

Εισαγωγικές σημειώσεις Κβαντικής Μηχανικής

Φοίβος Μαυρόπουλος

Τμήμα Φυσικής, ΕΚΠΑ

Αθήνα 2026

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
2	Οι φυσικές καταστάσεις στην κβαντική μηχανική	5
3	Η μέτρηση στην κβαντική μηχανική	9
3.1	Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές	11
3.2	Προετοιμασία κατάστασης και φιλτράρισμα	12
3.3	Συμβατά και ασύμβατα μεγέθη	13
3.4	Το αξίωμα προβολής	15
3.5	Φυσικός ορισμός των συμβατών μεγεθών	19
3.6	Αρχή της αβεβαιότητας	19
3.7	Είναι τα γινόμενα και οι μεταθέτες ερμιτιανών τελεστών ερμιτιανοί τελεστές;	21
3.8	Παράρτημα: Μεγέθη με συνεχές φάσμα τιμών	22
3.9	Προβλήματα	25
4	Η γεωμετρική δομή των καταστάσεων: χώρος Hilbert	27
4.1	Γενικά	27
4.2	Πληρότητα ιδιοδιανυσμάτων και πιθανότητα μετάβασης	31
4.3	Αναπαράσταση γραμμικών τελεστών από πίνακες	32
4.4	Κοινά ιδιοδιανύσματα μετατιθέμενων τελεστών	33
4.5	Ερμιτιανοί συζυγείς τελεστές	34
4.6	Μοναδιαίοι τελεστές	36
4.7	Μετασχηματισμός ορθοκανονικής βάσης	37
4.8	Σχέση ερμιτιανών και μοναδιαίων τελεστών	38
4.9	Παράρτημα: Δράση της ορμής σε κυματοσυναρτήσεις με ιδιάζοντα σημεία	39

4.10 Προβλήματα	44
5 Χρονική εξέλιξη των καταστάσεων: η εξίσωση Schrödinger	47
5.1 Χρονική εξάρτηση μέσων τιμών. Διατηρούμενα μεγέθη	50
5.2 Σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου	51
5.3 Ρεύμα πιθανότητας και εξίσωση συνέχειας	52
5.4 Ανάπτυγμα σε ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής	54
5.5 Ελεύθερο σωματίδιο και συνεχές φάσμα	57
5.6 Αναπαράσταση ορμής	60
5.7 Γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις στη γενική περίπτωση	63
5.8 Ορθοκανονικότητα των γενικευμένων ιδιοκαταστάσεων	65
5.9 Σύνοψη της θεωρίας μέτρησης και χρονικής εξέλιξης	69
5.10 Παράρτημα: Προβολικοί τελεστές στο συνεχές φάσμα.	72
5.11 Προβλήματα	76
6 Συνύπαρξη διακριτού και συνεχούς φάσματος: πηγάδι δυναμικού	79
6.1 Περιγραφή του προβλήματος	79
6.2 Συμμετρία ομοτιμίας (αντιστροφής χώρου)	80
6.3 Δέσμιες καταστάσεις	82
6.4 Θεωρήματα για δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα προβλήματα	85
6.5 Καταστάσεις σκέδασης	87
6.6 Προβλήματα	92
7 Φραγμός δυναμικού και φαινόμενο σήραγγας	95
7.1 Βήμα δυναμικού. Πολλαπλή σκέδαση	97
7.2 Προσέγγιση στο φαινόμενο σήραγγας για υψηλό ή πλατύ φραγμό	99
7.3 Προβλήματα	100
8 Δυναμικά συνάρτησης δ	102
8.1 Δυναμικό συνάρτησης δ	102
8.2 Δέσμιες καταστάσεις σε δύο δυναμικά δ	103
8.3 Προβλήματα	106
9 Ο αρμονικός ταλαντωτής	108
9.1 Εισαγωγικά	108
9.2 Αναλυτική μέθοδος επίλυσης	108
9.3 Αλγεβρική μέθοδος επίλυσης	111
9.4 Προβλήματα	115

10 Κίνηση σε τρεις διαστάσεις και στροφορμή	116
10.1 Εισαγωγικά	116
10.2 Η στροφορμή	119
10.3 Συζήτηση περί των σχέσεων μετάθεσης των τελεστών στροφορμής . . .	122
10.4 Ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές της στροφορμής	123
10.5 Φυσική ερμηνεία του φάσματος	128
11 Κίνηση σε κεντρικό δυναμικό—το άτομο του Υδρογόνου	131
11.1 Διατήρηση της στροφορμής	131
11.2 Κινητική ενέργεια και στροφορμή	132
11.3 Χωρισμός μεταβλητών και ακτινική εξίσωση	133
11.4 Η λύση για το ελεύθερο σωματίδιο	136
11.5 Λύσεις δέσμιων καταστάσεων για το άτομο του Υδρογόνου	137
11.6 Το άτομο του Υδρογόνου ως σύστημα δύο χβαντικών σωματιδίων . . .	142
Παράρτημα Α: Η συνάρτηση δ	148
Παράρτημα Β: Χρήσιμες μαθηματικές σχέσεις	150
Ευρετήριο	151

1 Εισαγωγή

Η κβαντική μηχανική περιγράφει τη δυναμική στο μικρόκοσμο (ηλεκτρόνια, ατομικοί πυρήνες, άτομα, μόρια), ενώ στο μακρόκοσμο συνήθως δεν παρατηρούμε απευθείας κβαντική συμπεριφορά, παρά μόνο τις συνέπειές της σε διάφορα φαινόμενα. Η κβαντική μηχανική αναπτύχθηκε τις δεκαετίες 1920 και 1930 λόγω της αποτυχίας της κλασικής Φυσικής να εξηγήσει μια σειρά πειραματικών δεδομένων. Στις αρχές, προτάθηκαν *ad hoc* κβαντικές υποθέσεις από τους Planck, Einstein, Bohr, κ.α., οι οποίες οδήγησαν τελικά σε μια φυσική θεωρία. Παρακάτω παρατίθενται μερικά παραδείγματα φαινομένων όπου αποτυγχάνει κάθε απόπειρα εξήγησης με βάση την κλασική Φυσική (τέλη 19^{ου}–αρχές 20^{ου} αιώνα).⁽¹⁾

- Ακτινοβολία μέλανος σώματος. *Μέλαν σώμα* χαρακτηρίζεται ένα σώμα που απορροφά όλη την ακτινοβολία που προσπίπτει σε αυτό. Η απορροφούμενη ακτινοβολία μετατρέπεται σε θερμότητα, και το σώμα επανεκπέμπει λόγω της θερμοκρασίας του (τυπικά παραδείγματα είναι ο Ήλιος και μια μικρή οπή σε κοιλότητα με μονωμένα τοιχώματα). Το φάσμα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας δεν εξηγείται από την κλασική φυσική. Ερμηνεύθηκε από τον Max Planck (1900) βάσει κβαντικής υπόθεσης.
- Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (1887). Σε αυτό, ηλεκτρόνια εκπέμπονται από μεταλλικές επιφάνειες λόγω απορρόφησης ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Ένα πρόβλημα είναι ότι η εκπομπή σταματά όταν η συχνότητα της ακτινοβολίας πέσει κάτω από μια κρίσιμη τιμή, φαινόμενο που δεν εξηγείται κλασικά. Ερμηνεύθηκε από τον Albert Einstein (1905) βάσει κβαντικής υπόθεσης. Επιβεβαιώθηκε πειραματικά από τον Robert Millikan (1915).
- Φαινόμενο Compton (σχέδαση ηλεκτρονίων–φωτονίων). Ο κλασικός τύπος για τη γωνία σκέδασης δεν συμφωνεί με τα πειραματικά δεδομένα. Η εξήγηση δόθηκε με βάση την κβαντική θεωρία.
- Σταθερότητα των ατόμων. Στο κλασικό *πλανητικό μοντέλο*, τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται σε τροχιές γύρω από τους πυρήνες των ατόμων, άρα βρίσκονται σε διαρκή επιτάχυνση. Λόγω του φορτίου τους και της επιτάχυνσης, θα έπρεπε να εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, να χάνουν διαρκώς ενέργεια, και να πέφτουν στον πυρήνα σε περίπου 1 ns. Ερμηνεύθηκε από τους Niels Bohr και Ernest Rutherford (1913) βάσει κβαντικής υπόθεσης.
- Μαγνητισμός της ύλης σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Το θεώρημα van Leeuwen (1919) δείχνει ότι ένα κλασικό σύστημα κινούμενων φορτίων σε

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

κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας δεν μπορεί να έχει μαγνήτιση. Είναι προφανής η αντίφαση με την ύπαρξη μόνιμων μαγνητών. Η εξήγηση δίνεται με βάση την κβαντική θεωρία της ύλης.

Η κβαντική μηχανική προβλέπει κατανομές πιθανότητας στα αποτελέσματα μετρήσεων, σε αντίθεση με την κλασική μηχανική, που προβλέπει το ακριβές αποτέλεσμα κάθε μέτρησης. Πιο συγκεκριμένα, στην κλασική Φυσική υποθέτουμε το εξής. Έστω ότι μπορούμε να προετοιμάσουμε ένα σύστημα με αυθαίρετα μεγάλη ακρίβεια και να κάνουμε μέτρηση ενός μεγέθους A (θέση, ορμή, ενέργεια, στροφορμή, κλπ.) με αυθαίρετα υψηλή διακριτική ικανότητα, χάρη σε κατάλληλες πειραματικές τεχνικές. Αν προετοιμάσουμε το σύστημα στις ίδιες ακριβώς αρχικές συνθήκες πολλές φορές και κάνουμε κάθε φορά μια μέτρηση του A , τότε θα βρούμε κάθε φορά ως αποτέλεσμα την ίδια τιμή, a , η οποία θα εξαρτάται μόνο από τις αρχικές συνθήκες.

Στην κβαντική Φυσική έχουμε το εξής φαινόμενο. Έστω και πάλι ότι έχουμε τη δυνατότητα αυθαίρετα μεγάλης ακρίβειας στην προετοιμασία του συστήματος και διακριτικής ικανότητας στη μέτρηση. Προετοιμάζουμε το σύστημα πολλές φορές, έστω N τον αριθμό, στις ίδιες ακριβώς αρχικές συνθήκες. Μετράμε κάθε φορά ένα μέγεθος A με δυνατές τιμές $a \in \mathbb{R}$ και βρίσκουμε αποτελέσματα $a_1, a_2, \dots, a_N$, ένα για κάθε μέτρηση. Κάποια από αυτά ίσως ταυτίζονται, κάποια διαφέρουν μεταξύ τους. Έχουμε μια κατανομή αποτελεσμάτων, η οποία στο όριο μεγάλου N θα δίνει μια κατανομή πιθανότητας $P(a)$ (ή πυκνότητα πιθανότητας $\rho(a)$, αν έχουμε συνεχές φάσμα τιμών στο μέγεθος). Η κατανομή πιθανότητας είναι δυνατόν να είναι πολύ ευρεία, δηλαδή να έχει μεγάλη διασπορά (ΔA) γύρω από τη μέση τιμή $\langle A \rangle$, ή να είναι οξεία, δηλαδή να έχει μικρή διασπορά, ή ακόμα και να έχει μηδενική διασπορά, δηλαδή $a_1 = a_2 = \dots = a_N$ και $(\Delta A) = 0$.

Η κατανομή πιθανότητας $P(a)$ εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες προετοιμασίας και από το μέγεθος A . Δηλαδή, για δεδομένες αρχικές συνθήκες, υπάρχουν μετρήσιμα μεγέθη που δίνουν μεγάλη διασπορά, άλλα που δίνουν μικρή διασπορά, και άλλα που δίνουν ουσιαστικά μηδενική διασπορά. Αντίστροφα, και για δεδομένο μέγεθος A , υπάρχουν αρχικές συνθήκες που θα δώσουν μεγάλη, ή μικρή, ή ουσιαστικά μηδενική διασπορά στις μετρήσεις του μεγέθους.

Πρέπει να τονίσουμε ότι η ύπαρξη διασποράς στην κβαντική Φυσική δεν οφείλεται σε κάποια ατέλεια του πειράματος ή αβεβαιότητα στις αρχικές συνθήκες λόγω πεπερασμένης ακρίβειας, όπως στην κλασική στατιστική Φυσική, αλλά είναι εγγενής ιδιότητα της Φύσης για κατάλληλους συνδυασμούς αρχικών συνθηκών με μετρήσιμα μεγέθη. Αυτή η παραδοξότητα βρίσκεται στην καρδιά της κβαντικής Φυσικής. Ο συνδυασμός αρχικών συνθηκών με μετρήσιμο μέγεθος που δίνει διασπορά στα αποτελέσματα μπορεί να είναι πολύ απλός, π.χ., συμβαίνει εάν τεθεί ως αρχική συνθήκη η στροφορμή ενός

ατόμου με δεδομένη τιμή προβολής στην κατεύθυνση z και στη συνέχεια μετρηθεί η προβολή της στροφορμής στην κατεύθυνση x .

Η κβαντική μηχανική δύναται να προβλέψει την κατανομή πιθανότητας $P(a)$ αν δοθούν οι αρχικές συνθήκες, αλλά δεν δύναται να προβλέψει τι αποτέλεσμα θα φέρει κάθε ξεχωριστή μέτρηση (εκτός από τις ειδικές περιπτώσεις που δεν έχουμε διασπορά, οπότε όλες οι μετρήσεις δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα). Απ' όσο μπορούμε να γνωρίζουμε, δεν υπάρχει μέθοδος πρόβλεψης για τις μεμονωμένες μετρήσεις: η κβαντική μηχανική αποτελεί ό,τι καλύτερο μπορούμε να καταφέρουμε σε επίπεδο πρόβλεψης, δηλαδή να υπολογίσουμε κατανομές πιθανότητας των πειραματικών αποτελεσμάτων.

Ας εστιάσουμε για απλότητα στην περίπτωση ενός σωματιδίου σε κάποιο εξωτερικό πεδίο. Στην κλασική μηχανική, οι αρχικές συνθήκες, στις οποίες προετοιμάζεται πειραματικά ένα σύστημα, κωδικοποιούνται από τη θέση x και την ορμή p ενός σωματιδίου. Το σύνολο των ζευγών (x, p) αποτελούν τον χώρο των φάσεων. Λέμε ότι ένα ζεύγος (x, p) , δηλαδή ένα σημείο του χώρου των φάσεων, εκπροσωπεί μια κατάσταση του συστήματος. Η γνώση αυτής της κατάστασης επιτρέπει (α) την πρόβλεψη της κατάστασης σε οποιοδήποτε μελλοντικό χρόνο, $(x(t), p(t))$, μέσω ενός νόμου χρονικής εξέλιξης που εκφράζεται από τις εξισώσεις Hamilton, και (β) την πρόβλεψη του αποτελέσματος κάθε μέτρησης, που δίνεται ως κάποια συνάρτηση $f(x, p)$.

Στην κβαντική μηχανική, οι αρχικές συνθήκες έχουν αναγκαστικά πιο περίπλοκη έκφραση, διότι πρέπει να εμπεριέχουν όλες τις δυνατές κατανομές πιθανότητας όλων των πειραμάτων. Μαθηματικά, οι αρχικές συνθήκες κωδικοποιούνται από ένα διάνυσμα Ψ μοναδιαίου μήκους το οποίο είναι στοιχείο ενός απειροδιάστατου μιγαδικού γραμμικού χώρου Hilbert. Το Ψ αναπαριστάται ως συνάρτηση $\Psi(x)$ από το φυσικό χώρο της θέσης x στους μιγαδικούς αριθμούς και συνήθως ονομάζεται *κυματοσυνάρτηση*. Το σύνολο των συναρτήσεων Ψ περιέχει το σύνολο των αρχικών συνθηκών στις οποίες μπορεί να προετοιμαστεί πειραματικά το σύστημα και επομένως το σύνολο των καταστάσεων του συστήματος.

Η γνώση μιας κατάστασης Ψ επιτρέπει (α) την πρόβλεψη της κατάστασης σε οποιοδήποτε μελλοντικό χρόνο, $\Psi(t)$, μέσω ενός νόμου χρονικής εξέλιξης που εκφράζεται από την εξίσωση του Schrödinger, *αν δεν μεσολαβήσει μέτρηση*. Επίσης, η γνώση μιας κατάστασης Ψ επιτρέπει (β) την πρόβλεψη του στατιστικού αποτελέσματος μετρήσεων οποιουδήποτε μεγέθους, δηλαδή την κατανομή πιθανότητας $P(a)$ εάν μετρηθεί πολλές φορές κάποιο μέγεθος A ξεκινώντας κάθε φορά από την ίδια προετοιμασία. Με άλλα λόγια, η Ψ εκπροσωπεί μια συλλογή πανομοιότυπα προετοιμασμένων συστημάτων. Γνωρίζοντας την Ψ , και επιλέγοντας ένα φυσικό μέγεθος A , μπορούμε να προβλέψουμε το στατιστικό αποτέλεσμα πολλών μετρήσεων του A , μίας τέτοιας σε κάθε προετοιμασμένο σύστημα. Τέλος, η ίδια κατανομή πιθανότητας $P(a)$ μας δίνει (γ) τις πιθανές νέες αρχικές συνθήκες στις οποίες δύναται να τεθεί το σύστημα μετά από μια μέτρηση. Ωστόσο,

ο νόμος χρονικής εξέλιξης παραβιάζεται εφόσον μεσολαβήσει μια μέτρηση, καθώς τότε αλλάζει απότομα η κατάσταση σε μια νέα, την οποία μόνο στατιστικά μπορούμε να γνωρίζουμε με βάση την $P(a)$. Αυτή είναι άλλη μια ιδιαιτερότητα της κβαντικής Φυσικής, η οποία μερικές φορές εκφράζεται λέγοντας ότι η μέτρηση υποχρεωτικά επηρεάζει το σύστημα.

Η κβαντική μηχανική χτίζεται πάνω σε δύο θεμελιώδεις έννοιες, τη γραμμικότητα και την αβεβαιότητα. Η γραμμικότητα σημαίνει πως, δεδομένων δύο καταστάσεων ενός συστήματος, Ψ_1 και Ψ_2 , υπάρχουν όλες οι καταστάσεις της μορφής $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$, όπου c_1 και c_2 μιγαδικοί αριθμοί. Η $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$, ως μαθηματικό αντικείμενο, αντιστοιχεί σε αρχικές συνθήκες σε κάποιο πείραμα. Επειδή ως μαθηματικό αντικείμενο είναι διαφορετική και από την Ψ_1 και από την Ψ_2 , οι αρχικές συνθήκες που αντιστοιχούν στην $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ είναι διαφορετικές από εκείνες των δύο συστατικών της. Η κβαντική μηχανική δεν μας δίνει τις οδηγίες για να επιτύχουμε στο πείραμα την $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$, παρά μόνον αξιώνει θεωρητικά την ύπαρξή της. Ενδέχεται σε κάποιες περιπτώσεις να είναι εύκολη η πειραματική υλοποίηση αυτών των αρχικών συνθηκών. Π.χ. στην περίπτωση που η Ψ_1 αντιστοιχεί στην αρχική συνθήκη προσανατολισμού της στροφορμής ενός ατόμου στον άξονα z και η Ψ_2 στον άξονα x , η $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ αντιστοιχεί στην αρχική συνθήκη προσανατολισμού της στροφορμής σε άλλον άξονα ο οποίος υπολογίζεται από τις τιμές των c_1 και c_2 . Σε άλλες περιπτώσεις, ενδέχεται να είναι δύσκολη ακόμα και η κατ' αρχήν επινόηση ενός πειράματος που να ανταποκρίνεται στην αρχική συνθήκη $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$. Αλλά πάντα στη Φυσική ο μαθηματικός φορμαλισμός των καταστάσεων υπερβαίνει τις πρακτικές δυνατότητες πειραματικής υλοποίησης.

Η έννοια της αβεβαιότητας συνδέεται με την απαίτηση, για κάθε κυματοσυνάρτηση Ψ (και ως εκ τούτου για κάθε μορφή αρχικών συνθηκών που υλοποιούνται πειραματικά), να υπάρχουν φυσικά μεγέθη των οποίων η μέτρηση να δίνει μη μηδενική διασπορά—ως εκ τούτου και αβεβαιότητα στο αποτέλεσμα της κάθε μέτρησης. Οι έννοιες της γραμμικότητας και της αβεβαιότητας συνδέονται μεταξύ τους και μπορεί κανείς να χτίσει τη μία στη βάση της άλλης.

2 Οι φυσικές καταστάσεις στην κβαντική μηχανική

Θα ξεκινήσουμε τη συζήτηση των καταστάσεων στην κβαντική μηχανική με ένα παράδειγμα. Έστω ένα σωματίδιο που κινείται σε μια χωρική διάσταση, $x \in \mathbb{R}$. Οι κβαντικές καταστάσεις του συστήματος είναι μιγαδικές συναρτήσεις, $\Psi(x) \in \mathbb{C}$, οι οποίες ονομάζονται *κυματοσυναρτήσεις* και ικανοποιούν τη συνθήκη κανονικοποίησης

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

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

Ίσως το απλούστερο φυσικό μέγεθος που προκύπτει από την κυματοσυνάρτηση είναι η *κατανομή πιθανότητας* (για την ακρίβεια, *πυκνότητα πιθανότητας*) $\rho(x)$ να βρεθεί το σωματίδιο στη θέση x :

$$\rho(x) = \Psi^*(x) \Psi(x) = |\Psi(x)|^2. \quad (2)$$

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

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

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

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

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

Πώς μπορούν να υπολογιστούν άλλες ποσότητες με βάση την Ψ ; Σε κάθε φυσικό

⁽²⁾Είναι δυνατόν να κατασκευαστεί κυματοσυνάρτηση επαρκώς εντοπισμένη, ώστε να αναπαριστά πρακτική βεβαιότητα (πιθανότητα 1) εύρεσης κάθε σωματιδίου της συλλογής στην ίδια θέση x ; Ναι, είναι δυνατόν, ως όριο εντοπισμένων κυματοσυναρτήσεων, εφόσον το σύστημα προετοιμαστεί κατάλληλα. Θα συζητηθεί στο εδάφιο 3.8.

μέγεθος αντιστοιχεί ένας τελεστής που μετασχηματίζει την κυματοσυνάρτηση σε μια άλλη. Ας πάρουμε, για παράδειγμα, την ορμή. Συμβολίζουμε τον τελεστή της ορμής με $\hat{p}$. Για λόγους που εν μέρει αναλύονται στο εδάφιο 5.1, ο ορισμός του είναι

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

δηλ. συμπίπτει με την παράγωγο της κυματοσυνάρτησης επί $-i\hbar$, όπου $\hbar = h/2\pi$ με h τη σταθερά του Planck.⁽³⁾ Σύμφωνα με αυτό τον ορισμό, ο τελεστής ορμής μετασχηματίζει την Ψ σε μια άλλη κυματοσυνάρτηση, την $\Phi(x) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$. Η κβαντική θεωρία μάς υπαγορεύει ότι η μέση τιμή των μετρήσεων της ορμής στη συλλογή που αντιστοιχεί στην Ψ είναι

$$\langle \hat{p} \rangle_{\Psi} = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \hat{p} \Psi(x) dx \quad (5)$$

$$= -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx \quad (6)$$

με προφανή συμβολισμό στο αριστερό μέλος.

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

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

σε συμφωνία και με τον τύπο (2).

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

Ωστόσο, κάθε μέτρηση φυσικού μεγέθους πρέπει να δίνει ως τιμή έναν πραγματικό αριθμό, επομένως και η μέση τιμή πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός. Αυτό εξασφα-

⁽³⁾Το $\hbar \approx 1,055 \times 10^{-34}$ Js είναι μια φυσική σταθερά εξίσου θεμελιώδης με την ταχύτητα του φωτός στο κενό c . Όπως η θεωρία της σχετικότητας αποκαλύπτει τη σύνδεση του χώρου με το χρόνο μέσω του συντελεστή αναλογίας c , έτσι και η κβαντική θεωρία αποκαλύπτει τη σύνδεση χρόνου-ενέργειας, ή, ακριβέστερα, συχνότητας-ενέργειας, μέσω του συντελεστή αναλογίας $\hbar$.

λίζεται από την εξής απαίτηση της κβαντικής θεωρίας: οι τελεστές που αντιστοιχούν σε μετρήσιμα μεγέθη πρέπει να είναι *ερμιτιανοί* (*hermitian*). Εξ ορισμού, ένας τελεστής $\hat{A}$ λέγεται ερμιτιανός, εάν πληροί τις ακόλουθες δύο προϋποθέσεις. Πρώτον, να είναι γραμμικός, δηλαδή, για κυματοσυναρτήσεις Ψ_1 και Ψ_2 και (μιγαδικούς) αριθμούς c_1 και c_2 , να ισχύει

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

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

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

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

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

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

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

δηλαδή η τιμή του αριστερού μέλους ισούται με το μιγαδικό συζυγές της, επομένως είναι πραγματική. Εδώ χρησιμοποιήσαμε παραγοντική ολοκλήρωση και το γεγονός ότι οι κυματοσυναρτήσεις μηδενίζονται στο $x \rightarrow \pm\infty$.⁽⁴⁾

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

$$(\Psi, \Phi) \equiv \int \Psi^*(x) \Phi(x) dx. \quad (12)$$

Π.χ., $(\Psi, \hat{A} \Psi) \equiv \int \Psi^*(x) \hat{A} \Psi(x) dx$. Είναι εύκολο να αποδειχθούν οι ακόλουθες ιδι-

⁽⁴⁾ Αυτό αποτελεί εύλογη φυσική απαίτηση, διότι το $|\Psi(x)|^2$ είναι πυκνότητα πιθανότητας. Είναι αδύνατον να πετύχει κανείς πειραματικά μια πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση ενός σωματιδίου, η οποία να μη μηδενίζεται στο άπειρο. Τυπικά, όμως, είναι δυνατόν να κατασκευάσει κανείς τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση η οποία να μην ικανοποιεί αυτή την απαίτηση. Για τέτοιες προβληματικές συναρτήσεις, η απόδειξη αποτυγχάνει.

ότητες του εσωτερικού γινομένου:⁽⁵⁾

$$(\Psi, \Phi) = (\Phi, \Psi)^*$$

$$(\Psi, c_1 \Phi_1 + c_2 \Phi_2) = c_1 (\Psi, \Phi_1) + c_2 (\Psi, \Phi_2) \text{ (γραμμικότητα ως προς το 2° όρισμα)} \quad (13)$$

$$(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2, \Phi) = c_1^* (\Psi_1, \Phi) + c_2^* (\Psi_2, \Phi) \text{ (αντιγραμμικότητα ως προς το 1° όρισμα)}$$

Η ποσότητα $\|\Psi\| = \sqrt{(\Psi, \Psi)}$ ονομάζεται *νόρμα* της Ψ και είναι προδήλως θετική, αν $\Psi \neq 0$, ή μηδέν, αν $\Psi(x) = 0$ (σε όλο το πεδίο ορισμού πλην ενδεχομένως διακριτών σημείων). Δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ και Φ ονομάζονται *ορθογώνιες*, αν $(\Psi, \Phi) = 0$. Επίσης, ισχύει η ακόλουθη *ανισότητα Cauchy-Schwarz*:⁽⁶⁾

$$(\Phi, \Phi)(\Psi, \Psi) \geq |(\Phi, \Psi)|^2 \quad (14)$$

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

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

$$(\Psi, \hat{A} \Psi) \in \mathbb{R} \quad (15)$$

$$(\Phi, \hat{A} \Psi) = (\hat{A} \Phi, \Psi), \quad (16)$$

για κάθε Φ και Ψ στο πεδίο ορισμού. Η πρώτη ιδιότητα είναι συντομογραφία της εξ. (9) του ορισμού, ενώ η δεύτερη προκύπτει εύκολα από τον ορισμό.⁽⁷⁾

⁽⁵⁾Πρόβλημα 3.1.

⁽⁶⁾Πρόβλημα 3.1.

⁽⁷⁾Πρόβλημα 3.2.

3 Η μέτρηση στην κβαντική μηχανική

Έστω ένα σύστημα στο οποίο γίνεται μια σειρά από μετρήσεις, και το οποίο προετοιμάζουμε πριν από κάθε μέτρηση με τον ίδιο τρόπο.⁽⁸⁾ Όπως είπαμε, η πανομοιότυπη προετοιμασία μάς δίνει μια συλλογή που εκφράζεται, μαθηματικά, με την κυματοσυνάρτηση Ψ . Αυτή περιέχει, κωδικοποιημένη, την κατανομή πιθανότητας για τις τιμές όλων των παρατηρήσιμων μεγεθών. Ας υποθέσουμε ότι μετράμε κάθε φορά το ίδιο μέγεθος. Οι τιμές των μετρήσεων θα παρουσιάζουν, εν γένει, μια διασπορά (πλην ειδικών περιπτώσεων που θα συζητηθούν πιο κάτω). Κάθε μέτρηση θα δώσει, προφανώς, μια μόνο τιμή, αλλά οποιαδήποτε μεμονωμένη τιμή δεν είναι δυνατόν να προβλεφθεί με βάση την Ψ . Μόνο η κατανομή πιθανότητας μπορεί να προβλεφθεί (δηλαδή, η σχετική συχνότητα που παρουσιάζει κάθε τιμή στο σύνολο των μετρήσεων).

Τα μετρήσιμα μεγέθη αναπαριστούνται από ερμιτιανούς τελεστές. Αν $\hat{A}$ ένας τέτοιος τελεστής, και $\Psi(x)$ η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην συλλογή, τότε η μέση τιμή και οι ροπές της κατανομής εκφράζονται από:⁽⁹⁾

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

Η n -οστή δύναμη ενός ερμιτιανού τελεστή επιδέχεται την ακόλουθη φυσική ερμηνεία: πραγματοποιούμε μια μέτρηση και παίρνουμε την n -οστή δύναμη της μετρημένης τιμής, $a \rightarrow a^n$. Επαναλαμβάνουμε πολλές φορές με πανομοιότυπη προετοιμασία του συστήματος, ώστε να αποκτήσουμε στατιστική εντός της συλλογής Ψ . Τότε, ο μέσος όρος των a^n αναπαριστάται, μαθηματικά, από το $(\Psi, \hat{A}^n \Psi)$.⁽¹⁰⁾

Οι παραπάνω εξισώσεις καταδεικνύουν ότι μια ολική φάση, $e^{i\gamma}$ (με $\gamma \in \mathbb{R}$ μια σταθερά), δεν παίζει κανένα ρόλο στα παρατηρήσιμα μεγέθη. Εάν κάνουμε την αλλαγή

⁽⁸⁾Ισοδύναμα, ένα σύνολο από πανομοιότυπα συστήματα, προετοιμασμένα κάθε φορά με τον ίδιο τρόπο.

⁽⁹⁾Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, δηλ. $\forall \Psi, (\Psi, \hat{A} \Psi) \in \mathbb{R}$, τότε και οι δυνάμεις $\hat{A}^n$ είναι ερμιτιανοί. Αυτό φαίνεται ως εξής: Για $n = 2$, $(\Psi, \hat{A}^2 \Psi) = (\Psi, \hat{A} \hat{A} \Psi) = (\hat{A} \Psi, \hat{A} \Psi) = \|\hat{A} \Psi\|^2 \in \mathbb{R}$, άρα ο $\hat{A}^2$ είναι ερμιτιανός. Για $n = 3$, $(\Psi, \hat{A}^3 \Psi) = (\hat{A} \Psi, \hat{A}[\hat{A} \Psi]) \in \mathbb{R}$ (αφού ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός), άρα και ο $\hat{A}^3$ είναι ερμιτιανός. Για ανώτερες δυνάμεις προχωρούμε με επαγωγή, κατ' αναλογία με την περίπτωση $n = 2$ για τις άρτιες δυνάμεις, και με την περίπτωση $n = 3$ για τις περιττές δυνάμεις. (Πρόβλημα 3.)

⁽¹⁰⁾Με ανάλογο τρόπο, αν $f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots$ μια αναλυτική συνάρτηση, ορίζουμε τον τελεστή $\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1 \hat{A} + c_2 \hat{A}^2 + \dots$. Αν οι συντελεστές c_n είναι πραγματικοί, και αν $\hat{A}$ ερμιτιανός, τότε και ο $\hat{f}(\hat{A})$ είναι ερμιτιανός και επιδέχεται την ακόλουθη ερμηνεία: πραγματοποιούμε μια μέτρηση, παίρνουμε αποτέλεσμα a , και υπολογίζουμε την τιμή $f(a)$. Επαναλαμβάνουμε πολλές φορές με πανομοιότυπη προετοιμασία του συστήματος, ώστε να αποκτήσουμε στατιστική εντός της συλλογής Ψ . Ο μέσος όρος των $f(a)$ αναπαριστάται, μαθηματικά, από το $(\Psi, \hat{f}(\hat{A}) \Psi)$.

$\Psi(x) \rightarrow \Psi(x)e^{i\gamma}$, τότε $\hat{A}^n \Psi(x) \rightarrow \hat{A}^n \Psi(x)e^{i\gamma} = e^{i\gamma} \hat{A}^n \Psi(x)$ λόγω γραμμικότητας του $\hat{A}$ και άρα του $\hat{A}^n$, και εφόσον το γ είναι σταθερά. Επίσης, $\Psi^*(x) \rightarrow \Psi^*(x)e^{-i\gamma}$. Άρα οι παράγοντες $e^{i\gamma}e^{-i\gamma}$ αλληλοαναιρούνται στο τελικό αποτέλεσμα των εξ. (17).⁽¹¹⁾

Εφαρμόζοντας τις εξ. (17) για τη θέση λαμβάνουμε

$$\langle \hat{x} \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) x \Psi(x) dx \quad (18)$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx \quad (19)$$

κ.ο.κ., ενώ για την ορμή

$$\langle \hat{p} \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \hat{p} \Psi(x) dx = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx \quad (20)$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \hat{p}^2 \Psi(x) dx = (-i\hbar)^2 \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} dx \quad (21)$$

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

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

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

για τυχαία Ψ . Σε μια γεωμετρική ερμηνεία του χώρου καταστάσεων ως διανυσματικού χώρου, την οποία θα συζητήσουμε στο κεφάλαιο 4, αυτή η πράξη δίνει την προβολή της κυματοσυνάρτησης Ψ πάνω στη Φ . Οι προβολικοί τελεστές έχουν την ιδιότητα $\hat{P}_\Phi^2 = \hat{P}_\Phi$, δηλαδή η απλή είτε πολλαπλή δράση τους έχει το ίδιο αποτέλεσμα. Είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι πρόκειται για ερμιτιανούς τελεστές με ιδιοτιμές 0 ή 1.⁽¹²⁾ Επιδέχονται την ακόλουθη ερμηνεία μετρήσιμου μεγέθους: Εξετάζουμε με μια μέτρηση αν το σύστημα θα βρεθεί στην κατάσταση Φ . αν ναι, δίνουμε ως μετρημένη τιμή το 1, διαφορετικά το 0. Η έννοια του προβολικού τελεστή γενικεύεται και στην προβολή σε υπόχωρους περισσότερων διαστάσεων: αν Φ_i , $i = 1, 2, \dots$ κυματοσυναρτήσεις ορθογώνιες μεταξύ τους, τότε σε αυτό το σύνολο αντιστοιχεί ο προβολικός τελεστής $\hat{P} = \sum_i \hat{P}_{\Phi_i}$ με $\hat{P} \Psi = (\Phi_1, \Psi) \Phi_1 + (\Phi_2, \Psi) \Phi_2 + \dots$.

⁽¹¹⁾ Η σταθερά $e^{i\gamma}$ έχει μέτρο τη μονάδα, ώστε δεν επηρεάζει τη νόρμα $\|\Psi\|$.

⁽¹²⁾ Πρόβλημα 4.

3.1 Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές

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

$$\hat{A} \Psi_{\hat{A}} = a \Psi_{\hat{A}}, \quad (23)$$

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

Η εξ. (23) μας δίνει αμέσως $(\Psi_{\hat{A}}, \hat{A} \Psi_{\hat{A}}) = (\Psi_{\hat{A}}, a \Psi_{\hat{A}}) = a (\Psi_{\hat{A}}, \Psi_{\hat{A}}) = a$ (λόγω κανονικοποίησης). Επειδή ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, το αριστερό μέλος πρέπει να είναι πραγματικό, άρα $a \in \mathbb{R}$. Συμπεραίνουμε ότι *οι ιδιοτιμές των ερμιτιανών τελεστών είναι πραγματικές*.⁽¹³⁾ Οι ιδιοτιμές έχουν και μια επιπλέον εξέχουσα θέση στη θεωρία μέτρησης της χβαντικής Φυσικής: *κάθε μεμονωμένη μέτρηση δίνει ως τιμή μια ιδιοτιμή του τελεστή του μετρούμενου μεγέθους*.⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾ Επομένως, ναι μεν δεν μπορούμε εν γένει να προβλέψουμε το αποτέλεσμα κάθε μεμονωμένης μέτρησης, αλλά γνωρίζουμε ότι πρέπει να ανήκει στο σύνολο ιδιοτιμών.⁽¹⁶⁾

Ας εξετάσουμε τη διασπορά τιμών, όταν το σύστημα βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$. Θυμίζουμε ότι η διασπορά ποσοτικοποιείται από την τυπική απόλιση (ΔA) . Για

⁽¹³⁾Ιδιοτιμές μπορούν να έχουν και μη ερμιτιανοί τελεστές, αλλά αυτές δεν είναι κατ' ανάγκη πραγματικές.

⁽¹⁴⁾Στο εδάφιο 3.4 θα δούμε ότι αυτή η απαίτηση προκύπτει και από το αξίωμα προβολής.

⁽¹⁵⁾Υπάρχουν ερμιτιανοί τελεστές, οι οποίοι δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές, αλλά χαρακτηρίζονται από ένα συνεχές φάσμα τιμών που μπορούν να λαμβάνουν τα αντίστοιχα μεγέθη. Για αυτούς μπορούμε να βρούμε καταστάσεις που προσεγγίζουν την ιδιότητα της ιδιοκατάστασης με αυθαίρετη ακρίβεια. Βλ. τη συζήτηση στο εδάφιο 3.8.

⁽¹⁶⁾Για παράδειγμα, το σπιν του ηλεκτρονίου έχει μόνο δύο ιδιοτιμές: $\pm \hbar/2$. Μια σειρά μετρήσεων θα εμφανίσει μια κατανομή αυτών των δυό τιμών: ποτέ δεν θα υπάρξει μετρημένη τιμή π.χ. 0, αν και η μέση τιμή των μετρήσεων ενδέχεται, αναλόγως την κατάσταση, να είναι οποιαδήποτε στο διάστημα $[-\hbar/2, \hbar/2]$.

τυχαία κατάσταση Ψ έχουμε (με το σύμβολο $\langle \dots \rangle$ υπονοούμε μέσο όρο στην Ψ , $\langle \dots \rangle_\Psi$)

$$(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \quad (\text{από ορισμό}) \quad (24)$$

$$= \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle \quad (\text{ταυτοτικά})$$

$$= \langle \hat{A}^2 \rangle - 2\langle \hat{A}\langle \hat{A} \rangle \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \quad (\text{γραμμικότητα μέσης τιμής})$$

$$= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \quad (\text{το } \langle \hat{A} \rangle \text{ είναι αριθμός})$$

$$= (\Psi, \hat{A}^2 \Psi) - (\Psi, \hat{A} \Psi)^2 \quad (\text{από εξ. 17}) \quad (25)$$

Στην ειδική περίπτωση που έχουμε ιδιοκατάσταση, έστω $\Psi_{\hat{A}}$, με ιδιοτιμή a , παρατηρούμε ότι $\hat{A}^2 \Psi_{\hat{A}} = \hat{A} \hat{A} \Psi_{\hat{A}} = \hat{A} a \Psi_{\hat{A}} = a \hat{A} \Psi_{\hat{A}} = a^2 \Psi_{\hat{A}}$.⁽¹⁷⁾ Εφαρμογή στην (25) δίνει $(\Delta A)^2 = a^2 - a^2 = 0$ (λαμβάνοντας υπ' όψη και την κανονικοποίηση $(\Psi, \Psi) = 1$).

