \mathrm{E} < 0$ και

β) στο φράγμα δυναμικού

$$V=\frac{V_0}{cosh^2(ax)}$$

με ενέργεια $V_0 > E > 0$

Λύση: Η γραφική παράσταση του πρώτου δυναμικού φαίνεται στο παρακάτω σχήμα



Σχήμα 6.5

Από το σχήμα του δυναμικού φαίνεται αμέσως ότι τα σωμάτια με ενέργεια $E < 0$ είναι δέσμια και επομένως στην περίπτωση αυτή έχουμε κβάντωση στην ενέργεια. Αντίθετα οι καταστάσεις με θετική ενέργεια είναι καταστάσεις σκέδασης. Θα εξετάσουμε μόνο τις πρώτες καταστάσεις.

Η εξίσωση του Σρέντινγκερ με το δυναμικό της άσκησης είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{V_0}{cosh^2(ax)}\psi(x) = E\psi(x)$$

Θεωρούμε τον ακόλουθο μετασχηματισμό

$$\xi = tanh(ax) \quad \Longrightarrow \quad 1-\xi^2 = \frac{1}{cosh^2(ax)}$$

Βρίσκουμε την παράγωγο ως προς x

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi} = \frac{a}{cosh^2(ax)}\frac{d}{d\xi} = a(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}$$

Επομένως η διαφορική εξίσωση γίνεται

$$-\frac{\hbar^2 a^2}{2m}(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}\right]\psi(\xi) - (1-\xi^2)V_0\psi(\xi) = \mathrm{E}\psi(\xi) \quad \Longrightarrow$$

$$(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}\frac{d}{d\xi}\psi(\xi) + \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2} + \frac{2mE}{\hbar^2 a^2}\frac{1}{1-\xi^2}\right]\psi(\xi) = 0$$

Κάνουμε τους μετασχηματισμούς

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar a}$$

η σταθερά ε είναι πραγματική εφόσον $E < 0$ και

$$s(s+1) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2} \quad \Longrightarrow \quad s = \frac{1}{2}\left[-1 + \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\hbar^2 a^2}}\right]$$

και η διαφορικό εξίσωση γίνεται

$$(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}\psi(\xi) + \left[s(s+1) + \frac{\varepsilon}{1-\xi^2}\right]\psi(\xi) = 0$$

Η εξίσωση αυτή είναι η γνωστή εξίσωση (6.1) του Λεζάντρ και έχει λυθεί. Η εξίσωση αυτή μπορεί να πάρει την υπεργεωμετρική μορφή αν κάνουμε τον μετασχηματισμό

$$\psi = (1-\xi^2)^{\varepsilon/2}\varphi(\xi) \qquad\qquad u = \frac{1}{2}(1-\xi)$$

Η διαφορική εξίσωση γίνεται

$$u(1-u)\varphi'' + (\varepsilon+1)(1-2u)\varphi' - (\varepsilon-s)(\varepsilon+s+1)\varphi = 0$$

και έχει λύση την παρακάτω υπεργεωμετρική συνάρτηση.

$$\psi = (1-\xi^2)^{\varepsilon/2} F\left[\varepsilon-s, \varepsilon+s+1, \varepsilon+1, \frac{1}{2}(1-\xi)\right]$$

Η υπεργεωμετρική συνάρτηση ορίζεται στον κύκλο $|z|<1$ από τον τύπο

$$F(\alpha,\beta,\gamma,z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \cdots$$

όπου οι σταθερές α και β είναι οποιεσδήποτε ενώ $\gamma \neq 0, -1, -2, \cdots$ Η συνάρτηση είναι προφανώς συμμετρική ως προς α και β.

Η λύση δεν απειρίζεται για $\xi = -1$ (δηλαδή για $x \to -\infty$) αν έχουμε

$$s - \varepsilon = n \qquad\qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Η υπεργεωμετρική συνάρτηση F είναι ένα πολυώνυμο βαθμού n

Αν αντικαταστήσουμε τις σταθερές ε και s βρίσκουμε τελικά τις ιδιοτιμές του προβλήματος.

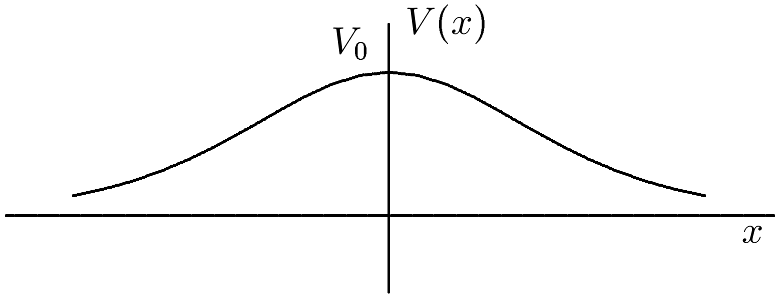
$$E = -\frac{\hbar^2 a^2}{8m}\left[-(1+2n) + \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\hbar^2 a^2}}\right]$$