Έστω ότι ένα μέγεθος έχει μηδενική διασπορά, $(\Delta A)^2 = 0$. Για ευκολία, εξετάζουμε το μέγεθος $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, το οποίο έχει την ίδια τυπική απόκλιση με το $\hat{A}$, αλλά μέση τιμή μηδέν.⁽¹⁸⁾ Τότε: $0 = (\Delta A')^2 = (\Psi, \hat{A}'^2 \Psi) = (\hat{A}' \Psi, \hat{A}' \Psi) = \|\hat{A}' \Psi\|^2$,⁽¹⁹⁾ δηλ. η νόρμα $\|\hat{A}' \Psi\|$ μηδενίζεται, το οποίο είναι δυνατόν μόνον αν $\hat{A}' \Psi = 0$. Επομένως, η Ψ πρέπει να είναι ιδιοκατάσταση του $\hat{A}'$ με ιδιοτιμή μηδέν: $0 = \hat{A}' \Psi = \hat{A} \Psi - \langle \hat{A} \rangle \Psi$, άρα $\hat{A} \Psi = \langle \hat{A} \rangle \Psi$. Δηλαδή, η Ψ είναι ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή $a = \langle \hat{A} \rangle$.

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

Δίνουμε, τέλος, μια ιδιότητα των ερμιτιανών τελεστών: *Ιδιοκαταστάσεις ερμιτιανού τελεστή που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.* Η απόδειξη είναι απλή: έστω $\hat{A}$ ερμιτιανός τελεστής και Ψ_1, Ψ_2 ιδιοκαταστάσεις του με ιδιοτιμές a_1, a_2 αντίστοιχα. Τότε: $(\Psi_1, \hat{A} \Psi_2) = (\Psi_1, a_2 \Psi_2) = a_2(\Psi_1, \Psi_2)$. Επίσης: $(\Psi_1, \hat{A} \Psi_2) = (\hat{A} \Psi_1, \Psi_2) = (a_1 \Psi_1, \Psi_2) = a_1(\Psi_1, \Psi_2)$ (το πρώτο βήμα προκύπτει από την ιδιότητα (16) των ερμιτιανών τελεστών και στο τελευταίο βήμα εκμεταλλευθήκαμε το γεγονός ότι $a_2 \in \mathbb{R}$). Άρα, $a_2(\Psi_1, \Psi_2) = a_1(\Psi_1, \Psi_2)$. Αν $a_1 \neq a_2$, τότε, αναγκαστικά, $(\Psi_1, \Psi_2) = 0$, δηλ. οι Ψ_1, Ψ_2 είναι ορθογώνιες.

3.2 Προετοιμασία κατάστασης και φιλτράρισμα

Ποιου είδους πειραματικές διατάξεις παράγουν συλλογές που αντιστοιχούν σε ιδιοκαταστάσεις τελεστών; Τα πειράματα αυτά πρέπει να κάνουν ένα είδος διαλογής, ή φιλτράρισματος, μιας αρχικής συλλογής, επιλέγοντας ένα κατάλληλο υποσύνολο συστημάτων

⁽¹⁷⁾Γενικά, $\hat{A}^n \Psi_{\hat{A}} = a^n \Psi_{\hat{A}}$, όπως προκύπτει με επαγωγή.

⁽¹⁸⁾Πρόβλημα 6.

⁽¹⁹⁾Στο δεύτερο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα των ερμιτιανών τελεστών $(\Psi, \hat{A} \Phi) = (\hat{A} \Psi, \Phi)$ (εξ. 16) με $\Phi = \hat{A} \Psi$.

ως νέα συλλογή. Παραδείγματα:

- Ηλεκτρόνια εκπέμπονται από μια πηγή, τοποθετημένη στο χώρο σε $z < 0$, προς μια μεμβράνη που τα σταματά στο επίπεδο xy (δηλ. $z = 0$). Ανοίγουμε μια μικρή οπή στη μεμβράνη στο σημείο $x = y = 0$, η οποία επιτρέπει στα ηλεκτρόνια να διέλθουν. Όσα περάσουν την οπή, βρίσκονται, αμέσως αφού περάσουν ($z > 0$ αλλά πολύ μικρό), σε κατάσταση που είναι με πολύ καλή προσέγγιση ιδιοκατάσταση των τελεστών θέσης $\hat{x}$ και $\hat{y}$.
- Ηλεκτρόνια εκπέμπονται ευθύγραμμα από μια πηγή και διέρχονται μέσα από χωρικά εντοπισμένο μαγνητικό πεδίο. Λόγω της δύναμης Lorentz, αποκλίνουν της πορείας τους, με τη γωνία απόκλισης να εξαρτάται από το μέτρο της ορμής τους (δηλ. την κινητική τους ενέργεια). Επιλέγοντας τα ηλεκτρόνια που έχουν αποκλίνει υπό συγκεκριμένη γωνία (και σταματώντας τα υπόλοιπα), έχουμε μια νέα συλλογή, η οποία αντιστοιχεί με πολύ καλή προσέγγιση σε ιδιοκατάσταση του τελεστή της κινητικής ενέργειας.
- Άτομα (ηλεκτρικά ουδέτερα) με εσωτερική μαγνητική ροπή διέρχονται από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο. Το πεδίο διασπά τη δέσμη των ατόμων και τα ανακατευθύνει, ανάλογα με τη σχετική κατεύθυνση της μαγνητικής ροπής προς την κατεύθυνση του πεδίου. Επιλέγοντας δέσμη συγκεκριμένης κατεύθυνσης, έχουμε μια νέα συλλογή, που αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση του τελεστή της μαγνητικής ροπής.⁽²⁰⁾
- Άτομα ψύχονται σε πολύ χαμηλή θερμοκρασία και αφήνονται αρκετό χρόνο, ώστε να απωλέσουν μέσω ακτινοβολίας την όποια ενέργεια διεγερμένων στιβάδων. Στο τέλος της διαδικασίας, έχουμε μια συλλογή ατόμων που αντιστοιχεί στην ιδιοκατάσταση της χαμηλότερης δυνατής ενέργειας.

3.3 Συμβατά και ασύμβατα μεγέθη

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

⁽²⁰⁾Ο τελεστής της μαγνητικής ροπής προκύπτει από συνδυασμό του τελεστή της τροχιακής στροφορμής, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, και της στροφορμής σπιν. Στην πράξη συνεισφέρουν εδώ μόνο τα ηλεκτρόνια και όχι οι πυρήνες. Οι Otto Stern και Walter Gerlach χρησιμοποίησαν το 1922 μια τέτοια διάταξη για να αποδείξουν την κβάντωση της στροφορμής.

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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (26)$$

δηλ. $[\hat{x}, \hat{p}]\Psi = i\hbar\Psi$ για κάθε Ψ .⁽²¹⁾ Ζεύγη μεγεθών, που ικανοποιούν τη σχέση $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$, ονομάζονται *κανονικά συζυγή* (*canonical conjugate*). Άλλα παραδείγματα ζευγών που δεν έχουν ούτε μια κοινή ιδιοκατάσταση (χωρίς, απαραίτητα, να είναι κανονικά συζυγή) είναι η θέση και δυνάμεις της ορμής (π.χ., θέση και κινητική ενέργεια), ή, γενικότερα, συναρτήσεις της θέσης και συναρτήσεις της ορμής, και ανά δύο οι συνιστώσες του διανύσματος της στροφορμής (πλην περίπτωσης η κυματοσυνάρτηση να αντιστοιχεί σε μέτρο της στροφορμής μηδέν).

Δυο μεγέθη, που αντιπροσωπεύονται από μετατιθέμενους ερμιτιανούς τελεστές κατά δράση τους σε όλες τις κυματοσυναρτήσεις (δηλ. $[\hat{A}, \hat{B}]\Psi = 0$, $\forall\Psi$), ονομάζονται *συμβατά* (*compatible*), σε διαφορετική περίπτωση ονομάζονται *ασύμβατα* (*incompatible*). (Είναι δυνατόν, δύο ασύμβατα μεγέθη $\hat{A}$ και $\hat{B}$ να έχουν κάποιες κοινές ιδιοκαταστάσεις, έστω Ψ . Τότε, η δράση του μεταθέτη τους σε αυτές μηδενίζεται: $[\hat{A}, \hat{B}]\Psi = 0$, αλλά θα υπάρχουν άλλες, έστω Φ για τις οποίες $[\hat{A}, \hat{B}]\Phi \neq 0$.) Ένας φυσικός ορισμός των συμβατών μεγεθών δίνεται μετά το αξίωμα προβολής, στο εδάφιο 3.5.

Λόγω της ύπαρξης ασύμβατων μεγεθών, παρουσιάζεται στην κβαντική Φυσική η εξής ιδιομορφία, η οποία είναι απύσχα στην κλασική Φυσική. Έστω ότι προετοιμάζουμε το σύστημα (π.χ. μέσω φιλτραρίσματος) σε μια ιδιοκατάσταση $\Psi_{\hat{A}}$ του μεγέθους $\hat{A}$. Τότε, μπορούμε να βρούμε μέγεθος ασύμβατο με το $\hat{A}$, δηλαδή τέτοιο ώστε οι μετρήσεις του να παρουσιάζουν υποχρεωτικά διασπορά. Η διασπορά λόγω ασυμβατότητας δεν σχετίζεται με την ακρίβεια του οργάνου της μέτρησης, ούτε με την ακρίβεια της προετοιμασίας της συλλογής. Στην κλασική Φυσική δεχόμαστε ως αξίωμα ότι μπορούμε να προετοιμάσουμε ένα σύστημα με επαρκή ακρίβεια, και επιπρόσθετα να έχουμε επαρκή ακρίβεια στη μέτρηση, ώστε η διασπορά να καθίσταται αυθαίρετα μικρή, ή και να μηδενίζεται. Στην κβαντική Φυσική, αυτό είναι αδύνατον μεταξύ ασύμβατων μεγεθών, των οποίων την ύπαρξη δεχόμαστε, κατ' ουσίαν, αξιωματικά.

Γενικά, για οποιεσδήποτε δύο διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις δεν είναι ορθογώνιες

⁽²¹⁾ Έχουμε $[\hat{x}, \hat{p}]\Psi = \hat{x}(\hat{p}\Psi) - \hat{p}(\hat{x}\Psi) = -i\hbar x(\partial\Psi/\partial x) + i\hbar \partial(x\Psi)/\partial x = i\hbar(-x\partial\Psi/\partial x + \Psi + x\partial\Psi/\partial x) = i\hbar\Psi$, για κάθε διαφορίσιμη Ψ .

μεταξύ τους (δηλ. $1 \neq |(\Phi, \Psi)| \neq 0$), οι αντίστοιχοι προβολικοί τελεστές αντιστοιχούν σε ασύμβατα μεγέθη. Αυτό προκύπτει από τη δράση του μεταθέτη $[\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]$ είτε στην Ψ είτε στη Φ .⁽²²⁾

Η ύπαρξη ασύμβατων μεγεθών στην κβαντική Φυσική επάγεται απ' ευθείας από την αρχή της επαλληλίας, χάρη στην οποία μπορούμε να κατασκευάσουμε ζεύγος μη ορθογώνιων κυματοσυναρτήσεων από οποιοδήποτε ζεύγος κυματοσυναρτήσεων, αρκεί αυτές είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Έστω Ψ_1 και Ψ_2 δύο κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές συλλογές (δηλ., δεν είναι η μια πολλαπλάσιο της άλλης: δεν υπάρχει σταθερά c , τέτοια ώστε $\Psi_1 = c\Psi_2$). Κατασκευάζουμε τώρα, μέσω επαλληλίας, μια νέα κυματοσυνάρτηση η οποία να αδυνατεί να είναι ταυτόχρονα ορθογώνια και στην Ψ_1 και στην Ψ_2 : $\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$, με $a_1 \neq 0 \neq a_2$ και $|a_1|^2 + |a_2|^2 + 2\text{Re}[a_1^*a_2(\Psi_1, \Psi_2)] = 1$ ώστε να είναι κανονικοποιημένη [π.χ., αν οι Ψ_1 και Ψ_2 είναι ορθογώνιες, $\Phi = (1/\sqrt{2})\Psi_1 + (1/\sqrt{2})\Psi_2$]. Τότε, ο προβολικός τελεστής της Φ είναι μέγεθος ασύμβατο είτε με τον προβολικό τελεστή της Ψ_1 είτε με εκείνον της Ψ_2 είτε και με τους δύο.⁽²³⁾

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

3.4 Το αξίωμα προβολής

Ας συζητήσουμε τώρα τη διαδικασία μέτρησης. Αναφερόμαστε σε μετρήσεις οι οποίες δεν καταστρέφουν το σύστημα.⁽²⁴⁾ Δεχόμαστε ότι, κατά τη διάρκεια της μέτρησης, το μετρούμενο σύστημα αλληλεπιδρά με τη μετρητική συσκευή, η οποία είναι ένα δεύτερο σύστημα. Στο τέλος της διαδικασίας, η αλληλεπίδραση σταματά, και η μετρητική συσκευή δείχνει μια τιμή (π.χ. μέσω της θέσης ενός δείκτη η οποία αντιστοιχεί σε

⁽²²⁾Θέτουμε $Q(x) = [\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]\Psi$ και υπολογίζουμε $(Q, Q) = |(\Phi, \Psi)|^2 - |(\Phi, \Psi)|^4 \geq 0$ [προκύπτει από την ανισότητα Cauchy-Schwarz (14) αφού $0 \leq |(\Phi, \Psi)| \leq 1$], το οποίο μηδενίζεται μόνο αν $|(\Phi, \Psi)| = 0$ ή 1, δηλ. μόνο αν οι Ψ και Φ είναι ορθογώνιες ή ταυτίζονται. (Πρόβλημα 7.)

⁽²³⁾Πρόβλημα 8.

⁽²⁴⁾Υπάρχουν και μετρήσεις που καταστρέφουν το μετρούμενο σύστημα. Π.χ., η μέτρηση της ενέργειας ενός φωτονίου γίνεται μέσω της απορρόφησής του, οπότε και το φωτόνιο καταστρέφεται.

πραγματικό αριθμό), την οποία καταγράφουμε. Ως αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας, το σύστημα ενδέχεται να αλλάξει την κατάστασή του. Συγκεκριμένα, εάν η αρχική κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί σε μέγεθος ασύμβατο με το μετρούμενο μέγεθος, τότε η κατάσταση θα αλλάξει σίγουρα: η διαδικασία της μέτρησης επηρεάζει την κατάσταση του συστήματος.

Ποια η κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά τη μέτρηση; Η κβαντική θεωρία απαντά με το αξίωμα προβολής (*projection postulate*): Δύο αλληλέπληλές μετρήσεις του ίδιου μεγέθους θα δώσουν την ίδια τιμή. Με βάση όσα είπαμε ως τώρα, αυτό σημαίνει ότι μια μέτρηση φέρνει το σύστημα σε κυματοσυνάρτηση η οποία αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση του μετρημένου μεγέθους, τέτοια ώστε να της αντιστοιχεί η μετρημένη τιμή ως ιδιοτιμή. Με άλλα λόγια, έστω μέγεθος $\hat{A}$ με ζεύγη ιδιοκατάστασης-ιδιοτιμής $\{\Psi_1, a_1\}, \{\Psi_2, a_2\}, \dots$. Έστω ότι, δεδομένης μιας προετοιμασίας της συλλογής στην κατάσταση Φ , πραγματοποιούμε μια μέτρηση του $\hat{A}$. Επαναλαμβάνοντας πολλές φορές, σε κάθε σύστημα της συλλογής, βρίσκουμε διαφορετικές τιμές $\{a_i\}$. Επιλέγοντας εκείνα τα συστήματα για τα οποία μετρήσαμε μια συγκεκριμένη τιμή, π.χ. a_1 , δημιουργούμε μια νέα συλλογή. Αν επικεντρωθούμε στη νέα συλλογή και κάνουμε αμέσως (πριν προλάβει να εξελιχθεί χρονικά η κατάσταση) δεύτερο σετ μετρήσεων του μεγέθους $\hat{A}$, τότε, σύμφωνα με το αξίωμα προβολής, θα ξαναβρούμε σε όλες τις μετρήσεις του δεύτερου σετ την τιμή a_1 χωρίς διασπορά. Σύμφωνα με το προηγούμενο εδάφιο, η απουσία διασποράς συνεπάγεται ότι η νέα συλλογή, ήδη πριν τη δεύτερη μέτρηση, βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή a_1 , δηλαδή θα αντιπροσωπεύεται από την κατάσταση Ψ_1 . Βλέπουμε ότι η μέτρηση μπορεί να ερμηνευθεί και ως διαδικασία φιλτραρίσματος της κατάστασης Ψ_1 . Η διαδικασία ονομάζεται μερικές φορές και *αναγωγή* (*reduction*) ή *κατάρρευση* (*collapse*) της κατάστασης Φ στην Ψ_1 . Η αναγωγή είναι χρονικά ασυνεχής μεταβολή της κυματοσυνάρτησης, σε αντίθεση με τη χρονική εξέλιξη που είναι συνεχής μεταβολή (βλ. κεφ. 5).

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

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

της συλλογής), δίνεται μέσω της μέσης τιμής του προβολικού τελεστή της $\Psi_{\hat{A},i}$:

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

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

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

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

Η παραπάνω παραδοχή πως η πιθανότητα μετάβασης δίνεται από την έκφραση $\langle \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \rangle_{\Phi}$ δικαιολογείται ως εξής. Η μέτρηση του προβολικού τελεστή $\hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}}$ δίνει την τιμή 1, εάν μετρηθεί τιμή a_i , οπότε και προκαλείται μετάβαση στην ιδιοκατάσταση $\Psi_{\hat{A},i}$, ή την τιμή 0, εάν μετρηθεί οποιαδήποτε άλλη τιμή, οπότε προκαλείται μετάβαση σε κατάσταση ορθογώνια στην $\Psi_{\hat{A},i}$ (θυμηθείτε ότι οι ιδιοκαταστάσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές ερμιτιανών τελεστών είναι ορθογώνιες). Η πιθανότητα P_i μετάβασης της Φ στην $\Psi_{\hat{A},i}$ και, ισοδύναμα, μέτρησης της τιμής a_i , ισούται με το κλάσμα

$$\begin{aligned}
P_i &= \frac{\text{Αριθμός των μετρήσεων του } \hat{A} \text{ που έδωσαν } a_i}{\text{Συνολικός αριθμός των μετρήσεων}} \\
&= \frac{\text{Αριθμός των μετρήσεων του } \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \text{ που έδωσαν } 1}{\text{Συνολικός αριθμός των μετρήσεων}}
\end{aligned} \tag{29}$$

$$= \frac{1 \cdot (\text{Αρ. μετρήσεων του } \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \text{ που έδωσαν } 1) + 0 \cdot (\text{Αρ. μετρήσεων του } \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \text{ που έδωσαν } 0)}{\text{Συνολικός αριθμός των μετρήσεων}}$$

Η τελευταία έκφραση δεν είναι άλλη από τη μέση τιμή $\langle \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \rangle_{\Phi}$.

Τέλος, ας δούμε το αξίωμα προβολής στην περίπτωση *εκφυλισμού*, δηλαδή δύο ή περισσότερων γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων του μετρούμενου μεγέθους $\hat{A}$, $\Psi_1, \Psi_2, \dots$, οι οποίες τυγχάνει να αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή α . Ας υποθέσουμε ότι μετράμε το μέγεθος $\hat{A}$ και βρίσκουμε α . Αυτή η πληροφορία δεν επαρκεί για να ξέρουμε σε ποια από τις $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ (ή σε ποιον γραμμικό συνδυασμό τους) βρίσκεται το

σύστημα. Τότε έχουμε ατελές φιλτράρισμα, η συλλογή που προκύπτει δεν αντιστοιχεί σε κυματοσυνάρτηση, και η μέτρηση πρέπει να συνοδευτεί από μέτρηση άλλου μεγέθους $\hat{B}$, συμβατού με το $\hat{A}$, ώστε η συλλογή να εκλεπτυνθεί περαιτέρω και να αντιστοιχεί τελικά σε κυματοσυνάρτηση. Η μέτρηση του $\hat{B}$ γίνεται στα ίδια συστήματα στα οποία μετρήθηκε το $\hat{A}$, ώστε να εφαρμοστεί εκ νέου το αξίωμα προβολής. Εντός λοιπόν αυτού του υποσυνόλου των μετρημένων συστημάτων που ήδη έδωσαν a , η μέτρηση του $\hat{B}$ θα δώσει αποτελέσματα $\beta_1, \beta_2, \dots$. Επιλέγοντας μόνο εκείνα τα συστήματα που έδωσαν π.χ. β_1 , αποκτούμε πλέον μια συλλογή η οποία δεν έχει διασπορά ούτε ως προς το $\hat{A}$ ούτε ως προς το $\hat{B}$.

Το δεύτερο μέγεθος $\hat{B}$ πρέπει να είναι συμβατό με το $\hat{A}$, ώστε η μέτρηση να μην επηρεάσει τη μετρημένη ιδιοτιμή του $\hat{A}$. Εάν το $\hat{B}$ ήταν ασύμβατο με το $\hat{A}$, τότε μια εκ νέου μέτρηση του $\hat{A}$ μετά από αυτή του $\hat{B}$ θα έδινε διασπορά. Άρα η μέτρηση του $\hat{B}$ θα μας απομάχρυνε από τις ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$. Αν όμως το $\hat{B}$ είναι συμβατό με το $\hat{A}$, δηλ. $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, η μέτρηση αφήνει τη συλλογή στο προηγούμενο σύνολο (στον υπόχωρο γραμμικών συνδυασμών) των ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{A}$ με την ίδια ιδιοτιμή a . Αυτό το ξέρουμε διότι, αν η Ψ_α ανήκει στον υπόχωρο, δηλ. $\hat{A}\Psi_\alpha = a\Psi_\alpha$, τότε η κυματοσυνάρτηση $\hat{B}\Psi_\alpha$ είναι επίσης ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή a : $\hat{A}(\hat{B}\Psi_\alpha) = \hat{B}\hat{A}\Psi_\alpha = \hat{B}a\Psi_\alpha = a(\hat{B}\Psi_\alpha)$, άρα ανήκει και αυτή στον υπόχωρο (ο υπόχωρος περιλαμβάνει όλες τις ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$ με την ίδια ιδιοτιμή a). Επομένως, το $\hat{B}$ προσφέρει την επιθυμητή εκλέπτυνση μεταξύ αυτών, αρκεί να μην είναι και αυτό εκφυλισμένο στον υπόχωρο.

Εάν υπάρχουν και εκφυλισμένες ιδιοτιμές (έστω β) του μεγέθους $\hat{B}$, τότε πρέπει να γίνει και τρίτη μέτρηση κάποιου κατάλληλου $\hat{C}$, συμβατού με τα $\hat{A}$ και $\hat{B}$, κ.ο.κ., έως ότου αρθθούν όλοι οι εκφυλισμοί. Μια οικογένεια μεγεθών που απαιτείται κατ' ελάχιστο να μετρηθούν ώστε να προκύψει κατάλληλη συλλογή που να αντιστοιχεί σε κυματοσυνάρτηση ονομάζεται *πλήρες σύστημα μετατιθέμενων μεγεθών* (*complete system of commuting observables*). Ένα παράδειγμα είναι οι ενεργειακές στάθμες του ατόμου του Υδρογόνου: η ενέργεια καθορίζεται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n , ενώ σε ιδιοτιμή ενέργειας E_n αντιστοιχούν περισσότερες καταστάσεις που διακρίνονται με βάση τη στροφορμή. Τα μετατιθέμενα μεγέθη που αποτελούν το πλήρες σύστημα σε αυτό το πρόβλημα είναι η ενέργεια, το μέτρο της στροφορμής, η συνιστώσα z της στροφορμής, και η συνιστώσα z της ιδιοστροφορμής (σπιν) του ηλεκτρονίου.

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

3.5 Φυσικός ορισμός των συμβατών μεγεθών

Η συζήτηση στο προηγούμενο εδάφιο μας οδηγεί σε μια ιδιότητα των συμβατών μεγεθών, η οποία δύναται να εκληφθεί ως λειτουργικός (δηλαδή φυσικός) ορισμός. Έστω ότι μετράμε ένα μέγεθος $\hat{A}$ σε μια συλλογή συστημάτων και βρίσκουμε την τιμή a χωρίς διασπορά. Έπειτα, μετράμε ένα μέγεθος $\hat{B}$ στα ίδια συστήματα, όπου ήδη μετρήσαμε το $\hat{A}$. Τέλος, ξαναμετράμε το $\hat{A}$. Εάν τα δύο μεγέθη είναι συμβατά, τότε θα ξαναβρούμε την προηγούμενη τιμή a χωρίς διασπορά. Γενικεύοντας, εάν επαναλάβουμε τη διαδικασία για όλες τις δυνατές τιμές του a (που αντιστοιχούν σε διαφορετικές συλλογές), και κάθε φορά η ενδιάμεση μέτρηση του $\hat{B}$ δεν δίνει διασπορά στην τελευταία μέτρηση του $\hat{A}$, τότε τα μεγέθη είναι σίγουρα συμβατά. Εννοείται ότι οι αλεπάλληλες μετρήσεις πρέπει να γίνουν χωρίς ουσιαστικά να μεσολαβήσει χρόνος.

Μετά την πρώτη μέτρηση, λόγω της απουσίας διασποράς, βρισκόμαστε είτε σε ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$ είτε σε εκφυλισμένο υπόχωρο ιδιοτιμής a . Αν το $\hat{B}$ είναι συμβατό με το $\hat{A}$, τότε η ακόλουθη μέτρηση του $\hat{B}$ ενδέχεται να έχει ή να μην έχει διασπορά, αλλά αφήνει τη συλλογή στον προηγούμενο υπόχωρο (ή στην ιδιοκατάσταση). Κατά πόσον αυτό συνέβη ή όχι, διαπιστώνεται με την τελευταία μέτρηση του $\hat{A}$ και την απουσία ή όχι διασποράς σε αυτή. Για να είναι τα δύο μεγέθη συμβατά με βεβαιότητα, πρέπει να συμβαίνουν τα προηγούμενα για κάθε δυνατή ιδιοτιμή του $\hat{A}$.

3.6 Αρχή της αβεβαιότητας

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

$$(\Delta A)_\Psi (\Delta B)_\Psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi| \quad (30)$$

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

Η απόδειξη προχωρεί σε δύο βήματα. Πρώτον, εκμεταλλευόμαστε την ανισότητα

Cauchy-Schwarz (14):

$$\begin{aligned}
(\Delta A)_\Psi^2 (\Delta B)_\Psi^2 &= \langle \hat{A}'^2 \rangle_\Psi \langle \hat{B}'^2 \rangle_\Psi \\
&= (\Psi, \hat{A}'^2 \Psi) (\Psi, \hat{B}'^2 \Psi) \\
&= (\hat{A}' \Psi, \hat{A}' \Psi) (\hat{B}' \Psi, \hat{B}' \Psi) \quad [\text{από ιδιότητα εξ. (16)}] \\
&\geq |(\hat{A}' \Psi, \hat{B}' \Psi)|^2 \quad (\text{από ανισότητα Cauchy-Schwarz}) (31)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
|(\hat{A}' \Psi, \hat{B}' \Psi)| \geq |\text{Im}z| &= \frac{1}{2}|z - z^*| \\
&= \frac{1}{2}|(\hat{A}' \Psi, \hat{B}' \Psi) - (\hat{B}' \Psi, \hat{A}' \Psi)| \\
&= \frac{1}{2}|(\Psi, \hat{A}' \hat{B}' \Psi) - (\Psi, \hat{B}' \hat{A}' \Psi)| \quad [\text{από ιδιότητα εξ. (16)}] \\
&= \frac{1}{2}|(\Psi, [\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}'] \Psi)| \quad (\text{γραμμικότητα εσωτ. γινομένου}) \\
&\equiv \frac{1}{2}|(\Psi, [\hat{A}', \hat{B}'] \Psi)| \\
&\equiv \frac{1}{2}|\langle [\hat{A}', \hat{B}'] \rangle_\Psi| \quad (32)
\end{aligned}$$

Από τις (31) και (32) προκύπτει $(\Delta A)_\Psi^2 (\Delta B)_\Psi^2 \geq \left(\frac{1}{2} |\langle [\hat{A}', \hat{B}'] \rangle_\Psi| \right)^2$, που είναι ισοδύναμη με την (30).

Η αρχή της αβεβαιότητας θέτει, λοιπόν, ένα ελάχιστο στη διασπορά δύο μεγεθών, μετρημένων σε συστήματα της ίδιας συλλογής (δηλ. σε συστήματα με πανομοιότυπη προετοιμασία).⁽²⁵⁾ Θα συζητήσουμε την ερμηνεία της αρχής στο παράδειγμα του ζεύγους μεγεθών ορμής-θέσης στον χώρο των καταστάσεων σωματιδίου σε μια διάσταση ($x \in \mathbb{R}$). Για αυτά είδαμε ότι ισχύει $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, ανεξάρτητα της κυματοσυνάρτησης στην οποία που δρουν. Επομένως, $|\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| = |i\hbar(\Psi, \Psi)| = \hbar$, ανεξάρτητα της Ψ (αρκεί $\|\Psi\| = 1$). Λαμβάνουμε τη σχέση αβεβαιότητας θέσης-ορμής:

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2}\hbar. \quad (33)$$

Αυτή η σχέση, διατυπωμένη από το Heisenberg, είναι ίσως η πιο διάσημη περίπτωση της αρχής της αβεβαιότητας. Ποια είναι η ερμηνεία της; Ξεκινάμε με μια συλλογή,

⁽²⁵⁾Πρέπει να τονίσουμε ότι δεν αναφερόμαστε σε διαδοχική μέτρηση των δύο μεγεθών στο ίδιο σύστημα: π.χ., δεν αναφερόμαστε σε μέτρηση πρώτα της θέσης και στη συνέχεια την ορμής του ίδιου ηλεκτρονίου. Αντίθετα, προετοιμάζουμε N ηλεκτρόνια με τον ίδιο τρόπο, και σε ένα υποσύνολο μετράμε τη θέση, ενώ σε άλλο υποσύνολο την ορμή.

που αναπαριστάται από κάποια κυματοσυνάρτηση Ψ . Μετράμε σε κάποια συστήματα της συλλογής τη θέση, σε κάποια άλλα συστήματα της συλλογής την ορμή (αρκετά συστήματα, και στις δύο περιπτώσεις, ώστε να έχουμε επαρκείς μετρήσεις για στατιστική). Τότε, η τυπική απόκλιση των αποτελεσμάτων στη θέση, (Δx) , και στην ορμή, (Δp) , ικανοποιούν την (33): το γινόμενο $(\Delta x)(\Delta p)$ έχει κάτω φράγμα. Εναλλακτικά, αλλά στο ίδιο πνεύμα, από μια αρχική συλλογή δημιουργούμε με φιλτράρισμα μια υποσυλλογή με τυπική απόκλιση στη θέση (Δx) . Μετράμε σε αυτή την υποσυλλογή την ορμή και βρίσκουμε την τυπική απόκλιση (Δp) . Το γινόμενο $(\Delta x)(\Delta p)$ έχει κάτω φράγμα.

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

Συνεπεία της ανισότητας (33), όσο πιο εντοπισμένη είναι η κατανομή στο ένα από τα δύο μεγέθη (θέση ή ορμή), δηλαδή, όσο πιο κοντά βρίσκεται η Ψ σε ιδιοκατάσταση ενός από τα δύο, τόσο μεγαλύτερη είναι η διασπορά στο άλλο μέγεθος (ασυμπτωτικά, αν η διασπορά του ενός γίνει απειροστά μικρή, τότε η διασπορά του άλλου απειρίζεται). Στα δύο αυτά μεγέθη δεν αντιστοιχούν ιδιοκαταστάσεις.⁽²⁶⁾ Επομένως, δεν είναι δυνατόν να μηδενιστεί κανένα από τα (Δx) και (Δp) . Ωστόσο, στη γενική περίπτωση, η σχέση απροσδιοριστίας (30) ισχύει και για μεγέθη που έχουν ιδιοκαταστάσεις. Εάν η Ψ τύχει να είναι ιδιοκατάσταση π.χ. του $\hat{A}$, τότε το γινόμενο $(\Delta A)(\Delta B) = 0$ (και, υποχρεωτικά, το δεξιό μέλος της (30) επίσης μηδενίζεται).⁽²⁷⁾ Εάν, όμως, η Ψ δεν είναι ταυτόχρονα ιδιοκατάσταση και του $\hat{B}$, τότε το (ΔB) θα είναι μη μηδενικό.

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

Το γινόμενο ερμιτιανών τελεστών $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν και μόνο αν οι $\hat{A}$ και $\hat{B}$ μετατίθενται. Για να αποδειχθεί αυτό, έστω ότι το γινόμενο $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός

⁽²⁶⁾ Βλ. συζήτηση για τα μεγέθη με συνεχές φάσμα τιμών και πρόβλημα 9.

⁽²⁷⁾ Πρόβλημα 13.

τελεστής. Η δράση του μεταθέτη σε τυχαία κυματοσυνάρτηση Φ δίνει:

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

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

$$\begin{aligned}
(\Psi, [\hat{A}, \hat{B}]\Psi) &= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi) - (\Psi, \hat{B}\hat{A}\Psi) \\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi) - (\hat{B}\Psi, \hat{A}\Psi) \quad (\text{ο } \hat{B} \text{ είναι ερμιτιανός}) \\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi) - (\hat{A}\hat{B}\Psi, \Psi) \quad (\text{ο } \hat{A} \text{ είναι ερμιτιανός}) \\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi) - (\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi)^* \\
&\equiv 2i \operatorname{Im}(\Psi, \hat{A}\hat{B}\Psi) \quad (\text{διότι } z - z^* = 2i \operatorname{Im}z, \forall z \in \mathbb{C}). \quad (34)
\end{aligned}$$

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

Από την εξίσωση (34) προκύπτει αμέσως και το εξής συμπέρασμα, το οποίο θα χρειαστούμε αργότερα: για ερμιτιανούς τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$, η ποσότητα $(\Psi, i[\hat{A}, \hat{B}]\Psi)$ είναι πάντα πραγματικός αριθμός, επομένως ο τελεστής $i[\hat{A}, \hat{B}]$ είναι ερμιτιανός.

3.8 Παράρτημα: Μεγέθη με συνεχές φάσμα τιμών

Έχουν όλοι οι ερμιτιανοί τελεστές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές; Όχι: υπάρχουν σημαντικές εξαιρέσεις. Για παράδειγμα, ο τελεστής θέσης $\hat{x}$ και ο τελεστής ορμής $\hat{p}$ (στο χώρο των κυματοσυναρτήσεων ορισμένων στο $\mathbb{R}$)⁽²⁸⁾ δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις.⁽²⁹⁾ Η διαπίστωση αυτή έχει την ακόλουθη φυσική ερμηνεία. Μεγέθη όπως η θέση, με συνεχή, αντί για διακριτή, κατανομή τιμών, δεν είναι δυνατόν να μετρηθούν με απόλυτη ακρίβεια. Οποιαδήποτε μετρητική συσκευή, όσο ακριβής και να είναι, θα δίνει τιμές a με κάποια διασπορά εντός ενός διαστήματος $[a - \delta a, a + \delta a]$, με το δa να γίνεται αυθαίρετα

⁽²⁸⁾Υπάρχουν και παραδείγματα, όπου ο τελεστής ορμής έχει ιδιοσυναρτήσεις, π.χ. για σωματίδιο περιορισμένο σε δακτύλιο με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

⁽²⁹⁾Πρόβλημα 9.

μικρό, αλλά ποτέ ακριβώς μηδέν. Όμοια, οποιαδήποτε προετοιμασία ή φιλτράρισμα μιας συλλογής θα δίνει μια αντίστοιχη διασπορά, έστω και αν αυτή γίνεται αυθαίρετα μικρή. Αυτό αντανακλάται στον αντίστοιχο ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$, ο οποίος δεν έχει ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές. Μπορεί, όμως, να κατασκευάσει κανείς κυματοσυναρτήσεις οι οποίες αντιστοιχούν σε αυθαίρετα μικρή απόκλιση γύρω από μια επιθυμητή τιμή a , και οι οποίες επέχουν, υπό αυτό το πρίσμα, ρόλο των ιδιοκαταστάσεων με ιδιοτιμή a . Ένα παράδειγμα για τον τελεστή θέσης είναι η κυματοσυνάρτηση

$$\Phi_{x_0,\eta}(x) = [\delta_\eta(x - x_0)]^{1/2} \equiv \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\eta^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\eta^2}} \right]^{1/2} = \left[\frac{1}{2\pi\eta^2} \right]^{1/4} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\eta^2}}, \quad (35)$$

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

$$\Phi_{x_0,\eta}(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{\eta}, & \text{αν } x \in [x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta], \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (36)$$

καθώς και με άλλες επαρκώς εντοπισμένες κυματοσυναρτήσεις με ελεγχόμενη διασπορά.⁽³⁰⁾

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

Θα δείξουμε εδώ τη γενική ιδέα. Ας ονομάσουμε $\hat{P}_{x_0,\eta}$ τον προβολικό τελεστή στην κυματοσυνάρτηση $\Phi_{x_0,\eta}$ της εξ. (36). Για κάθε x_0 έχουμε έναν τέτοιο τελεστή. Η δράση του σε κυματοσυνάρτηση Ψ είναι

$$\begin{aligned} \hat{P}_{x_0,\eta}\Psi(x) &= (\Phi_{x_0,\eta}, \Psi) \Phi_{x_0,\eta}(x) \\ &= \left[\int_{\mathbb{R}} \Phi_{x_0,\eta}(x') \Psi(x') dx' \right] \Phi_{x_0,\eta}(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\eta}} \left[\int_{x_0-\eta/2}^{x_0+\eta/2} \Psi(x') dx' \right] \Phi_{x_0,\eta}(x) \\ &\approx \sqrt{\eta} \Psi(x_0) \Phi_{x_0,\eta}(x) \\ &= \begin{cases} \Psi(x_0), & \text{αν } x \in [x_0 - \eta/2, x_0 + \eta/2]. \\ 0, & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \end{aligned} \quad (37)$$

⁽³⁰⁾Πρόβλημα 14 κεφ. 4.

Η προσέγγιση του προτελευταίου βήματος γίνεται ολοένα και ακριβέστερη, όσο μικρότερο λαμβάνουμε το η σε σχέση με το χαρακτηριστικό μήκος μεταβολής της $\Psi(x)$. Θεωρούμε τώρα μια διαμέριση του χώρου (της ευθείας x από το $-\infty$ ως το $+\infty$) σε αλληπάλγηλα εφαπτόμενα διαστήματα μήκους η και κέντρου x_i , $i \in \mathbb{Z}$. Σε αυτά τα διαστήματα θεωρούμε αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις $\Phi_{x_i, \eta}$, οι οποίες ορίζονται ακριβώς όπως η (36), με το x_i στη θέση του x_0 . Επίσης, θεωρούμε τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές $\hat{P}_{x_i, \eta}$. Ορίζουμε στη συνέχεια τον τελεστή $\hat{X}_{i, \eta} = x_i \hat{P}_{x_i, \eta}$, ο οποίος διαφέρει από τον προβολικό τελεστή μόνο κατά το ότι δίνει τιμή x_i εκεί όπου ο προβολικός τελεστής δίνει τιμή 1. Εφόσον ο $\hat{X}_{i, \eta}$ προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό ερμιτιανού τελεστή με πραγματικό αριθμό, είναι επίσης ερμιτιανός, με δύο ιδιοτιμές: x_i και 0.

Από την (37) λαμβάνουμε ότι, για $\eta \ll 1$, δηλαδή στο όριο πυκνής διαμέρισης, $\hat{X}_{i, \eta} \Psi(x) = x_i \Psi(x_i)$, για $x \in [x_0 - \eta/2, x_0 + \eta/2]$, και 0, διαφορετικά. Το τελευταίο βήμα του συλλογισμού έγκειται στο να πάρουμε το άθροισμα των τελεστών $\hat{X}_{i, \eta}$, ώστε να καλύπτεται όλος ο χώρος (όλη η ευθεία x) λόγω της διαμέρισης: ορίζουμε τον τελεστή

$$\hat{X} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \hat{X}_i, \quad (38)$$

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

$$\hat{X} \Psi(x) = x_i \Psi(x_i) \approx x \Psi(x) \quad (39)$$

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

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

3.9 Προβλήματα

1. α) Πεισθείτε για τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου (13). β) Δείξτε την ανισότητα Cauchy-Schwarz (14). Υπόδειξη: Δείξτε ότι $\|\Phi\|^2 [\|\Psi\|^2 \|\Phi\|^2 - |(\Phi, \Psi)|^2] = \|[\|\Phi\|^2 \Psi - (\Phi, \Psi)\Phi]\|^2$ και εκμεταλλευτείτε το γεγονός ότι το δεξιό μέλος είναι θετικό.
2. Δείξτε ότι οι ερμιτιανοί τελεστές έχουν την ιδιότητα $(\Psi, \hat{A}\Phi) = (\hat{A}\Psi, \Phi)$, για κάθε Ψ και Φ στο πεδίο ορισμού τους. Υπόδειξη: ξεκινήστε από την απαίτηση $\text{Im}(\Phi + \Psi, \hat{A}(\Phi + \Psi)) = 0$ και ταυτόχρονα $\text{Im}(\Phi + i\Psi, \hat{A}(\Phi + i\Psi)) = 0$ (από τον ορισμό του ερμιτιανού τελεστή). Επίσης, διαπιστώστε ότι το γινόμενο γραμμικών τελεστών είναι γραμμικός τελεστής.
3. Δείξτε ότι, αν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε και ο $\hat{A}^n$ (n θετικός ακέραιος) είναι ερμιτιανός.
4. Δείξτε ότι, αν $\hat{P}$ προβολικός τελεστής, τότε $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Επίσης, δείξτε ότι οι προβολικοί τελεστές είναι ερμιτιανοί με ιδιοτιμές 0 ή 1.
5. Δείξτε ότι, αν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε το ίδιο ισχύει και για τον $\hat{f}(\hat{A}) = \sum_n c_n \hat{A}^n$, εάν $c_n \in \mathbb{R}$ και εάν $f(x) = \sum_n c_n x^n$ αναλυτική συνάρτηση.
6. Δείξτε ότι το μέγεθος $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ έχει την ίδια τυπική απόκλιση με το $\hat{A}$, αλλά μέση τιμή μηδέν.
7. Δείξτε ότι, αν δύο καταστάσεις Ψ και Φ (κυματοσυναρτήσεις με νόρμα 1) δεν είναι ορθογώνιες (και επίσης δεν είναι η μια πολλαπλάσιο της άλλης), τότε οι αντίστοιχοι προβολικοί τελεστές δεν μετατίθενται. Υπόδειξη: Θέστε $Q(x) = [\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]\Psi$ και δείξτε ότι $(Q, Q) > 0$. Χρησιμοποιήστε την ανισότητα Schwarz.
8. Έστω δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ_1 και Ψ_2 με νόρμα 1 και τέτοιες ώστε να μην είναι η μια πολλαπλάσιο της άλλης. Θεωρήστε την $\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$, με a_1 και a_2 μη μηδενικές σταθερές και $|a_1|^2 + |a_2|^2 + 2\text{Re}[a_1^* a_2 (\Psi_1, \Psi_2)] = 1$. α) Δείξτε ότι η Φ είναι κανονικοποιημένη. β) Δείξτε ότι η Φ δεν είναι ταυτόχρονα ορθογώνια στην Ψ_1 και στην Ψ_2 . γ) Γιατί ο προβολικός τελεστής στην Φ είναι μέγεθος ασύμβατο είτε με τον προβολικό τελεστή στην Ψ_1 είτε με εκείνον στην Ψ_2 είτε και με τους δύο;
9. Δείξτε ότι οι τελεστές θέσης και ορμής δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις στο χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων στο $\mathbb{R}$ (πλην, φυσικά, της τετριμμένης περίπτωσης $\Psi(x) = 0$, η οποία δεν αντιστοιχεί σε κατάσταση). (Υπόδειξη για τον τελεστή ορμής: βρείτε τις ιδιοσυναρτήσεις του και δείξτε ότι δεν

είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.) Δείξτε το ίδιο για τον τελεστή της κινητικής ενέργειας, $\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$.

10. Δείξτε την ακόλουθη ταυτότητα μεταθετών: $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$. Συγκρίνετε με τον κανόνα παραγώγισης γινομένου συναρτήσεων, $\frac{\partial}{\partial x}[f(x)g(x)] = \left[\frac{\partial}{\partial x}f(x)\right]g(x) + f(x)\left[\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right]$.
11. Υπολογίστε τον μεταθέτη του τελεστή θέσης με τον τελεστή κινητικής ενέργειας, $[\hat{x}, \frac{1}{2m}\hat{p}^2]$. (Υπόδειξη: χρησιμοποιήστε την ταυτότητα του προβλήματος 10.) Εάν ερμηνεύσετε τον τελεστή $\frac{1}{m}\hat{p} \equiv \hat{v}$ ως τελεστή ταχύτητας, τι λαμβάνετε;
12. Θεωρήστε κίνηση ενός σωματιδίου σε τρεις χωρικές διαστάσεις. Οι τελεστές θέσης $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{r}_x, \hat{r}_y, \hat{r}_z)$ και ορμής $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ είναι διανυσματικοί. Δρουν με προφανή γενίκευση της μιας διάστασης: $\hat{r}_\nu \Psi(\mathbf{r}) = r_\nu \Psi(\mathbf{r})$ και $\hat{p}_\nu \Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r_\nu}$ ($\nu \in \{x, y, z\}$). Υπολογίστε τους μεταθέτες $[\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu]$, τον τελεστή κινητικής ενέργειας $\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$, και το μεταθέτη $[\mathbf{r}_\nu, \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2]$. Τι δίνει ο μεταθέτης, εάν ερμηνεύσουμε τον τελεστή $\frac{1}{m}\hat{\mathbf{p}} \equiv \hat{\mathbf{v}}$ ως διανυσματικό τελεστή ταχύτητας;
13. Θεωρήστε τη σχέση απροσδιοριστίας (30). Υποθέστε ότι η Ψ είναι τέτοια, ώστε το αριστερό μέλος να μηδενίζεται: $(\Delta A)(\Delta B) = 0$. Δείξτε, με απ' ευθείας υπολογισμό της ποσότητας $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi$ ότι και το δεξιό μέλος μηδενίζεται. (Υπόδειξη: για να μηδενίζεται το αριστερό μέλος, η Ψ πρέπει να είναι υποχρεωτικά ιδιοκατάσταση ενός των δύο τελεστών.)
14. Δείξτε ότι, για να ικανοποιείται το ελάχιστο γινόμενο απροσδιοριστίας, δηλαδή $(\Delta A)_\Psi(\Delta B)_\Psi = \frac{1}{2}|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi|$, θα πρέπει η Ψ να είναι τέτοια ώστε οι $(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi)\Psi$ και $(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi)\Psi$ να είναι γραμμικά εξαρτημένες, δηλ. $(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi)\Psi = i\lambda(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi)\Psi$, με $\lambda \in \mathbb{R}$. (Υπόδειξη: εξετάστε τότε η ανισότητα Cauchy-Schwarz μετατρέπεται σε ισότητα.)
15. Θεωρήστε σωματίδιο κινούμενο σε μία διάσταση στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Υποθέστε ότι η Ψ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κατάσταση. Δείξτε ότι η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας στην κατάσταση είναι πάντα γνήσια θετική: $\left(\Psi, \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi\right) > 0$. (Υπόδειξη: κάνετε ολοκλήρωση κατά παράγοντες και χρησιμοποιήστε την ιδιότητα $\Psi(x) \rightarrow 0$ και $\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) \rightarrow 0$ για $x \rightarrow \pm\infty$. Εναλλακτικά, χρησιμοποιήστε την ερμιτιανή ιδιότητα του τελεστή ορμής.)
16. Θεωρήστε σωματίδιο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, δηλ. κινούμενο στο διάστημα $[-d, d]$ με $\Psi(-d) = \Psi(d) = 0$. Το σωματίδιο βρίσκεται σε κατάσταση $\Psi(x) = c(x+d)$, για $x < 0$, και $\Psi(x) = -c(x-d)$, για $x \geq 0$. Βρείτε την κατανομή πιθανότητας της κινητικής ενέργειας.

4 Η γεωμετρική δομή των καταστάσεων: χώρος Hilbert

4.1 Γενικά

Οι κυματοσυναρτήσεις στην κβαντική μηχανική ικανοποιούν τα αξιώματα του διανυσματικού χώρου. Συμβολίζουμε το σύνολο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων μιγαδικών συναρτήσεων στο $\mathbb{R}$, δηλ. $\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 dx < \infty$ (συμπεριλαμβανόμενης και της σταθερής $\Psi = 0$), με $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Όμοια, και αναλόγως τη φύση του προβλήματος, θεωρούμε το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων $\mathcal{L}^2([0, a])$ για σωματίδιο που κινείται σε μία διάσταση, αλλά περιορισμένο στο διάστημα $[0, a]$, το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ για σωματίδιο που κινείται στις τρεις διαστάσεις, κ.ο.κ. Το μόνο που αλλάζει στα ακόλουθα, αναλόγως την περίπτωση, είναι το όρισμα της κυματοσυνάρτησης (x στη μία διάσταση, $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$ στις τρεις διαστάσεις) καθώς και η μεταβλητή και τα όρια ολοκλήρωσης στο εσωτερικό γινόμενο ($\int_{\mathbb{R}} dx$, $\int_0^a dx$, $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x$, κ.ο.κ.).⁽³¹⁾ Για απλότητα θα αναφερόμαστε συνήθως στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

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

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

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

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

$$\|\Psi - \Phi\| \equiv \sqrt{(\Psi - \Phi, \Psi - \Phi)} \equiv \left[\int |\Psi(x) - \Phi(x)|^2 dx \right]^{1/2} \quad (40)$$

Εάν $\|\Psi - \Phi\| = 0$, τότε τα δύο διανύσματα ταυτίζονται. Αυτό φαίνεται από την ολοκληρωτέα ποσότητα $|\Psi(x) - \Phi(x)|^2 \geq 0$, η οποία πρέπει να μηδενίζεται, για να μηδενιστεί το ολοκλήρωμα, επομένως $\Psi(x) = \Phi(x)$.⁽³²⁾

⁽³¹⁾Οι συνοριακές συνθήκες που επιβάλλουμε στις κυματοσυναρτήσεις προκύπτουν από το φυσικό πρόβλημα που προσεγγίζουμε και παίζουν σημαντικό ρόλο στους τελεστές που αναπαριστούν φυσικά μεγέθη. Βλ. πρόβλημα 1.

⁽³²⁾Στην πραγματικότητα, εάν $\Psi(x) \neq \Phi(x)$ μόνο σε διακριτά σημεία x (η μαθηματική διατύπωση είναι υποσύνολο μηδενικού μέτρου του $\mathbb{R}$), τότε το ολοκλήρωμα πάλι μηδενίζεται, χωρίς να ταυτίζονται οι συναρτήσεις σε όλα τα σημεία. Ωστόσο, συναρτήσεις που διαφέρουν μόνο σε διακριτά σημεία

Η ύπαρξη νόρμας επιτρέπει να μιλήσουμε για σύγκλιση ακολουθίας συναρτήσεων. Λέμε ότι μια ακολουθία Ψ_n , $n = 1, 2, \dots$, συγκλίνει στη Φ , αν η ακολουθία θετικών αριθμών $\|\Psi_n - \Phi\|$ (δηλ. η απόσταση μεταξύ των Ψ_n και Φ) συγκλίνει στο μηδέν.⁽³³⁾ Οι ιδιότητες εσωτερικού γινομένου και πληρότητας, που χαρακτηρίζουν το διανυσματικό χώρο, του δίνουν δομή χώρου Hilbert, ο οποίος συμβολίζεται συνήθως με $\mathcal{H}$.

Θυμίζουμε ότι N διανύσματα χαρακτηρίζονται γραμμικά ανεξάρτητα μεταξύ τους, αν δεν μπορεί να γραφεί κανένα από αυτά ως γραμμικός συνδυασμός των υπόλοιπων. Εάν οποιοδήποτε άλλο διάνυσμα αναπτύσσεται ως γραμμικός συνδυασμός αυτών, τότε λέμε ότι αυτά αποτελούν βάση, και ότι ο χώρος έχει διάσταση N . Για τον χώρο Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, προκύπτει ότι η διάσταση είναι άπειρη αριθμήσιμη ($\aleph_0$).⁽³⁴⁾

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

$$\begin{aligned} (u_i, u_i) &= 1 \\ (u_i, u_j) &= 0, \text{ αν } i \neq j \end{aligned} \quad (41)$$

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

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i = \Psi. \quad (42)$$

Οι πρώτη εξίσωση απαιτεί την κανονικοποίηση των στοιχείων βάσης και η δεύτερη τη μεταξύ τους ορθογωνιότητα. Η τρίτη ερμηνεύεται ως σύγκλιση της άπειρης σειράς ως προς τη νόρμα του $\mathcal{H}$, δηλαδή $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\sum_{i=1}^n c_i u_i - \Psi\| = 0$.⁽³⁵⁾ Εάν έχουμε δεδομένα μια κυματοσυνάρτηση Ψ και μια ορθοκανονική βάση $\{u_i\}$, τότε οι συντελεστές

δεχόμαστε ότι αντιστοιχούν στο ίδιο διάνυσμα. Οι κατανομές πιθανότητας που προκύπτουν από δυο τέτοιες συναρτήσεις ταυτίζονται μαθηματικά, διότι διαφορές σε διακριτά σημεία δεν συνεισφέρουν στο $\int \Psi^* \dot{A} \Psi dx$, για τον ίδιο λόγο που δεν συνεισφέρουν στο $\int |\Psi - \Phi|^2 dx$.

⁽³³⁾ Αξίζει να αναφέρουμε σχετικά τα εξής, αν και δεν θα μας απασχολήσουν εδώ. Κατ' επέκταση της έννοιας της σύγκλισης ορίζεται και η έννοια της συνέχειας. Επίσης, ορίζονται ακολουθίες Cauchy, για τις οποίες η νόρμα $\|\Psi_n - \Psi_m\| \rightarrow 0$ καθώς τα $n, m \rightarrow \infty$, και οι οποίες συγκλίνουν σε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις. Ως εκ τούτου, ο χώρος χαρακτηρίζεται πλήρης.

⁽³⁴⁾ Το ίδιο ισχύει και για τους $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ και $\mathcal{L}^2([0, a])$ (βλ. προβλήματα 2 και 3).

⁽³⁵⁾ Αυτός ο ορισμός διαφοροποιείται από τον ορισμό της κατά σημείο σύγκλισης, σύμφωνα με τον οποίο $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n c_i u_i(x) = \Psi(x)$.

ανάπτυγματος c_i βρίσκονται παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο⁽³⁶⁾

$$c_i = (u_i, \Psi) = \int u_i^*(x) \Psi(x) dx. \quad (43)$$

Συνεπώς, η έκφραση (42) γράφεται και $\sum_{i=1}^{\infty} (u_i, \Psi) u_i = \Psi$. Παρατηρούμε ότι εδώ εμφανίζεται ο προβολικός τελεστής στη u_i , $\hat{P}_{u_i}$, με $\hat{P}_{u_i} \Psi \equiv (u_i, \Psi) u_i$ [βλ. τον ορισμό (22)]. Επομένως, το ανάπτυγμα σε ορθοκανονική βάση λαμβάνει τη μορφή

$$\sum_{i=1}^{\infty} \hat{P}_{u_i} \Psi = \Psi, \quad (44)$$

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

Το γεγονός ότι η εξ. (44) ισχύει για κάθε $\Psi \in \mathcal{H}$, συνεπάγεται ότι το άθροισμα των προβολικών τελεστών δίνει τον ταυτοτικό τελεστή $\hat{I}$:⁽³⁷⁾

$$\sum_{i=1}^{\infty} \hat{P}_{u_i} = \hat{I}, \quad (45)$$

Αυτή ονομάζεται *σχέση πληρότητας*, και εκφράζει την ιδιότητα ότι το σύνολο των u_i δεν είναι μόνο γραμμικά ανεξάρτητο, αλλά αποτελεί βάση (παράγει όλο το χώρο $\mathcal{H}$).⁽³⁸⁾

⁽³⁶⁾ Πρόβλημα 4.

⁽³⁷⁾ Ο ταυτοτικός τελεστής ορίζεται από την ιδιότητα $\hat{I} \Psi = \Psi$.

⁽³⁸⁾ Σε πεπερασμένη διάσταση, ο αριθμός των u_i ταυτίζεται με τη διάσταση του χώρου. Σε άπειρη διάσταση, όμως, είναι δυνατόν τα u_i να είναι ορθοκανονικά και άπειρα, αλλά να μην επαρκούν ώστε να παραγάγουν όλα τα διανύσματα του χώρου. Αυτό φαίνεται στο πολύ απλό παράδειγμα του να θεωρήσουμε τη βάση πλην του u_1 . Τα εναπομείναντα $(u_2, u_2, \dots)$ είναι άπειρα και ορθοκανονικά, αλλά δεν μπορούν να παραγάγουν το u_1 με γραμμικό συνδυασμό, διότι είναι όλα ορθογώνια σε αυτό.

Η νόρμα της Ψ συνδέεται με τους συντελεστές c_i ως εξής.⁽³⁹⁾

$$\begin{aligned}
\|\Psi\|^2 &\equiv (\Psi, \Psi) \\
&= \left(\sum_i c_i u_i, \sum_j c_j u_j \right) \\
&= \sum_j c_j \left(\sum_i c_i u_i, u_j \right) \quad (\text{βλ. 2η από εξ. (13)}) \\
&= \sum_i \sum_j c_i^* c_j (u_i, u_j) \quad (\text{βλ. 3η από εξ. (13)}) \\
&= \sum_i c_i^* c_i (u_i, u_i) \quad (\text{διότι } (u_i, u_j) = 0, \text{ για } i \neq j) \\
&= \sum_i |c_i|^2 \quad (\text{διότι } (u_i, u_i) = 1). \tag{46}
\end{aligned}$$

Συνεπώς, η απαίτηση $\|\Psi\|^2 < \infty$ συνεπάγεται την απαίτηση $\sum_i |c_i|^2 < \infty$.⁽⁴⁰⁾ Αλλά ισχύει και το αντίστροφο (δίνουμε το αποτέλεσμα χωρίς απόδειξη): εάν για μια ακολουθία αριθμών $\{c_i\}$ ισχύει $\sum_i |c_i|^2 < \infty$, τότε η $\sum_i c_i u_i$ συγκλίνει.

Δεδομένης μιας ορθοκανονικής βάσης $\{u_i\}$, το ανάπτυγμα (42), και ισοδύναμα το ανάπτυγμα (44), είναι μοναδικό. Δηλαδή, αν υποθέσουμε ότι $\sum_i c_i u_i = \Psi = \sum_i d_i u_i$, τότε, υποχρεωτικά, $d_i = c_i$, $\forall i$.

Έχουμε μια πλήρη αντιστοιχία των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων $\Psi \in \mathcal{H}$ με τις ακολουθίες $\{c_i\}$, για τις οποίες το $\sum_i c_i u_i$ συγκλίνει. Αν $c = \{c_i\}$ και $d = \{d_i\}$ δυο τέτοιες ακολουθίες, με $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και $\Phi = \sum_i d_i u_i$, τότε $(\Psi, \Phi) = \sum_i c_i^* d_i \equiv (c, d)$ (με προφανή συμβολισμό του εσωτερικού γινομένου ακολουθιών), $\Psi + \Phi = \sum_i (c_i + d_i) u_i$, και $a\Psi = \sum_i (ac_i) u_i$.⁽⁴¹⁾ Επομένως, οι ακολουθίες και οι κυματοσυναρτήσεις είναι δύο διαφορετικοί τρόποι έκφρασης των ίδιων κβαντικών καταστάσεων. Ο χώρος των τετραγωνικά αθροίσιμων ακολουθιών συμβολίζεται με $\ell^2(\mathbb{N})$ (εφόσον ο δείκτης i λαμβάνει τιμές στους φυσικούς), είναι ισόμορφος με τον $\mathcal{H}$ και, επομένως, ικανοποιεί επίσης τα αξιώματα του χώρου Hilbert.

⁽³⁹⁾Εδώ χρησιμοποιούμε κανόνες πεπερασμένων αθροισμάτων σε άπειρα αθροίσματα. Ωστόσο, το αποτέλεσμα ισχύει, διότι αποδεικνύεται με προσεκτικό χειρισμό των άπειρων αθροισμάτων.

⁽⁴⁰⁾Αξίζει να τονίσουμε ότι η εξ. (46) είναι γενίκευση του πυθαγόριου θεωρήματος σε άπειρες διαστάσεις.

⁽⁴¹⁾Πρόβλημα 5.

4.2 Πληρότητα ιδιοδιανυσμάτων και πιθανότητα μετάβασης

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

$$\Psi = \sum_i c_i u_i, \quad (47)$$

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

$$P_i = |(u_i, \Psi)|^2 = |c_i|^2. \quad (48)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i = \sum_i |c_i|^2 a_i \\ \langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i^2 = \sum_i |c_i|^2 a_i^2 \\ \text{και γενικά: } \langle \hat{A}^n \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i^n = \sum_i |c_i|^2 a_i^n \end{aligned} \quad (49)$$

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

Τίθεται τώρα το ερώτημα, εάν μπορεί να βρεθεί ένα ανάπτυγμα (47) για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση Ψ και για οποιοδήποτε παρατηρήσιμο μέγεθος $\hat{A}$, ώστε να εφαρμοστούν οι τύποι (48) και (49). Η απάντηση είναι αρνητική, δεδομένου ότι υπάρχουν ερμιτιανοί τελεστές που δεν έχουν ιδιοδιανύσματα στο χώρο Hilbert (όπως ο τελεστής θέσης) ή τα ιδιοδιανύσματά τους δεν επαρκούν για να παραγάγουν το χώρο (δεν δίνουν πληρότητα). Τα αντίστοιχα μεγέθη έχουν συνεχές φάσμα τιμών. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να κάνουμε μια ανάλυση ανάλογη εκείνης του εδαφίου 3.8, χρησιμοποιώντας μια διαμέριση του συνεχούς φάσματος με τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές, και τροποποιώντας το μετρήσιμο μέγεθος και τον αντίστοιχο τελεστή, ώστε να έχει ιδιοσυναρτήσεις που δίνουν πληρότητα. Ο τροποποιημένος τελεστής έχει διακριτό φάσμα, ως διαμέριση του συνεχούς φάσματος, και δίνει κατανομή πιθανότητας είτε απ' ευθείας, σύμφωνα με τους τύπους (48) και (49), είτε μέσω των ροπών, σύμφωνα με τον τύπο (17). Στο όριο της πυκνής διαμέρισης, το φάσμα επανέρχεται στο συνεχές, η

κατανομή πιθανότητας τείνει σε πυκνότητα πιθανότητας, και πλέον εφαρμόζεται μόνο ο τύπος (17) για να βρεθεί η κατανομή.

4.3 Αναπαράσταση γραμμικών τελεστών από πίνακες

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

$$A_{ij} \equiv (u_i, \hat{A}u_j) \equiv \int u_i(x) \hat{A} u_j(x) dx. \quad (50)$$

Αν $\Psi = \sum_j c_j u_j$ οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση, τότε η δράση του $\hat{A}\Psi = \Phi$ γράφεται $\hat{A}\Psi = \sum_j c_j \hat{A}u_j = \Phi$. Παίρνοντας και το ανάπτυγμα της $\Phi = \sum_k d_k u_k$, λαμβάνουμε $\sum_j c_j \hat{A}u_j = \sum_k d_k u_k$. Σχηματίζουμε τώρα το εσωτερικό γινόμενο της u_i με το αριστερό και δεξιό μέλος της τελευταίας εξίσωσης. Δεδομένου ότι $(u_i, u_k) = \delta_{ik}$ (εξ. 41), μηδενίζονται όλοι οι όροι πλην ενός στο δεξιό άθροισμα: $\sum_j c_j (u_i, \hat{A}u_j) = d_i$. Χρησιμοποιώντας το συμβολισμό (50), καταλήγουμε:

$$\sum_j A_{ij} c_j = d_i \quad (51)$$

Μέσω αυτής της έκφρασης μετασχηματίζονται οι συντεταγμένες μιας κυματοσυνάρτησης σε εκείνες μιας άλλης, λόγω της δράσης ενός τελεστή. Η έκφραση είναι αντίστοιχη με τον πολλαπλασιασμό ενός τετραγωνικού πίνακα, με στοιχεία A_{ij} , με έναν πίνακα-στήλη, με στοιχεία c_j , δίνοντας ως αποτέλεσμα έναν πίνακα-στήλη με στοιχεία d_i . Η μόνη διαφορά είναι ότι εδώ οι πίνακες έχουν διαστάσεις $(\infty \times \infty)$ (ο A) και $(\infty \times 1)$ (οι c και d). Όσο για τη δομή των τελεστών, οι μόνοι δύο περιορισμοί είναι α) να είναι γραμμικοί,⁽⁴²⁾ και β) να περιλαμβάνουν στο πεδίο ορισμού τους τις συναρτήσεις u_i , ώστε να εφαρμόζεται η εξ. (50). Κατά τα άλλα, οι τελεστές μπορεί να είναι διαφορικοί (όπως η ορμή), ολοκληρωτικοί, κ.λ.π., χωρίς αυτό να εμποδίζει την αναπαράστασή τους από πίνακες.⁽⁴³⁾

Είναι εύκολο να δει κανείς ότι το γινόμενο γραμμικών τελεστών αναπαριστάται από το αντίστοιχο γινόμενο πινάκων:⁽⁴⁴⁾

$$\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \longrightarrow C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}. \quad (52)$$

⁽⁴²⁾ Η γραμμικότητα είναι απαραίτητη για την αναπαράσταση τελεστών από πίνακες, δεδομένου ότι ο πολλαπλασιασμός πινάκων είναι πάντα γραμμική πράξη.

⁽⁴³⁾ Πρόβλημα 6.

⁽⁴⁴⁾ Πρόβλημα 7.

Οι ερμιτιανοί τελεστές εκφράζονται από πίνακες με ιδιαίτερη συμμετρική δομή:

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad (\text{αν και μόνο αν ο } \hat{A} \text{ είναι ερμιτιανός}). \quad (53)$$

Αυτό το βλέπουμε παίρνοντας $A_{ij} = (u_i, \hat{A}u_j) = (\hat{A}u_i, u_j) = (u_j, \hat{A}u_i)^* = A_{ji}^*$ [στο δεύτερο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα (16)]. Αντίστροφα: έστω ότι, για κάποιον γραμμικό τελεστή $\hat{A}$, ισχύει $(u_i, \hat{A}u_j) = (u_j, \hat{A}u_i)^*$ για κάθε ζεύγος στοιχείων βάσης u_i και u_j . Τότε, μπορούμε να δείξουμε ότι ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός.⁽⁴⁵⁾

4.4 Κοινά ιδιοδιανύσματα μετατιθέμενων τελεστών

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

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

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

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

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

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

(β) Αν η α_i είναι εκφυλισμένη, δηλαδή αν υπάρχουν γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδια-

⁽⁴⁵⁾Πρόβλημα 8.

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

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

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

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

4.5 Ερμιτιανοί συζυγείς τελεστές

Οι ερμιτιανοί τελεστές και αντίστοιχοι πίνακες είναι, κατά μια έννοια, το ανάλογο των πραγματικών αριθμών: τους αντιστοιχεί πραγματική μέση τιμή, πραγματικές ιδιοτιμές, και ικανοποιούν τη σχέση συμμετρίας (53), η οποία μπορεί να ιδωθεί ως γενίκευση της σχέσης $z = z^*$. Η αναλογία γενικεύεται και σε μη ερμιτιανούς γραμμικούς τελεστές:

αν $\hat{A}$ μη ερμιτιανός γραμμικός τελεστής, ορίζουμε τον *ερμιτιανό συζυγή* (*hermitian adjoint*) $\hat{A}^\dagger$ ως εξής:

$$(\hat{A}^\dagger \Phi, \Psi) = (\Phi, \hat{A} \Psi), \quad \forall \Phi, \Psi. \quad (54)$$

Ο ορισμός του $\hat{A}^\dagger$ έχει την ιδιαιτερότητα να μη δίνεται εκπεφρασμένα, μέσω της δράσης του σε καταστάσεις, αλλά έμμεσα, μέσω της δράσης του σε εσωτερικά γινόμενα.

Ωστόσο, ο ορισμός μάς επιτρέπει να βρούμε τη δράση του $\hat{A}^\dagger$ σε τυχαία Ψ , εάν γνωρίζουμε τη δράση του $\hat{A}$ σε καταστάσεις. Χρησιμοποιούμε το ανάπτυγμα της $\hat{A}^\dagger \Psi$ σε μια ορθοκανονική βάση $\{u_i\}$ (όχι απαραίτητα ιδιοκαταστάσεων του $\hat{A}$) και βρίσκουμε:

$$\hat{A}^\dagger \Psi = \sum_i (u_i, \hat{A}^\dagger \Psi) u_i = \sum_i (\hat{A}^\dagger \Psi, u_i)^* u_i = \sum_i (\Psi, \hat{A} u_i)^* u_i \quad (55)$$

Στο πρώτο βήμα εφαρμόσαμε τον τύπο του ανάπτυγματος στην ορθοκανονική βάση, στο δεύτερο μια από τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου, και στο τρίτο τον ορισμό του ερμιτιανού συζυγούς τελεστή $\hat{A}^\dagger$. Μέσω των εσωτερικών γινομένων $(\Psi, \hat{A} u_i)$ βρίσκουμε επομένως το $\hat{A}^\dagger \Psi$.

Εξετάζοντας την εφαρμογή του ορισμού σε διανύσματα ορθοκανονικής βάσης $\{u_i\}$, και θέτοντας $\Phi = u_i$, $\Psi = u_j$, παίρνουμε $(u_j, \hat{A} u_i) = (\hat{A}^\dagger u_j, u_i) = (u_i, \hat{A}^\dagger u_j)^*$, ή αλλιώς

$$A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*. \quad (56)$$

Δηλαδή, ο πίνακας που αντιστοιχεί στον ερμιτιανό συζυγή δίνεται από αναστροφή και μιγαδική συζυγία του αρχικού πίνακα.

Εισάγουμε τώρα έναν βολικό συμβολισμό. Ήδη συμβολίσαμε τα στοιχεία πίνακα του τελεστή $\hat{A}$ με A_{ij} και τα στοιχεία πίνακα του ανάστροφου και μιγαδικού συζυγούς (δηλ. ερμιτιανού συζυγούς) με $A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$ (εξ. 56). Υιοθετούμε, αντίστοιχα, συμβολισμό για τις ακολουθίες που ορίζουν καταστάσεις $\Psi = \sum_i c_i u_i$: με c συμβολίζουμε, πέραν της ακολουθίας $\{c_i\}$, τον πίνακα-στήλη που προκύπτει από τα στοιχεία της ακολουθίας. Επιπλέον, με $c^\dagger$ ορίζουμε τον ανάστροφο και μιγαδικό συζυγή πίνακα του c , δηλαδή τον πίνακα-γραμμή με στοιχεία c_i^* . Εφαρμόζοντας τους κανόνες πολλαπλασιασμού πινάκων, το εσωτερικό γινόμενο δύο καταστάσεων $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και $\Phi = \sum_i d_i u_i$ που ορίζονται μέσω ακολουθιών c και d , γράφεται

$$(c, d) \equiv (\Psi, \Phi) = \sum_i c_i^* d_i = c^\dagger d. \quad (57)$$

Ομοίως, η δράση γραμμικού τελεστή αναπαριστάται από τον πίνακα-στήλη (βλ. εξ. 51)

$$d = A c \quad (58)$$

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

$$(c, Ad) = c^\dagger A d = (A^\dagger c)^\dagger d, \quad (59)$$

όπως εύκολα επαληθεύεται εφαρμόζοντας τους κανόνες πολλαπλασιασμού πινάκων.

Θα δώσουμε τώρα επιπλέον ιδιότητες των ερμιτιανών συζυγών τελεστών. Έστω $\hat{A}$ και $\hat{B}$ γραμμικοί τελεστές. Τότε:⁽⁴⁶⁾

1. Ο $\hat{A}^\dagger$ είναι μοναδικός (δεν υπάρχουν δύο διαφορετικοί τελεστές που να είναι ερμιτιανοί συζυγείς του $\hat{A}$).
2. $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.
3. Ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Οι τελεστές με αυτή την ιδιότητα ονομάζονται αυτοσυζυγείς (*self-adjoint*).⁽⁴⁷⁾
4. $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.⁽⁴⁸⁾
5. Οι τελεστές $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ και $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ είναι ερμιτιανοί.⁽⁴⁹⁾
6. Οι τελεστές $\frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$ και $\frac{1}{2i}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$ είναι ερμιτιανοί και αντιστοιχούν στη γενίκευση του πραγματικού και φανταστικού μέρους, αντίστοιχα, ενός μιγαδικού αριθμού. Ο τελεστής $\frac{1}{2}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$ λέγεται αντιερμιτιανός, διότι για οποιαδήποτε Ψ βρίσκουμε ότι ο αριθμός $(\Psi, \frac{1}{2}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)\Psi)$ είναι καθαρά φανταστικός. Γενικά ένας γραμμικός τελεστής γράφεται ως άθροισμα του ερμιτιανού και του αντιερμιτιανού μέρους: $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger) + i\frac{1}{2i}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$.
7. Το γινόμενο δύο τελεστών γράφεται ως άθροισμα του ερμιτιανού και του αντιερμιτιανού του μέρους ως εξής: $\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]$.

4.6 Μοναδιαίοι τελεστές

Θα ορίσουμε τώρα τη γενίκευση των ορθογώνιων πινάκων, οι οποίοι διατηρούν το μέτρο και το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων και αντιστοιχούν σε στροφές στον $\mathbb{R}^n$. Στο χώρο Hilbert, τις στροφές εκφράζουν οι μοναδιαίοι τελεστές (*unitary operators*). Ένας

⁽⁴⁶⁾Πρόβλημα 9.

⁽⁴⁷⁾Σε χώρους άπειρης διάστασης, οι αυτοσυζυγείς τελεστές είναι υποκατηγορία των ερμιτιανών. Επειδή το θεώρημα φασματικής ανάλυσης, απαραίτητο για την πρόβλεψη της πιθανότητας μετάβασης, ισχύει για αυτοσυζυγείς, αλλά όχι απαραίτητα για ερμιτιανούς, τα φυσικά μεγέθη εκπροσωπούνται από αυτοσυζυγείς τελεστές. Στο πλαίσιο του παρόντος κειμένου, όμως, δεν υπάρχει ανάγκη διάκρισης των δύο.

⁽⁴⁸⁾Απόδειξη: για τυχαίες Ψ και Φ έχουμε $(\Phi, \hat{A}\hat{B}\Psi) = (\hat{A}^\dagger\Phi, \hat{B}\Psi) = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\Phi, \Psi)$.

⁽⁴⁹⁾Απόδειξη: για τυχαία Ψ έχουμε $(\Psi, \hat{A}\hat{A}^\dagger\Psi) = (\hat{A}^\dagger\Psi, \hat{A}^\dagger\Psi) = \|\hat{A}^\dagger\Psi\|^2 \in \mathbb{R}$.

γραμμικός τελεστής $\hat{U}$ λέγεται μοναδιαίος, αν είναι «1-1 και επί» (δηλ. αντιστρέψιμος) και ισομετρικός, δηλαδή η δράση του σε οποιαδήποτε διάνυσμα διατηρεί τη νόρμα:

$$\|\hat{U}\Psi\| = \|\Psi\| \quad (60)$$

Από τον ορισμό προκύπτει⁽⁵⁰⁾ ότι οι μοναδιαίοι τελεστές διατηρούν και το εσωτερικό γινόμενο:

$$(\hat{U}\Psi, \hat{U}\Phi) = (\Psi, \Phi) \quad (61)$$

για τυχαίες Ψ και $\Phi \in \mathcal{H}$. Κατά συνέπεια, διατηρούν την κατανομή πιθανότητας κατά τη μέτρηση (βλ. εξ. 27). Δεδομένου ότι οι κατανομές πιθανότητας συνδέουν την κβαντική θεωρία με τις μετρήσεις, οι μοναδιαίοι τελεστές παίζουν κυρίαρχο ρόλο στη μαθηματική έκφραση της αρχής της σχετικότητας.⁽⁵¹⁾ Θα δούμε, επίσης, ότι οι μοναδιαίοι τελεστές αντιστοιχούν σε αλλαγή ορθοκανονικής βάσης στο χώρο Hilbert.

Για τυχαίους μοναδιαίους τελεστές $\hat{U}$ και $\hat{U}'$ αποδεικνύονται ακόλουθες ιδιότητες:⁽⁵²⁾

1. Ο αντίστροφος ισούται με τον ερμιτιανό συζυγή: $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ (όπου $\hat{I}$ ο ταυτοτικός τελεστής). Ο αντίστροφος ενός μοναδιαίου τελεστή αντιστοιχεί στην αντίστροφη στροφή στο χώρο Hilbert.
2. Το γινόμενο $\hat{U}\hat{U}'$ είναι μοναδιαίος.
3. Οι ιδιοτιμές μοναδιαίων τελεστών έχουν μέτρο τη μονάδα, δηλαδή, αν $\hat{U}\Psi_{\hat{U}} = \alpha\Psi_{\hat{U}}$, τότε $\alpha = e^{i\gamma}$, $\gamma \in \mathbb{R}$.

4.7 Μετασχηματισμός ορθοκανονικής βάσης

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

$$U_{ij} \equiv (v_i, u_j). \quad (62)$$

Δηλαδή, σε αναλογία με την προβολή οποιασδήποτε κυματοσυνάρτησης σε διανύσματα βάσης, που δίνει $c_i = (u_i, \Psi)$ (βλ. τις εξ. 42 και 43), αναπτύσσουμε κάθε μία των συναρτήσεων βάσης u_j στη βάση $\{v_i\}$. Αν λοιπόν θέλουμε να βρούμε τις συντεταγμένες

⁽⁵⁰⁾Πρόβλημα 10.

⁽⁵¹⁾Με τον όρο «αρχή της σχετικότητας» δεν αναφερόμαστε στη θεωρία της σχετικότητας του Einstein, αλλά γενικότερα στην απαίτηση συμφωνίας φυσικών νόμων για παρατηρητές διαφορετικών συστημάτων αναφοράς.

⁽⁵²⁾Πρόβλημα 11.

της $\Psi = \sum_j c_j u_j$ στη νέα βάση $\{v_i\}$, ώστε να λάβουμε το νέο ανάπτυγμα $\Psi = \sum_j d_j v_j$, πρέπει να κάνουμε τα ακόλουθα βήματα:

$$d_i = (v_i, \Psi) = (v_i, \sum_j c_j u_j) = \sum_j (v_i, u_j) c_j \equiv \sum_j U_{ij} c_j. \quad (63)$$

Επομένως, ο πίνακας U (62) μετασχηματίζει τις συντεταγμένες της κυματοσυνάρτησης από τη βάση $\{u_i\}$ στη βάση $\{v_i\}$. Επίσης, ο πίνακας U αντιστοιχεί στο μοναδιαίο τελεστή $\hat{U}$, ο οποίος ορίζεται από την απεικόνιση κάθε συνάρτησης βάσης v_j στη συνάρτηση βάσης u_j :

$$\hat{U} v_j = u_j. \quad (64)$$

Πράγματι, τα στοιχεία πίνακα του $\hat{U}$ είναι $(v_i, \hat{U} v_j) = (v_i, u_j) = U_{ij}$, σε συμφωνία με την (62). Συνεπώς, ο πίνακας U είναι η αναπαράσταση του τελεστή (64) στη βάση v . Σημειώνουμε το εξής: ενώ ο τελεστής $\hat{U}$ μετασχηματίζει τα στοιχεία βάσης από τα v στα u , ο αντίστοιχος πίνακας U μετασχηματίζει τις συντεταγμένες από τη βάση u στη βάση v .

Η απεικόνιση $\hat{U}$ είναι $1 - 1$ και επί, δηλαδή αντιστρέψιμη. Είναι αναμενόμενο, και εύκολο ναδειχθεί, ότι ο $\hat{U}$ είναι μοναδιαίος, διότι η αλλαγή ορθοκανονικής βάσης εκφράζει μια στροφή.⁽⁵³⁾ Αλλά και αντίστροφα, αν ένας τελεστής είναι μοναδιαίος, τότε απεικονίζει οποιαδήποτε ορθοκανονική βάση v σε άλλη ορθοκανονική βάση u , δεδομένου ότι διατηρεί την ορθογωνιότητα και την κανονικοποίηση των στοιχείων βάσης και δεδομένου ότι είναι αντιστρέψιμος.

4.8 Σχέση ερμιτιανών και μοναδιαίων τελεστών

Θυμίζουμε ότι, αν $f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots$ μια αναλυτική συνάρτηση, και $\hat{A}$ κάποιος γραμμικός τελεστής, ορίζεται ο (επίσης γραμμικός) τελεστής $\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1 \hat{A} + c_2 \hat{A}^2 + \dots$.