Επειδή προφανώς $\varepsilon > 0$ ο αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων είναι πεπερασμένος και ορίζεται από την συνθήκη

$$n < s$$

β) Θα λύσουμε τώρα το δεύτερο πρόβλημα. Η γραφική παράσταση του δυναμικού αυτού φαίνεται στο παραπάνω σχήμα

$$V = \frac{V_0}{cosh^2(ax)}$$



Σχήμα 6.6

Η εξίσωση Σρέντινγκερ με το δυναμικό αυτό είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{V_0}{cosh^2(ax)}\psi(x) = E\psi(x)$$

Η εξίσωση είναι ίδια με την προηγούμενη μόνο που το V_0 έχει εδώ διαφορετικό πρόσημο. Η λύση είναι

$$\psi = (1-\xi^2)^{-ik/2a} F\left[-ik/a - s, -ik/a + s + 1, -ik/a + 1, \frac{1}{2}(1-\xi)\right]$$

όπου έχουμε θέσει

$$\xi = tanh(ax)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad s = \frac{1}{2}\left[-1 + \sqrt{1 - \frac{8mV_0}{\hbar^2 a^2}}\right]$$

Αν θεωρήσουμε ότι τα σωματίδια ταξιδεύουν από τα αρνητικά x προς τα θετικά τότε για $x \to +\infty$ (ή $\xi \to 1$, ή $1-\xi \approx 2e^{-x}$ η λύση πρέπει να έχει μόνο τον όρο e^{ikx}. Προσεγγιστική έκφραση για την κυματοσυνάρτηση του προβλήματος μπορούμε να βρούμε για $x \to \infty$ (ή $\xi \to -1$).

$$\psi \approx e^{ikx}\frac{\Gamma(ik)\Gamma(1-ik)}{\Gamma(-s)\Gamma(s+1)} + e^{-ikx}\frac{\Gamma(-ik)\Gamma(1-ik)}{\Gamma(-ik-s)\Gamma(-ik+s+1)}$$

Μπορούμε τέλος να υπολογίσουμε τον συντελεστή της διέλευσης D από το δυναμικό. Μετά από κάποιες πράξεις βρίσκουμε

$$D = \frac{sinh^2(\pi k/a)}{sinh^2(\pi k/a) + \text{συν}^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1 - 8mV_0/\hbar^2 a^2}\right)}$$

όπου $1 - 8mV_0/\hbar^2 a^2 > 0$. Αν η προηγούμενη έκφραση είναι αρνητική το συνημίτονο του παραπάνω τύπου γίνεται υπερβολικό συνημίτονο.

$$D = \frac{sinh^2(\pi k/a)}{sinh^2(\pi k/a) + \cosh^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1 - 8mV_0/\hbar^2 a^2}\right)}$$

Ασκήσεις

Άσκηση 7.1

Η κλασσική εξίσωση της κίνησης ενός ηλεκτρονίου μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = e\left(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{H}\right)$$

Αν συμβολίσουμε με $\vec{A}$ και φ το διανυσματικό και το βαθμωτό δυναμικό του πεδίου αντιστοίχως δηλαδή

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \qquad\qquad \vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

τότε να αποδειχτεί ότι οι εξισώσεις της κίνησης προέρχονται από την ακόλουθη συνάρτηση του Λαγκράνζ.

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + e\left(\frac{1}{c}\vec{v} \cdot \vec{A} - \varphi\right)$$

Να υπολογίσετε την συζυγή ορμή που βγαίνει από την λαγκρανζιανή αυτή και να βρείτε την κλασσική χαμιλτονιανή.

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + e\varphi$$

Άσκηση 7.2

Να δείξετε ότι η φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας $u(\nu)$ έχει ένα μέγιστο για $\nu = \nu_0$. Να βρεθεί η τιμή ν_0. Να δείξετε ότι το μέγιστο των συναρτήσεων $u(\lambda)$ και $u(\nu)$ αντιστοιχεί σε διαφορετικό μήκος κύματος.

Αυτό οφείλεται στην σχέση $u(\lambda)|d\lambda| = u(\nu)|d\nu|$. Δίνεται ότι η λύση της εξίσωσης $3(e^x - 1) - xe^x = 0$ είναι $x = 2,9$.

′Ασκηση 7.3

Να αποδειχτεί ότι το ολοκλήρωμα

$$< f|g > = \int_{\Re} f^* g dx \qquad \forall f \ , \ g \in L^2(\Re)$$

είναι πράγματι ένα εσωτερικό γινόμενο.

Να αποδειχτεί ότι στο σύνολο $L^2[0, 2\pi]$ το σύνολο των συναρτήσεων

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikt} \quad k = \pm 0, \pm 1, \cdots$$

είναι ορθοκανονικό.

′Ασκηση 7.4

Να αποδειχτεί ότι σε έναν χώρο Χίλμπερτ το εσωτερικό γινόμενο είναι συνεχής συνάρτηση ως προς αμφότερες τις μεταβλητές. Να αποδειχτεί επίσης ότι και η παρακάτω απεικόνιση είναι συνεχής

$$\| \cdot \cdot \| : \ x \ \longmapsto \ \|x\| \ \in \ \Re$$

′Ασκηση 7.5

Να αποδειχτεί ότι ο χώρος

$$l^2(\infty) = \left\{ x = (x_1, x_2, \cdots), \quad x_i \in C \quad / \quad \sum_{k=1}^{\infty} |x|^2 < \infty \right\}$$

είναι ένας χώρος Χίλμπερτ.

Να δειχτεί ότι κάθε πεπερασμένης διάστασης Ευκλείδειος χώρος είναι ένας διαχωρίσιμος χώρος Χίλμπερτ.

Άσκηση 7.6

Ορίζουμε την κατανομή κυρία τιμή του $x^{-1} = P\left(\frac{1}{x}\right)$ από την ακόλουθη σχέση

$$\left(P\left(\frac{1}{x}\right)\right)(\varphi(x)) \overset{\text{ορσ}}{=\!=} \lim_{\varepsilon\to 0+}\left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon}\frac{\varphi(x)}{x}dx + \int_{\varepsilon}^{\infty}\frac{\varphi(x)}{x}dx\right)$$

Να αποδειχτεί ότι η παραπάνω σχέση ορίζει πράγματι μία κατανομή και ότι

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{λογ}\,|x|\right) = P\left(\frac{1}{x}\right)$$

Επίσης να αποδειχτεί ότι ισχύουν και οι σχέσεις

$$\lim_{y\to 0+}\text{λογ}\,z = \text{λογ}\,|x| + i\pi\left(1 - H(x)\right) \qquad \text{όπου} \quad z = x + iy$$

$$\frac{1}{x \pm i0} = \lim_{y\to 0+}\frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$$

Να αποδειχτεί τέλος ότι η εξίσωση

$$xy = 1$$

έχει λύση την κατανομή

$$y = P\left(\frac{1}{x}\right) + c\delta(x)$$

Άσκηση 7.7

Να αναλυθεί σε σειρά Φουριέ η συνάρτηση $f(x) = x$, $-\pi < x < \pi$. Με την βοήθεια της ανάλυσης αυτής να αποδείξετε την σχέση

$$\frac{\pi^2}{12} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n^2} = 1 - \frac{1}{4} + \frac{1}{9} - \frac{1}{16} + \cdots$$

Να αποδείξετε ότι η ανάλυση σε σειρά Φουριέ της συνάρτησης $f(x) = x^2$, $-\pi < x < \pi$ είναι

$$f(x) = \frac{\pi^2}{3} + 4\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2}\, \text{συν}(nx)$$

Να γράψετε το παραπάνω άθροισμα όταν $x = 0$ και όταν $x = \pi$.

Να αναλύσετε τέλος σε σειρά Φουριέ την άρτια συνάρτηση $f(x) = x^4$, $-\pi < x < \pi$. Με την βοήθεια της ανάλυσης αυτής να αποδείξετε την σχέση

$$\sum_{n=1}^{\infty}(1/n^4) = \pi^4/90$$

Άσκηση 7.8

Να μελετηθούν οι συναρτήσεις Γκρην για τους τελεστές δυναμικού, θερμότητας και κύματος που ικανοποιούν αντιστοίχως τις παρακάτω διαφορικές εξισώσεις

$$\nabla^2 G(\vec{r};\vec{r}_0) = -4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) G(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0) = -4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\delta(t-t_0)$$

$$\left(\nabla^2 - \alpha^2\frac{\partial}{\partial t}\right) G(\vec{r},t;\vec{r}_0,t_0) = -4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\delta(t-t_0)$$

Να αποδειχτεί ότι η διαφορική εξίσωση

$$\left(\nabla_1^2 + k^2\right) G(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = -\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$$

έχει λύση την Γκρην συνάρτηση

$$G(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{e^{ik|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}}{4\pi|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

Άσκηση 7.9

Θεωρούμε ένα σταθμητό διανυσματικό χώρο V και ένα στοιχείο $f \in V^*$. Να αποδειχτεί ότι ο χώρος V γίνεται ένας χώρος Μπάναχ με τη στάθμη

$$\|f\| = \sup_{x \neq 0} \frac{|f(x)|}{\|x\|}$$

Άσκηση 7.10

Να αποδειχτεί ότι ένα γραμμικό συναρτησιακό είναι συνεχές τότε και μόνο τότε όταν είναι φραγμένο

Να αποδειχτεί ότι ένα γραμμικό συναρτησιακό είναι συνεχές όταν είναι συνεχές σε ένα μόνο σημείο.