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

$$e^{\lambda \hat{A}} = 1 + \lambda \hat{A} + \frac{1}{2} \lambda^2 \hat{A}^2 + \dots = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \quad (\lambda \in \mathbb{C}). \quad (65)$$

Προκύπτει ότι

$$e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} = e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})}, \quad \text{αν } [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (66)$$

Για να πεισθούμε για αυτό, αναπτύσσουμε τα εκθετικά: $e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \sum_m \frac{\lambda^m}{m!} \hat{B}^m$. Παρατηρούμε ότι, εφόσον οι τελεστές μετατίθενται, τα γινόμενα των επιμέρους όρων

⁽⁵³⁾ Πρόβλημα 12.

των σειρών δεν διαφοροποιούνται φορμαλιστικά από τα αντίστοιχα γινόμενα που θα είχαμε, αν οι $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ήταν αριθμοί. Επομένως, καταλήγουμε στην (66). Ειδικότερα έχουμε

$$e^{i\hat{A}} e^{-i\hat{A}} = 1. \quad (67)$$

Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε οι τελεστές $e^{i\hat{A}} e^{-i\hat{A}}$ είναι, επιπρόσθετα, ερμιτιανοί συζυγείς,⁽⁵⁴⁾ επομένως ο $e^{i\hat{A}}$ είναι μοναδιαίος. Αντίστροφα, οι μοναδιαίοι τελεστές γράφονται στη μορφή $\hat{U} = e^{i\hat{A}}$, όπου $\hat{A}$ κατάλληλος ερμιτιανός τελεστής.

4.9 Παράρτημα: Δράση της ορμής σε κυματοσυναρτήσεις με ιδιάζοντα σημεία

Ο τελεστής της ορμής, από τον ορισμό του, δρα κατ' αρχήν μόνο σε παραγωγίσιμες κυματοσυναρτήσεις. Ωστόσο, σε κάποιες περιπτώσεις καλούμαστε να αποφανθούμε για τη δράση του σε σημεία όπου η παράγωγος $\phi'(x)$ της κυματοσυνάρτησης $\phi(x)$ δεν ορίζεται, δηλαδή σημεία ασυνέχειας της παραγώγου ή σημεία ασυνέχειας της κυματοσυνάρτησης. Για τις ανάγκες αυτού του εδαφίου, ονομάζουμε αυτά τα σημεία ιδιάζοντα. Σε αυτές τις περιπτώσεις, εργαζόμαστε ως εξής. Ορίζουμε μια ακολουθία συναρτήσεων (όχι απαραίτητα ορθοκανονική βάση), ϕ_n , στην οποία η δράση του τελεστή είναι καλά ορισμένη, δηλαδή οι $\phi'_n(x)$ ορίζονται για το δεδομένο ιδιάζον σημείο και η ακολουθία οποία συγκλίνει στην υπό διερεύνηση συνάρτηση ϕ :

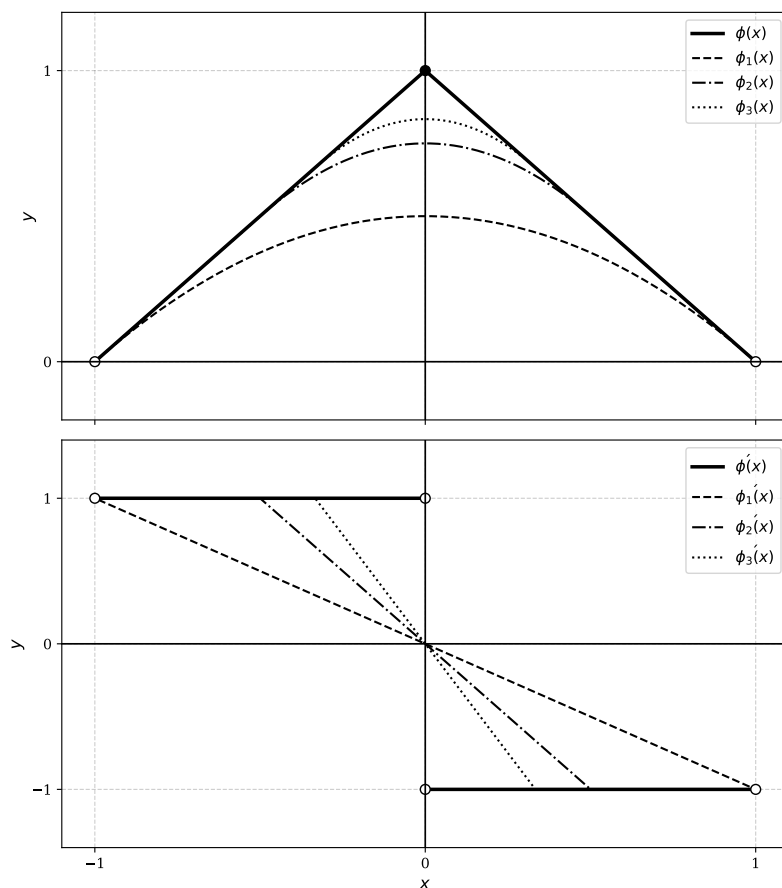
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\phi_n - \phi\| \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\int |\phi_n(x) - \phi(x)|^2 dx \right]^{1/2} = 0.$$

Πάντα μπορούμε να βρούμε τέτοια ακολουθία, διότι η συναρτησιακή ανάλυση μας βεβαιώνει πως το σύνολο των παντού παραγωγίσιμων συναρτήσεων είναι πυκνό εντός του $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Έπειτα, εξετάζουμε τη δράση $\hat{p}\phi_n$, η οποία είναι καλά ορισμένη από την κατασκευή των ϕ_n , και ορίζουμε

$$\hat{p}\phi \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{p}\phi_n$$

(για την ακρίβεια, η $\hat{p}\phi$ ορίζεται από την ιδιότητα $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\hat{p}\phi_n - \hat{p}\phi\| = 0$). Ενδέχεται και αυτό το όριο να μην υπάρχει, οπότε η $\hat{p}\phi$ δεν ορίζεται, όμως το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων στις οποίες αυτό το όριο υπάρχει είναι ευρύτερο από το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων όπου η $\phi(x)$ είναι παραγωγίσιμη. Επομένως, για να αποφανθούμε για τη δράση $\hat{p}\phi$, για παράδειγμα για να υπολογίσουμε τη μέση τιμή $(\phi, \hat{p}\phi)$, υπολογίζουμε το αποτέλεσμα στις $\hat{p}\phi_n$ στο όριο $n \rightarrow \infty$, π.χ. υπολογίζουμε το όριο

⁽⁵⁴⁾ Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε $\hat{A}^n = (\hat{A}^\dagger)^n$, άρα $(i\hat{A})^n = (-i\hat{A}^\dagger)^n = [(-i\hat{A})^\dagger]^n$, από όπου προκύπτει, μέσω της δυναμοσειράς, $e^{-i\hat{A}} = [e^{i\hat{A}}]^\dagger$.



Σχήμα 1: Άνω: Η συνάρτηση ϕ , με ασυνεχή παράγωγο στο μηδέν, προσεγγίζεται ως όριο ακολουθίας συναρτήσεων ϕ_n με συνεχή παράγωγο. Κάτω: Οι παράγωγοι των ϕ και ϕ_n .

$\lim_{n \rightarrow \infty} (\phi_n, \hat{p} \phi_n)$.

Στο ακόλουθο παράδειγμα, θέτουμε το ιδιάζον σημείο στο $x = 0$ και εστιάζουμε σε ένα διάστημα $(-1, +1)$ γύρω από αυτό, υποθέτοντας ότι εκτός του διαστήματος η συνάρτηση συμπεριφέρεται εντελώς ομαλά. Έστω

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 + x, & x < 0, \\ 1 - x, & x > 0. \end{cases}$$

Αυτή προσεγγίζεται από την ακολουθία

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 1 + x, & x < -1/n, \\ -\frac{1}{2}nx^2 + (1 - 1/2n), & -1/n < x < 1/n \\ 1 - x, & x > 1/n \end{cases}$$

της οποίας κάθε όρος είναι συνεχής και παραγωγίσιμη συνάρτηση ακόμα και στο $x = 0$.

Οι ϕ και ϕ_n απεικονίζονται στο Σχ. 1. Βρίσκουμε

$$\phi'_n(x) = \begin{cases} 1, & x < -1/n, \\ 2nx, & -1/n < x < 1/n \\ -1, & x > 1/n \end{cases}$$

Ορίζουμε τότε

$$\hat{p}\phi = \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{p}\phi_n = -i\hbar \lim_{n \rightarrow \infty} \phi'_n.$$

Και πάλι, τα όρια των συναρτήσεων πρέπει να ερμηνευτούν στον χώρο $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, δηλαδή η $\hat{p}\phi$ ορίζεται στην πραγματικότητα από τη σχέση $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\hat{p}\phi_n - \hat{p}\phi\| = 0$. Το αποτέλεσμα, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση μοναδιαίου βήματος, γράφεται και

$$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar(1 - 2\theta(x)).$$

Βλέπουμε ότι, για τον υπολογισμό της μέσης τιμής της ορμής, $\int \phi^*(x)\hat{p}\phi(x)dx$, το σημείο ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου δεν δημιουργεί προβλήματα: οριακά, αριστερά της ασυνέχειας παίζει ρόλο η παράγωγος από αριστερά, ενώ δεξιά της ασυνέχειας η παράγωγος από δεξιά. Αυτό το συμπέρασμα γενικεύεται για οποιαδήποτε συνεχή κυματοσυνάρτηση με απομονωμένα (διακριτά) σημεία ασυνέχειας της παραγώγου. Η χρήση των ϕ_n μάς έδωσε λοιπόν τη δυνατότητα να επεξεργαστούμε μαθηματικά μια έκφραση που αρχικά ήταν ασαφής: τη δράση του τελεστή $\hat{p}$, δηλαδή της παραγωγίσης, σε μια συνάρτηση με ασυνεχή πρώτη παράγωγο.

Τα πράγματα περιπλέκονται στην περίπτωση του $\hat{p}^2$ που χρειάζεται για την κινητική ενέργεια. Η δράση του τελεστή $\hat{p}^2$ στη ϕ περνά επίσης μέσα από τη δράση του στις ϕ_n :

$$\phi''_n(x) = \begin{cases} 2n, & -1/n < x < 1/n \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Αλλά αυτή είναι μια αναπαράσταση της $\delta(x)$ (για την ακρίβεια, της $2\delta(x)$). Καταλήγουμε

$$\hat{p}^2\phi(x) = +2\hbar^2\delta(x),$$

η οποία, συγκρίνοντας με την έκφραση $\hat{p}\phi(x) = -i\hbar(1 - 2\theta(x))$, συμφωνεί με την ταυτότητα $\theta'(x) = \delta(x)$. Η $\delta(x)$ δεν είναι μεν κανονική συνάρτηση, αλλά εξυπηρετεί αν θέλουμε να υπολογίσουμε την ποσότητα $\langle p^2 \rangle$:

$$(\phi, \hat{p}^2\phi) = \int \phi^*(x)\hat{p}^2\phi(x) dx = 2\hbar^2 \int \phi(x)\delta(x)dx = 2\hbar^2\phi(0)$$

(λαμβάνοντας υπόψη ότι στο δεδομένο παράδειγμα, $\phi^*(x) = \phi(x)$). Δηλαδή, βρίσκουμε

κινητική ενέργεια συμπυκνωμένη σε ένα ιδιάζον σημείο ($x = 0$) άπειρης καμπυλότητας. Το ίδιο θα βρίσκαμε αν αντικαθιστούσαμε στο εσωτερικό γινόμενο τους όρους της ακολουθίας και παίρναμε το όριο, αντί να χρησιμοποιήσουμε τη μορφή με τη $\delta(x)$.

Ας επιχειρήσουμε τώρα να βρούμε την κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην ασυνεχή συνάρτηση

$$\psi(x) = \phi'(x) = 1 - 2\theta(x) = \begin{cases} 1, & x < 0 \\ -1, & x > 0. \end{cases}$$

Την προσεγγίζουμε με την ακολουθία καμπυλών τρίτου βαθμού σε ολοένα συρρικνούμενα διαστήματα $(-1/n, 1/n)$,

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 1, & x < -1/n \\ \frac{1}{2}n^3(x + \sqrt{3}/n)x(x - \sqrt{3}/n), & -1/n < x < 1/n \\ -1, & x \geq 1/n \end{cases}$$

οι οποίες είναι συνεχείς με συνεχή πρώτη παράγωγο (ακόμα και στα $x = \pm 1/n$). Βρίσκουμε:

$$\psi'(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}n^3(3x^2 - \frac{3}{n^2}) & \text{και} & \psi_n''(x) = \begin{cases} 3n^3x, & -1/n \leq x \leq 1/n \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \\ 0 & \end{cases}$$

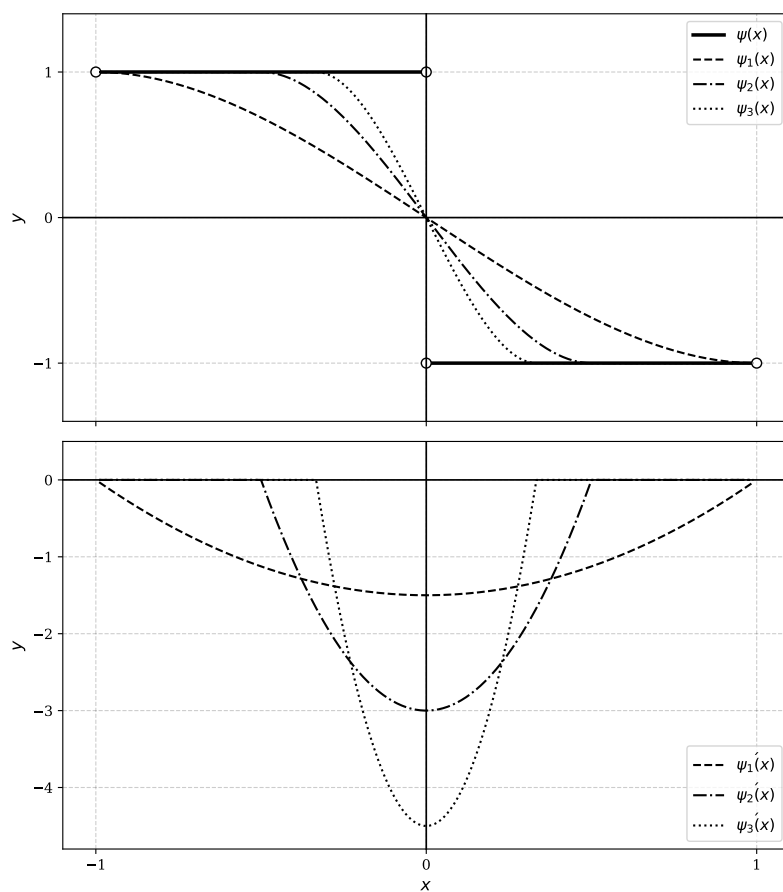
Οι ψ , ψ_n , ψ' και ψ'_n απεικονίζονται στο Σχ. 2. Στα σημεία $x = \pm 1/n$ οι ψ'_n έχουν διαφορετική παράγωγο από αριστερά και από δεξιά, δηλαδή οι ψ_n'' είναι ασυνεχείς, αλλά αυτό δεν μας εμποδίζει να ορίσουμε το εσωτερικό γινόμενο (ψ_n, ψ_n'') , δηλαδή να ορίσουμε τη μέση τιμή $\langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_n}$. Για τον υπολογισμό, εξυπηρετεί περισσότερο η έκφραση που εκμεταλλεύεται την ερμιτιανότητα του $\hat{p}$ και μεταφέρει με τη δράση του στο αριστερό μέλος του εσωτερικού γινομένου:

$$(\psi, \hat{p}^2 \psi) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\psi_n, \hat{p}^2 \psi_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\hat{p} \psi_n, \hat{p} \psi_n) = \hbar^2 \lim_{n \rightarrow \infty} \int |\psi'_n(x)|^2 dx.$$

Αντικαθιστώντας την ψ'_n , βρίσκουμε

$$(\psi, \hat{p}^2 \psi) = (\text{const.}) \times \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 = \infty$$

(όπου η σταθερά εξαρτάται από το διάστημα ολοκλήρωσης, αλλά είναι σίγουρα > 0). Επομένως, στην περίπτωση ασυνέχειας της ψ , η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας απειρίζεται. Σε αναλογία με το προηγούμενο παράδειγμα, η χρήση των ψ_n μάς επέτρεψε να επεξεργαστούμε μαθηματικά μια έκφραση που αρχικά ήταν ασαφής: τη δράση του τελεστή $\hat{p}^2$, δηλαδή της δεύτερης παραγωγίσης, σε μια ασυνεχή συνάρτηση.



Σχήμα 2: Άνω: Η συνάρτηση ψ , με ασυνεχή παράγωγο στο μηδέν, προσεγγίζεται ως όριο ακολουθίας συναρτήσεων ψ_n με συνεχή παράγωγο. Κάτω: Οι παράγωγοι των ψ_n .

Με ανάλογο τρόπο εργαζόμαστε όποτε έχουμε δράσεις τελεστών που φαινομενικά δεν ορίζονται σε κάποιες κυματοσυναρτήσεις.

Γενικά, αν ένας γραμμικός τελεστής $\hat{A}$ δίνει $\|\hat{A}\psi\|^2 = |(\hat{A}\psi, \hat{A}\psi)| < \infty$ για κάθε ψ τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, τότε ονομάζεται *φραγμένος* (*bounded*). Οι φραγμένοι ερμιτιανοί τελεστές χαρακτηρίζονται από φραγμένο φάσμα και αντιστοιχούν σε φυσικά μεγέθη με φραγμένο φάσμα τιμών. Πολλοί χρήσιμοι τελεστές, όμως, δεν είναι φραγμένοι (π.χ. της θέσης, της ορμής, της ενέργειας).

4.10 Προβλήματα

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

4. Δείξτε ότι οι συντελεστές αναπτύγματος $\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i$ (όπου $\{u_i\}$ ορθοκανονική βάση) ικανοποιούν τη σχέση $c_i = (u_i, \Psi)$.
5. Δείξτε ότι το εσωτερικό γινόμενο κυματοσυναρτήσεων (Ψ, Φ) , με $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και $\Phi = \sum_i c'_i u_i$, επάγει εσωτερικό γινόμενο των ακολουθιών $c \equiv \{c_i\}$ και $c' \equiv \{c'_i\}$, με τιμή $(c, c') = \sum_i c_i^* c'_i$. Δείξτε ότι αυτή η μορφή ικανοποιεί τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου των κυματοσυναρτήσεων [βλ. εξ. (13): αντιγραμμικότητα ως προς το πρώτο όρισμα (c), γραμμικότητα ως προς το δεύτερο (c'), θετική νόρμα $\|c\|^2 = (c, c)$, και $(c, c') = (c', c)^*$].
6. Θεωρήστε τον χώρο $\mathcal{L}^2([0, 1])$ με συνοριακές συνθήκες $\Psi(0) = \Psi(1) = 0$ και τη βάση $u_n(x) = \sin(n\pi x)$ ($n = 1, 2, \dots$). Βρείτε τα στοιχεία πίνακα α) T_{nm} του τελεστή της κινητικής ενέργειας $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ και β) x_{nm} του τελεστή θέσης $\hat{x}$. (Υπόδειξη: θα σας χρησιμεύσει η ταυτότητα $2 \sin \alpha \sin \beta = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$. Θα χρειαστεί ολοκλήρωση κατά παράγοντες.)
7. Θεωρήστε ανάπτυγμα των κυματοσυναρτήσεων σε βάση. Δείξτε ότι ο πολλαπλασιασμός γραμμικών τελεστών αναπαριστάται από γινόμενο πινάκων (ενδεχομένως άπειρης διάστασης): $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \rightarrow C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$ (σχ. 52). [Υπόδειξη: Γράψτε το ανάπτυγμα της δράσης του $\hat{B}$ σε μια $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και προχωρήστε σε αναλογία με την απόδειξη της σχ. 51.]
8. Υποθέστε ότι, για κάποιον γραμμικό τελεστή $\hat{A}$, ισχύει $(u_i, \hat{A} u_j) = (u_j, \hat{A} u_i)^*$, όπου u_i και u_j διανύσματα βάσης. Δείξτε ότι ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. (Υπόδειξη: αναπτύξτε τυχαία κυματοσυνάρτηση στη δεδομένη βάση, $\Psi = \sum_i c_i u_i$, και ελέγξτε ότι το εσωτερικό γινόμενο $(\Psi, \hat{A} \Psi)$ είναι πραγματικός αριθμός.)
9. Δείξτε τις ακόλουθες ιδιότητες ερμιτιανών συζυγών χρησιμοποιώντας την αναπαράστασή τους με πίνακες.
- Ο $\hat{A}^\dagger$ είναι μοναδικός (δεν υπάρχουν δύο διαφορετικοί τελεστές που να είναι ερμιτιανοί συζυγείς του $\hat{A}$).
 - $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.
 - Ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν και μόνο αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.
 - $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.
 - Οι τελεστές $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ και $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ είναι ερμιτιανοί.
 - Οι τελεστές $\frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$ και $\frac{1}{2i}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$ είναι ερμιτιανοί.
10. Ξεκινώντας από τον ορισμό των μοναδιαίων τελεστών $\hat{U}$ (διατήρηση νόρμας, εξ. 60), αποδείξτε ότι η δράση τους διατηρεί και το εσωτερικό γινόμενο (εξ. 61).

(Υπόδειξη: για δύο τυχαίες κυματοσυναρτήσεις, Ψ και Φ , εξετάστε τις ποσότητες $\|\hat{U}(\Psi + \Phi)\|^2$ και $\|\hat{U}(\Psi + i\Phi)\|^2$.)

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

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

12. Δείξτε ότι ο τελεστής μετασχηματισμού βάσης $\hat{U}$ (εξ. 64) είναι μοναδιαίος. (Υπόδειξη: εξετάστε τη νόρμα $\|\hat{U}\Psi\|$ για τυχαία $\Psi = \sum_i d_i v_i$.)

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

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

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

14. Θεωρήστε την κυματοσυνάρτηση (36) (κεφ. 3), $\Phi_{x_0, \eta}(x)$. Στο όριο $\eta \ll 1$: α) δείξτε ότι η μέση τιμή του τελεστή θέσης είναι x_0 , ενώ η τυπική απόκλιση τείνει στο μηδέν. β) υπολογίστε τη νόρμα $\|\hat{x}\Phi_{x_0, \eta} - x_0\Phi_{x_0, \eta}\|$. Εξετάστε αν η νόρμα τείνει στο μηδέν. Δικαιολογείται να πούμε ότι η $\Phi_{x_0, \eta}$ είναι, προσεγγιστικά, ιδιοκατάσταση του τελεστή θέσης με ιδιοτιμή x_0 ; γ) Εξετάστε αν η νόρμα $\|\Phi_{x_0, \eta} - \Phi_{x_0, \eta/2}\|$ τείνει στο μηδέν. Μια ακολουθία από κυματοσυναρτήσεις Φ_{x_0, η_n} με ολοένα μειούμενο η_n , έτσι ώστε $\lim_{n \rightarrow \infty} \eta_n = 0$ (δηλαδή, με διασπορά να τείνει στο μηδέν), συγκλίνει στο χώρο Hilbert; Συγκρίνετε με το ερώτημα (β) και με το πρόβλημα 9 του κεφ. 3 και σχολιάστε.

5 Χρονική εξέλιξη των καταστάσεων: η εξίσωση Schrödinger

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

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

Προφανώς, υπάρχει μια απεικόνιση της κατάστασης σε χρόνο t_1 στην κατάσταση σε χρόνο t_2 . Στη μαθηματική περιγραφή, ονομάζουμε αυτή την απεικόνιση $\hat{U}(t_2, t_1)$. Για την $\Psi(t_2) = \hat{U}(t_2, t_1) \Psi(t_1)$ αξιώνουμε τα εξής. Πρώτον, $\|\Psi(t_2)\| = \|\Psi(t_1)\| = 1$, ώστε να αντιστοιχούν σε καταστάσεις. Δεύτερον, να ισχύει η αρχή της επαλληλίας, δηλαδή η απεικόνιση $\hat{U}$ να είναι γραμμική: $\hat{U}(t_2, t_1)(a\Phi + b\Psi) = a\hat{U}(t_2, t_1)\Phi + b\hat{U}(t_2, t_1)\Psi$. Από τα δύο αξιώματα προκύπτει ότι ο τελεστής $\hat{U}$ είναι μοναδιαίος.⁽⁵⁵⁾ Το γινόμενο

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1) \quad (68)$$

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

Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης ενδέχεται να μην εξαρτάται από τον αρχικό χρόνο, παρά μόνον από τη διαφορά $t_2 - t_1 = t$. Δηλαδή, είτε ξεκινήσουμε από μια κατάσταση Ψ σε χρόνο t_1 και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t_1 + t$, είτε ξεκινήσουμε από την ίδια Ψ σε χρόνο $t'_1 \neq t_1$ και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t'_1 + t$, να έχουμε τα ίδια στατιστικά αποτελέσματα. Από φυσικής πλευράς, αυτό απαιτεί να μη δρούμε στο σύστημα με χρονικά μεταβαλλόμενες δυνάμεις ή πεδία. Τότε, λέμε ότι έχουμε *συμμετρία χρονικής μετατόπισης*. Σε αυτή την περίπτωση, $\hat{U}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_2 - t_1) \equiv \hat{U}(t)$, δηλαδή, ο (μοναδιαίος) τελεστής χρονικής εξέλιξης εξαρτάται μόνο από μια χρονική παράμετρο. Επίσης ισχύει, λόγω της (68), $\hat{U}(t+t') = \hat{U}(t)\hat{U}(t')$, και προφανώς $\hat{U}(0) = 1$. Τότε ο τελεστής χρονικής εξέλιξης γράφεται στη μορφή (δίνουμε το αποτέλεσμα χωρίς απόδειξη)

$$\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}, \quad (69)$$

⁽⁵⁵⁾Εξ ορισμού, οι μοναδιαίοι τελεστές είναι αντιστρέψιμοι, γραμμικοί και διατηρούν τη νόρμα. Εδώ, αξιώσαμε τη διατήρηση της νόρμας για τα διανύσματα με μοναδιαία νόρμα, αλλά από τη γραμμικότητα προκύπτει η διατήρηση της νόρμας για όλα τα διανύσματα.

όπου $\hat{H}$ ερμιτιανός τελεστής που ονομάζεται Χαμιλτονιανή του συστήματος και ερμηνεύεται ως τελεστής της ενέργειας. Η σταθερά του Planck $\hbar$ υπεισέρχεται εδώ για την μετατροπή μονάδων μεταξύ χρόνου και ενέργειας.⁽⁵⁶⁾ Έχουμε, λοιπόν,

$$\Psi(t_1 + t) = \hat{U}(t) \Psi(t_1) = e^{-it\hat{H}/\hbar} \Psi(t_1), \quad (70)$$

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

$$i\hbar\frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}\Psi(t). \quad (71)$$

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

Η ίδια εξίσωση (71) προκύπτει και αν δεν έχουμε συμμετρία χρονικής μετατόπισης, αλλά, τότε, ο τελεστής $\hat{U}$ εξαρτάται από δύο παραμέτρους (t_2, t_1) και δεν συνδέεται με τη Χαμιλτονιανή $\hat{H}$ μέσω της εξ. (69). Ας δούμε τη γενική αυτή περίπτωση. Ξεκινώντας σε χρόνο t με μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(t)$, έχουμε σε χρόνο $t + \delta t$ την $\Psi(t + \delta t) = \Psi(t) + \delta\Psi$. Αξιώνουμε τα ακόλουθα.

1. Διατήρηση της νόρμας $\|\Psi(t)\| = \|\Psi(t + \delta t)\| = 1$, διότι και οι δύο εκφράζουν φυσικές καταστάσεις.
2. Συνέχεια, διότι η χρονική εξέλιξη κατανομής πιθανότητας των παρατηρήσιμων μεγεθών είναι συνεχής.⁽⁵⁷⁾
3. Διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης ως προς το χρόνο, διότι ο χαρακτηρισμός της $\Psi(t)$ ως κατάστασης, σημαίνει ότι περιέχει όλη τη δυνατή πληροφορία για το σύστημα και πρέπει να επαρκεί ως αρχική συνθήκη.⁽⁵⁸⁾ Από αυτή την απαίτηση

⁽⁵⁶⁾ Η σταθερά $\hbar$ θα μπορούσε να απορροφηθεί στον ορισμό του τελεστή $\hat{H}$. Η εκπεφρασμένη παρουσία της στην εξίσωση έχει ιστορικούς λόγους.

⁽⁵⁷⁾ Εδώ τονίζουμε την ερμηνεία αυτής της πρότασης. Ξεκινάμε με μια συλλογή και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο t . Προετοιμάζουμε μια πανομοιότυπη συλλογή και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t + \delta t$. Για επαρκώς μικρά δt , τα δύο σετ μετρήσεων τείνουν στην ίδια στατιστική. Ποια δεν είναι η ερμηνεία: κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο t και, στα ήδη μετρημένα συστήματα, κάνουμε επιπλέον μετρήσεις σε χρόνο $t + \delta t$.

⁽⁵⁸⁾ Σε περίπτωση διαφορικής εξίσωσης ανώτερης τάξης, θα χρειαζόμασταν και την παράγωγο $\frac{d\Psi(t)}{dt}$, ή και ανώτερες παραγώγους, ως αρχική συνθήκη. Τότε, όμως, η Ψ δεν θα κωδικοποιούσε πλήρως την προετοιμασία του συστήματος: οι παράγωγοι εκφράζουν τη χρονική μεταβολή της $\Psi(t)$ σε προγενέστερους χρόνους και κωδικοποιούν επίσης την προετοιμασία. Σε σύγκριση, στην κλασική μηχανική, η κατάσταση δεν περιγράφεται μόνο από τη θέση, αλλά από το ζεύγος θέσης-ορμής, δηλαδή θέσης και χρονικής παραγώγου της, που απαιτούνται ως αρχικές συνθήκες. Δεν χρειάζεται, όμως, και η παράγωγος της ορμής ως αρχική συνθήκη.

προκύπτει ότι, για μικρά δt , η $\|\delta\Psi\|$ θα είναι επίσης μικρή, και θα μηδενίζεται γραμμικά στο όριο $\delta t \rightarrow 0$: $\delta\Psi \propto \delta t$.

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

Από τα παραπάνω αξιώματα λαμβάνουμε:

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

Ο όρος $\|\delta\Psi\|^2$ γίνεται αμελητέος για μικρά δt (είναι ανάλογος του δt^2 λόγω της προαναφερθείσας γραμμικής σχέσης $\delta\Psi \propto \delta t$). Επομένως, $\text{Re}(\Psi(t), \delta\Psi) = 0$.⁽⁵⁹⁾ Θέτοντας $\delta\Psi = \hat{A}(t)\Psi(t)$, και απαιτώντας ο $\hat{A}$ να είναι γραμμικός, λόγω της αξίωσης της αρχής της επαλληλίας, συμπεραίνουμε ότι η ποσότητα $(\Psi, \hat{A}\Psi) \equiv (\Psi, \delta\Psi)$ είναι καθαρά φανταστικό μέγεθος, ή, αλλιώς, ότι η ποσότητα $i(\Psi, \hat{A}\Psi) = (\Psi, i\hat{A}\Psi) \in \mathbb{R}$. Αυτό σημαίνει ότι ο τελεστής $i\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. Επίσης, λόγω του προαναφερθέντος αξιώματος 3 (πρωτοβάθμιας διαφορικής εξίσωσης), πρέπει $\hat{A}\Psi = \delta\Psi \propto \delta t$, οπότε πρέπει $\hat{A} \propto \delta t$. Με βάση αυτά, ο ερμιτιανός τελεστής $i\hat{A}$ γράφεται στη μορφή $i\hat{A}(t) = \frac{1}{\hbar}\hat{H}(t)\delta t$, όπου $\hat{H}(t)$ ερμιτιανός τελεστής, τον οποίο ερμηνεύουμε ως τη Χαμιλτονιανή. Καταλήγουμε: $\delta\Psi = -i\frac{1}{\hbar}\hat{H}(t)\Psi\delta t$, δηλ.

$$i\hbar\frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}(t)\Psi(t). \quad (72)$$

Αυτή είναι η εξ. Schrödinger (71), με τη διαφορά ότι εδώ η Χαμιλτονιανή επιτρέπεται να είναι συνάρτηση του χρόνου: $\hat{H} = \hat{H}(t)$. Στην ειδική περίπτωση, που η $\hat{H}$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου, η (72) ταυτίζεται με την (71). Τότε, ολοκληρώνοντας ως προς το χρόνο με αρχική συνθήκη $\Psi(t_1)$, λαμβάνουμε ως φορμαλιστική λύση την εξ. (70).

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

⁽⁵⁹⁾Πρόβλημα 1.

5.1 Χρονική εξάρτηση μέσω των τιμών. Διατηρούμενα μεγέθη

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

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t &= \left(\frac{d}{dt} \Psi(t), \hat{A} \Psi(t) \right) + \left(\Psi(t), \hat{A} \frac{d}{dt} \Psi(t) \right) \\
 &= \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(t), \hat{A} \Psi(t) \right) + \left(\Psi(t), \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(t) \right) \quad [\text{από εξ. Schrödinger}] \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \Psi(t), \hat{A} \Psi(t)) + \frac{1}{i\hbar} (\Psi(t), \hat{A} \hat{H} \Psi(t)) \quad [\text{ιδιότητες (13) εσ. γινομένου}] \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} (\Psi(t), \hat{H} \hat{A} \Psi(t)) + \frac{1}{i\hbar} (\Psi(t), \hat{A} \hat{H} \Psi(t)) \quad [\text{επειδή ο } \hat{H} \text{ είναι ερμιτιανός}] \\
 &= \frac{1}{i\hbar} (\Psi(t), [\hat{A}, \hat{H}] \Psi(t)) \\
 &\equiv \frac{1}{\hbar} \langle i[\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t.
 \end{aligned} \tag{73}$$

Εδώ βλέπουμε μια εφαρμογή της διαπίστωσης ότι, για δύο ερμιτιανούς τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{H}$, η ποσότητα $i[\hat{H}, \hat{A}]$ είναι ερμιτιανός τελεστής [βλ. συζήτηση μετά την εξ. (34)]. Εάν το μερούμενο μέγεθος έχει εκπεφρασμένη χρονική εξάρτηση, δηλ. $\hat{A} = \hat{A}(t)$, τότε πρέπει να ληφθεί υπ' όψη και η παραγώγιση $(\Psi(t), \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi(t))$. Λαμβάνουμε:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{1}{\hbar} \langle i[\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t \tag{74}$$

Αυτή ονομάζεται συχνά *σχέση του Ehrenfest*.

Ως εφαρμογή αυτού του αποτελέσματος, εξετάζουμε τη μεταβολή της θέσης ενός σωματιδίου, για το οποίο $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x})$ με $\hat{H} \Psi = (-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)) \Psi$ (δηλ. η Χαμιλτονιανή έχει όρο κινητικής ενέργειας και δυναμικού που εξαρτάται από τη θέση). Είναι εύκολο να υπολογίσουμε τους μεταθέτες $[\frac{1}{2m} \hat{p}^2, \hat{x}] = -i\hbar \frac{1}{m} \hat{p}^{(60)}$ και $[\hat{V}(\hat{x}), \hat{x}] = 0$. Αντικαθιστώντας στην (74), και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι ο τελεστής $\hat{x}$ δεν έχει χρονική εξάρτηση, λαμβάνουμε

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle, \tag{75}$$

δηλαδή τη γνωστή, κλασική σχέση ταχύτητας-ορμής, $p = mv$. Επίσης είναι εύκολο να

⁽⁶⁰⁾ Πρόβλημα 11 του κεφ. 3.

λάβουμε⁽⁶¹⁾ τη σχέση

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle. \quad (76)$$

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

Από τα παραπάνω προκύπτει και το ακόλουθο πολύ σημαντικό πόρισμα. Εάν για κάποιο μετρήσιμο μέγεθος ο αντίστοιχος τελεστής μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή, $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, τότε η κατανομή πιθανότητας του μεγέθους δεν αλλάζει με το χρόνο. Αυτό, διότι, από την $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ προκύπτει $[\hat{H}, \hat{A}^n] = 0$, δηλαδή, όλες οι δυνάμεις του $\hat{A}$ μετατίθενται με τη Χαμιλτονιανή. Από την εξ. (74) (με $\partial\hat{A}/\partial t = 0$) προκύπτει αμέσως

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

επομένως όλες οι ροπές της κατανομής είναι ανεξάρτητες του χρόνου.⁽⁶²⁾ Μεγέθη, για τα οποία $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, δηλαδή μεγέθη συμβατά με την ενέργεια, ονομάζονται *διατηρούμενα*.

Εάν το σύστημα βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, τότε είναι εύκολο να δει κανείς πως $\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle_\Psi = (\Psi, \hat{H}\hat{A}\Psi) - (\Psi, \hat{A}\hat{H}\Psi) = (\hat{H}\Psi, \hat{A}\Psi) - E(\Psi, \hat{A}\Psi) = 0$, δηλαδή $d\langle\hat{A}\rangle_\Psi/dt = 0$, ανεξάρτητα από το αν το μέγεθος είναι διατηρούμενο ή όχι. Δηλαδή, σε ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής διατηρείται η πυκνότητα πιθανότητας οποιουδήποτε μεγέθους, αρκεί αυτό να μην εξαρτάται ρητά από το χρόνο. Για παράδειγμα, στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου, η Χαμιλτονιανή ταυτίζεται με την κινητική ενέργεια. Τότε η ορμή διατηρείται χρονικά (όχι μόνο η μέση τιμή, αλλά και όλη η κατανομή πιθανότητας), διότι $[\frac{1}{2m}\hat{p}^2, \hat{p}] = 0$.

5.2 Σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου

Συνδυάζοντας τη σχέση του Ehrenfest (74) με την αρχή της αβεβαιότητας (30) για την ενέργεια και κάποιο άλλο μέγεθος $\hat{A}$, και υπό την προϋπόθεση ότι το $\hat{A}$ δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο, καταλήγουμε στην ανισότητα $(\Delta E)(\Delta A) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle| = \frac{1}{2}\hbar|d\langle\hat{A}\rangle/dt|$, ή

$$(\Delta E)\frac{(\Delta A)}{|d\langle\hat{A}\rangle/dt|} \equiv (\Delta E)\tau \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (77)$$

υποθέτοντας βέβαια ότι $d\langle\hat{A}\rangle/dt \neq 0$, δηλαδή ότι το μέγεθος δεν είναι διατηρούμενο. Όμως, η ποσότητα $d\langle\hat{A}\rangle/dt$ είναι ο ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής, επομένως η

⁽⁶¹⁾Πρόβλημα 2.

⁽⁶²⁾Πρόβλημα 3.

ποσότητα $\tau \equiv \frac{(\Delta A)}{|d\langle \hat{A} \rangle/dt|}$ είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος που χρειάζεται η μέση τιμή για να μετακινηθεί κατά μία διασπορά. Με άλλα λόγια, ο τ είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος που χρειάζεται για να γίνει μια σημαντική μεταβολή στο $\langle \hat{A} \rangle$. Η παραπάνω ανισότητα ονομάζεται *σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου*.

Ένας τρόπος να διαπιστωθεί εάν κάποιο μέγεθος $\hat{A}$ είναι διατηρούμενο, είναι να γίνουν μετρήσεις του $\hat{A}$ σε διαφορετικούς χρόνους $t_1, t_2, \dots$ και να συγκριθεί η κατανομή πιθανότητας των μετρημένων τιμών σε αυτούς. Αν αυτή μένει σταθερή, τότε το $\hat{A}$ είναι διατηρούμενο (ή η κατάσταση Ψ είναι ιδιοκατάσταση της $\hat{H}$). Η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου μας δίνει μια τάξη μεγέθους της χρονικής διάρκειας τ που πρέπει να απέχουν η πρώτη από την τελευταία μέτρηση, ώστε να είμαστε βέβαιοι πως δεν υπάρχει αλλαγή. Σε χρονική διάρκεια $\delta t \ll \tau = \hbar/2(\Delta E)$, σύμφωνα με την (77), η μεταβολή του $\langle \hat{A} \rangle$ θα είναι αμελητέα και πιθανώς μη παρατηρήσιμη, είτε πρόκειται για διατηρούμενο μέγεθος είτε όχι.