Άσκηση 7.11

Να οριστεί η κατανομή του Ντιράκ σε οποιοδήποτε καμπυλόγραμμο σύστημα συντεταγμένων (q_1, q_2, q_3). Να αποδειχτεί ότι σε σφαιρικές συντεταγμένες $(r, \text{συν}\,\theta, \varphi)$ η δέλτα συνάρτηση $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ γίνεται

$$\frac{1}{r_1^2}\delta\left(r_1 - r_2\right)\delta\left(\text{συν}\,\theta_1 - \text{συν}\,\theta_2\right)\delta\left(\varphi_1 - \varphi_2\right)$$

Άσκηση 7.12

Αν H είναι ένας ερμητιανός τελεστής και U ένας μοναδιαίος τελεστής τότε να αποδειχτούν ότι ο τελεστής UHU^{-1} είναι ερμητιανός, ο τελεστής $exp\{iH\}$ είναι μοναδιαίος, ο τελεστής $i\frac{U-1}{U+I}$ είναι ερμητιανός και ο τελεστής $\frac{I-iH}{I+iH}$ είναι μοναδιαίος.

Άσκηση 7.13

Να αποδειχτεί ότι οι τελεστές της θέσης και της ορμής ικανοποιούν την σχέση του Βάιλ.

$$e^{iaQ}e^{ibP} = e^{-i\hbar ab}e^{ibP}e^{iaQ}$$

Η σχέση αυτή είναι ισοδύναμη με την κανονική σχέση $[Q, P] = i\hbar$. Εχει όμως το πλεονέκτημα να περιέχει φραγμένους τελεστές. Να αποδειχτεί επίσης η σχέση

$$e^{-ibP}Q^n e^{ibP} = (Q - b\hbar)^n$$

και οι γενικότερες σχέσεις

$$[Q, F(Q,P)] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial P} \qquad [P, F(Q,P)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial Q}$$

Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση $F(Q,P)$ μπορεί να αναλυθεί σε σειρά δυνάμεων των Q και P. Να αποδειχτεί τέλος ότι για δύο τυχόντες τελεστές A και B ισχύει η σχέση

$$e^B A e^{-B} = A + [B,A] + \frac{1}{2}\,[B,[B,A]] + \frac{1}{3!}\,[B,[B,[B,A]]] + \cdots$$

Άσκηση 7.14

Η παράγωγος ενός τελεστή Α(ξ) που εξαρτάται από την πραγματική μεταβλητή ξ δίνεται από την σχέση

$$\frac{d\mathrm{A}}{d\xi} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathrm{A}(\xi + \varepsilon) - \mathrm{A}(\xi)}{\varepsilon}$$

Να αποδείξετε ότι

$$\frac{d}{d\xi}(AB) = \frac{dA}{d\xi} B + A \frac{dB}{d\xi} \qquad \frac{d}{d\xi} A^2 = \frac{dA}{d\xi} A + A \frac{dA}{d\xi}$$

$$\frac{d}{d\xi}\left(e^{iA\xi}\right) = iAe^{iA\xi}$$

Να αποδειχτεί η ανάπτυξη

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + t[A,B] + \frac{t^2}{2!}[A,[A,B]] + \cdots + \frac{t^n}{n!} \overbrace{[A,[A,\cdots[A,[A}^{n-\text{παρενθέσεις}},B]]\cdots]]$$

Αν συμβολίσουμε με L_A τον τελεστή που ορίζεται από τις σχέσεις

$$L_A^0 = B \qquad L_A B = [A,B] \qquad L_A^2 B = [A,[A,B]] \qquad \cdots$$

τότε η παραπάνω ταυτότητα γράφεται

$$e^{tA} B e^{-tA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} L_A^n B$$

Τέλος αν Α(ξ) είναι ένας τελεστής που εξαρτάται από την πραγματική μεταβλητή ξ και $dA/d\xi$ η παράγωγος ως προς ξ να αποδειχτεί η ταυτότητα

$$\frac{d}{d\xi}e^{tA} = te^{tA}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-t)^n}{(n+1)!}L_A^n\frac{dA}{d\xi}$$

'Ασκηση 7.15

Να υπολογιστεί ο μεταθέτης $[T_1, T_2]$ των τελεστών

$$T_1 = x \quad \text{και} \quad T_2 = \frac{d^2}{dx^2} \qquad\qquad T_1 = g(x) \quad \text{και} \quad T_2 = \frac{d}{dx}$$

$$T_1 = \nabla^2 \quad \text{και} \quad T_2 = \vec{r}\cdot\vec{\nabla} \qquad\qquad T_1 = \vec{c}\times\vec{\nabla} \quad \text{και} \quad T_2 = \vec{r}$$

'Ασκηση 7.16

Δίνεται ο τελεστής της μετάθεσης

$$T = e^{\alpha\frac{d}{dx}} = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n$$

Να αποδειχτεί ότι $Tf(x) = f(x+\alpha)$.
Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές του τελεστή αυτού.

'Ασκηση 7.17

Αν δυο τελεστές H_1 και H_2 είναι ερμητιανοί να αποδειχτεί ότι και οι ακόλουθοι τελεστές είναι επίσης ερμητιανοί

$$\{H_1, H_2\} = H_1H_2 + H_2H_1 \qquad\qquad i[H_1, H_2] \qquad\qquad TH_1T^+$$

'Ασκηση 7.18

Να δείξεται ότι αν $[A, B] = 0$, $[A, C] = 0$ και $[B, C] \neq 0$ τότε οι ιδιοτιμές του τελεστή A είναι εκφυλισμένες.

Άσκηση 7.19

Να εξεταστεί ποιοι από τους παρακάτω τελεστές είναι ερμητιανοί

$$T_1 = \frac{d}{dx} \quad T_2 = i\frac{d}{dx} \quad T_3 = \frac{d^2}{dx^2}$$

Άσκηση 7.20

Να αποδειχτεί ότι αν η πυκνότητα πιθανότητας $\rho(\vec{r},t)$ και η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας $\vec{J}(\vec{r},t)$, είναι ανεξάρτητες από τον χρόνο, τότε η κυματοσυνάρτηση παριστάνει μια στάσιμη κατάσταση δηλαδή

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r})$$

Να δειχτεί ότι το άθροισμα στάσιμων καταστάσεων δεν είναι στάσιμη κατάσταση.

Άσκηση 7.21

Να γράψετε την εξίσωση Σρέντινγκερ στις δύο παραστάσεις q και p και την εξίσωση Χάιζενμπεργκ για ένα φορτισμένο σωματίδιο μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Το δυναμικό του προβλήματος είναι $V(\vec{r}) = eE \cdot \vec{r}$.

Άσκηση 7.22

Να δείξετε ότι η μέση τιμή του τετραγώνου της ορμής σε ένα μονοδιάστατο πρόβλημα, μπορεί να γραφεί με την μορφή

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2 dx$$

Άσκηση 7.23

Ενα σωματίδιο κινείται από τα αριστερά προς τα δεξιά στο δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} V & \text{για} \quad x > 0 \\ 0 & \text{για} \quad x < 0 \end{cases}$$

Να λυθεί το πρόβλημα στις περιπτώσεις $\mathrm{E} < V$ και $\mathrm{E} > V$.

Άσκηση 7.24

Δίνεται η διαφορική εξίσωση ιδιοτιμών

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(ru(r)) + \lambda u(r) = 0$$

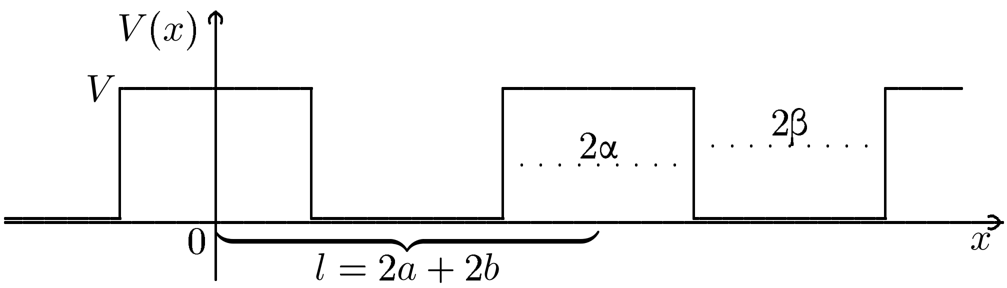
με τις οριακές συνθήκες $u(0) =$ πεπερασμένο και $u(a) = 0$. Να αποδείξετε ότι έχει λύση μόνο για θετικά $\lambda = k^2$ και ότι οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος είναι

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{1}{r}\,\text{ημ}\left(\frac{n\pi}{a}r\right) \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Γενικότερα κυματοσυναρτήσεις της μορφής $u(r) = \varepsilon^{\pm ikr}/r$ ονομάζονται σφαιρικά κύματα. Να αποδείξεται ότι το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας τους είναι $\vec{J} = \pm\frac{\hbar k}{m}\frac{1}{r^2}\vec{r}_0$.