5.3 Ρεύμα πιθανότητας και εξίσωση συνέχειας

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (78)$$

Εφόσον το δυναμικό είναι ερμιτιανός τελεστής, πρέπει $V(x) = V(x)^*$, δηλ. $V(x) \in \mathbb{R}$. Θεωρώντας την κυματοσυνάρτηση ως συνάρτηση του χώρου και του χρόνου, $\Psi = \Psi(x, t)$, η εξ. Schrödinger (71) γράφεται

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \right]. \quad (79)$$

Εξετάζουμε τώρα τη χρονική μεταβολή της πυκνότητας πιθανότητας:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} &\equiv \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)] \\
&= \left[\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right]^* \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \\
&= +\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi^*(x, t) \right] \Psi(x, t) \\
&\quad -\frac{i}{\hbar} \Psi^*(x, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) \right] \quad [\text{από εζ. (79)}] \\
&= \frac{1}{2} \left[-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{m} \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right] \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi(x, t) \frac{(-i\hbar)}{m} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} - \Psi^*(x, t) \frac{(-i\hbar)}{m} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi(x, t) - \Psi(x, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi^*(x, t) \right].
\end{aligned}$$

Ορίζοντας το αρνητικό της ποσότητας στο δεξιό μέλος ως ρεύμα πιθανότητας

$$j(x, t) \equiv \frac{1}{2} \left[\Psi^*(x, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi(x, t) - \Psi(x, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi^*(x, t) \right] = \text{Re} \left[\Psi^*(x, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi(x, t) \right] \quad (80)$$

καταλήγουμε στην εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0. \quad (81)$$

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

$$\frac{d}{dt} P([a, b], t) + j(b) - j(a) = 0. \quad (82)$$

Σε τρεις διαστάσεις, το ρεύμα πιθανότητας και η εξίσωση συνέχειας λαμβάνουν τη διανυσματική μορφή⁽⁶³⁾

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{2} \left[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right] \quad (83)$$

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (84)$$

⁽⁶³⁾ Πρόβλημα 4.

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

$$\frac{d}{dt}P(\Omega, t) + \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) dS = 0, \quad (85)$$

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

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

5.4 Ανάπτυγμα σε ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής

Έστω Φ_n μια ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E_n : $\hat{H} \Phi_n = E_n \Phi_n$. Από την εξ. (71) έχουμε:

$$i\hbar \frac{d\Phi_n}{dt} = \hat{H} \Phi_n = E_n \Phi_n, \quad (86)$$

η οποία έχει ως λύση

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

ως ειδική περίπτωση της (70). Δηλαδή, η κυματοσυνάρτηση μένει αμετάβλητη, με την εξαίρεση πολλαπλασιασμού με έναν παράγοντα φάσης με μέτρο τη μονάδα ($|e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}| = 1$, διότι $E_n \in \mathbb{R}$ ως ιδιοτιμή ερμιτιανού τελεστή), ο οποίος δεν παίζει ρόλο για τα παρατηρήσιμα μεγέθη.

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

$$\Psi(0) = \sum_n c_n(0) \Phi_n \quad (88)$$

ένας γραμμικός συνδυασμός τους σε χρόνο $t = 0$ με $c_n(0)$ κάποιους συντελεστές (το άθροισμα ενδέχεται να περιλαμβάνει άπειρους όρους). Τότε, για $t > 0$ παίρνουμε⁽⁶⁴⁾

$$\Psi(t) = e^{-it\frac{1}{\hbar}\hat{H}} \Psi(0) = \sum_n c_n(0) e^{-it\frac{1}{\hbar}\hat{H}} \Phi_n = \sum_n c_n(0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Phi_n. \quad (89)$$

⁽⁶⁴⁾ Χρησιμοποιούμε την εξ. (70). Βλ. και Πρόβλημα 5.

Ορίζοντας

$$c_n(t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} c_n(0), \quad (90)$$

η τελευταία εξίσωση ξαναγράφεται

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Phi_n. \quad (91)$$

Επομένως, από τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών $c_n(t)$, μπορούμε να ανασυνθέσουμε την κυματοσυνάρτηση σε οποιοδήποτε χρόνο t . Η εξ. (90) δίνει ισοδύναμα την αντίστοιχη διαφορική

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t). \quad (92)$$

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

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

Θα συζητήσουμε τώρα κατά πόσον οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί στη μορφή (88), δηλαδή κατά πόσον οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής αποτελούν ορθοκανονική βάση, ώστε να μπορεί κανείς να εκμεταλλευθεί τη σχ. (89) για τον υπολογισμό της χρονικής εξέλιξης. Για να συμβαίνει αυτό πρέπει να πληρούνται δύο προϋποθέσεις. Η πρώτη είναι, οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής να ικανοποιούν τη σχέση ορθοκανονικότητας $(\Phi_m, \Phi_n) = \delta_{mn}$. Ειδικότερα, εφόσον πρόκειται για φυσικές καταστάσεις, θα ισχύει σίγουρα η συνθήκη κανονικοποίησης $(\Phi_n, \Phi_n) = 1$. Για τη συνθήκη ορθογωνιότητας, $(\Phi_m, \Phi_n) = 0$ για $n \neq m$, παρατηρούμε ότι ισχύει, αν $E_n \neq E_m$, δηλαδή αν οι ιδιοτιμές διαφέρουν. Αυτό το έχουμε δείξει για τις ιδιοκαταστάσεις διαφορετικών ιδιοτιμών κάθε ερμιτιανού τελεστή.⁽⁶⁵⁾ Αν όμως ένα υποσύνολο γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοκαταστάσεων $\{\Phi_\lambda\}$ αντιστοιχεί στην ίδια ιδιοτιμή, E_λ , δηλαδή αν οι ιδιοκαταστάσεις είναι *εκφυλισμένες*,⁽⁶⁶⁾ τότε αυτές δεν είναι υποχρεωτικά ορθογώνιες, διότι, αν π.χ. οι $\Phi_\lambda, \Phi'_\lambda$ είναι ορθογώνιες, μπορούμε να κατασκευάσουμε την $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_\lambda + \Phi'_\lambda)$, η οποία είναι εμφανώς ιδιοκατάσταση με την ίδια ιδιοτιμή, αλλά δεν είναι ορθογώνια σε καμία από τις $\Phi_\lambda, \Phi'_\lambda$. Σε αυτή την περίπτωση, ωστόσο, το σύνολο εκφυλισμένων ιδιοκαταστάσεων με την ίδια ιδιοτιμή έχει δομή γραμμικού χώρου, υπόχωρου του χώρου Hilbert.⁽⁶⁷⁾ Τότε, μπορούμε να επιλέξουμε μια ορθοκανονική βάση $\Phi_{\lambda,1}, \Phi_{\lambda,2}, \dots$ στον εκφυλισμένο υπόχωρο. Για οποιαδήποτε επιλεγμένη ορθοκανονική βάση του εκφυλισμένου υπόχωρου ισχύει προφανώς η ορθογωνιότητα μεταξύ των στοιχείων της και των ιδιοκαταστάσεων που αντιστοιχούν σε άλλες ιδιοτιμές. Ε-

⁽⁶⁵⁾ Βλ. κεφ. 3, τελευταία παράγραφο του εδαφίου «Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές» σελ. 12.

⁽⁶⁶⁾ Ο αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοκαταστάσεων με ίδια ιδιοτιμή ονομάζεται *εκφυλισμός* της ιδιοτιμής, και μπορεί να είναι απλός ($=1$), διπλός, κ.ο.κ., ή και άπειρος.

⁽⁶⁷⁾ Ο υπόχωρος ενδέχεται να έχει είτε πεπερασμένη είτε άπειρη διάσταση.

πομένως, η προϋπόθεση της ορθοκανονικότητας των ιδιοσυναρτήσεων ικανοποιείται.

Η δεύτερη προϋπόθεση είναι αυτή της πληρότητας, δηλαδή να επαρκούν οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής για να παραγάγουν το χώρο Hilbert. Η απάντηση εδώ είναι αρνητική στη γενική περίπτωση: για παράδειγμα, η Χαμιλτονιανή του ελεύθερου σωματιδίου, που περιέχει μόνο την κινητική ενέργεια, κινούμενου σε όλο τον χώρο, δεν έχει ιδιοκαταστάσεις (οι ιδιοσυναρτήσεις της δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες). Σε αυτές τις περιπτώσεις, το ενεργειακό φάσμα του συστήματος είναι εν μέρει ή ολικά συνεχές και η σχ. (89) εμπλουτίζεται από τις γενικευμένες καταστάσεις του συνεχούς φάσματος, όπως θα συζητήσουμε πιο κάτω. Ωστόσο, υπάρχουν Χαμιλτονιανές, π.χ., αυτή της κινητικής ενέργειας στο απειρόβαθιο φρέαρ, ή του απλού αρμονικού ταλαντωτή (κεφάλαιο 9), οι οποίες όχι μόνον έχουν ιδιοκαταστάσεις, αλλά που οι ιδιοκαταστάσεις τους αποτελούν ορθοκανονική βάση. Τότε, το ενεργειακό φάσμα του συστήματος είναι διακριτό, το ανάπτυγμα σε ιδιοσυναρτήσεις υπάρχει για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση Ψ , και η σχ. (89) εφαρμόζεται αυτούσια, χωρίς γενικευμένες καταστάσεις συνεχούς φάσματος.

Η εξίσωση ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής,

$$\hat{H} \Phi_n = E_n \Phi_n, \quad (93)$$

ονομάζεται και *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger*. Σε πεπερασμένη διάσταση N , η εξίσωση δίνει N γραμμικά ανεξάρτητες ορθογώνιες ιδιοκαταστάσεις, οι οποίες, επομένως, αποτελούν βάση. Προκύπτει όμως ένα πρόβλημα στο όριο $N \rightarrow \infty$. Καθώς το N αυξάνεται, οι ιδιοτιμές ενδέχεται να ομαδοποιούνται και να πυκνώνουν στον πραγματικό άξονα, ώστε να σχηματίζουν, στο όριο $N \rightarrow \infty$, πυκνό σύνολο σε συνεχές διάστημα. Εάν συμβαίνει αυτό, τότε αποκτούμε ένα συνεχές φάσμα, αλλά δεν ικανοποιείται πλέον η εξ. (93) με Φ_n εντός του χώρου Hilbert: οι Φ_n είναι ιδιοσυναρτήσεις, αλλά όχι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, άρα δεν αποτελούν βάση. Ωστόσο, με μια γενικευμένη έννοια, παράγουν το χώρο, και τις χρησιμοποιούμε φορμαλιστικά με ανάλογο τρόπο, όπως τα διανύσματα βάσης. Τότε, οι σχ. (88) και (89) παραμένουν μεν φορμαλιστικά σε ισχύ, όμως με ένα μέρος του αθροίσματος $\sum_n$ να αντικαθίσταται από ολοκλήρωμα, $\int c(E) \Phi_E dE$, όπου E είναι η ενέργεια εντός του συνεχούς φάσματος και Φ_E οι αντίστοιχες γενικευμένες (μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες) ιδιοσυναρτήσεις. Στα επόμενα εδάφια θα συζητήσουμε αυτό το θέμα από φυσικής και μαθηματικής πλευράς.

5.5 Ελεύθερο σωματίδιο και συνεχές φάσμα

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

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad (94)$$

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

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad \text{με } k = \frac{2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (95)$$

και ονομάζονται *επίπεδα κύματα*. Η απαίτηση $k = \frac{2\pi n}{L}$ προκύπτει από τις συνοριακές συνθήκες $u_k(-\frac{1}{2}L) = u_k(\frac{1}{2}L)$. Οι ιδιοτιμές είναι

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2, \quad (96)$$

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

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

Εξετάζουμε τώρα το όριο $L \rightarrow \infty$. Ας υποθέσουμε ότι η περιοχή στην οποία λαμβάνει χώρα το πείραμα βρίσκεται στο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$. Το b μπορεί να είναι μεγάλο, ακόμα και μακροσκοπικό (περιλαμβάνοντας τον εργαστηριακό χώρο όπου πραγματοποιείται το πείραμα), αλλά σταθερό και, τελικά, $b \ll L$. Οποιαδήποτε φυσικά πραγματοποιήσιμη συλλογή πρέπει να αναπαριστάται, στην πράξη, από κυματοσυνάρτηση Ψ που να είναι εντοπισμένη στο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$, δηλ. $\Psi(x) = 0$ για x εκτός του $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$ και ταυτόχρονα $\int_{-b/2}^{b/2} |\Psi|^2 dx = 1$. Άρα, οποιαδήποτε φυσικά πραγματοποιήσιμη Ψ δεν είναι ιδιοκατάσταση της κινητικής ενέργειας (95), διότι $\int_{-b/2}^{b/2} |u_k(x)|^2 dx = \frac{b}{L} \ll 1$. Ωστόσο, θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε τις u_k , ώστε να αντιμετωπίσουμε μαθηματικά μέσω της σχ. (89) τη χρονική εξέλιξη της Ψ .

Το πρόβλημα αντιμετωπίζεται κατασκευάζοντας κυματοσυναρτήσεις εντοπισμένες

στο $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$ μέσω επαλληλίας επίπεδων κυμάτων,

$$\Psi = \sum_k c_k u_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_k e^{ikx}. \quad (97)$$

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

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

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

Δεδομένου ότι ο δείκτης $k = \frac{2\pi n}{L}$ δίνει μια πυκνή διαμέριση στο $\mathbb{R}$ στο όριο $L \rightarrow \infty$, μπορούμε να τον προσεγγίσουμε με μια συνεχή μεταβλητή και να μετατρέψουμε το άθροισμα (97) σε ολοκλήρωμα. Από τη σχέση $k = \frac{2\pi n}{L}$ προκύπτει ότι η διαφορά αλληλόκληρων σημείων k είναι $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$, δηλ. $\frac{L}{2\pi} \Delta k = 1$. Παίρνοντας το άθροισμα $\sum_k c_k e^{ikx} = \sum_k c_k e^{ikx} \frac{L}{2\pi} \Delta k$, λαμβάνουμε

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_k c_k u_k(x) L \Delta k \quad (98)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_k c_k e^{ikx} \sqrt{L} \Delta k. \quad (99)$$

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

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int f_k e^{ikx} dk. \quad (100)$$

Η σύμπτωση αυτής της έκφρασης με το μετασχηματισμό Fourier της f_k στην $\Psi(x)$ οφείλεται στην ειδική μορφή των συναρτήσεων βάσης $u_k(x)$. Στη γενική περίπτωση που η Χαμιλτονιανή περιλαμβάνει και δυναμικό, οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι

άλλης μορφής, όμως η Συναρτησιακή Ανάλυση μας βεβαιώνει πως τα συμπεράσματα γενικεύονται.

Η χρονική εξέλιξη της Ψ προκύπτει από τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών c_k (ισοδύναμα f_k), σύμφωνα με τον κανόνα (89), όπου το άθροισμα σε διακριτές (αριθμήσιμες) ιδιοσυναρτήσεις ($\sum_n$) μετατρέπεται σε ολοκλήρωμα ($\int dk$):

$$\Psi(x, t) = \int \frac{L}{2\pi} c_k u_k(x) e^{-iE_k t/\hbar} dk \quad (101)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int f_k e^{ikx} e^{-iE_k t/\hbar} dk. \quad (102)$$

Από φυσικής πλευράς, αναμένουμε ότι η συνοριακή συνθήκη στο $\pm \frac{1}{2}L$ δεν θα παίζει ρόλο, εάν δώσουμε στο L τιμές μεγαλύτερες από οποιοδήποτε πρακτικά μετρήσιμο μήκος. Πρόκειται για ένα μαθηματικό τέχνασμα, ώστε να προσεγγίσουμε τις συνοριακές συνθήκες και τη συνεπαγόμενη πυκνή κατανομή ιδιοτιμών, ενώ από φυσικής πλευράς το πείραμα περιορίζεται σε ένα πεπερασμένο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$ γύρω από το 0, με $b \ll L$. Με άλλα λόγια, οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες με $L \rightarrow \infty$ πρέπει να δίνουν τα ίδια αποτελέσματα με το πρόβλημα σωματιδίου στον χώρο $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Παρατηρούμε, επίσης, ότι οι συναρτήσεις e^{ikx} είναι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής (94), παρ' ότι δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες σε όλο το $\mathbb{R}$. Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι μπορούμε να τις χρησιμοποιήσουμε για να σχηματίσουμε το γραμμικό συνδυασμό (100), αρκεί οι συντελεστές f_k να είναι κατάλληλοι, ώστε να σχηματιστεί τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση. Επομένως, η τιμή του L που υπεισέρχεται στις περιοδικές συνοριακές συνθήκες τελικά απαλείφεται από το πρόβλημα.

Από την άλλη, οι ενεργειακές ιδιοτιμές (96) πυκνώνουν στο όριο $L \rightarrow \infty$, παρ' ότι παραμένουν αριθμήσιμες όπως και τα k . Εάν θέσουμε ένα πειραματικό όριο δE ευκρίνειας στην ενέργεια, οσοδήποτε μικρό, οι ιδιοτιμές θα πυκνώσουν τελικά τόσο, ώστε να περιέχεται αυθαίρετα μεγάλος (εξαρτώμενος από το L) αριθμός ιδιοτιμών στο δE . Τότε, μπορούμε να προσεγγίσουμε το πρόβλημα με μια συνεχή κατανομή ενεργειακού φάσματος, όπως προσεγγίσαμε τα διακριτά k με μια συνεχή κατανομή.

Τέλος, σημειώνουμε ότι οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες δεν είναι απαραίτητες για την παραπάνω ανάλυση, παρά μόνο διευκολύνουν λόγω της χρήσης των επίπεδων κυμάτων ως ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής. Θα καταλήγαμε στα ίδια συμπεράσματα χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες μηδενισμού της κυματοσυνάρτησης στα όρια $x = \pm \frac{1}{2}L$, μόνο που τότε οι ιδιοσυναρτήσεις θα ήταν $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{L}$ και $\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ για n περιττό και άρτιο, αντίστοιχα ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Ανακεφαλαιώνοντας, αυτό που πετύχαμε εδώ είναι να εκφράσουμε την χρονική εξέλιξη της Ψ μέσω της χρονικής εξέλιξης των επίπεδων κυμάτων e^{ikx} . Το πρόβλημα για $L \rightarrow \infty$ ήταν ότι αυτά δεν ανήκουν στον χώρο Hilbert των φυσικών καταστάσεων,

διότι δεν είναι κανονικοποιήσιμα. Τότε, η δράση της Χαμιλτονιανής και του τελεστή χρονικής εξέλιξης σε αυτά πρέπει να οριστεί κατάλληλα, διότι οι τελεστές ορίζονται (και οι ιδιότητές τους ως ερμιτιανού και ως μοναδιαίου, αντίστοιχα, προκύπτουν) μόνο όταν δρουν σε κανονικοποιήσιμες συναρτήσεις. Π.χ., για να αποφανθούμε για την ερμιτιανότητα, δηλαδή ότι $(u_k, \hat{H}u_k) \in \mathbb{R}$, πρέπει το εσωτερικό γινόμενο $\int u_k^*(x) \hat{H}u_k(x) dx$ κατ' αρχήν να συγκλίνει και όχι να απειρίζεται. Δουλεύοντας με το πεπερασμένο διάστημα $[-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L]$, όπου είναι όλα καλά ορισμένα, και στέλνοντας το L στο άπειρο μόνο στο τέλος, το πρόβλημα αντιμετωπίζεται επιτυχώς.

Η έννοια του κυματοπακέτου

Μια κυματοσυνάρτηση της μορφής (102), επαρκώς εντοπισμένη στον χώρο και αποτελούμενη από πολλές (άπειρες) συνιστώσες, ονομάζεται *κυματοπακέτο*. Λόγω του όρου $e^{ikx} e^{-iE_k t/\hbar} = e^{ik(x - \frac{E_k}{\hbar k} t)}$, το κυματοπακέτο εμφανίζεται να μετακινείται με το χρόνο. Λόγω της διαφορετικής χρονικής εξέλιξης διαφόρων συνιστωσών (διαφορετική τιμή του $\frac{E_k}{\hbar k}$ για διαφορετικά k), το κυματοπακέτο αλλάζει μορφή με το χρόνο: μοιάζει να διασπείρεται. Γι αυτό το λόγο, η συνάρτηση E_k (βλ. εξ. 96) ονομάζεται *σχέση διασποράς*. Εάν η συνάρτηση c_k είναι ιδιαίτερα εντοπισμένη γύρω από ένα δεδομένο k_0 , τότε οι συνιστώσες έχουν σχεδόν ίδια μεταβολή με το χρόνο και η διασπορά είναι αργή.

Από εδώ: αλλαγή στο κείμενο

5.6 Αναπαράσταση ορμής

Στα προηγούμενα, για να περιγράψουμε τη χρονική εξέλιξη του ελεύθερου σωματιδίου που κινείται στο $(-\infty, \infty)$, καταφύγαμε στο ενδιάμεσο μοντέλο της κίνησης στο $[-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L]$. Χρησιμοποιήσαμε το L ως μια παράμετρο στη στοιχειοθέτηση του προβλήματος, όμως το L δεν εμφανίζεται στις εξισώσεις στο τέλος. Είναι βολικό να ορίσουμε τις ιδιοκαταστάσεις της ορμής εξαρχής με τέτοιο τρόπο, ώστε να μην έχουμε την παράμετρο L , και να εργαζόμαστε απ' ευθείας στο $(-\infty, \infty)$.

Οι ιδιοκαταστάσεις πρέπει να εκπροσωπούνται από συναρτήσεις της μορφής $u_k(x) = (\text{σταθ.}) \cdot e^{ikx}$, $k \in \mathbb{R}$, $x \in (-\infty, \infty)$, διότι αυτές μόνον ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών με πραγματική ιδιοτιμή. Το ερώτημα είναι ποια η κατάλληλη σταθερά, για να έχει κανείς μια εξίσωση ισοδύναμη με την (100). Αν θέσουμε

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (103)$$

τότε αποκτούμε ως συντελεστή αναπτύγματος της κυματοσυνάρτησης τη γενίκευση του

εσωτερικού γινόμενου (σε μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις)

$$(u_k, \Psi) \equiv \int_{\mathbb{R}} u_k^*(x) \Psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \Psi(x) dx.$$

Αλλά αυτή η έκφραση δεν είναι άλλη από τον μετασχηματισμό Fourier της Ψ . Με αυτή τη σύμβαση, βρίσκουμε αμέσως ότι ικανοποιείται η (100), αρκεί να θέσουμε $f_k = \sqrt{2\pi} \tilde{\Psi}(k) = \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \Psi(x) dx$.

Εάν γνωρίζουμε τους συντελεστές $\tilde{\Psi}(k) = (u_k, \Psi)$, μπορούμε προφανώς να ανα-συνθέσουμε την Ψ με τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier. Γι αυτό το λόγο, ο μετασχηματισμός Fourier $\tilde{\Psi}(k)$ ονομάζεται *κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση ορμής*, σε αναλογία με τη συνήθη *κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση θέσης* $\Psi(x)$.

Στα προβλήματα όπου εφαρμόζουμε την αναπαράσταση ορμής, συνηθίζεται να χρη-σιμοποιούμε ως μεταβλητή την ιδιοτιμή της ορμής $p = \hbar k$ αντί του κυματαριθμού k . Με αυτή την αλλαγή μεταβλητής ο μετασχηματισμός μεταξύ των αναπαράστασεων θέσης $\Psi(x)$ και ορμής $\tilde{\Psi}(p)$ ορίζεται από τις σχέσεις

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp, \quad \tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \quad (104)$$

Εδώ, η αλλαγή μεταβλητής αλλάζει τη σταθερά κανονικοποίησης από $1/\sqrt{2\pi}$ σε $1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Από την ταυτότητα Parseval, προκύπτει ότι η κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση ορ-μής ικανοποιεί την ίδια συνθήκη κανονικοποίησης όπως η $\Psi(x)$, δηλ. $\int dp |\tilde{\Psi}(p)|^2 = 1$.⁽⁶⁸⁾

Έχει ενδιαφέρον να δούμε τη δράση των τελεστών θέσης και ορμής στις κυματο-συναρτήσεις σε αναπαράσταση ορμής. Δρώντας στην πρώτη εξίσωση των (104) με τον τελεστή θέσης, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \hat{x} \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} x \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i) \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p) \frac{\partial e^{i\frac{p}{\hbar}x}}{\partial p} dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i\hbar) \left\{ \left[\tilde{\Psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial \tilde{\Psi}(p)}{\partial p} e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(p)}{\partial p} e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \end{aligned} \quad (105)$$

Εδώ, εφαρμόσαμε ολοκλήρωση κατά παράγοντες και εκμεταλλευθήκαμε το ότι η $\tilde{\Psi}(p)$ μηδενίζεται στο $\pm\infty$, ως μετασχηματισμός Fourier τετραγωνικά ολοκληρώσιμης συνάρ-τησης.

Δρώντας στη δεύτερη των (104) με τον τελεστή ορμής, και παρατηρώντας ότι η

⁽⁶⁸⁾Για την απόδειξη μπορεί να χρησιμοποιηθεί η ταυτότητα $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k-k')x} = 2\pi\delta(k-k')$.

παραγωγή ως προς x δρα στο εκθετικό εντός του ολοκληρώματος, λαμβάνουμε:

$$\hat{p}\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(-i\hbar) \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p) \frac{\partial e^{i\frac{p}{\hbar}x}}{\partial x} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} p \tilde{\Psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \quad (106)$$

Συνοψίζοντας,

$$\hat{x}\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(p)}{\partial p} e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp, \quad \hat{p}\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} p \tilde{\Psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp. \quad (107)$$

Επομένως, ο μετασχηματισμός Fourier της $\hat{x}\Psi(x)$ είναι $+i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(p)}{\partial p}$, ενώ ο μετασχηματισμός Fourier της $\hat{p}\Psi(x)$ είναι $p \tilde{\Psi}(p)$. Λέμε λοιπόν ότι, στην αναπαράσταση ορμής, ο τελεστής θέσης αναπαριστάται ως διαφορικός τελεστής, $\hat{x}\tilde{\Psi}(p) \rightarrow +i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\Psi}(p)$, ενώ ο τελεστής ορμής αναπαριστάται ως πολλαπλασιαστικός τελεστής, $\hat{p}\tilde{\Psi}(p) \rightarrow p \tilde{\Psi}(p)$.

Κατ' επέκταση, είναι εύκολο να δει κανείς ότι όλες οι δυνάμεις του τελεστή της ορμής αναπαριστούνται επίσης πολλαπλασιαστικά στην αναπαράσταση ορμής: $\hat{p}^n \tilde{\Psi}(p) \rightarrow p^n \tilde{\Psi}(p)$, δηλαδή, ο μετασχηματισμός Fourier της $\hat{p}^n \Psi(x)$ είναι η $p^n \tilde{\Psi}(p)$.⁽⁶⁹⁾ Επίσης, τα εσωτερικά γινόμενα μετασχηματίζονται αντίστοιχα:

$$(\Phi, \hat{p}^n \Psi) \equiv \int_{\mathbb{R}} \Phi^*(x) \hat{p}^n \Psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \left(\tilde{\Phi}(p) \right)^* p^n \tilde{\Psi}(p) dp, \quad (108)$$

όπου στην τελευταία σχέση ο τελεστής $\hat{p}^n$ έχει αντικατασταθεί από το p^n . Επομένως, εάν μια κυματοσυνάρτηση δίνεται σε αναπαράσταση ορμής, είναι πολύ απλό να υπολογίσουμε την πυκνότητα πιθανότητας της ορμής. Η n -οστή ροπή της πυκνότητας πιθανότητας της ορμής είναι

$$\langle \hat{p}^n \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \hat{p}^n \Psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} p^n |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp \quad (109)$$

και ειδικά η κινητική ενέργεια είναι

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \hat{p}^2 \Psi(x) dx = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} p^2 |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp. \quad (110)$$

Η πιθανότητα να μετρηθεί η ορμή στο διάστημα (p_a, p_b) είναι

$$P(p_a, p_b) = \int_{p_a}^{p_b} |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp, \quad (111)$$

Η τελευταία σχέση δεν είναι παρά η εφαρμογή του αξιώματος προβολής στη μέτρηση της ορμής. Εάν είχαμε περιορίσει το χώρο κίνησης του σωματιδίου στο $[-\frac{1}{2}L, +\frac{1}{2}L]$ αντί για

⁽⁶⁹⁾Πρόβλημα 10

$(-\infty, +\infty)$, με το L να έχει πολύ μεγάλη τιμή, τότε οι ιδιοσυναρτήσεις ορμής θα ήταν κανονικοποιημένες, το ολοκλήρωμα Fourier (104) θα γινόταν αριθμήσιμο ανάπτυγμα $\Psi(x) = \sum_n c_n \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$, και οι συντελεστές $\tilde{\Psi}(p)$ θα αντιστοιχούσαν στους συντελεστές c_n , θέτοντας $p \rightarrow \hbar k_n$. Η πιθανότητα να μετρήσουμε ορμή ίση με $p = \hbar k_n$ θα ήταν $|c_n|^2$, λόγω του αξιώματος προβολής. Αντίστοιχα εδώ, η πυκνότητα πιθανότητας να μετρήσουμε ορμή p είναι $|\tilde{\Psi}(p)|^2$.

Από μαθηματικής πλευράς, η διαφορά μεταξύ των δύο περιπτώσεων, δηλαδή (α) $[-\frac{1}{2}L, +\frac{1}{2}L]$ και (β) $(-\infty, +\infty)$, είναι ότι, στην περίπτωση (α), οι συναρτήσεις $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$ είναι αριθμήσιμες σε πλήθος και κανονικοποιήσιμες και αποτελούν στο σύνολό τους βάση για τον χώρο Hilbert των καταστάσεων, ενώ στην περίπτωση (β) οι συναρτήσεις $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ είναι μη αριθμήσιμες σε πλήθος (λόγω της συνεχούς μεταβλητής p), μη κανονικοποιήσιμες και δεν αποτελούν βάση, αλλά είναι γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις της ορμής. Από φυσικής πλευράς, η ερμηνεία είναι ότι στην περίπτωση (β) έχουμε συνεχές φάσμα τιμών της ορμής, επομένως μια μέτρηση δεν θα μας δώσει την ακριβή τιμή της ορμής, παρά μόνο ένα εύρος τιμών μεταξύ $[p_a, p_b]$, όπου τα άκρα του διαστήματος p_a και p_b εξαρτώνται από τη διακριτική ικανότητα της πειραματικής συσκευής. Αυτό εκπροσωπείται μαθηματικά από το σύνολο των προβολικών τελεστών εντός του διαστήματος, και όχι από μία μοναδική κυματοσυνάρτηση.

Τα παραπάνω συμπεράσματα έχουν ιδιαίτερη χρησιμότητα σε προβλήματα σκέδασης, στα οποία η αρχική κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί σε κυματοπακέτο που προσπίπτει σε έναν στόχο από μεγάλη απόσταση. Όσο το κυματοπακέτο βρίσκεται μακριά από τον στόχο, αντιστοιχεί σε ελεύθερο σωματίδιο, οπότε εξυπηρετεί να κάνει κανείς ένα ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης σε ιδιοσυναρτήσεις της ορμής.

5.7 Γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις στη γενική περίπτωση

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα φυσικό μέγεθος με συνεχές φάσμα τιμών. Αυτό εκπροσωπείται μαθηματικά από έναν ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$ με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών a . Η εξίσωση ιδιοτιμών είναι $\hat{A}\Phi_a = a\Phi_a$, με το a να παίρνει συνεχείς τιμές εντός ενός διαστήματος στο $\mathbb{R}$. Οι ιδιοσυναρτήσεις Φ_a , όμως, δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, όπως δεν είναι και οι ιδιοσυναρτήσεις της ορμής e^{ikx} . Η ιδιότητα της τετραγωνικής ολοκληρωσιμότητας των ιδιοσυναρτήσεων συμβαδίζει με το διακριτό φάσμα, ενώ η απουσία της συμβαδίζει με το συνεχές φάσμα.

Σε αναλογία με την περίπτωση του διακριτού φάσματος, όπου δεχόμαστε μόνο τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις, ενώ απορρίπτουμε τις μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, αν υπάρχουν, εδώ έχουμε μια διαφορετική συνθήκη, η οποία εδράζει στην απαίτηση να αναπτύσσουμε μια τυχαία κυματοσυνάρτηση Ψ σε ένα συνεχές ιδιοσυναρτήσεων Φ_a . Η απαίτηση αυτή εδράζεται στην αξίωση να υπολογίζουμε την

πυκνότητα πιθανότητας μιας τιμή του a σε μια μέτρηση του $\hat{A}$ για οποιαδήποτε Ψ .

Η συνθήκη τετραγωνικής ολοκληρωσιμότητας του διακριτού φάσματος αντικαθίσταται από τη συνθήκη

$$|(\Phi_a, \Psi)| \equiv \left| \int \Phi_a^*(x) \Psi(x) dx \right| < \infty \quad (112)$$

για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$. Οι μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις Φ_a ερμιτιανών τελεστών που ικανοποιούν αυτή τη συνθήκη ονομάζονται *γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις* ή *γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις*. Με τη βοήθεια των γενικευμένων ιδιοσυναρτήσεων ενός τελεστή, μπορούμε να κατασκευάσουμε οποιαδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση,

$$\Psi = \int_{\text{cont}} f(a) \Phi_a da, \quad (113)$$

με κατάλληλη επιλογή της (μιγαδικής) συνάρτησης $f(a)$. (Το ολοκλήρωμα νοείται στην περιοχή του συνεχούς φάσματος.) Συγκεκριμένα, η $f(a)$ δίνεται από τη σχέση

$$f(a) = (\Phi_a, \Psi) = \int_{\text{cont}} \Phi_a^*(x) \Psi(x) dx,$$

δηλ. σχετίζεται με την απαίτηση (112). Στην (113), το ολοκλήρωμα στη συνεχή ιδιοτιμή a υποκαθιστά την άθροιση που έχει κανείς στο ανάπτυγμα σε βάση. Εάν το μέγεθος $\hat{A}$ έχει και διακριτό και συνέχες φάσμα, όπως π.χ. στην περίπτωση ενός πεπερασμένου φρέατος δυναμικού, τότε η σχέση (113) πρέπει να επαυξηθεί με άθροιση στις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του διακριτού φάσματος ϕ_n :

$$\Psi = \sum_n c_n \phi_n + \int_{\text{cont}} f(a) \Phi_a da, \quad (114)$$

Μπορούμε επίσης να κατασκευάσουμε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις οι οποίες να είναι σχεδόν ιδιοσυναρτήσεις του ίδιου τελεστή, ως εξής:

$$\Psi_{a_0} = \int f_{a_0}(a) \Phi_a da, \quad (115)$$

όπου $f_{a_0}(a) > 0$ μια κατανομή περιορισμένη σε ένα στενό διάστημα γύρω από την τιμή a_0 , π.χ.

$$\Psi_{a_0, \eta} = \int \left[\frac{1}{2\pi\eta^2} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{(a - a_0)^2}{4\eta^2} \right] \Phi_a da, \quad (116)$$

όπου $\eta > 0$ αυθαίρετα μικρό. Όσο μικρότερο το η , τόσο πλησιάζει η Ψ_{a_0} την ιδιότητα της τετραγωνικά ολοκληρώσιμης ιδιοσυνάρτησης του $\hat{A}$ (δηλαδή, την απουσία διασποράς) με ιδιοτιμή το a_0 . Στο επόμενο εδάφιο θα δούμε κάποιες προϋποθέσεις

για την f_{a_0} και τις Φ_a ώστε η Ψ να έχει νόρμα τη μονάδα (δηλ. $(\Psi, \Psi) = 1$). Υπό εκείνες τις προϋποθέσεις, η κυματοσυνάρτηση (116) δίνει μέση τιμή $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_{a_0, \eta}} = a_0$ και $(\Delta A)_{\Psi_{a_0, \eta}} = \eta$.

Ως εδώ: αλλαγή στο κείμενο

5.8 Ορθοκανονικότητα των γενικευμένων ιδιοκαταστάσεων

Οι γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις Φ_a (δηλ. $\hat{A}\Phi_a = a\Phi_a$ με a στο συνεχές φάσμα που πληρούν την ιδιότητα (112)) δεν είναι μεν στοιχεία του χώρου Hilbert (ως μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες), όμως πληρούν μια γενικευμένη σχέση ορθογωνιότητας: $(\Phi_a, \Phi_{a'}) \equiv \int \Phi_a^*(x)\Phi_{a'}(x)dx = 0$ για $a \neq a'$. Για $a = a'$, η ποσότητα (Φ_a, Φ_a) απειρίζεται, επειδή οι Φ_a δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Ωστόσο, μπορούμε να πούμε περισσότερα. Απαιτώντας την κανονικοποίηση στη μονάδα της συνάρτησης Ψ στην (113), γράφουμε

$$1 = (\Psi, \Psi) = \left(\int f(a)\Phi_a da, \int f(a')\Phi_{a'} da' \right) = \int \int f^*(a)f(a')(\Phi_a, \Phi_{a'}) da' da$$

Η σχέση αυτή ικανοποιείται αν δεχτούμε τη γενικευμένη σχέση ορθοκανονικότητας

$$(\Phi_a, \Phi_{a'}) = \delta(a - a'), \quad (117)$$

υποθέτοντας ότι η $f(a)$ είναι επιλεγμένη έτσι ώστε $\int |f(a)|^2 da = 1$.

Για παράδειγμα, ας δούμε τις γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις της ορμής: $\hat{p}u_k = \hbar k u_k$, με

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

[βλ. τη σχέση (103)]. Εξετάζοντας τη γενικευμένη σχέση ορθοκανονικότητας, έχουμε

$$(u_k, u_{k'}) = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')x} dx = \delta(k - k'), \quad (118)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = 2\pi\delta(k - k')$. Επομένως, ο παράγοντας $1/\sqrt{2\pi}$ εξυπηρετεί τη γενικευμένη κανονικοποίηση μέσω της συνάρτησης δ . Η κανονικοποίηση εξασφαλίζει ότι η έκφραση $\Psi = \int f(k)u_k dk$ δίνει $(\Psi, \Psi) = 1$, αρκεί να ισχύει $\int |f(k)|^2 dk = 1$.

Αν θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε για τις ιδιοσυναρτήσεις τη μορφή $u_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$,

(p είναι η συνεχής ιδιοτιμή της ορμής), λαμβάνουμε αντίστοιχα

$$\int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p'}{\hbar}x} dx = \delta(p - p'). \quad (119)$$

όπου υπεισήλθε η ιδιότητα $\delta(\frac{p-p'}{\hbar}) = \hbar \delta(p - p')$. Με αυτές τις u_p , η έκφραση $\Psi = \int f(p) u_p dp$ δίνει $(\Psi, \Psi) = 1$, αρκεί να ισχύει $\int |f(p)|^2 dp = 1$.

Έστω ότι πολλαπλασιάζουμε τις Φ_a με μια (ομαλά συμπεριφερόμενη) συνάρτηση $g(a) \neq 0$ (ανεξάρτητη του x). Τότε, στη σχέση (113), η $g(a)$ μπορεί να απορροφηθεί στην $f(a)$, δίνοντας το ίδιο αποτέλεσμα Ψ (που είναι από φυσικής πλευράς η τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κατάσταση του συστήματος). Δηλαδή, μπορούμε να γράψουμε $\Psi = \int f_1(a) \Phi_a da = \int f_2(a) [g(a) \Phi(a)] da$, αρκεί να προσαρμόσουμε την $f_2(a)$ να είναι $f_1(a)/g(a)$. Εφόσον εδώ δεν έχουμε την απαίτηση της τετραγωνικής ολοκληρωσιμότητας για την Φ_a , παρά μόνο την απαίτηση σχηματισμού της Ψ , μπορούμε να διαλέξουμε ως γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις είτε τις Φ_a είτε τις $g(a) \Phi_a$.⁽⁷⁰⁾ Ο τρόπος που επιλέγουμε την $g(a)$ εξαρτάται από το τι εξυπηρετεί από μαθηματικής πλευράς.