Άσκηση 7.25

Να λυθεί το πρόβλημα ενός σωματιδίου μέσα στο περιοδικό δυναμικό του σχήματος



Σχήμα 7.1

Άσκηση 7.26

Να αποδείξεται την σχέση

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s[A, B]A^{n-s-1}$$

Να εφαρμόσετε την σχέση για να αποδείξετε ότι

$$[q, p^n] = n\, i\hbar p^{n-1} \qquad\qquad [q^n, p] = n\, i\hbar q^{n-1}$$

Αν $A(q, p)$ είναι μια αναλυτική συνάρτηση των τελεστών p και q να αποδειχτούν οι γενικότερες σχέσεις

$$[p, A(q, p)] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q} \qquad\qquad [q, A(q, p)] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p}$$

Αν $\mathrm{N} = a^+ a$ είναι ο αριθμητικός τελεστής, να αποδείξετε επίσης τις σχέσεις

$$[N, a^p] = -pa^p \qquad\qquad [N, \left(a^+\right)^p] = +p\left(a^+\right)^p$$

όπου p είναι θετικός ακέραιος. Οι μόνες αλγεβρικές συναρτήσεις των τελεστών δημιουργίας και εξαφάνισης που εναλλάσσονται με τον αριθμητικό τελεστή N είναι οι συναρτήσεις του N.

Άσκηση 7.27

Με την βοήθεια της παρακάτω γεννήτριας συνάρτησης των πολυωνύμων του Ερμίτ

$$e^{-\xi^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} H_n(s)$$

να βρεθεί το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^p H_n(\xi) H_k(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

Άσκηση 7.28

Ενα σωματίδιο κινείται στο δυναμικό

$$V(x) = \frac{1}{2} k \left(|x| - \alpha\right)^2$$

Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές του προβλήματος.

Άσκηση 7.29

Να λυθεί η εξίσωση Σρέντινγκερ
για το μοριακό δυναμικό Κρέτζερ

$$V(x) = \frac{G}{x^2} - \frac{g}{x}$$

β) και για το μοριακό δυναμικό Μορς

$$V(x) = V_0 \left(e^{-2\lambda x} - e^{-\lambda x}\right)$$

Άσκηση 7.30

Να λυθεί το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή σε τρεις διαστάσεις.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\left(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2\right)$$

Να δείξετε ότι στην περίπτωση των δύο διαστάσεων ($\omega_3 = 0$) αν ο λόγος ω_1/ω_2 είναι άρρητος δεν υπάρχει εκφυλισμός της ενέργειας.

Να λυθεί και να διερευνηθεί η ισότροπος περίπτωση όπου $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$. Να αποδειχθεί ότι ο βαθμός εκφυλισμού της ενεργειακής στάθμης E_n είναι ίσος με $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$. Να λύσετε το πρόβλημα σε σφαιρικές συντεταγμένες.

Άσκηση 7.31

Να βρεθούν οι μέσες τιμές των τελεστων x^2 και p^2 του αρμονικού ταλαντωτή στην n κατάσταση. Να αποδείξετε ότι ισχύει η σχέση απροσδιοριστίας

$$(\Delta x)(\Delta p) = (n + 1/2)\hbar$$

Να δειχθεί ότι η ενέργεια του αρμονικού ταλαντωτή στην $n -$ κατάσταση, είναι ανάλογη της μέσης τιμής του τετραγώνου της θέσης και ότι η μέση κινητική ενέργεια, είναι ίση με την μέση δυναμική ενέργεια δηλαδή

$$\mathrm{E}_n = m\omega^2 \left\langle x^2 \right\rangle_n \quad \text{και} \quad \langle \mathrm{E}_{\kappa\iota\nu} \rangle = \langle V \rangle_n$$

Άσκηση 7.32

Να βρεθούν οι τελεστές που αντιστοιχούν στις συνιστώσες της στροφορμής $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ και να αποδειχτούν οι σχέσεις εναλλαγής

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\vec{L}$$

$$[L_j, x_k] = i\hbar\varepsilon_{jkn}x_n \qquad [L_j, p_k] = i\hbar\varepsilon_{jkn}p_n$$

Να αποδειχτεί ότι οι μήτρες που παριστάνουν τους τελεστές της στροφορμής για $l = 1$ είναι

$$l_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad l_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$l_3 = \hbar\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad l^2 = 2\hbar^2 \cdot 1$$

Άσκηση 7.33

Ενα σωματίδιο βρίσκεται στο δυναμικό

$$V = m\omega^2 x^2 + \frac{b^2}{x^2}$$

Να δειχτεί ότι οι ιδιοτιμές τις ενεργείας είναι

$$W_n = 2\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\alpha\right) \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

όπου $\alpha^2 = (2mb^2/\hbar^2) + 1/4$, και ότι οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις είναι

$$\psi_n = N_n e^{-\frac{1}{2}z^2}\ z^{\alpha+\frac{1}{2}}\ L^{\alpha}_{n+\alpha}\left(z^2\right)$$

όπου $z = x\sqrt{m\omega/\hbar}$. Να βρείτε τις σταθερές N_n σε συνάρτηση των n, M, ω και $\hbar$.