Εφαρμόζοντας αυτή τη διαπίστωση, μπορούμε να αντικαταστήσουμε τη συνεχή μεταβλητή της ορμής με τη συνεχή μεταβλητή της κινητικής ενέργειας, $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/(2m)$, και να εργαστούμε με τις γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας. Οι ιδιοσυναρτήσεις γράφονται $\phi_E(x) = g(E) \exp[ikx] = g(E) \exp[i\sqrt{2mE/\hbar^2}x]$ και αναζητούμε την $g(E)$ ώστε

$$(\phi_E, \phi_{E'}) = \delta(E - E'). \quad (120)$$

Αντικαθιστώντας τις ϕ_E και $\phi_{E'}$ στο εσωτερικό γινόμενο και χρησιμοποιώντας στο αριστερό μέλος την ταυτότητα $\delta(\sqrt{E} - \sqrt{E'}) = 2\sqrt{E} \delta(E - E')$, που προκύπτει από τις ιδιότητες της συνάρτησης δ , καταλήγουμε $g(E) = [\sqrt{2m/E}/(4\pi\hbar)]^{1/2}$, δηλαδή

$$\phi_E(x) = \left(\frac{1}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right)^{1/2} e^{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x}. \quad (121)$$

Πλέον, η $\Psi = \int f(E) \phi_E dE$ δίνει $(\Psi, \Psi) = 1$, αρκεί να ισχύει $\int |f(E)|^2 dE = 1$.

Επιστρέφουμε στις γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις της ορμής, έστω σε ιδιοτιμή p_0 , $u_{p_0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$. Μπορούμε να τις αναζητήσουμε σε αναπαράσταση ορμής μέσω του μετασχηματισμού (104):

$$\tilde{u}_{p_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int u_{p_0}(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i\frac{p_0-p}{\hbar}x} dx.$$

⁽⁷⁰⁾Και οι δύο μορφές ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών με την ίδια ιδιοτιμή a , επειδή ο τελεστής $\hat{A}$ είναι γραμμικός: αν $\hat{A}\Phi_a = a\Phi_a$, τότε και $\hat{A}[g(a)\Phi_a] = g(a)\hat{A}\Phi_a = a[g(a)\Phi_a]$. Στην εξίσωση ιδιοτιμών, η $g(a)$, εφόσον δεν είναι συνάρτηση του x , επέχει θέση μιας απλής πολλαπλασιαστικής σταθεράς.

Αλλά το ολοκλήρωμα δεν είναι άλλο από τη συνάρτηση $2\pi\delta(\frac{p_0-p}{\hbar}) = 2\pi\hbar\delta(p-p_0)$. Καταλήγουμε:

$$\tilde{u}_{p_0}(p) = \delta(p-p_0). \quad (122)$$

Άρα, σε αναπαράσταση ορμής, οι γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις της ορμής είναι απλώς συναρτήσεις δ .

Πηγαίνοντας στον τελεστή θέσης, αυτός γράφεται σε αναπαράσταση ορμής $\hat{x} = +i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ [βλ. συζήτηση μετά την εξ. (107)]. Οι γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις αυτού είναι οι $\tilde{w}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-i\frac{p}{\hbar}x_0}$, δηλαδή πάλι τα επίπεδα κύματα, αλλά ως συνάρτηση του p , με το x_0 να επέχει τη θέση παραμέτρου. [Ο συντελεστής $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ φροντίζει για την κανονικοποίηση $\int \tilde{w}_x^*(p)\tilde{w}_{x'}(p) dp = \delta(x-x')$.] Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier σε αναπαράσταση θέσης δίνει

$$w_{x_0}(x) = \delta(x-x_0), \quad (123)$$

Δηλαδή, η γενικευμένη ιδιοσυνάρτηση του τελεστή θέσης είναι η συνάρτηση δ . Με αυτή τη διαπίστωση, επαληθεύεται και η γενικευμένη σχέση ορθοκανονικότητας (117):

$$(w_{x_1}, w_{x_2}) = \int w_{x_1}^*(x')w_{x_2}(x') dx' = \int \delta(x_1-x')\delta(x_2-x') dx' = \delta(x_1-x_2). \quad (124)$$

Παραμένοντας σε αναπαράσταση θέσης, δοκιμάζουμε τη δράση του τελεστή θέσης:

$$\hat{x} w_{x_0}(x) = x w_{x_0}(x) = x\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0), \quad (125)$$

με το τελευταίο βήμα να ισχύει λόγω της δ . Άρα, η ιδιοτιμή της $w_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$ δεν είναι άλλη από την τιμή x_0 .

Σε αυτό το σημείο πρέπει να σχολιάσουμε μια φαινομενική αντίφαση. Στο εδάφιο 3.8 κατασκευάσαμε κυματοσυναρτήσεις οι οποίες είναι σε πολύ καλή προσέγγιση ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή θέσης, π.χ. την (36),

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

Προφανώς $\int \Phi_{x_0,\eta}(x)dx = \sqrt{\eta}$, ενώ $\int |\Phi_{x_0,\eta}(x)|^2 dx = 1$. Δηλαδή, στο όριο $\eta \rightarrow 0$, η $|\Phi_{x_0,\eta}(x)|^2$ τείνει στη συνάρτηση $\delta(x-x_0)$, ενώ η $\Phi_{x_0,\eta}$ τείνει σε κάτι σαν την τετραγωνική ρίζα της $\delta(x-x_0)$. Από την άλλη πλευρά, στην προηγούμενη συζήτηση καταλήξαμε πως η γενικευμένη ιδιοσυνάρτηση του τελεστή θέσης είναι η ίδια η $\delta(x-x_0)$, όχι η τετραγωνική της ρίζα. Γιατί η οριακή διαδικασία της $\Phi_{x_0,\eta}$ για $\eta \rightarrow 0$ δεν μας δίνει οδηγεί στο ίδιο συμπέρασμα;

Ας εξετάσουμε την περίπτωση μιας μέτρησης της θέσης, δεδομένης μιας κυματοσυν-

νάρτησης $\Psi(x)$. Έστω ότι η μέτρηση δίνει x_0 . Στην πραγματικότητα, όμως, ξέρουμε ότι η μέτρηση δεν δίνει ακριβώς x_0 , αλλά $x_0 - \frac{1}{2}\eta < x < x_0 + \frac{1}{2}\eta$, για κάποιο $\eta > 0$ που σχετίζεται με την πειραματική ακρίβεια μέτρησης. Μετράμε, δηλαδή, όχι ακριβώς τη θέση, αλλά το αν το σωματίδιο βρίσκεται στο διάστημα $[x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta]$. Άρα, η αρχική κυματοσυνάρτηση μπορεί κατ' αρχήν να αναχθεί σε οποιαδήποτε νέα κυματοσυνάρτηση περιορίζεται σε αυτό το διάστημα και μηδενίζεται έξω από αυτό. Επομένως, η προαναφερθείσα $\Phi_{x_0, \eta}$ είναι μία μόνο από πολλές (άπειρες) δυνατότητες αναγωγής. Οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις που περιορίζονται στο $[x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta]$ αποτελούν έναν χώρο Hilbert, τον $\mathcal{L}^2([x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta])$, υπόχωρο του αρχικού $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Οποιαδήποτε από αυτές τις συναρτήσεις είναι ιδιοσυνάρτηση του μετρούμενου μεγέθους

$$\llcorner \text{Το σωματίδιο ανιχνεύεται εντός του διαστήματος } [x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta] \llcorner$$

με ιδιοτιμή 1. Το αξίωμα προβολής της θεωρίας μέτρησης σε αυτή την περίπτωση εμπλουτίζεται από περαιτέρω αξιώσεις, στις οποίες δεν θα επεκταθούμε εδώ.⁽⁷¹⁾

Όταν όμως το διάστημα $[x_0 - \frac{1}{2}\eta, x_0 + \frac{1}{2}\eta]$ εκφυλίζεται σε ένα σημείο (δηλ. όταν $\eta \rightarrow 0$), τότε έχουμε μια εξιδανικευμένη εκδοχή μέτρησης της θέσης, όπου αποφαινόμαστε πως το σωματίδιο μετρήθηκε με βεβαιότητα στο σημείο x_0 . Εδώ υπεισέρχεται η $w_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ ως ιδιοκατάσταση της θέσης, η οποία είναι η νέα κατάσταση στην οποία ανάγεται η παλιά λόγω της μέτρησης. Φορμαλιστικά, το πλάτος μετάβασης γράφεται $(w_{x_0}, \Psi) = \int \delta(x - x_0) \Psi(x) dx = \Psi(x_0)$, ενώ η πυκνότητα πιθανότητας μετάβασης γράφεται $|(w_{x_0}, \Psi)|^2 = |\Psi(x_0)|^2$, δηλαδή έχουμε τη γνώριμη έκφραση για την πυκνότητα πιθανότητας να μετρήσουμε το σωματίδιο στη θέση x_0 .

⁽⁷¹⁾Βλ. π.χ. A. Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 3rd ed., Springer 2003, κεφ. II.

5.9 Σύνοψη της θεωρίας μέτρησης και χρονικής εξέλιξης

Εδώ δίνουμε μια σύνοψη όσων γράφηκαν ως τώρα για τη θεωρία μέτρησης και χρονικής εξέλιξης στην κβαντική μηχανική.

1. Μια συλλογή συστημάτων, προετοιμασμένων με τον ίδιο ακριβώς τρόπο και με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη πειραματική ακρίβεια, εκπροσωπείται μαθηματικά από μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(x) \in \mathbb{C}$, με $(\Psi, \Psi) = \int |\Psi(x)|^2 dx = 1$. Η Ψ ονομάζεται και κατάσταση.
2. Αν οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες (όχι απαραίτητα ορθογώνιες) καταστάσεις, τότε ο γραμμικός συνδυασμός $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots$, με τυχαίους συντελεστές $c_n \in \mathbb{C}$, είναι επίσης κατάσταση, αρκεί οι c_n να είναι τέτοιοι ώστε $(\Psi, \Psi) = 1$. Η Ψ προσωπεύει μια συλλογή άλλο τρόπο προετοιμασίας (ενδεχομένως εντελώς διαφορετικό) από οποιαδήποτε συνιστώσα $\Psi_1, \Psi_2, \dots$.
3. Οι προβλέψεις της Κβαντικής Μηχανικής αφορούν πιθανότητα μέτρησης τιμών, όχι βεβαιότητα αποτελέσματος κάθε μέτρησης (πλην της περίπτωσης ιδιοκαταστάσεων).
4. Τα φυσικά μετρούμενα μεγέθη εκπροσωπούνται μαθηματικά από αυτοσυζυγείς (ερμιτιανούς) τελεστές $\hat{A}$ με τις εξής ιδιότητες:

(α') $\langle \hat{A} \rangle_\Psi \equiv (\Psi, \hat{A}\Psi) \in \mathbb{R}$ είναι η μέση τιμή των μετρήσεων του $\hat{A}$ δεδομένης της Ψ .

(β') $\langle \hat{A}^n \rangle_\Psi$ είναι η n -οστή ροπή της κατανομής πιθανότητας. Ειδικότερα, $(\Delta A)_\Psi = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi - \langle \hat{A} \rangle_\Psi^2}$ είναι η διασπορά (τυπική απόκλιση) στις τιμές των μετρήσεων.

(γ') Η εξίσωση ιδιοτιμών, $\hat{A}f_n = \alpha_n f_n$ ή $\hat{A}f_\alpha = \alpha f_\alpha$, δίνει το σύνολο, διακριτό ή συνεχές, των τιμών $\{\alpha_n\}$ ή $\{\alpha\}$ σε κάποιο διάστημα του $\mathbb{R}$ που δύναται να δώσει η μέτρηση, υπό την ακόλουθη προϋπόθεση για τις f_n και f_α :

(δ') Αποδίδεται φυσικό νόημα σε εκείνες τις ιδιοσυναρτήσεις f του $\hat{A}$ οι οποίες είτε ανήκουν στο διακριτό φάσμα, με $(f_n, f_n) = 1$, είτε στο συνεχές φάσμα, με $|(f_\alpha, \Psi)| < \infty$ (γενικευμένες διοσυναρτήσεις), για τυχαία Ψ .

(ε') Ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές φυσικού μεγέθους είναι ορθογώνιες. Πιο συγκεκριμένα, αν η f_n ανήκουν στο διακριτό και οι f_α στο συνεχές φάσμα, τότε $(f_n, f_{n'}) = \delta_{nn'}$, $(f_\alpha, f_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$ και $(f_n, f_\alpha) = 0$.

(τ') Οποιαδήποτε κατάσταση Ψ μπορεί να αναπτυχθεί σε ιδιοσυναρτήσεις οποιουδήποτε φυσικού μεγέθους $\hat{A}$ ως εξής:

$$\Psi = \sum_{n,\mu} (f_{n,\mu}, \Psi) f_{n,\mu} + \int \sum_{\mu} (f_{\alpha,\mu}, \Psi) f_{\alpha,\mu} d\alpha,$$

όπου υπεισέρχονται οι ιδιοσυναρτήσεις του διακριτού και του συνεχούς φάσματος. Το ολοκλήρωμα νοείται στο διάστημα του $\mathbb{R}$ που αντιστοιχεί στο συνεχές φάσμα. Ο δείκτης μ αριθμεί τις ορθογώνιες μεταξύ τους ιδιοκαταστάσεις εκφυλισμένων ιδιοτιμών, αν υπάρχουν. Η δράση του $\hat{A}$ δίνει

$$\hat{A}\Psi = \sum_{n,\mu} (f_{n,\mu}, \Psi) \alpha_n f_n + \int (f_{\alpha,\mu}, \Psi) \alpha f_{\alpha,\mu} d\alpha,$$

5. Μια μέτρηση ενός μεγέθους δίνει ως δυνατές τιμές μόνο ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή $\hat{A}$.
6. Η μέτρηση θεωρείται ακαριαία. Αμέσως μετά τη μέτρηση, το μετρημένο φυσικό σύστημα μεταβαίνει σε ιδιοκατάσταση του μετρημένου μεγέθους με χρονικά ασυνεχή τρόπο.
7. Σε περίπτωση μη εκφυλισμένων ιδιοτιμών, η πιθανότητα μέτρησης της ιδιοτιμής α_n του διακριτού φάσματος είναι $P_n = |(f_n, \Psi)|^2$. Η πυκνότητα πιθανότητας μέτρησης της τιμής α στο συνεχές φάσμα είναι $\rho(\alpha) = |(f_\alpha, \Psi)|^2$. Αυτές ονομάζονται και πιθανότητες μετάβασης.
8. Σε περίπτωση μη εκφυλισμένων ιδιοτιμών, αμέσως μετά τη μέτρηση, οι υποσυστημολογές συστημάτων όπου μετρήθηκε η ιδιοτιμή α_n μεταβαίνουν η κάθε μία στην αντίστοιχη κατάσταση f_n .
9. Σε περίπτωση εκφυλισμένης ιδιοτιμής α_n , θεωρούμε μια ορθοκανονική βάση στον αντίστοιχο υπόχωρο, δηλαδή μια βάση ορθογώνιων συναρτήσεων $f_{n,1}, f_{n,2}, \dots$, $(f_{n,\mu}, f_{n,\nu}) = \delta_{\mu\nu}$, $\hat{A}f_{n\mu} = \alpha_n f_{n\mu}$ (με κοινή ιδιοτιμή). Η πιθανότητα εύρεσης της ιδιοτιμής α_n σε μια μέτρηση είναι $P_n = \sum_{\mu} |(f_{n,\mu}, \Psi)|^2$. Εντελώς αντίστοιχα βρίσκουμε την πυκνότητα πιθανότητας στο συνεχές φάσμα με εκφυλισμό: $\rho(\alpha) = \sum_{\mu} |(f_{\alpha\mu}, \Psi)|^2$.
10. Σε περίπτωση εκφυλισμένων ιδιοτιμών, η μέτρησή τους δεν αρκεί για να προσδιοριστεί η νέα κατάσταση. Απαιτείται άλλη μια μέτρηση, αμέσως μετά την πρώτη, κάποιου μεγέθους $\hat{B}$ συμβατού με το $\hat{A}$ (δηλ. $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$), το οποίο να αίρει τον εκφυλισμό. Μόλις γίνει η μέτρηση των $\hat{A}$ και $\hat{B}$, τα συστήματα όπου μετρήθηκαν οι τιμές α_n και β_m μεταβαίνουν στην κοινή ιδιοκατάσταση των δύο μεγεθών, έστω

ϕ . Αυτή αντιστοιχεί στις μετρημένες ιδιοτιμές, δηλ. $\hat{A}\phi = \alpha_n\phi$ και ταυτόχρονα $\hat{B}\phi = \beta_m\phi$. Αν τα δύο μεγέθη δεν αρκούν για την πλήρη άρση του εκφυλισμού, συνεχίζεται η διαδικασία με περισσότερα συμβατά μεγέθη.

11. Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης, εφόσον δεν μεσολαβεί μέτρηση, καθορίζεται από την εξίσωση του Schrödinger,

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

όπου ο ερμιτιανός τελεστής $\hat{H}$ ονομάζεται Χαμιλτονιανή και έχει την ερμηνεία της ενέργειας. Η εξίσωση διατηρεί την ολική πιθανότητα, $(\Psi, \Psi) = 1$.

12. Εάν η Χαμιλτονιανή δεν έχει ρητή εξάρτηση από το χρόνο, η εξίσωση του Schrödinger επιδέχεται τη λύση

$$\Psi(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}}\Psi_0 = \sum_{n,\mu} (\phi_{n,\mu}, \Psi_0) e^{-i\frac{t}{\hbar}E_n} \phi_{n,\mu} + \int \sum_{\mu} (\phi_{E,\mu}, \Psi_0) e^{-i\frac{t}{\hbar}E} \phi_{E,\mu} dE,$$

όπου Ψ_0 η κυματοσυνάρτηση σε χρόνο $t = 0$, $\phi_{n,\mu}, E_n$ οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές του διακριτού φάσματος της $\hat{H}$, και $\phi_{E,\mu}, E$ οι αντίστοιχες του συνεχούς (το ολοκλήρωμα λαμβάνεται στην περιοχή του συνεχούς φάσματος). Ο δείκτης μ χαρακτηρίζει τις ορθογώνιες μεταξύ τους ιδιοκαταστάσεις εκφυλισμένων τιμών της ενέργειας, αν υπάρχουν (αν δεν υπάρχει εκφυλισμός, ο δείκτης μ παραλείπεται).

5.10 Παράρτημα: Προβολικοί τελεστές στο συνεχές φάσμα.

Χρησιμοποιώντας την έννοια του προβολικού τελεστή, έχουμε μια ένα-προς-ένα αντιστοιχία των ορθογώνιων ιδιοκαταστάσεων μιας Χαμιλτονιανής, Φ_n , με τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές $\hat{P}_{\Phi_n}$. Εάν οι Φ_n επαρκούν για να αποτελέσουν ορθοκανονική βάση, τότε θα ισχύει η εξ. πληρότητας (45): $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} = \hat{I}$. Σε αυτή την περίπτωση, η Χαμιλτονιανή παίρνει, φορμαλιστικά, τη μορφή $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n}$.⁽⁷²⁾

Θυμόμαστε, τώρα, ότι οι προβολικοί τελεστές ορίζονται και στην περίπτωση υπόχωρων διάστασης μεγαλύτερης του 1. Π.χ., αν έχουμε ένα σύνολο από μονοδιάστατους προβολικούς τελεστές που μετατίθενται (ισοδύναμα, αν προβάλλουν σε ορθογώνιες μεταξύ τους κυματοσυναρτήσεις $\{\Phi_n\}$), τότε το άθροισμά τους είναι προβολικός τελεστής στον υπόχωρο μεγαλύτερης διάστασης ο οποίος παράγεται από τις $\{\Phi_n\}$ (βλ. συζήτηση μετά την εξ. 22). Καθώς το n αυξάνει στη σειρά $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n}$, το άθροισμα προβάλλει σε ολοένα ευρύτερους υπόχωρους: ο υπόχωρος όπου προβάλλει ο $\hat{P}_{\Phi_1}$ περιέχεται στον υπόχωρο όπου προβάλλει ο $\hat{P}_{\Phi_1} + \hat{P}_{\Phi_2}$, κ.ο.κ., ώσπου καταλήγουμε στον ταυτοτικό τελεστή $\hat{I} = \sum_n \hat{P}_{\Phi_n}$, ο οποίος είναι προβολικός τελεστής με την τετριμμένη έννοια διότι απλώς αναπαράγει οποιοδήποτε διάνυσμα. Εφόσον οι $\hat{P}_{\Phi_n}$ μετατίθενται μεταξύ τους, το ίδιο συμβαίνει και με τους όρους της ακολουθίας μερικών αθροισμάτων $\hat{P}_{\Phi_1}$, $\hat{P}_{\Phi_1} + \hat{P}_{\Phi_2}$, $\hat{P}_{\Phi_1} + \hat{P}_{\Phi_2} + \hat{P}_{\Phi_3}$, κ.ο.κ.

Εάν, όμως, το σύνολο όλων των ιδιοκαταστάσεων Φ_n της Χαμιλτονιανής δεν επαρκεί ώστε αυτές να αποτελούν βάση, τότε η ταυτότητα $\hat{I} = \sum_n \hat{P}_{\Phi_n}$ δεν ισχύει.⁽⁷³⁾ Ωστόσο, ισχύει κάτι αντίστοιχο, στο οποίο θα αναφερθούμε εδώ μόνο περιγραφικά. Οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής πυκνώνουν στο συνεχές των ενεργειών, δηλ. σε διαστήματα του $\mathbb{R}$, με τρόπο αντίστοιχο με αυτόν που περιγράψαμε στο εδάφιο 5.5 για τον $\mathcal{L}^2([-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L])$ ($L \rightarrow \infty$). Πέραν των πυκνών ιδιοτιμών, η Χαμιλτονιανή ενδέχεται να έχει και διακριτές (μη πυκνές) ιδιοτιμές E_n . Προκύπτει μια οικογένεια μετατιθέμενων προβολικών τελεστών, $\hat{P}_E$, η οποία χαρακτηρίζεται από συνεχή παράμετρο E , σε αναλογία με την οικογένεια προβολικών τελεστών στις ιδιοκαταστάσεις Φ_n που χαρακτηρίζονται από τη διακριτή παράμετρο E_n . Η σχέση πληρότητας $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} = \hat{I}$ αντικαθίσταται από την ακόλουθη:

$$\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} + \int_{\text{cont}} d\hat{P}_E = \hat{I}, \quad (126)$$

όπου συνυπάρχουν οι διακριτές ιδιοκαταστάσεις με το συνεχές φάσμα, και όπου το ολοκλήρωμα λαμβάνεται στο συνεχές φάσμα. Η τελευταία σχέση είναι συμβολικός τρόπος

⁽⁷²⁾ Διότι υποθέσαμε πληρότητα των Φ_n , επομένως η τυχαία κατάσταση αναλύεται ως $\Psi = \sum_n c_n \Phi_n$. Άρα, $\hat{H}\Psi = \sum_n E_n c_n \Phi_n = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n} \Psi$, δηλ. $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n}$.

⁽⁷³⁾ Το συνηθέστερο παράδειγμα είναι η κινητική ενέργεια στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, δηλαδή η περίπτωση του ελεύθερου σωματίου που κινείται σε όλο τον χώρο. Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι οι $\exp(ikx)$, $x \in (-\infty, \infty)$, οι οποίες δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, άρα δεν ανήκουν στον χώρο Hilbert και δεν αποτελούν βάση.

γραφής της ακόλουθης πρότασης: για τυχαίες Ψ_1, Ψ_2 τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, υπάρχει μια οικογένεια προβολικών τελεστών, διακριτή ($\hat{P}_{\Phi_n}$) ή εξαρτώμενη από τη συνεχή παράμετρο E ($\hat{P}_E$), ώστε να ισχύει

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

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

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{H} \Psi_2) &= \sum_n E_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n} \Psi_2) + \int_{\text{cont}} E d(\Psi_1, \hat{P}_E \Psi_2) \\ &= \sum_n E_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n} \Psi_2) + \int_{\text{cont}} E \frac{d(\Psi_1, \hat{P}_E \Psi_2)}{dE} dE. \end{aligned} \quad (127)$$

Το σύνολο των διακριτών ιδιοτιμών E_n μαζί με τις συνεχείς τιμές E , οι οποίες απαιτούνται για να γραφεί η σχέση πληρότητας και η ανάλυση της Χαμιλτονιανής σε προβολικούς τελεστές, ονομάζεται *φάσμα* του τελεστή $\hat{H}$. Η ύπαρξη τέτοιας οικογένειας τελεστών προκύπτει από το θεώρημα φασματικής ανάλυσης.⁽⁷⁴⁾

Στο παράδειγμα του προηγούμενου εδαφίου (ελεύθερο σωματίδιο), προσεγγίσαμε το συνεχές φάσμα μέσω του ορίου $L \rightarrow \infty$. Οι προβολικοί τελεστές που συνθέτουν τη Χαμιλτονιανή, για πεπερασμένο L και διακριτές ιδιοτιμές, είναι της μορφής $\hat{P}_k \Psi(x) = (u_k, \Psi) u_k(x)$, και η δράση της Χαμιλτονιανής γράφεται $\hat{H} \Psi(x) = \sum_k E_k (u_k, \Psi) u_k(x) = \sum_k E_k \hat{P}_{u_k} \Psi$. Παίρνοντας το όριο $L \rightarrow \infty$, και μετατρέποντας το άθροισμα σε ολοκλήρωμα, έχουμε $\hat{H} \Psi(x) = \int \frac{L}{2\pi} E_k (u_k, \Psi) u_k(x) dk$, το οποίο φαινομενικά μόνο εξαρτάται από την τιμή του L . Εφόσον οι ιδιοσυναρτήσεις είναι $u_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, λαμβάνουμε

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

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

⁽⁷⁴⁾Βλ. π.χ. J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).

στο εξής:

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

Επομένως, η οικογένεια προβολικών τελεστών $\hat{P}_E$ [για την ακρίβεια η ποσότητα που δίνεται στην (127) ως $\frac{d}{dE}(\Psi_1, \hat{P}_E\Psi_2)$] ορίζεται εδώ από την έκφραση μέσα στην αγκύλη παρενθέση. Το διπλό ολοκλήρωμα εντός της αγκύλης παρένθεσης προκύπτει από το εσωτερικό γινομένο $(\Psi_1, \hat{P}_E\Psi_2)$ της εξ. (127): ένα ολοκλήρωμα λόγω του εσωτερικού γινομένου και ένα λόγω της δράσης του προβολικού τελεστή, η οποία επίσης περιέχει ένα εσωτερικό γινόμενο.

Ένας άλλος τρόπος να δούμε το αποτέλεσμα είναι να γράψουμε: $(\Psi_1, \hat{P}_k\Psi_2) = (\Psi_1, (u_k, \Psi_2)u_k) = (\Psi_1, u_k)(u_k, \Psi_2)$. Προσθέτοντας τον αντίστοιχο όρο για το $-k$, καταλήγουμε στο $(\Psi_1, \hat{P}_E\Psi_2) = (\Psi_1, (\hat{P}_k + \hat{P}_{-k})\Psi_2)$. Ολοκληρώνοντας ως προς E και λαμβάνοντας υπόψη το συντελεστή μετατροπής μεταξύ dE και dk , φτάνουμε στην ίδια εξίσωση.

Η ποσότητα $n(E) \equiv \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}}$ που περιλαμβάνεται στην παραπάνω έκφραση ονομάζεται *πυκνότητα καταστάσεων* (*density of states*) και το ολοκλήρωμα $\int_{E_1}^{E_2} n(E)dE$ δίνει τον αριθμό των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής μεταξύ E_1 και E_2 ανά μονάδα μήκους στον άξονα x (ή ανά μονάδα όγκου στις τρεις διαστάσεις). ⁽⁷⁵⁾

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

Μπορούμε εύκολα να δούμε και τη φασματική ανάλυση του τελεστή της ορμής σε προβολικούς τελεστές. Ας εργαστούμε απ' ευθείας σε κίνηση σε όλο το χώρο, $x \in (-\infty, \infty)$. Για τον τελεστή της ορμής λαμβάνουμε την ιδιοτιμή $p = \hbar k$ ως συνεχή μεταβλητή, με γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις τις

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}.$$

⁽⁷⁵⁾Η συναρτησιακή μορφή της πυκνότητας καταστάσεων εξαρτάται από τη διάσταση του χώρου: η μορφή $n(E) \propto 1/\sqrt{E}$ είναι χαρακτηριστική για το ελεύθερο σωματίδιο σε μία διάσταση, η μορφή $n(E) = (\text{σταθ.})$ (ανεξάρτητη της ενέργειας) για τις δύο διαστάσεις και η μορφή $n(E) \propto \sqrt{E}$ για τις τρεις διαστάσεις.

Προκύπτει η συνεχής οικογένεια προβολικών τελεστών $\hat{P}_k$ με

$$\hat{P}_k \Psi(x) = (u_k, \Psi) u_k(x) = \left[\int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx'} \Psi(x') \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (128)$$

και στοιχεία πίνακα

$$(\Psi_1, \hat{P}_k \Psi_2) = (\Psi_1, u_k) (u_k, \Psi_2) = \int dx \Psi_1^*(x) \left[\int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx'} \Psi_2(x') \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (129)$$

όπου, αντί τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων βάσης, χρησιμοποιούνται οι μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις της ορμής, οι οποίες, σύμφωνα με την προηγούμενη συζήτηση, είναι γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις. Ο παράγοντας $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ που συνοδεύει τα εκθετικά συμβαδίζει με την απαίτηση $\int \hat{P}_k dk = \hat{I}$. Ο τελεστής της ορμής αποκτά το φασματικό ανάπτυγμα

$$(\Psi_1, \hat{p} \Psi_2) = \int dk \hbar k (\Psi_1, \hat{P}_k \Psi_2).$$

Μπορούμε να επιλέξουμε να εργαστούμε με την ιδιοτιμή της ορμής, p , ως παράμετρο, αντί για τον κυματαριθμό k , κάνοντας την αλλαγή $k = p/\hbar$ και $1/\sqrt{2\pi} \rightarrow 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ στις παραπάνω εκφράσεις. Αυτό δεν αλλάζει τον προβολικό τελεστή, καθώς οι ιδιοκαταστάσεις στις οποίες προβάλλει είναι οι ίδιες, είτε χρησιμοποιήσουμε το k είτε το p .

Ανάπτυγμα του τύπου (126) σε προβολικούς τελεστές μπορεί να βρεθεί όχι μόνο για τη Χαμιλτονιανή, αλλά γενικότερα για μια μεγάλη κλάση ερμιτιανών τελεστών. Σε αντιστοιχία με την (126), έστω ότι έχουμε διακριτό και συνεχές φάσμα τιμών κάποιου μεγέθους $\hat{A}$, με $\hat{A}\Phi_n = a_n\Phi_n$ και $\hat{A}\phi_a = a\phi_a$, αντίστοιχα. Στο διακριτό έχουμε την κανονικοποίηση $(\Phi_n, \Phi_n) = 1$. Στο συνεχές έχουμε $\int |\phi_a(x)|^2 dx = \infty$, αλλά $|\langle \phi_a, \Psi \rangle| < \infty$ για τυχαία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη Ψ . Αν θέσουμε την κανονικοποίηση $(\phi_a, \phi_{a'}) = \delta(a - a')$, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{A} \Psi_2) &= \sum_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n} \Psi_2) + \int_{\text{cont}} da a (\Psi_1, \phi_a) (\phi_a, \Psi_2) \\ &= \sum_n (\Psi_1, \Phi_n) (\Phi_n, \Psi_2) + \int_{\text{cont}} da a (\Psi_1, \phi_a) (\phi_a, \Psi_2). \end{aligned}$$

5.11 Προβλήματα

1. Θεωρήστε μια απειροστή στροφή στον τρισδιάστατο ευκλείδειο χώρο (και γενικότερα στον $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2$), κατά την οποία ένα αρχικό διάνυσμα $\mathbf{r}$ στρέφεται στο $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$. Στο όριο $d\mathbf{r} \rightarrow 0$ δείξτε ότι τα $\mathbf{r}$ και $d\mathbf{r}$ είναι ορθογώνια. Εξετάστε αν ισχύει το ίδιο και σε απειροστές στροφές στο χώρο Hilbert. Αν όχι, ποια η διαφορά;
2. Η Χαμιλτονιανή, για σωματίδιο που κινείται σε δυναμικό $V(x)$, είναι $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$. Δείξτε τη σχέση $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle$. (Υπόδειξη: Δείξτε ότι ο μεταθέτης της ορμής με μια συνάρτηση της θέσης είναι $[\hat{p}, \hat{V}(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$.)
3. α) Ξεκινάμε με μια συλλογή σε χρόνο $t = 0$ και κάνουμε μετρήσεις ενέργειας σε χρόνο t . Λαμβάνουμε μια κατανομή πιθανότητας της ενέργειας. Δείξτε ότι η κατανομή είναι ανεξάρτητη από το χρόνο (υποθέτοντας ότι η Χαμιλτονιανή δεν έχει εξάρτηση από το χρόνο). β) Για σύστημα ελεύθερου σωματιδίου, ξεκινάμε με μια συλλογή σε χρόνο $t = 0$ και κάνουμε μετρήσεις ορμής σε χρόνο t . Δείξτε ότι η κατανομή της ορμής είναι ανεξάρτητη από το χρόνο.
4. Δείξτε τη μορφή της εξ. συνέχειας στη διαφορική της μορφή (84) και στην ολοκληρωτική της μορφή (82) σε τρεις διαστάσεις.
5. Δείξτε ότι $e^{-it\hat{H}/\hbar} \sum_n c_n(0) \Phi_n = \sum_n e^{-itE_n/\hbar} c_n(0) \Phi_n$, εάν η Χαμιλτονιανή δεν εξαρτάται από το χρόνο και εάν οι Φ_n είναι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$ με ιδιοτιμές E_n . (Υπόδειξη: σε πρώτο βήμα δείξτε ότι οι Φ_n είναι και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $e^{-it\hat{H}/\hbar}$ με ιδιοτιμή $e^{-itE_n/\hbar}$. Χρησιμοποιήστε προς τούτο το ανάπτυγμα της εκθετικής συνάρτησης.)
6. Δείξτε ότι η πρόσθεση μιας σταθεράς στη Χαμιλτονιανή, δηλαδή $\hat{H} \rightarrow \hat{H} + \lambda \hat{I}$, με $\hat{I}$ τον ταυτοτικό τελεστή και $\lambda \in \mathbb{R}$ σταθερά ανεξάρτητη του χρόνου, δεν επιφέρει αλλαγές στα μετρήσιμα μεγέθη και επομένως δεν έχει φυσική σημασία.
7. Για Χαμιλτονιανή της μορφής $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x)$, και υπό την προϋπόθεση πως η συνάρτηση $V(x)$ έχει ελάχιστο $V_{\min}$, δείξτε ότι: α) η μέση τιμή της ενέργειας $\langle \Psi, \hat{H} \Psi \rangle$ σε οποιαδήποτε Ψ δεν μπορεί να είναι μικρότερη από $V_{\min}$, β) οποιαδήποτε ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής δεν μπορεί να είναι μικρότερη από $V_{\min}$. (Βλ. και κεφ. 3 πρόβλημα 15.)
8. Δείξτε το θεώρημα virial σε μία διάσταση: $\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{1}{2} \langle x \partial V(x) / \partial x \rangle_n$, όπου η μέση τιμή λαμβάνεται σε οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση Ψ_n της Χαμιλτονιανής $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Υπόδειξη: εξετάστε τη μέση τιμή του μεταθέτη $\langle [\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] \rangle_n$.

9. α) Υπολογίστε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x) = Ce^{-\gamma x^2}$, $\gamma > 0$, σε αναπαράσταση ορμής, αφού υπολογίσετε τη σταθερά κανονικοποίησης C .
 β) Ένα σωματίδιο χαρακτηρίζεται από την κυματοσυνάρτηση του (α). Γίνεται μέτρηση της ορμής. Βρείτε την πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί η τιμή p_0 . Υπόδειξη: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c} = \sqrt{\pi/a} \exp(b^2/4a - c)$ με $a > 0$ και $b, c \in \mathbb{C}$.
 γ) Ένα σωματίδιο χαρακτηρίζεται από την κυματοσυνάρτηση του (α) και αφήνεται ελεύθερο (δηλ. χωρίς την επίδραση δυναμικού) στο χώρο. Μετά από χρόνο t γίνεται μέτρηση της ορμής. Βρείτε την πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί η τιμή p_0 . (Υπόδειξη: αν το δυναμικό μηδενίζεται, η ορμή είναι διατηρούμενο μέγεθος.)
10. α) Πεισθείτε για τα αποτελέσματα 104,107. β) Δείξτε ότι η αναπαράσταση ορμής της $\hat{p}^n \Psi(x)$ είναι η $p^n \tilde{\Psi}(p)$. Υπόδειξη: δοκιμάστε απόδειξη με επαγωγή.
11. α) Υπολογίστε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x) = Ce^{-\gamma x^2} e^{ikx}$, $\gamma > 0$, $k \in \mathbb{R}$, σε αναπαράσταση ορμής, αφού υπολογίσετε τη σταθερά κανονικοποίησης C .
 β) Υπολογίστε τη μέση τιμή και τη διασπορά της θέσης και της ορμής. Διαπιστώστε ότι το γινόμενο αβεβαιότητας είναι $\hbar/2$.
 γ) Θεωρήστε το όριο όπου η παράμετρος γ γίνεται πολύ μικρή. Διαπιστώστε ότι η διασπορά στην ορμή γίνεται επίσης πολύ μικρή, δηλαδή ότι έχουμε μια σχεδόν ιδιοκατάσταση της ορμής.
 δ) Διαπιστώστε ότι το εσωτερικό γινόμενο με τη γενικευμένη ιδιοκατάσταση της ορμής e^{iqx} , τείνει στο μηδέν, εκτός αν $k \approx q$ (πιο συγκεκριμένα, αν το $|k - q|$ είναι της τάξης του $\sqrt{\gamma}$ ή μικρότερο). Υπόδειξη: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c} = \sqrt{\pi/a} \exp(b^2/4a - c)$ με $a > 0$ και $b, c \in \mathbb{C}$.
12. Θεωρήστε μια κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση ορμής που να δίνει σταθερή πυκνότητα πιθανότητας μέτρησης της ορμής σε ένα διάστημα $[p_0 - \eta, p_0 + \eta]$ και μηδέν εκτός διαστήματος. Δηλαδή,

$$\tilde{\Psi}(p) = \begin{cases} \tilde{\Psi}(p_0), & p_0 - \eta \leq p \leq p_0 + \eta \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

- α) Κανονικοποιήστε την $\tilde{\Psi}$, δηλαδή υπολογίστε τη σταθερά $\tilde{\Psi}(p_0)$.
 β) Υπολογίστε τη μέση τιμή και τη διασπορά της ορμής. Διαπιστώστε ότι, στο όριο μικρού η , η διασπορά στην ορμή γίνεται πολύ μικρή, δηλαδή ότι έχουμε μια σχεδόν ιδιοκατάσταση της ορμής.
 γ) Υπολογίστε την κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων. Διαπιστώστε ότι το εσωτερικό γινόμενο με τη γενικευμένη ιδιοκατάσταση της ορμής e^{iqx} , τείνει στο μηδέν, εκτός αν $k \approx q$ (πιο συγκεκριμένα, αν το $|k - q|$ είναι της τάξης του η ή μικρότερο).

Υποδείξεις: Μελετήστε τη συνάρτηση $\sin(\eta x)/(\eta x)$, η οποία θα προκύψει κατά τον μετασχηματισμό Fourier. Διαπιστώστε πως, στο όριο μικρών η , είναι περίπου σταθερή, ίση με τη μονάδα, για ένα διάστημα της τάξης μεγέθους του $1/\eta$ γύρω από το $x = 0$, ενώ ταλαντώνεται φθίνουσα για $x \gg 1/\eta$. Στο διάστημα όπου $\sin(\eta x)/(\eta x) \sim 1$, η $\Psi(x)$ πρακτικά ταυτίζεται με την e^{ikx} (επί μια σταθερά).