Άσκηση 7.34

Να μελετηθεί η ολική στροφορμή ενός συστήματος δύο σωματιδίων

$$J = J_1 + J_2$$

Οι τελεστές J_1 και J_2 της στροφορμής των δύο σωματιδίων αντιστοίχως μετατίθενται. Να μελετηθεί επίσης το ολικό σπιν δύο ηλεκτρονίων.

$$S = S_1 + S_2$$

Άσκηση 7.35

Να λυθεί η εξίσωση Σρέντινγκερ σε δυναμικό Κουλόμπ σε παραβολικές συντεταγμένες

$$\xi = r - z = r(1 - \text{συν}\,\theta) \quad \eta = r + z = r(1 + \text{συν}\,\theta) \quad \varphi = \varphi$$

Να αποδειχτεί ότι οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές δίνονται από τις σχέσεις

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(\xi\eta)^{\frac{1}{2}|m|} L_{n_1+|m|}^{|m|}(\alpha\xi) L_{n_2+|m|}^{|m|}(\alpha\eta)$$

$$\mathrm{E}_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \quad n = n_1 + n_2 + |m| + 1$$

Άσκηση 7.36

Δίνεται ότι το σπιν ενός ηλεκτρονίου κείται επί ενός διανύσματος που σχηματίζει γωνίες θ και φ με τους άξονες z και x. Να βρεθεί η κατάσταση σπιν του ηλεκτρονίου αυτού.

Άσκηση 7.37

Οι τελεστές $\vec{\mathrm{A}}$ και $\vec{\mathrm{B}}$ είναι δύο διανυσματικοί τελεστές που εναλλάσσονται με τους τελεστές $\vec{\sigma}$ αλλά όχι μεταξύ τους. Να αποδειχτεί ότι

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

$$\vec{\sigma} \times \left(\vec{\sigma} \times \vec{A}\right) = i\left(\vec{\sigma} \times \vec{A}\right) - 2\vec{A} \qquad \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{\mathrm{A}}\right)\vec{\sigma} = \vec{A} + i\left(\vec{\sigma} \times \vec{A}\right)$$

Άσκηση 7.38

Σε ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο θεωρούμε τον ακόλουθο μετασχηματισμό βαθμίδας (gauge)

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f \qquad \text{με} \quad \nabla^2 f = 0$$

$$\psi' = \psi\, exp(i\frac{e}{\hbar c}f)$$

Να αποδειχτεί ότι η εξίσωση Σρέντινγκερ παραμένει αναλλοίωτη.

Άσκηση 7.39

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές της ενέργειας ενός σωματίου στο ακόλουθο κεντρικό δυναμικό

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2$$

όπου A και B είναι θετικοί αριθμοί. Να δειχτεί ότι εις την ειδική περίπτωση όπου $A = 0$ και $B = m\omega^2/2$, τα ενεργειακά επίπεδα είναι ίδια με εκείνα του ισότροπου τρισδιάστατου ταλαντωτή.

Να λυθεί επίσης το ίδιο πρόβλημα και για το ακόλουθο κεντρικό δυναμικό

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$$

Άσκηση 7.40

Η εξίσωση Σρέντινγκερ του ατόμου του υδρογόνου μέσα σε ηλεκτρικό πεδίο κατά την z διεύθυνση είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{r}\psi - eEz\psi = E\psi$$

Να μελετηθεί το πρόβλημα σε παραβολικές συντεταγμένες, Φαινόμενο Σταρκ.

Άσκηση 7.41

Να λυθεί το διαφορικό σύστημα

$$i\frac{dX}{dt} = H\ X = \frac{1}{2}\omega\sigma_1 X$$

με αρχική συνθήκη

$$\mathrm{X}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Το καταστατικό διάνυσμα $\mathrm{X}(t)$ παριστάνει το σπιν ενός ηλεκτρονίου μέσα σε σταθερό και ομογενές μαγνητικό πεδίο κατά την θετική διεύθυνση του άξονα x. Βρείτε επίσης τις πιθανότητες να βρούμε το ηλεκτρόνιο με σπιν πάνω ή κάτω ως προς τον αρχικό άξονα z.

Άσκηση 7.42

Να λυθεί με την μέθοδο των σειρών η εξίσωση Μπέσελ

$$x^2 y''(x) + x y'(x) + \left(x^2 - \nu^2\right) y(x) = 0$$

Να λυθεί επίσης η διαφορική εξίσωση

$$x^2 y''(x) + 2x y'(x) + \left[x^2 - l(l+1)\right] y(x) = 0$$

Άσκηση 7.43

Οι τελεστές τις θέσης και της ορμής στην παράσταση Βίγκνερ, δίνονται από τις σχέσεις

$$Q = q + \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p} \qquad\qquad P = p - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial q}$$

Να αποδειχτεί ότι οι τελεστές αυτοί ικανοποιούν τις γνωστές σχέσεις της αντιμετάθεσης

$$[P, Q] = -i\hbar \quad [P^*, Q^*] = i\hbar \qquad\qquad [P^*, Q] = [P, Q^*] = 0$$