6 Συνύπαρξη διακριτού και συνεχούς φάσματος: πηγάδι δυναμικού

6.1 Περιγραφή του προβλήματος

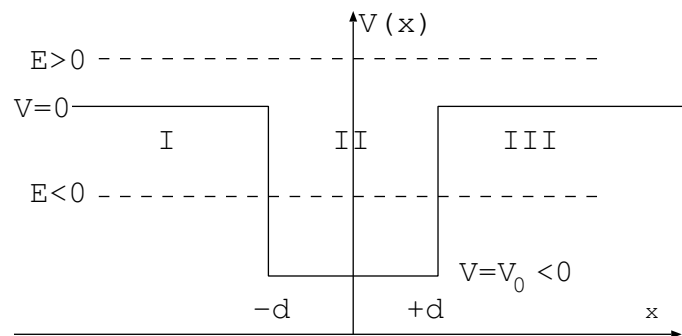
Θα λύσουμε τώρα το εξής πρόβλημα: σωματίδιο κινείται σε μια διάσταση υπό την επίδραση Χαμιλτονιανής της μορφής

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (130)$$

με

$$V(x) = \begin{cases} V_0 < 0, & \text{αν } -d < x < d \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \quad (131)$$

Δηλαδή, το δυναμικό σχηματίζει ένα πηγάδι, βάθους V_0 και πλάτους $2d$, γύρω από το $x = 0$ (βλ. σχ. 3). Αυτό μπορεί να ιδωθεί και ως μοντέλο ατόμου σε μια ιδιαίτερα απλοϊκή μορφή.



Σχήμα 3: Πηγάδι δυναμικού σε μία διάσταση.

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

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

Ολοκληρώνοντας την εξ. Schrödinger σε ένα μικρό διάστημα πάχους 2η γύρω από το

d , έχουμε

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

Στο τελευταίο βήμα δεχθήκαμε ότι η Ψ δεν απειρίζεται στο d . Εξάλλου, εξετάζοντας τις ποσότητες $\Psi(d-\eta) = \int_{-\infty}^{d-\eta} \Psi'(x) dx$ και $\Psi(d+\eta) = \int_{-\infty}^{d+\eta} \Psi'(x) dx$, και δεχόμενοι ότι η $\Psi'(x)$ δεν απειρίζεται, βλέπουμε ότι $\Psi(d^-) = \Psi(d^+)$, δηλαδή η Ψ είναι συνεχής. Εντελώς ανάλογα είναι και τα αποτελέσματα στη θέση $-d$.

Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε τα εξής. Σε σημείο πεπερασμένης ασυνέχειας δυναμικού κατά V_0 :

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

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

$$\Psi_\mu = a_\mu e^{ik_\mu x} + b_\mu e^{-ik_\mu x} \quad (132)$$

$$\frac{\partial \Psi_\mu}{\partial x} = ik_\mu (a_\mu e^{ik_\mu x} - b_\mu e^{-ik_\mu x}) \quad (133)$$

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

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

6.2 Συμμετρία ομοτιμίας (αντιστροφής χώρου)

Η Χαμιλτονιανή (130) με το δυναμικό (131) είναι αναλλοίωτη υπό το μετασχηματισμό $x \rightarrow -x$. Αυτό μας οδηγεί στο να ορίσουμε τον τελεστή της ομοτιμίας (*parity*) ή

αντιστροφής χώρου (*space inversion*) $\hat{\mathcal{P}}$, με

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}) \quad (134)$$

ή, σε μία διάσταση, $\hat{\mathcal{P}}\Psi(x) = \Psi(-x)$. Ο τελεστής είναι ερμιτιανός: πρώτον, είναι πρόδηλα γραμμικός, και δεύτερον, εύκολα βρίσκουμε ότι $(\Psi, \hat{\mathcal{P}}\Psi) \in \mathbb{R}$. Επίσης, εύκολα βρίσκουμε ότι $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$, ότι οι ιδιοκαταστάσεις του είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις και ότι οι ιδιοτιμές του είναι το 1 (για άρτιες συναρτήσεις) και το -1 (για περιττές).⁽⁷⁶⁾

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

Από εδώ προκύπτει ότι οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής μπορούν να επιλεγούν με τέτοιο τρόπο, ώστε να είναι και ιδιοκαταστάσεις της ομοτιμίας. Αν Φ ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E , τότε $\hat{H}(\hat{\mathcal{P}}\Phi) = \hat{\mathcal{P}}\hat{H}\Phi = E\hat{\mathcal{P}}\Phi$ (στο πρώτο βήμα χρησιμοποιήσαμε τη μεταθετική ιδιότητα των $\hat{\mathcal{P}}$ και $\hat{H}$), δηλαδή η $\hat{\mathcal{P}}\Phi$ είναι επίσης ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής με την ίδια ιδιοτιμή (η $\hat{\mathcal{P}}\Phi$ ενδέχεται και να ταυτίζεται με την Φ). Επομένως, οι κυματοσυναρτήσεις

$$\Phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi + \hat{\mathcal{P}}\Phi) \quad \text{και} \quad \Phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi - \hat{\mathcal{P}}\Phi) \quad (135)$$

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

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

Γενικότερα, αν η Χαμιλτονιανή μετατίθεται με κάποιον ερμιτιανό τελεστή, μπορούμε να αναζητήσουμε κοινές ιδιοσυναρτήσεις, απλοποιώντας την επίλυση του προβλήματος. Π.χ. η κινητική ενέργεια μετατίθεται με τον τελεστή της ορμής, οπότε επιλέγουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της ορμής e^{ikx} ως λύσεις. Όμοια, σε τρεις διαστάσεις, εάν η Χαμιλτονιανή να μετατίθεται με τον τελεστή της στροφορμής, τότε επιλέγουμε να λύσουμε το πρόβλημα σε βάση ιδιοκαταστάσεων της στροφορμής. Σε αυτές τις περιπτώσεις, λέμε ότι η Χαμιλτονιανή υπακούει σε μια συμμετρία (εδώ, τη συμμετρία της ομοτιμίας), η οποία

⁽⁷⁶⁾Πρόβλημα 4.10.

επίσης επάγει ένα διατηρούμενο μέγεθος (εδώ, την ομοτιμία των κυματοσυναρτήσεων: άρτιες εξελίσσονται χρονικά σε άρτιες, περιττές σε περιττές), όπως συζητήσαμε στο κεφάλαιο 5. Το πλεονέκτημα της χρήσης των συμμετριών είναι ότι οι ιδιοκαταστάσεις τους μπορούν συνήθως να βρεθούν με απλά επιχειρήματα, σε αντίθεση με τη Χαμιλτονιανή, της οποίας το πρόβλημα ιδιοτιμών είναι συνήθως πιο περίπλοκο. Για παράδειγμα, οποιαδήποτε Χαμιλτονιανή με κινητική ενέργεια και άρτια συνάρτηση δυναμικού έχει συμμετρία ομοτιμίας, ανεξάρτητα της ακριβούς μορφής του δυναμικού. Η αναζήτηση ιδιοσυναρτήσεων της Χαμιλτονιανής ξεχωριστά στον υπόχωρο των άρτιων και ξεχωριστά των περιττών συναρτήσεων μειώνει την πολυπλοκότητα του προβλήματος.

6.3 Δέσμιες καταστάσεις

Προχωρούμε, τώρα, στην εύρεση των συντελεστών a_μ , b_μ και της ενέργειας E (βλ. εξ. 132,133 και την παράγραφο που ακολουθεί). Πρώτα εξετάζουμε λύσεις *δέσμιων καταστάσεων* (*bound states*) εκμεταλλευόμενοι τη συμμετρία των κυματοσυναρτήσεων. Δέσμιες ονομάζονται εκείνες οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής, οι οποίες είναι ουσιαστικά εντοπισμένες σε πεπερασμένο χώρο (μηδενίζονται ή πέφτουν εκθετικά για μεγάλα $|x|$).

Ήδη καταλήξαμε $k_I^2 = k_{III}^2 \equiv q^2$. Από τη συμμετρία ομοτιμίας, $\Psi(-x) = \pm \Psi(x)$, έχουμε $a_I = \pm b_{III}$ και $b_I = \pm a_{III}$ (+ για άρτιες συναρτήσεις, − για περιττές). Επίσης, $a_{II} = \pm b_{II} \equiv c/2$, δηλαδή, στην περιοχή II έχουμε ή $\Psi = c \cos(kx)$ ή $c \sin(kx)$. Επομένως, η εξίσωση (132) γράφεται

$$\Psi_+ = \begin{cases} ae^{iqx} + be^{-iqx} \\ c \cos(kx) \\ be^{iqx} + ae^{-iqx} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} ae^{iqx} + be^{-iqx} & x < -d \\ c \sin(kx) & -d < x < d \\ -(be^{iqx} + ae^{-iqx}) & d < x \end{cases} \quad (136)$$

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

για $x < -d$: και πάλι πρέπει $b = 0$. Έχουμε λοιπόν το ενδιαμέσο αποτέλεσμα:

$$\Psi_+ = \begin{cases} ae^{\gamma x} \\ c \cos(kx) \\ ae^{-\gamma x} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} ae^{\gamma x} & x < -d \\ c \sin(kx) & -d < x < d \\ -ae^{-\gamma x} & d < x \end{cases} \quad (137)$$

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

$$\begin{array}{ll} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ c \cos(kd) = a e^{-\gamma d} & c \sin(kd) = -a e^{-\gamma d} \\ k c \sin(kd) = \gamma a e^{-\gamma d} & k c \cos(kd) = \gamma a e^{-\gamma d} \end{array} \quad (138)$$

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

$$\begin{array}{ll} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ \tan(kd) = \frac{\gamma}{k} & \tan(kd) = -\frac{k}{\gamma} \end{array} \quad (139)$$

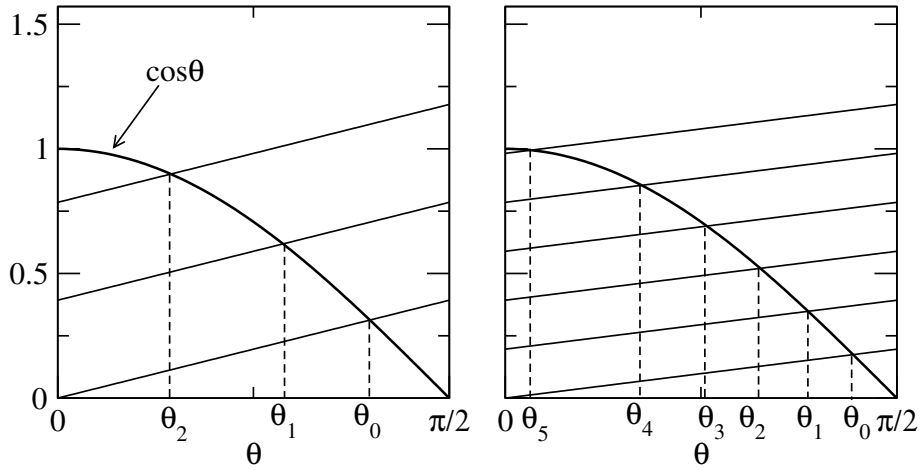
Δεδομένου ότι τα γ και k είναι συναρτήσεις της ενέργειας, οι παραπάνω εξισώσεις, αν λυθούν ως προς E , δίνουν τις δυνατές ιδιοτιμές της ενέργειας για άρτιες και περιττές δέσμιες καταστάσεις. Στη συνέχεια, με αντικατάσταση των ιδιοτιμών στην (138) λαμβάνουμε το λόγο a/c και σε τελευταίο βήμα, με χρήση της εξίσωσης κανονικοποίησης, $\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$, λαμβάνουμε τις τιμές των a και c .

Προχωρούμε σε επίλυση των εξ. (139).⁽⁷⁷⁾ Παρατηρούμε ότι $(kd)^2 + (\gamma d)^2 = [\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) + \frac{2m}{\hbar^2}(-E)]d^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|V_0|d^2 = \lambda^2$ (είναι $E < 0$ και $V_0 < 0$), όπου, για συντομία στο συμβολισμό, ορίσαμε την αδιάστατη παράμετρο $\lambda^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}|V_0|d^2$, $\lambda > 0$. Κάνουμε τώρα το μετασχηματισμό $kd = \lambda \cos \theta$, $\gamma d = \lambda \sin \theta$, που δίνει $k/\gamma = \cot \theta$ και $\gamma/k = \tan \theta$, ορίζοντας έτσι το $\theta(E) \equiv \arcsin(\gamma(E)d/\lambda) \equiv \arcsin(\sqrt{|E/V_0|})$. Οι εξ. (139) γίνονται

$$\begin{array}{ll} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ \tan(kd) = \tan \theta & \tan(kd) = -\cot \theta = \tan(\theta - \frac{\pi}{2}) \end{array} \quad (140)$$

Αυτές οι εξισώσεις έχουν τις λύσεις (δεδομένου ότι $\cos \theta = kd/\lambda > 0$, $\sin \theta = \gamma d/\lambda >$

⁽⁷⁷⁾ Ακολουθούμε τη μέθοδο που παρουσιάζεται στο βιβλίο του Στέφανου Τραχανά, *Κβαντομηχανική I*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991) (κεφ. 3).



Σχήμα 4: Γραφική λύση της εξ. (143) για $\lambda = \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar}d = 4$ (αριστερά) και $\lambda = 8$ (δεξιά). Τα σημεία τομής των ευθειών με την καμπύλη $\cos \theta$ αντιστοιχούν στις λύσεις θ_n στον άξονα των θ .

0, προκύπτει $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$)

$$\begin{aligned} &\text{για την } \Psi_+: \\ kd = \theta + n\pi = \theta + 2n\frac{\pi}{2}, \\ &(n = 0, 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\text{για την } \Psi_-: \\ kd = \theta - \frac{\pi}{2} + n\pi = \theta + (2n - 1)\frac{\pi}{2}, \quad (141) \\ &(n = 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

που συνοψίζονται στην

$$kd = \theta + n\frac{\pi}{2}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{άρτια } n \text{ για την } \Psi_+ \\ \text{περιττά } n \text{ για την } \Psi_- \end{array} \right. \quad (142)$$

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

$$\begin{aligned} \cos \theta(E) &= \frac{1}{\lambda} \theta(E) + \frac{1}{\lambda} \frac{\pi}{2} n \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m|V_0|}d} \theta(E) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m|V_0|}d} \frac{\pi}{2} n \end{aligned} \quad (143)$$

Οι λύσεις ως προς $\theta = \theta_n$ της τελευταίας εξίσωσης μπορούν να βρεθούν γραφικά με απλό τρόπο, ως σημεία τομής της καμπύλης $\cos \theta$ με την ευθεία $\frac{1}{\lambda} \theta(E) + \frac{1}{\lambda} \frac{n\pi}{2}$. Από τις θ_n (βλ. Σχ. 4) υπολογίζονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \gamma^2 = -|V_0| \sin^2 \theta_n = -|V_0| + |V_0| \cos^2 \theta_n. \quad (144)$$

Παρατηρούμε τα ακόλουθα:

- Υπάρχει τουλάχιστον μία λύση (για $n = 0$).

- Όλες οι λύσεις έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από V_0 .
- Η ενέργεια των λύσεων αυξάνεται με το n .
- Ο αριθμός λύσεων είναι πεπερασμένος. Δεδομένου ότι $\cos \theta \leq 1$, έχουμε $n_{\max} + 1$ λύσεις, με $n_{\max}$ το ακέραιο μέρος του $2\lambda/\pi$.
- Ο αριθμός των λύσεων εξαρτάται από το $1/\lambda$ μέσω του γινομένου των παραμέτρων $1/(\sqrt{|V_0|}d)$. Καθώς το λ αυξάνεται, δηλαδή για μεγαλύτερο $\sqrt{|V_0|}d$ (βαθύτερα ή πλατύτερα πηγάδια), ο αριθμός των λύσεων επίσης αυξάνεται.

Για μεγάλα λ (στο όριο $\sqrt{|V_0|}d \gg \hbar/\sqrt{2m}$), οι χαμηλότερες ενεργειακά λύσεις δίνονται από $\theta_n = \frac{\pi}{2} - \delta\theta_n$, με $\delta\theta_n \ll 1$. Προσεγγίζοντας $\cos(\frac{\pi}{2} - \delta\theta_n) = \sin \delta\theta_n \approx \delta\theta_n$, η εξ. (143) γράφεται $\delta\theta_n = \frac{1}{\lambda}(\frac{\pi}{2} - \delta\theta_n) + \frac{1}{\lambda}\frac{\pi}{2}n$, ή $\delta\theta_n = \frac{1}{\lambda}\frac{1+n}{1+1/\lambda}\frac{\pi}{2} \approx \frac{1}{\lambda}\frac{\pi}{2}(n+1)$. Αντικαθιστώντας στην (144) το $\cos^2 \theta_n = \sin^2 \delta\theta_n \approx (\delta\theta_n)^2$, προκύπτει

$$E_n - V_0 \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2d} \right)^2 (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (145)$$

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

Η κατώτατη ιδιοτιμή ενέργειας ονομάζεται *θεμελιώδης ή βασική στάθμη* και η αντίστοιχη κατάσταση *θεμελιώδης ή βασική κατάσταση (ground state)*. Παρατηρούμε ότι η θεμελιώδης στάθμη είναι υψηλότερη του ελάχιστου του δυναμικού: $E_0 > V_0$. Αυτό οφείλεται στην αναγκαστική ύπαρξη κινητικής ενέργειας.⁽⁷⁸⁾

Οι δέσμιες καταστάσεις διεισδύουν στις περιοχές I,III όπου το δυναμικό $V = 0$ υπερβαίνει την ενέργεια $E_n < 0$. Αυτό το φαινόμενο δεν παρουσιάζεται στην κλασική μηχανική. Όπως φαίνεται από την εξ. (137) η ιδιοσυνάρτηση φθίνει εκθετικά σε αυτές τις περιοχές, $ae^{\pm\gamma x}$. Ένα μέτρο της διείσδυσης είναι η ποσότητα $1/\gamma$, η οποία έχει διαστάσεις μήκους και ονομάζεται *βάθος διείσδυσης*. Στο όριο ($\sqrt{|V_0|}d \gg \hbar/\sqrt{2m}$), το βάθος διείσδυσης των ενεργειακά χαμηλών κυματοσυναρτήσεων (μικρό n) γίνεται απειροστό ($1/\gamma \ll d$), και οι κυματοσυναρτήσεις παίρνουν, προσεγγιστικά, τη μορφή της λύσης για το πρόβλημα σωματιδίου περιορισμένου στο $[-d, d]$.⁽⁷⁹⁾

6.4 Θεωρήματα για δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα προβλήματα

Παρατηρούμε από τα προηγούμενα ότι για το πρόβλημα των δέσμιων καταστάσεων στο πηγάδι δυναμικού δεν υπάρχει εκφυλισμός. Επίσης παρατηρούμε ότι η θεμελιώδης

⁽⁷⁸⁾Βλ. κεφ. 5 πρόβλημα 7.

⁽⁷⁹⁾Προβλήματα 2 και 3.

κατάσταση δεν έχει κόμβους, η πρώτη διεγερμένη έχει έναν κόμβο, κ.ο.κ. Αυτά τα συμπεράσματα γενικεύονται για δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα συστήματα.

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

Για να το δείξουμε αυτό,⁽⁸⁰⁾ θεωρούμε την ορίζουσα Wronski δύο συναρτήσεων $\Psi_1(x)$ και $\Psi_2(x)$, $W(x) = \Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x)$. Αν $W(x) = 0$, τότε $\Psi_1'/\Psi_1 = \Psi_2'/\Psi_2$, από όπου προκύπτει $\frac{d}{dx} \ln \Psi_1(x) = \frac{d}{dx} \ln \Psi_2(x)$, δηλαδή $\Psi_1 = c\Psi_2$, όπου c σταθερά, δηλαδή οι δύο συναρτήσεις είναι γραμμικά εξαρτημένες. Για το πρόβλημά μας, αν οι $\Psi_{1,2}$ ικανοποιούν τη χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger με κοινή ιδιοτιμή E , τότε $\Psi_{1,2}'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\Psi_{1,2}(x)$. Τότε, προκύπτει $\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2' = 0$. Αλλά η έκφραση στο αριστερό μέλος ταυτίζεται με την παράγωγο της ορίζουσας Wronski, άρα $W'(x) = 0$, άρα $W(x) = \Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x) = \text{σταθ.}$. Παρατηρώντας ότι οι δέσμιες καταστάσεις μηδενίζονται για $x \rightarrow \pm\infty$, πρέπει η σταθερά να μηδενίζεται, δηλ. $W(x) = 0$. Άρα, οι $\Psi_{1,2}$ είναι γραμμικά εξαρτημένες και αντιστοιχούν στην ίδια κατάσταση.

Προκύπτει το ακόλουθο πόρισμα:

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

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

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

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

- Θεώρημα αυστηρής σύγκρισης του Sturm. Σε μονοδιάστατα συστήματα, εάν το δυναμικό είναι συνεχές, και εάν $E_n < E_m$, τότε μεταξύ δύο κόμβων της Ψ_n υπάρχει τουλάχιστον ένας κόμβος της Ψ_m . Ως κόμβο εννοούμε ένα σημείο x_0 όπου η κυμα-

⁽⁸⁰⁾Βλ., π.χ., Στέφανος Τραχανάς, *Κβαντομηχανική I*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991).

το συνάρτηση μηδενίζεται και αλλάζει πρόσημο: είτε $\Psi(x_0^-) < 0$ και $\Psi(x_0^+) > 0$, είτε $\Psi(x_0^-) > 0$ και $\Psi(x_0^+) < 0$.

• Θεώρημα ταλάντωσης (*oscillation theorem*) του Sturm ή Θεώρημα *Sturm-Liouville*.

Σε μονοδιάστατα συστήματα, εάν το δυναμικό είναι συνεχές, η n -οστή κατά σειρά δέσμια κατάσταση έχει n κόμβους ($n = 0, 1, 2, \dots$).⁽⁸¹⁾ Ειδικότερα, η θεμελιώδης κατάσταση δεν έχει κόμβους.⁽⁸²⁾

Στην πράξη, τα τελευταία δύο θεωρήματά μας οδηγούν στο συμπέρασμα πως η Ψ_{n+1} έχει ακριβώς έναν κόμβο σε κάθε διάστημα κοιλίας της Ψ_n . Σε άρτιο δυναμικό, καταλήγουμε πως η ακολουθία των ιδιοσυναρτήσεων με αύξουσα ενέργεια είναι εναλλάξ άρτια, περιττή, άρτια, περιττή, κ.ο.κ., μια και οι άρτιες έχουν κοιλία στο μηδέν, ενώ οι περιττές υποχρεωτικά κόμβο.

6.5 Καταστάσεις σκέδασης

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

Προτού προχωρήσουμε στην εξέταση των λύσεων, θα συζητήσουμε τα πειράματα που συνήθως αφορούν οι καταστάσεις σκέδασης και τις αντίστοιχες αρχικές και συ-

⁽⁸¹⁾ Τα δύο τελευταία θεωρήματα αφορούν συναρτήσεις ορισμένες σε διάστημα $[a, b]$, με συνοριακές συνθήκες $\Psi(a) = \Psi(b) = 0$. Από φυσικής πλευράς, το θεώρημα αφορά πρακτικά οποιοδήποτε μονοδιάστατο φυσικό πρόβλημα, διότι μπορούμε να θέσουμε $a = -\frac{1}{2}L$ και $b = \frac{1}{2}L$ με L πολύ μεγάλο. Βλ. Ν. Δ. Αλικάκος και Γ. Η. Καλογερόπουλος, *Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις*, εκδόσεις Σύγχρονη Εποχή, 2003. Επίσης, Β. Simon, *Sturm Oscillation and Comparison Theorems*, στο *Sturm-Liouville Theory: Past and Present*, edited by W. O. Arnein, A. M. Hinz & D. B. Pearson, Birkhäuser Verlag 2000.

⁽⁸²⁾ Για να ισχύει το θεώρημα για τη θεμελιώδη κατάσταση, αρκεί το δυναμικό να μην έχει άπειρη ασυνέχεια. Βλ. Πρόβλημα 6.

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

Η φύση του προβλήματος επιβάλλει να εξετάσουμε κυματοσυναρτήσεις που κινούνται προς το στόχο, εισερχόμενες από μακριά, και στο μακρινό παρελθόν δεν αλληλεπιδρούν με το δυναμικό (δηλαδή, στο συγκεκριμένο πρόβλημα του πηγαιδιού δυναμικού, είναι αρχικά εντοπισμένες π.χ. σε μια περιοχή $x \ll -d$ και κινούνται προς το $x = 0$). Τέτοιες κυματοσυναρτήσεις είναι τα κυματοπακέτα στα οποία αναφερθήκαμε στο κεφ. 5 (εξ. 102):

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

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

Η φορά κίνησης του κυματοπακέτου συμφωνεί με το πρόσημο του q , όπως φαίνεται εκ πρώτης όψεως από τον όρο $e^{i(qx - Et/\hbar)}$ και όπως βρίσκουμε υπολογίζοντας το ρεύμα

πιθανότητας για κάθε επίπεδο κύμα (80):⁽⁸³⁾

$$\begin{aligned} j_q(x, t) &= \frac{(-i\hbar)}{2m} \left(e^{-i(qx-Et/\hbar)} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(qx-Et/\hbar)} - e^{i(qx-Et/\hbar)} \frac{\partial}{\partial x} e^{-i(qx-Et/\hbar)} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m} q. \end{aligned} \quad (146)$$

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

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int f_q \Psi_q(x) e^{-iE_q t/\hbar} dq, \quad (147)$$

Για την περίπτωση που εξετάζουμε, τυχαίνει το συνεχές μέρος του ενεργειακού φάσματος ($E > 0$) να ταυτίζεται με εκείνο του ελεύθερου σωματιδίου, αλλά οι κυματοσυναρτήσεις αλλάζουν, σύμφωνα με την εξ. (132):

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

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

Λόγω της φύσης του προβλήματος σκέδασης, δεν προχωρούμε στην κατασκευή άρτιων και περιττών λύσεων, όπως κάναμε στις δέσμιες καταστάσεις, αλλά στην κατασκευή λύσεων που να ικανοποιούν την αρχική συνθήκη εισερχόμενου κυματοπακέτου προς το $x = 0$ από το $x \ll -d$. Αυτή η αρχική συνθήκη κατασκευάζεται από επαλληλία των κυμάτων e^{iqx} , $q > 0$, διότι εύκολα βρίσκουμε ότι το ρεύμα πιθανότητας που αντιστοιχεί στην $a_I e^{iqx}$ ($x < -d$) είναι $j(x) = |a_I|^2 \frac{\hbar}{m} q > 0$. (Ισοδύναμα θα μπορούσαμε να είχαμε

⁽⁸³⁾ Σε μια ακριβή αντιμετώπιση, πρέπει να πάρουμε το ρεύμα που αντιστοιχεί στην $\Psi(x, t)$ του κυματοπακέτου στο όριο της εντοπισμένης κατανομής f_q γύρω από το q_0 και να καταλήξουμε στην ταχύτητα ομάδας, $v_{q_0} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_q}{dq} \Big|_{q_0} = \frac{\hbar}{m} q_0$.

διαλέξει τα κύματα $b_I e^{-iqx}$, αλλά με $q < 0$.) Έχουμε, επίσης, αυτόματα $b_{III} = 0$, που εκφράζει το γεγονός ότι δεν εισέρχεται κύμα από το $x \gg d$. Αυτό προκύπτει, διότι το ρεύμα πιθανότητας που αντιστοιχεί στη συνάρτηση $b_{III} e^{-iqx}$ ($x > d$) υπολογίζεται εύκολα πως είναι $j(x) = |b_{III}|^2 (-\hbar \frac{q}{m}) < 0$.

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

Συνεχίζουμε με την πρώτη οικογένεια λύσεων ($q > 0$, $b_{III} = 0$). Θα προσδιορίσουμε την κυματοσυνάρτηση μέσω των συνοριακών συνθηκών στα $x = \pm d$, θέτοντας $a_I = 1$. Αυτό μπορούμε να το κάνουμε, διότι το a_I θα μείνει στο τέλος ως ελεύθερη μεταβλητή, η οποία βρίσκεται από την αρχική μορφή του κυματοπακέτου: το a_I ταυτίζεται με τον συντελεστή $f_q/2\pi$ της εξ. (147). Ο συντελεστής $r \equiv b_I$ ονομάζεται *πλάτος ανάκλασης* (*reflection amplitude*) και ο συντελεστής $t \equiv a_{III}$ ονομάζεται *πλάτος διέλευσης* (*transmission amplitude*), διότι ο πρώτος δίνει το πλάτος του ανακλώμενου κύματος από το στόχο ($r e^{-iqx}$, με $j(x) = |r|^2 (-\frac{\hbar}{m}q) < 0$ για $x < -d$), ενώ ο δεύτερος δίνει το πλάτος του διερχόμενου κύματος ($t e^{-iqx}$, με $j(x) = |t|^2 \frac{\hbar}{m}q < 0$ για $x > d$). Συνοψίζοντας:

$$\Psi_q = \begin{cases} e^{iqx} + r e^{-iqx}, & x < -d \\ a e^{ikx} + b e^{-ikx}, & -d < x < d \\ t e^{iqx}, & d < x \end{cases} \quad (148)$$

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

$$\begin{aligned} \text{Συνεχεια της } \Psi \text{ στο } -d: \quad e^{-iqd} + r e^{iqd} &= a e^{-ikd} + b e^{ikd} \\ \text{Συνεχεια της } \Psi' \text{ στο } -d: \quad q(e^{-iqd} - r e^{iqd}) &= k(a e^{-ikd} - b e^{ikd}) \\ \text{Συνεχεια της } \Psi \text{ στο } +d: \quad a e^{ikd} + b e^{-ikd} &= t e^{iqd} \\ \text{Συνεχεια της } \Psi' \text{ στο } +d: \quad k(a e^{ikd} - b e^{-ikd}) &= q t e^{iqd} \end{aligned} \quad (149)$$

Παρά ότι η λύση του συστήματος δίνει όλους τους συντελεστές, στα πειράματα μετράται συνήθως το ποσοστό των σωματιδίων που διέρχεται και το ποσοστό που ανακλάται. Αυτά δίνονται από τις ποσότητες είναι οι $|t|^2$ και $|r|^2$, αντίστοιχα. Δίνουμε εδώ μόνο το

τελικό αποτέλεσμα για τα r και t :⁽⁸⁴⁾

$$r = ie^{-2iqd} \frac{(k^2 - q^2) \sin(2kd)}{2qk \cos(2kd) - i(k^2 + q^2) \sin(2kd)} \quad (150)$$

$$t = e^{-2iqd} \frac{2kq}{2qk \cos(2kd) - i(k^2 + q^2) \sin(2kd)} \quad (151)$$

Η ποσότητα $|t|^2 \frac{\hbar q}{m}$ δίνει το ρεύμα πιθανότητας που απομακρύνεται από την περιοχή του δυναμικού προς τα $x \gg d$. Αντίστοιχα, η ποσότητα $-|r|^2 \frac{\hbar q}{m}$ δίνει το ρεύμα που απομακρύνεται προς τα $x \ll -d$, ενώ η ποσότητα $\frac{\hbar q}{m}$ το προσπίπτον ρεύμα προερχόμενο από τα $x \ll -d$. Αυτό φαίνεται εύκολα, αν υπολογίσουμε την τιμή του ρεύματος $j(x)$ στις συναρτήσεις e^{iqx} , te^{iqx} και re^{-iqx} . Επίσης, λόγω του ότι έχουμε στάσιμη κατάσταση (ιδιοσυνάρτηση της εξ. Schrödinger) η οποία δεν μεταβάλλεται με το χρόνο παρά μόνο μέσω του παράγοντα φάσης $e^{-iEt/\hbar}$ με μέτρο τη μονάδα, η πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στο διάστημα $[-d, d]$ είναι σταθερή στο χρόνο.⁽⁸⁵⁾ Η εξίσωση συνέχειας στην ολοκληρωτική μορφή της (82) μας δίνει λοιπόν

$$|t|^2 + |r|^2 = 1, \quad (152)$$

το οποίο ελέγχεται και με απ' ευθείας υπολογισμό και εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας. Ο συντελεστής διέλευσης $|t|^2$ προκύπτει (εφόσον $V_0 < 0$, δηλ. $k^2 > 0$):

$$|t|^2 = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(2kd)} = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2(2kd)}. \quad (153)$$

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

Παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον ότι οι συντελεστές $|t|^2$ και $|r|^2$ δεν είναι μονότονες συναρτήσεις της ενέργειας (ή του q). Μάλιστα, για $2kd = \nu\pi$ ($\nu = 1, 2, 3, \dots$), ο αριθμητής της (150) μηδενίζεται και ο παρονομαστής της (151) εξισώνεται με τον αριθμητή. Τότε, έχουμε $|r|^2 = 0$ και $|t|^2 = 1$, δηλαδή πλήρη διέλευση. Αυτή η κατάσταση ονομάζεται *συντονισμός σκέδασης* (*scattering resonance*). Εμφανίζεται σε ενέργειες

⁽⁸⁴⁾Βλ. S. Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015) (κεφ. 4). Στο συμβολισμό εδώ, τα k και q έχουν ανταλλαγή σε σχέση με το συμβολισμό του Gasiorowicz.

⁽⁸⁵⁾Αυτό ισχύει μεν για την ιδιοσυνάρτηση της εξ. Schrödinger, αλλά όχι για το κυματοπακέτο, το οποίο προκύπτει από επαλληλία ιδιοσυνάρτησεων (εξ. 147) και χαρακτηρίζεται από χρονικά μεταβαλλόμενη πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε οποιοδήποτε πεπερασμένο διάστημα.

$E_\nu = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2d}\right)^2 \nu^2$ (υπό την προϋπόθεση $E_\nu > 0$), δηλαδή, η απόσταση των οποίων από το ελάχιστο του δυναμικού είναι ίδια με τις ιδιοενέργειες των καταστάσεων του πηγαδιού με πλήρως ανακλαστικά τοιχώματα (σωματίδιο περιορισμένο στο $[-d, d]$). Θα ξαναδούμε το φαινόμενο στο επόμενο κεφάλαιο.

6.6 Προβλήματα

1. Για τον τελεστή ομοτιμίας $\hat{\mathcal{P}}\Psi(x) = \Psi(-x)$ δείξτε τα ακόλουθα: α) είναι ερμιτιανός, β) $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$, γ) οι ιδιοκαταστάσεις του είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις και δ) οι ιδιοτιμές του είναι το 1 (για άρτιες συναρτήσεις) και το -1 (για περιττές).
2. Θεωρήστε το πρόβλημα που ορίζεται από τις σχέσεις (130) και (131) στο όριο $|V_0|d^2 \gg \hbar^2/2m$. Δείξτε ότι οι ιδιοκαταστάσεις χαμηλών ενεργειών E_n προσεγγίζουν εκείνες του προβλήματος σωματιδίου εγκλωβισμένου στο διάστημα $[-d, d]$, δηλαδή σε απειρόβαθο πηγάδι.
3. Εξετάστε το λεγόμενο κλασικό όριο στο πηγάδι δυναμικού: όταν η μάζα του σωματιδίου γίνεται πολύ μεγάλη, ή όταν το $\hbar$ μπορεί να θεωρηθεί πολύ μικρό, δείξτε ότι οι ιδιοτιμές ενέργειας των δέσμιων καταστάσεων γίνονται πυκνές και επομένως χάνεται ο κβαντισμένος χαρακτήρας τους. Προσδιορίστε, σε σχέση με ποια ποσότητα πρέπει να γίνει πολύ μεγάλη η μάζα, ή ποια ποσότητα πρέπει να γίνει πολύ μεγάλη σε σχέση με το $\hbar$, για να ισχύουν τα παραπάνω.
4. Προσδιορίστε τη θεμελιώδη στάθμη και το βάθος διείσδυσης στην περίπτωση πηγαδιού δυναμικού πλάτους $2d = 1\text{nm}$ (10^{-9}m) και βάθους $V_0 = -1\text{eV}$ ($1.6 \times 10^{-19}\text{J}$) για α) ένα ηλεκτρόνιο ($m_e = 9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$), β) ένα πρωτόνιο ($m_p \approx 1840m_e$), γ) ένα άτομο Ηλίου ($m_{\text{He}} \approx 4m_p$), δ) ένα άτομο Ρουβιδίου ($m_{\text{Rb}} \approx 85m_p$). Πόσο απέχει σε κάθε περίπτωση η θεμελιώδης στάθμη από το ελάχιστο του δυναμικού και πόσο από τη δεύτερη στάθμη;
5. Σε πηγάδι δυναμικού πλάτους $2d = 1\text{nm}$ (10^{-9}m) και μεγάλου βάθους εντοπίζουμε ένα σωματίδιο στο αριστερό μισό του πηγαδιού. Δείξτε ότι αυτό μπορεί να επιτευχθεί, κατά προσέγγιση, με κατάλληλη επαλληλία της βασικής και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης, Ψ_0 και Ψ_1 . Εάν πριν τον εντοπισμό το σωματίδιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη, προσδιορίστε την ενέργεια που απαιτείται για να επιτευχθεί ο εντοπισμός στην περίπτωση που το σωματίδιο είναι α) ένα ηλεκτρόνιο, β) ένα πρωτόνιο, γ) ένα άτομο Ηλίου, δ) ένα άτομο Ρουβιδίου. (Υπόδειξη: γράψτε $\Psi = a\Psi_0 + b\Psi_1$ με $|a|^2 + |b|^2 = 1$ για κανονικοποίηση και

υπολογίστε κατάλληλο συνδυασμό a και b , ώστε η $|\Psi(x)|^2$ να είναι μέγιστα εντοπισμένη στην περιοχή $x < 0$ και ελάχιστα στην περιοχή $x > 0$, δηλαδή, το $\int_{-d}^0 |\Psi(x)|^2 dx$ να γίνεται μέγιστο.)

6. Αποδείξτε ότι σε μονοδιάστατα προβλήματα, εάν το δυναμικό δεν έχει άπειρη ασυνέχεια, η θεμελιώδης κατάσταση δεν έχει κόμβους.

Προφανώς πρόκειται για απευθείας πόρισμα του θεωρήματος ταλάντωσης του Sturm. Μπορεί να αποδειχθεί και ως εξής, ακολουθώντας μια μέθοδο των R. P. Feynman και M. Cohen. Θεωρήστε μια κατάσταση $\Psi(x) \in \mathbb{R}$, δεδομένου ότι οι δέσμιες καταστάσεις γράφονται σε πραγματική μορφή. Υποθέστε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι η Ψ έχει έναν κόμβο, έστω στο $x = 0$, όπου αλλάζει πρόσημο από τα αρνητικά στα θετικά. Θα κατασκευάσουμε μια $\Phi(x)$ με χαμηλότερη ενέργεια.

Θέσετε $\Phi(x) = |\Psi(x)|$, εκτός από ένα πολύ στενό διάστημα $[-\eta, \eta]$ γύρω από τον κόμβο. Στο διάστημα αυτό, θεωρήστε την Ψ σε πολύ καλή προσέγγιση γραμμική, δηλαδή $\Psi(x) = ax$, $x \in [-\eta, \eta]$, με $a > 0$, και θέσετε την $\Phi(x)$ ως μια παραβολική παρεμβολή που να ταιριάζει στην $|\Psi(\pm\eta)|$ ως προς τη συνέχεια της συνάρτησης και της πρώτης παραγώγου:

$$\Phi(x) = \begin{cases} C|\Psi(x)|, & |x| \geq \eta \\ C \left(\frac{a}{2\eta} x^2 + \frac{a\eta}{2} \right), & |x| < \eta \end{cases}, \quad (154)$$

όπου C σταθερά κανονικοποίησης προς προσδιορισμό, υποθέτοντας ότι η Ψ είναι κανονικοποιημένη. Προφανώς $\Phi(x) > 0$, δηλαδή η Φ δεν έχει κόμβο στο μηδέν. Υπολογίστε τώρα τη διαφορά στην ενέργεια μεταξύ των Ψ και Φ . Εφόσον οι $|\Psi(x)|$ και $|\Phi(x)|$ ταυτίζονται εκτός του διαστήματος $[-\eta, \eta]$, η διαφορά στην κινητική ενέργεια προέρχεται μόνο από το χωρίο εντός του διαστήματος. Στις εκφράσεις με το Φ , μπορείτε να αναπτύξετε τη σταθερά C κατά Taylor γύρω από το $\eta = 0$ και να κρατήσετε τους χαμηλότερους όρους που εξυπηρετούν.

Για την κινητική ενέργεια, εξυπηρετεί να χρησιμοποιήσετε την έκφραση $\langle \hat{T} \rangle = +\frac{\hbar^2}{2m} \int |\Psi'(x)|^2 dx$, όπου όλες οι ποσότητες είναι θετικά ορισμένες. Η έκφραση αποδεικνύεται με ολοκλήρωση κατά παράγοντες: $\langle \hat{T} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi''(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi^*(x) \Psi'(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi'^*(x) \Psi'(x) dx \right]$, όπου ο πρώτος όρος μηδενίζεται επειδή η Ψ μηδενίζεται στο $\pm\infty$. Διαπιστώστε ότι για τη διαφορά της κινητικής ενέργειας ισχύει $\langle \hat{T} \rangle_{\Phi} - \langle \hat{T} \rangle_{\Psi} < 0$, και είναι της τάξης του η .