Να αποδειχτεί επίσης ότι η κατανομή του Βίγκνερ

$$f(p,q,t) = h^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip\tau/\hbar} \psi^* \left(q + \frac{\tau}{2}, t\right) \psi \left(q - \frac{\tau}{2}, t\right) d\tau$$

είναι λύση της διαφορικής εξίσωσης

$$i\hbar \frac{df}{dt} = [H(P,Q) - H(P^*,Q^*)] \; f(p,q)$$

Να αποδειχτεί ότι η μέση τιμή ενός μεγέθους A δίνεται από το εξής "κλασσικό" ολοκλήρωμα στον χώρο των φάσεων

$$\langle A \rangle = Tr(fA) = \int dp\, dq\, \mathrm{A}(p,q) f(p,q)$$

όπου $\mathrm{A}(p,q)$ είναι ο μετασχηματισμός Βάιλ του τελεστή $A(p,q)$, δηλαδή

$$\mathrm{A}(p,q) = (2\pi)^{-2} \int d\tau\, d\theta\, \varepsilon^{-i(\theta q + \tau p)} Tr\left[A(P,Q) e^{i(\theta Q + \tau P)}\right]$$

Να αποδειχτεί ότι τα ολοκληρώματα της κατανομής του Βίγκνερ ως προς p και q είναι οι πυκνότητες πιθανότητας στον χώρο των ορμών και στον χώρο των θέσεων αντιστοίχως. Δηλαδή να αποδειχτούν οι σχέσεις.

$$\int f(p,q,t) dq = |\varphi(p,t)|^2 \qquad\qquad \int f(p,q,t) dp = |\psi(q,t)|^2$$

Να βρεθεί τέλος η συνάρτηση $f(q,p,t)$ για το ελεύθερο σωμάτιο.

Βιβλιογραφία

1) Αρχαία Ελληνική Γραμματεία, Οι Ελληνες.
Πλάτων. Τίμαιος ή περί φύσεως.
Εκδόσεις Κάκτος, Ο. Χατζόπουλος & σία. Αθήνα 1993
2) Μαθηματική θεμελίωση της κβαντομηχανικής
Α. Γιαννούσης
Εκδόσεις Πανεπιστημίου Πατρών, 1981
3) Εισαγωγή στην κβαντομηχανική, Χ. Γεωργαλάς
Πανεπιστήμιο Πατρών, 1979
4) Κβαντομηχανική I, II, III και
Σχετικιστική Κβαντομηχανική, Σ. Τραχανάς
Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, 1981
5) Εισαγωγή στην κβαντομηχανική, Γ. Ανδριτσόπουλος
Α. Παπασωτηρίου και ΣΙΑ Ο.Ε. Αθήνα 1995
6) Quantum mechanics in Hilbert space, E. Prugovecki
Academic press, 1971
7) Quantum mechanics non relativistic theory, Vol. 3
Relativistic Quantum Theory, Vol 4, P 1,2
L. Landau, E. Lifshitz
Pergamon press, 1958
8) Quantum Mechanics Vol I, II, A. Messiah
North-Holland Publishing Company 1991
9) Quantum statistical properties of radiation, W. Louisell
J. Wiley and Sons, 1975
10) Συναρτησιακή ανάλυση, Α. Παντελίδης
Εκδοση Τεχνικού Επιμελητηρίου Ελλάδος, 1971
11) Methods of theoretical physics part I, part II
P. Morse and H. Feshbach
Mc Graw Hill P.C. 1953
12) Mathematical methods for physicists, G. Arfken
Academic press 1971
13) Intoduction to the theory of distributions
G. Friedlander
Cambridge University Press 1982.

Η απόδοση κάποιων ονομάτων στα Ελληνικά

M. Planck	Πλάνκ
W. Heisenberg	Χάιζενμπεργκ
E. Schrödinger	Σρέντιγκερ
P. Dirac	Ντιράκ
A. Einstein	Αϊνστάιν
N. Bohr	Μπορ
W. Röntgen	Ρέντγκεν
H. Lorentz	Λόρεντς
J. Neumann	Νόυμαν
P. Zeeman	Ζέιμαν
W. Pauli	Πάουλι
F. Bloch	Μπλόχ
M. Born	Μπόρν
D. Landau	Λαντάου
E. Wigner	Βίγκνερ
R. Feynman	Φάυνμαν
H. Weyl	Βάιλ
C. Hermit	Ερμίτ
D. Hilbert	Χίλμπερτ
A. Becquerel	Βεκερέλ
C. Huygens	Χόυχενς
P. Curie	Κιουρί
Lord Rayleigh	Ρέιλι
Lord Rutherford	Ράδερφορντ
G. Thomson	Τόμσον
A. Michelson	Μάικελσον
W. Wien	Βήν
J. Stark	Σταρκ
G. Herz	Χέρτζ
A. Compton	Κόμπτον
C. Wilson	Γουίλσον
L. de Brogli	ντε Μπρολί
E. Fermi	Φέρμι
O. Stern	Στερν