Για τη διαφορά της δυναμικής ενέργειας, θεωρήστε κατά προσέγγιση ότι $V(x) = V(0)$ στο μικρό διάστημα $[-\eta, \eta]$, όπου, σε περίπτωση πεπερασμένης ασυνέχειας του δυναμικού στο μηδέν, θέτουμε $V(0) = \frac{1}{2}[V(0_+) + V(0_-)]$. Βρείτε ότι ι-

σχύει $V(0) [\langle \hat{V} \rangle_\Phi - \langle \hat{V} \rangle_\Psi] < 0$, δηλαδή το πρόσημο στη διαφορά της δυναμικής ενέργειας εξαρτάται από το πρόσημο του $V(0)$. Βρείτε, ωστόσο, ότι η ποσότητα $[\langle \hat{V} \rangle_\Phi - \langle \hat{V} \rangle_\Psi]$ είναι της τάξης η^3 , δηλαδή ασήμαντη σε σχέση με τη διαφορά της κινητικής ενέργειας.

Καταλήξτε στο συμπέρασμα ότι $\langle \hat{H} \rangle_\Phi < \langle \hat{H} \rangle_\Psi$, αρκεί το η να είναι επαρκώς μικρό, και αιτιολογήστε γιατί η Ψ δεν μπορεί να είναι θεμελιώδης.

7 Φραγμός δυναμικού και φαινόμενο σήραγγας

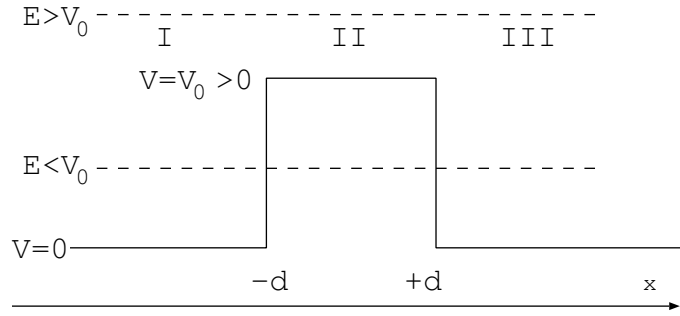
Θα μελετήσουμε τώρα το πρόβλημα σκέδασης σωματιδίου που κινείται σε μια διάσταση στο $(-\infty, \infty)$ και υπόκειται σε ορθογώνιο φραγμό δυναμικού:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (155)$$

με

$$V(x) = \begin{cases} V_0 (> 0), & \text{αν } -d < x < d \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \quad (156)$$

Η Χαμιλτονιανή είναι ίδια με εκείνη του πηγαδιού δυναμικού (εξ. 130 και 131), με τη διαφορά ότι εδώ $V_0 > 0$ (βλ. σχ. 5). Οι λύσεις δίνονται από την εξ. (148), την οποία



Σχήμα 5: Φραγμός δυναμικού σε μία διάσταση.

επαναλαμβάνουμε εδώ:

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

με $q^2 = 2mE/\hbar^2$ και $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Σε αντίθεση με εκείνη την περίπτωση, εδώ έχουμε πάντα $E > 0$: όπως εύκολα μπορεί να διαπιστώσει κανείς οι λύσεις με $E < 0$ απειρίζονται στο $x \rightarrow \pm\infty$, και ως εκ τούτου απορρίπτονται. Οι λύσεις για τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης δίνονται από τις εξ. (150) και (151), αντίστοιχα. Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

α) Για $E > V_0$ ($k \in \mathbb{R}$) απλώς επαναλαμβάνονται οι εξισώσεις (150), (151) και (153):

$$r = ie^{-2iqd} \frac{(k^2 - q^2) \sin(2kd)}{2qk \cos(2kd) - i(k^2 + q^2) \sin(2kd)} \quad (157)$$

$$t = e^{-2iqd} \frac{2kq}{2qk \cos(2kd) - i(k^2 + q^2) \sin(2kd)} \quad (158)$$

$$|t|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(2kd)} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2(2kd)}. \quad (159)$$

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

$$E_\nu = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2d}\right)^2 \nu^2 \quad (160)$$

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

β) Για $E < V_0$ έχουμε $k^2 < 0$. Για απλότητα θέτουμε τότε $ik = \gamma \in \mathbb{R}$. Οι εξ. (157) και (158) δεν αλλάζουν, παρά μετασχηματίζονται με την αλλαγή μεταβλητής $[\cos(2kd) \rightarrow \cosh(2\gamma d), \sin(2kd) \rightarrow i \sinh(2\gamma d)]$. Ο συντελεστής διέλευσης γράφεται

$$|t|^2 = \frac{4q^2\gamma^2}{4q^2\gamma^2 + (q^2 + \gamma^2)^2 \sinh^2(2\gamma d)} = \frac{4q^2\gamma^2}{4q^2\gamma^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2}V_0\right)^2 \sinh^2(2\gamma d)}. \quad (161)$$

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

$$|t|^2 \approx \left(\frac{\hbar^2\gamma q}{mV_0}\right)^2 e^{-4\gamma d}, \quad \text{για} \quad \sqrt{|E - V_0|}d \ll \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \quad (162)$$

Το σημαντικό σε αυτόν τον τύπο είναι η εκθετική εξάρτηση του $|t|^2$ από το πάχος και το ύψος του φράγματος ($\gamma d = \sqrt{2m|E - V_0|}d/\hbar$). Ο όρος στην παρένθεση έχει, συγκριτικά, ασυθενή εξάρτηση από τα d και V_0 . Η εκθετική εξάρτηση κάνει το φαινόμενο σήραγγας εξαιρετικά ευαίσθητο σε μεταβολές των παραμέτρων του φράγματος και της μάζας του σωματιδίου.⁽⁸⁶⁾ Παράδειγμα της ευαισθησίας είναι ο χρόνος ζωής των πυρήνων που διασπώνται εκπέμποντας σωματίδια α , ο οποίος διαφοροποιείται κατά τάξεις μεγέθους.

⁽⁸⁶⁾Πρόβλημα 1.

7.1 Βήμα δυναμικού. Πολλαπλή σκέδαση

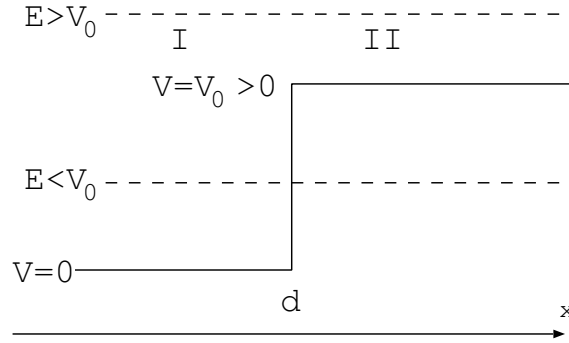
Θα μελετήσουμε το πρόβλημα σκέδασης σωματιδίου που κινείται σε μία διάσταση στο $(-\infty, \infty)$ και προσπίπτει σε βήμα δυναμικού (βλ. σχ. 6):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (163)$$

με

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{αν } x < d \\ V_0, & \text{αν } x \geq d \end{cases} \quad (164)$$

Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger έχει τη γενική λύση



Σχήμα 6: Βήμα δυναμικού με $V_0 > 0$.

$$\Psi(x) = \begin{cases} ae^{iqx} + re^{-iqx}, & \text{αν } x < d \\ te^{ikx} + be^{-ikx}, & \text{αν } x \geq d \end{cases} \quad (165)$$

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

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

οι οποίες έχουν τη λύση

$$t = e^{i(q-k)d} \frac{2q}{q+k} = e^{i(q-k)d} t_0 \quad (166)$$

$$r = e^{2iqd} \frac{q-k}{q+k} = e^{2iqd} r_0 \quad (167)$$

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

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

$$|r|^2 q + |t|^2 k = q \rightsquigarrow |r|^2 + |t|^2 \frac{k}{q} = 1, \quad (168)$$

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

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

Η πρόσπτωση από δεξιά (από τα $x > d$ προς $x < d$) αντιμετωπίζεται με τον ίδιο τρόπο. Προκύπτουν οι ίδιες εξισώσεις (166 και 167), με τη διαφορά ότι τα k και q πρέπει να ανταλλάγουν, διότι το e^{ikx} (δηλ. το κύμα στην περιοχή, όπου $V_0 \neq 0$) είναι πλέον προσπίπτον, το $r e^{-ikx}$ ανακλώμενο, και το $t e^{iqx}$ (δηλ. το κύμα στην περιοχή, όπου $V_0 = 0$) διερχόμενο. Αντίστοιχα, πρέπει να τεθεί $\text{Re } k < 0$ και $\text{Re } q < 0$, λόγω της απαίτησης για πρόσπτωση από δεξιά.

Έχει ενδιαφέρον να δει κανείς το πρόβλημα του φραγμού δυναμικού (βλ. εξ. 158) ως ένα πρόβλημα πολλαπλής σκέδασης μεταξύ δύο βημάτων δυναμικού, ενός στο $-d$ από $V = 0$ σε $V = V_0$ και ενός στο d από $V = V_0$ σε $V = 0$. Έστω ότι το πρώτο βήμα έχει πλάτη διέλευσης t'_1 και ανάκλασης r'_1 για πρόσπτωση από τα αριστερά και t_1 , r_1 για πρόσπτωση από δεξιά, ενώ το δεύτερο έχει πλάτη διέλευσης t_2 και ανάκλασης r_2 για πρόσπτωση από αριστερά. Τότε η κυματοσυνάρτηση που εξέρχεται στα δεξιά του βήματος στο $+d$ προκύπτει από επαλληλία των ακόλουθων βημάτων:

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

κ.ο.κ., λαμβάνοντας υπ' όψη τη διπλή, τετραπλή, κλπ., ανάκλαση. Αν t το συνολικό πλάτος διέλευσης, με $\Psi(x) = t e^{iqx}$ για $x > d$, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} t &= t'_1 t_2 + t'_1 (r_2 r_1) t_2 + t'_1 (r_2 r_1 r_2 r_1) t_2 + \dots \\ &= t'_1 [1 + (r_2 r_1) + (r_2 r_1)^2 + \dots] t_2 \\ &= t'_1 [1 - r_1 r_2]^{-1} t_2 \end{aligned} \quad (169)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον τύπο άθροισης γεωμετρικής σειράς, $\sum_n \lambda^n = [1 - \lambda]^{-1}$.

Στους συντελεστές $r_{1,2}$ περιέχονται παράγοντες φάσης της μορφής e^{i2kd} οι οποίοι προκύπτουν από τη διάδοση μεταξύ $-d$ και $+d$, σε αναλογία με την εξ. (167), αλλά με το k στη θέση του q , διότι εδώ το x είναι εντός του βήματος δυναμικού, οπότε $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Όμοια, στους συντελεστές t'_1 και $t_{1,2}$ περιλαμβάνονται παράγοντες φάσης της μορφής $e^{2i(q-k)d}$. Εδώ λοιπόν πρέπει να αντικαταστήσουμε τα t'_1 , $r_{1,2}$ και $t_{1,2}$ για το βήμα δυναμικού που προκύπτουν από τις εξ. (166,167), λαμβάνοντας υπ' όψη την πρόσπτωση από δεξιά ή αριστερά στα d και $-d$. Μετά από λίγες πράξεις καταλήγουμε στο πλάτος διέλευσης του τετραγωνικού φραγμού.⁽⁸⁷⁾

7.2 Προσέγγιση στο φαινόμενο σήραγγας για υψηλό ή πλατύ φραγμό

Η εξ. (169) μάς δίνει τη δυνατότητα προσέγγισης του συντελεστή διέλευσης στο φαινόμενο σήραγγας από μη τετραγωνικό φραγμό, αρκεί να είναι επαρκώς υψηλός ή πλατύς και να περιγράφεται από επαρκώς ομαλή συνάρτηση.

Σε πρώτο βήμα, παρατηρούμε ότι το γινόμενο $r_1 r_2$ γίνεται αμελητέο, εάν το γινόμενο $(V_0 - E) d^2$ είναι μεγάλο. Αυτό προκύπτει από την έκφραση (167), προσαρμοσμένη για την περίπτωση όπου το προσπίπτον κύμα είναι εντός του φραγμού με $E < V_0$. Τότε, το προσπίπτον κύμα έχει κυματαριθμό k και το διερχόμενο q , οπότε ανταλλάσσουμε τα q και k στην (167) και θέτουμε $k = i\gamma$, $\gamma \in \mathbb{R}$. Βρίσκουμε $r_1 = e^{-2\gamma d}(i\gamma + q)/(i\gamma - q)$. Όμοια, το πλάτος r_2 πέφτει εκθετικά ως $e^{-2\gamma d}$, άρα $r_1 r_2 \propto e^{-4\gamma d}$, που γίνεται αμελητέο. Ως αποτέλεσμα, $t \approx t'_1 t_2$, οπότε το $|t|^2 = |t'_1 t_2|^2$ δίνεται από τον τύπο (162).

Σε δεύτερο βήμα, προσεγγίζουμε το δυναμικό $V(x)$ με άθροισμα φραγμών δυναμικού σε N αλληπάλλληλα εφαπτόμενα διαστήματα $[x_i, x_i + d_i)$ μήκους d_i το καθένα: $V(x) = \sum_i V_i \chi_i(x)$, όπου V_i σταθερά και $\chi_i(x) = 1$, αν $x_i \leq x < x_i + d_i$ και $= 0$, αλλιώς.⁽⁸⁸⁾ Ως x_0 παίρνουμε το σημείο όπου ξεκινά η συνθήκη φαινόμενου σήραγγας, $V(x) > E$, και ως x_N το σημείο στο οποίο σταματά η συνθήκη. Δηλαδή κάνουμε μια διαμέριση του διαστήματος στο οποίο $V(x) > E$ και προσεγγίζουμε τη συνάρτηση $V(x)$ με μια κατά διαστήματα σταθερή συνάρτηση. Η διαμέριση, όμως, δεν γίνεται ολοένα και πυκνότερη, αλλά είναι τέτοια, ώστε τα διαστήματα να είναι επαρκώς πλατιά, ή η διαφορά $V(x) - E$ επαρκώς μεγάλη, ώστε να ισχύει, ανά διάστημα, ο τύπος (162). Προφανώς, αυτή η προσέγγιση δεν μπορεί να γίνει σε οποιαδήποτε συνάρτηση $V(x)$, παρά μόνο σε αργά μεταβαλλόμενες συναρτήσεις.

Σε τρίτο βήμα εφαρμόζουμε το ανάπτυγμα πολλαπλής σκέδασης, σε αντιστοιχία με την εξ. (169), στα αλληπάλλληλα $N + 1$ βήματα δυναμικού. Τα πλάτη ανάκλασης έχουν αμελητέα συνεισφορά, διότι το γινόμενο $V_i d_i^2$ είναι από υπόθεση μεγάλο, οπότε κα-

⁽⁸⁷⁾ Πρόβλημα 2.

⁽⁸⁸⁾ Η $\chi_i(x)$ λέγεται χαρακτηριστική συνάρτηση του διαστήματος $[x_i, x_i + 2d_i)$.

ταλήγουμε για το πλάτος διέλευσης t όλου του φραγμού: $t \approx t_0 t_2 \cdots t_N$. Για το t_i εφαρμόζουμε τον τύπο (166), κατάλληλα προσαρμοσμένο για σκέδαση σε βήμα δυναμικού στη θέση x_i . Αντικαθιστώντας τον κυματαριθμό του προσπίπτοντος με k_{i-1} και του διερχόμενου με k_i , λαμβάνουμε $t_i = e^{i(k_{i-1}-k_i)x_i} (2k_{i-1}) / (k_{i-1} + k_i)$. Εδώ όμως έχουμε πάντα $V_i < E$, επομένως θέτουμε $k_i = i\gamma_i$, $\gamma_i \in \mathbb{R}$, $\gamma_i > 0$. Εξαιρέση αποτελούν τα $k_{-1} = k_N \equiv q \in \mathbb{R}$ (δηλαδή οι κυματαριθμοί εκτός φράγματος, για $x < x_0$ και $x > x_N$). Επομένως, η πιθανότητα διέλευσης γράφεται (παρατηρώντας ότι ο πρώτος και τελευταίος όρος του παρονομαστή γράφονται $|q + i\gamma_0|^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ και $|q + i\gamma_{N-1}|^2 = \frac{2mV_{N-1}}{\hbar^2}$):

$$\begin{aligned}
|t|^2 &\approx |t_0|^2 |t_2|^2 \cdots |t_N|^2 \\
&= \frac{(2q 2\gamma_0 \cdots 2\gamma_{N-1})^2}{\frac{2mV_0}{\hbar^2} (\gamma_0 + \gamma_1)^2 \cdots (\gamma_{N-2} + \gamma_{N-1})^2 \frac{2mV_{N-1}}{\hbar^2}} \\
&\quad \times e^{-2\gamma_0 x_0} e^{-2(\gamma_1 - \gamma_0)x_1} \cdots e^{-2\gamma_{N-1}(x_N - x_{N-1})} \\
&= C(E) e^{-2[\gamma_0(x_1 - x_0) + \gamma_1(x_2 - x_1) \cdots + \gamma_N(x_N - x_{N-1})]} \\
&= C(E) e^{-2 \sum \gamma_i d_i} \\
&\approx C(E) \exp \left[-2 \int_{x_0}^{x_N} \gamma(x) dx \right] \\
&\equiv C(E) \exp \left[-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{x_0}^{x_N} \sqrt{V(x) - E} dx \right] \quad (170)
\end{aligned}$$

Η έκφραση αναδεικνύει την εκθετική συμπεριφορά του συντελεστή διέλευσης ως προς την ενέργεια στο φαινόμενο σήραγγας. Ο παράγοντας $C(E)$ (το κλάσμα αριστερά του εκθετικού) εξαρτάται μεν από την ενέργεια, αλλά πολύ ασθενέστερα από το εκθετικό. Στην πράξη, η έκφραση χρησιμεύει ως πρώτη προσέγγιση σε προβλήματα όπου γνωρίζει κανείς τη γενική μορφή του δυναμικού, αλλά αγνοεί τις λεπτομέρειες. Τέτοιο παράδειγμα είναι ο τύπος Fowler-Nordheim για την εκπομή ηλεκτρονίων από μέταλλα υπό την επίδραση εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου και ο τύπος εκπομπής σωματιδίων α από πυρήνες.⁽⁸⁹⁾

7.3 Προβλήματα

1. Στο φαινόμενο σήραγγας, εξετάστε την κυματοσυνάρτηση εντός του φραγμού δυναμικού. Βρείτε το βάθος διείσδυσης. Εξετάστε το συντελεστή διέλευσης σε σύγκριση με το βάθος διείσδυσης. Στη συνέχεια, εξετάστε την εξάρτηση του συντελεστή διέλευσης, $|t|^2$, από τη μάζα του σωματιδίου. Συγκρίνετε το αποτέλεσμα για ηλεκτρόνια με εκείνο για πρωτόνια ($m_p \approx 1840m_e$).

⁽⁸⁹⁾Βλ. π.χ. Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015) (κεφ. 4 και παράρτημα Π6.).

2. Βρείτε τα πλάτη t'_1 , t_2 και $r_{1,2}$ και το τελικό πλάτος διέλευσης t της εξ. (169). Συγκρίνετε με την εξ. (158).
3. Σωματίδιο ενέργειας γνωστής μάζας m και άγνωστου φορτίου $q > 0$ προσπίπτει από αριστερά σε φραγμό δυναμικού της μορφής

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

Εδώ, $D > 0$ είναι ηλεκτρικό πεδίο που ελέγχει την ισχύ του φραγμού. Δεχόμαστε ότι $V_0 > 0$ και ότι η ενέργεια του σωματιδίου είναι γνωστή και βρίσκεται στο διάστημα $0 < E < V_0$.

Έστω ότι γίνονται δύο μετρήσεις του ρεύματος διέλευσης J με την ίδια ενέργεια E . Στην πρώτη, με $D = D_1$ βρίσκουμε $J = J_1$. Στη δεύτερη, με $D = 2D_1$, βρίσκουμε $J = 2J_1$. Να υπολογιστεί το φορτίο q .

8 Δυναμικά συνάρτησης δ

8.1 Δυναμικό συνάρτησης δ

Θεωρούμε το δυναμικό $V(x) = g\delta(x)$.⁽⁹⁰⁾⁽⁹¹⁾ Αυτό μπορεί να εκληφθεί ως όριο του τετραγωνικού πηγαδιού δυναμικού, αν $g < 0$, ή φραγμού δυναμικού, αν $g > 0$, όταν εκείνο περιορίζεται σε ολοένα μικρότερο διάστημα $[-d, d]$ και λαμβάνει αντίστοιχα υψηλή τιμή. Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + g\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (171)$$

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

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

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

$$\frac{2mg}{\hbar^2} \Psi(0) + \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{0-} = \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{0+}, \quad (172)$$

δηλαδή, η παράγωγος της ιδιοσυνάρτησης παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια στο $x = 0$. Ολοκληρώνοντας την παράγωγο με πεπερασμένη ασυνέχεια, βρίσκουμε ότι η ιδιοσυνάρτηση είναι συνεχής στο $x = 0$.⁽⁹²⁾

Θεωρούμε την περίπτωση $g < 0$ και αναζητούμε δέσμιες καταστάσεις. Η γενική λύση της (171) γράφεται

$$\Psi(x) = \begin{cases} a_I e^{iqx} + b_I e^{-iqx} & x < 0 \\ a_{II} e^{iqx} + b_{II} e^{-iqx} & x > 0 \end{cases} \quad (173)$$

με $q^2 \equiv 2mE/\hbar^2$. Αν $E > 0$, τότε $q \in \mathbb{R}$, οπότε για $x < 0$ $|\Psi(x)|^2 = |a_I|^2 + |b_I|^2 + 2\text{Re}[a_I b_I^* e^{2iqx}]$, η οποία είναι περιοδική συνάρτηση του x με θετικές τιμές και το ολοκλήρωμά της στο $(-\infty, 0)$ αποκλίνει. Άρα, για $E > 0$ δεν έχουμε δέσμιες καταστάσεις, όπως είχαμε βρει και στο πηγάδι δυναμικού. Αν $E < 0$, τότε θέτουμε

⁽⁹⁰⁾Για τον ορισμό και τις ιδιότητες της συνάρτησης δ του Dirac, βλ. το Παράρτημα Α.

⁽⁹¹⁾Εφόσον το $V(x)$ έχει μονάδες ενέργειας και η $\delta(x)$ μονάδες αντίστροφου μήκους, το g πρέπει να έχει μονάδες $[\text{ενέργεια}] \times [\text{μήκος}]$.

⁽⁹²⁾Οι ιδιότητες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης διαφοροποιούνται, επομένως, από εκείνες της περίπτωσης δυναμικού με πεπερασμένη μόνον ασυνέχεια.

$iq = \gamma \in \mathbb{R}$, $\gamma > 0$, και η απαίτηση για μηδενισμό της $\Psi(x)$ στο $\pm\infty$ επιβάλλει $b_I = a_{II} = 0$. Δεδομένου αυτού, η συνέχεια της κυματοσυνάρτησης στο $x = 0$ επιβάλλει $b_{II} = a_I \equiv a$. Επομένως:

$$\Psi(x) = \begin{cases} a e^{\gamma x} & x < 0 \\ a e^{-\gamma x} & x > 0. \end{cases} \quad (174)$$

Το γ προσδιορίζεται εφαρμόζοντας τη συνθήκη ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου:

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

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

$$E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \quad (175)$$

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

Η εύρεση των καταστάσεων σκέδασης είναι απλή και βασίζεται στην ίδια συνοριακή συνθήκη συνέχειας της ιδιοσυνάρτησης και ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στο $x = 0$.⁽⁹³⁾

8.2 Δέσμιες καταστάσεις σε δύο δυναμικά δ

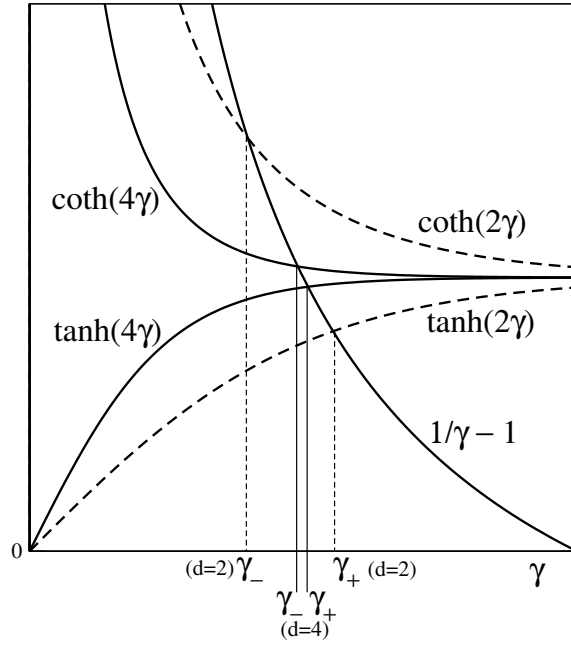
Εξετάζουμε τώρα δύο δυναμικά δ σε απόσταση $2d$ μεταξύ τους,

$$V(x) = g \delta(x+d) + g \delta(x-d) \quad (176)$$

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

$$\Psi_+ = \begin{cases} a_+ e^{\gamma_+ x} \\ b_+ \cosh(\gamma_+ x) \\ a_+ e^{-\gamma_+ x} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} a_- e^{\gamma_- x}, & x < -d \\ b_- \sinh(\gamma_- x), & -d \leq x < d \\ -a_- e^{-\gamma_- x}, & x > d \end{cases} \quad (177)$$

⁽⁹³⁾Πρόβλημα 1.



Σχήμα 7: Γραφική λύση των εξ. (178) για $d = 2$ και $d = 4$.

με $\gamma_{\pm} \equiv \sqrt{2m(-E_{\pm})}/\hbar$. Η συνθήκη συνέχειας στο d (ισοδύναμα, στο $-d$) δίνει $b_+ = a_+ e^{-\gamma_+ d} / \cosh(\gamma_+ d)$ και $b_- = -a_- e^{-\gamma_- d} / \sinh(\gamma_- d)$. Μένει να προσδιοριστούν τα $\gamma_{\pm}$ (μέσω της ασυνέχειας της παραγώγου είτε στο d είτε στο $-d$) και από αυτά οι ιδιοτιμές της ενέργειας και τα $a_{\pm}$ (μέσω της συνθήκη κανονικοποίησης). Η συνθήκη ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στο d γράφεται, σε αντιστοιχία με την (172), $\frac{2mg}{\hbar^2} \Psi(d) + \Psi'(d^-) = \Psi'(d^+)$, δηλ.

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

ή (εφόσον $g < 0$)

$$\tanh(\gamma_+ d) = \frac{2m|g|}{\hbar^2} \frac{1}{\gamma_+} - 1 \quad \text{και} \quad \coth(\gamma_- d) = \frac{2m|g|}{\hbar^2} \frac{1}{\gamma_-} - 1 \quad (178)$$

Αυτές οι εξισώσεις επιδέχονται αριθμητική ή γραφική λύση (βλ. σχ. 7). Παρατηρούμε ότι υπάρχει πάντα (για όλες τις τιμές του d) ακριβώς μία λύση γ_+ για την άρτια κυματοσυνάρτηση, ενώ το πολύ μία λύση γ_- για την περιττή κυματοσυνάρτηση. ⁽⁹⁴⁾

Για επαρκώς μεγάλα d , $\tanh(\gamma_+ d) \approx \coth(\gamma_- d) \approx 1$, οπότε $\gamma_+ \approx \gamma_- \approx m|g|/\hbar^2$ και οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι $E_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m} \gamma_{\pm}^2 \approx -\frac{mg^2}{2\hbar^2} \equiv E_0$. Δηλαδή, αν τα σημεία $\pm d$ είναι σε μεγάλη απόσταση, έχουμε δύο ιδιοτιμές σχεδόν ίσες με την ιδιοτιμή της ενέργειας E_0 (εξ. 175) του απλού δυναμικού: τα δύο δυναμικά είναι πρακτικά ανεξάρτητα μεταξύ τους. Σε αυτή την περίπτωση, αν συμβολίσουμε με Φ την ιδιοσυνάρτηση (174)

⁽⁹⁴⁾ Πρόβλημα 2

της περίπτωσης απλού δυναμικού, βρίσκουμε εύκολα ότι

$$\Psi_{\pm} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi(x+d) \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi(x-d), \quad (179)$$

όπου ο παράγοντας $1/\sqrt{2}$ φροντίζει για κανονικοποίηση.⁽⁹⁵⁾ Σε αυτή την περίπτωση, οι $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ είναι σχεδόν ορθογώνιες, λόγω της μεγάλης απόστασης των κέντρων τους και της εκθετικής πτώσης κάθε μιας μακριά από το κέντρο της: εκεί, όπου αποκτά σημαντικό πλάτος η μία, μηδενίζεται πρακτικά η άλλη. Υπό αυτή την προσέγγιση, οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ παραμένει ιδιοσυνάρτηση. Η επιλογή (179) αντιστοιχεί στους δύο γραμμικούς συνδυασμούς που είναι, ταυτόχρονα, ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή ομοτιμίας.

Καθώς η απόσταση $2d$ μειώνεται, η προσέγγιση παύει να ισχύει και έχουμε $E_+ < E_0$, $E_- > E_0$. Οι $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ παύουν να είναι ορθογώνιες και οι συναρτήσεις (179) δεν αποτελούν πλέον ιδιοσυναρτήσεις, όμως δίνουν μια πρώτη προσέγγιση στην ακριβή μορφή των $\Psi_{\pm}$. Η E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση του d ενώ η E_- φθίνουσα. Κάτω από κάποια κρίσιμη τιμή του d , για την οποία $E_- = 0$, παύουμε να έχουμε αντιδεσμική (Ψ_-) δέσμια κατάσταση: επιβιώνει μόνο η δεσμική (Ψ_+).

Η παραπάνω περιγραφή είναι ένα πρώτο βήμα για την κατανόηση του χημικού δεσμού. Ας υποθέσουμε ότι το δυναμικό (176) περιγράφει την αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με τους πυρήνες δύο ατόμων σε μία διάσταση και σε απόσταση $2d$ μεταξύ των ατόμων. Ας υποθέσουμε, επίσης, ότι σε κάθε άτομο αντιστοιχεί ένα ηλεκτρόνιο. Από την αρχή του Pauli γνωρίζουμε ότι τα δύο ηλεκτρόνια μπορούν να τοποθετηθούν στην ίδια κατάσταση, υπό την προϋπόθεση ότι έχουν διαφορετικό σπιν. Τότε, η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος θα είναι αυτή, στην οποία τα δύο ηλεκτρόνια τοποθετούνται στην Ψ_+ με αντίθετα σπιν. Η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης θα είναι $2E_+ < 0$. Εφόσον το E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση της απόστασης, το σύστημα μειώνει την ενέργειά του όσο πλησιάζουν τα άτομα μεταξύ τους. Με αυτό τον τρόπο δημιουργείται μια ελκτική τάση, η οποία οδηγεί στη διαμόρφωση σταθερού μορίου. Προφανώς, στην πραγματικότητα το πρόβλημα είναι εξαιρετικά πιο περίπλοκο: υπάρχει η άπωση μεταξύ των ηλεκτρονίων και των πυρήνων, η οποία θα εξισορροπήσει κάποια στιγμή την τάση για προσέγγιση. Το πρόβλημα πρέπει να αντιμετωπιστεί στο χώρο Hilbert δύο ηλεκτρονίων και δύο πυρήνων. Τέλος, το δυναμικό της συνάρτησης δ δεν αποτελεί ικανοποιητική προσέγγιση του δυναμικού Coulomb. Ωστόσο, η τάση για δημιουργία δεσμικών και αντιδεσμικών κυματοσυναρτήσεων και η επακόλουθη μείωση της ενέργειας επιβιώνει ανεξάρτητα από την προσέγγιση και αποτελεί βασικό στοιχείο κατανόησης του ομοιοπολικού χημικού δεσμού.

⁽⁹⁵⁾ Η Ψ_+ ονομάζεται δεσμική και η Ψ_- αντιδεσμική κατάσταση.

8.3 Προβλήματα

1. Λύστε το πρόβλημα σκέδασης για δυναμικό $g\delta(x)$. α) Βρείτε τα πλάτη και τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης. β) Κατά πόσον διαφοροποιείται η περίπτωση $g > 0$ από την περίπτωση $g < 0$; γ) Προκύπτουν συντονισμοί σκέδασης; δ) Ποια η μορφή της $|\Psi(x)|^2$ για $x < 0$ και $x > 0$; Σχολιάστε τις διαφορές.
2. Εξετάστε τις ιδιοτιμές της ενέργειας $E_{\pm}$ για το διπλό δυναμικό δ (εξ. 176). α) Δείξτε ότι η E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση και η E_- φθίνουσα συνάρτηση της απόστασης $2d$. β) Λύστε γραφικά το πρόβλημα της ιδιοτιμής E_- . Δείξτε ότι η E_- μηδενίζεται για d μικρότερο ή ίσο κάποιου d_{crit} . Τι συμβαίνει τότε με τον συντελεστή γ_- ; Τι συμβαίνει με το μήκος διείσδυσης; Υπόδειξη για το (β): Το σχ. 7 δεν εξυπηρετεί στην εύρεση της γ_- για μικρά d , διότι το σημείο τομής των καμπύλων $\coth(\gamma_-d)$ και $\frac{2m|g|}{\hbar^2} \frac{1}{\gamma_-} - 1$ λαμβάνει πολύ υψηλές τιμές στον άξονα y . Γι αυτό, ξαναγράψτε τη δεύτερη των (178) στη μορφή $\tanh(\gamma_-d) = f(\gamma_-)$, με $f(\gamma_-) = \frac{\hbar^2}{2m|g|} \gamma_- / \left(1 - \frac{\hbar^2}{2m|g|} \gamma_-\right)$. Σχεδιάστε τις καμπύλες του αριστερού και δεξιού μέλους και εξετάστε σε ποιο διάστημα ενδέχεται να τέμνονται, υπό την προϋπόθεση $\gamma_- > 0$. Εξετάστε την παράγωγο των δύο καμπύλων στο $\gamma_- = 0$ και υπολογίστε την $d_{\text{crit}} = \frac{\hbar^2}{2m|g|}$.

3. Σωματίδιο βρίσκεται σε δυναμικό της μορφής

$$V(x) = -g\delta(x) + V_1\theta(x), \quad g, V_1 > 0$$

δηλαδή, $V(x) = 0$ για $x < 0$, $V(x) = V_1$ (σταθερό) για $x > 0$, και επιπλέον $V(x) = -g\delta(x)$ ακριβώς στο κέντρο. [$\theta(x) = 0$ για $x < 0$ και $= 1$, για $x > 0$, είναι η συνάρτηση μοναδιαίου βήματος.]

- α) Να υπολογίσετε την ιδιοτιμή της ενέργειας της δέσμιας κατάστασης.
- β) Να δείξετε ότι, καθώς το V_1 αυξάνεται, φτάνει μια κρίσιμη τιμή, πάνω από την οποία δεν προκύπτει δέσμια κατάσταση. Να υπολογίσετε την κρίσιμη τιμή και να αιτιολογήσετε το αποτέλεσμα.

4. Σωματίδιο βρίσκεται σε δυναμικό της μορφής

$$V(x) = \begin{cases} -g\delta(x), & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| > L/2 \end{cases}$$

με $g, L > 0$, δηλαδή, σε απειρόβαθο φρέαρ δυναμικού με μια συνάρτηση δ στο κέντρο.

- α) Να βρεθεί η θεμελιώδης κατάσταση και η αντίστοιχη ιδιοτιμή ενέργειας E_0 .

β) Να διερευνηθεί για ποιες τιμές του g έχουμε $E_0 < 0$.

γ) Να βρεθούν οι ιδιοτιμές της ενέργειας όλων των περιπτώσεων ιδιοσυναρτήσεων και να συγκριθούν με τις αντίστοιχες για την περίπτωση $g = 0$.

5. Θεωρήστε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x) = a \exp(-\gamma|x|)$. Λόγω της ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στο μηδέν, ο υπολογισμός της κινητικής ενέργειας χρειάζεται ειδική μεταχείριση. Διερευνήστε το πρόβλημα με δύο τρόπους:

α) Γράψτε την $\Psi(x)$ στην προσεγγιστική μορφή $\Psi_\eta(x) = \Psi(x)$, για $|x| > \eta$, και $\Psi_\eta(x) = -bx^2 + c$, για $|x| < \eta$. Υπολογίστε τα b και c ώστε να υπάρχει συνέχεια της Ψ_η και της πρώτης παραγώγου στα σημεία $\pm\eta$. Υπολογίστε την κινητική ενέργεια της Ψ_η και πάρτε το όριο $\eta \rightarrow 0$.

β) Γράψτε την Ψ στη μορφή $\Psi(x) = a \exp(\gamma x)\theta(-x) + a \exp(-\gamma x)\theta(x)$. Βρείτε την $\Psi''(x)$ εφαρμόζοντας τους κανόνες παραγώγισης της $\theta(x)$ και τις ιδιότητες της $\delta(x)$ και έπειτα υπολογίστε την κινητική ενέργεια. Τέλος, συγκρίνετε με το (α).

9 Ο αρμονικός ταλαντωτής

9.1 Εισαγωγικά

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

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (180)$$

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

9.2 Αναλυτική μέθοδος επίλυσης

Ο κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής ορίζεται από τη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (181)$$

με εξίσωση ιδιοτιμών

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi. \quad (182)$$

Για ευκολία εφαρμόζουμε την αλλαγή μεταβλητής⁽⁹⁶⁾

$$\begin{aligned} \bar{x} &= x\sqrt{m\omega/\hbar} \\ \bar{E} &= E/\hbar\omega \end{aligned} \quad (183)$$

⁽⁹⁶⁾Για την επίλυση ακολουθούμε το βιβλίο του Στέφανου Τραχανά *Κβαντομηχανική I*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991).

οπότε η εξίσωση (182) γίνεται αδιάστατη:

$$\Psi''(\bar{x}) + (2\bar{E} - \bar{x}^2)\Psi(\bar{x}) = 0. \quad (184)$$

Δεδομένου ότι το δυναμικό απειρίζεται για $x \rightarrow \pm\infty$, αναμένουμε μόνο δέσμιες καταστάσεις, δηλαδή ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής που μηδενίζονται ασυμπτωτικά για μεγάλα $|x|$, τις οποίες θα αναζητήσουμε.

Παρατηρούμε ότι, για την ειδική περίπτωση $\bar{E} = 1/2$, η διαφορική εξίσωση γίνεται $\Psi''(\bar{x}) + (1 - \bar{x}^2)\Psi(\bar{x}) = 0$, με ιδιαίτερα απλές λύσεις τις δύο γραμμικά ανεξάρτητες συναρτήσεις $\Psi = c e^{\pm\bar{x}^2/2}$, c σταθερά. Η λύση $c e^{+\bar{x}^2/2}$ απορρίπτεται για φυσικές καταστάσεις, διότι απειρίζεται την κυματοσυνάρτηση στο $\pm\infty$, οπότε απομένει η $\Psi = c e^{-\bar{x}^2/2}$. Καθοδηγούμενοι από αυτό το αποτέλεσμα, δοκιμάζουμε για τυχαίο $\bar{E}$ να βρούμε λύσεις με ασυμπτωτική συμπεριφορά $\Psi \sim c e^{-\bar{x}^2/2}$. Αυτές θα έχουν τη μορφή

$$\Psi(\bar{x}) = c e^{-\bar{x}^2/2} h(\bar{x}) \quad (185)$$

όπου c σταθερά κανονικοποίησης και $h(\bar{x})$ συνάρτηση προς προσδιορισμό. Αντικαθιστώντας στην (184) λαμβάνουμε την ακόλουθη διαφορική εξίσωση για την $h(\bar{x})$:

$$h''(\bar{x}) - 2\bar{x}h'(\bar{x}) + (2\bar{E} - 1)h(\bar{x}) = 0, \quad (186)$$

γνωστή και ως εξίσωση του Hermite. Στο πνεύμα της μεθόδου των δυναμοσειρών, επιχειρούμε επίλυση μέσω αναπτύγματος σε σειρά:

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

Παραγωγίζοντας τους όρους της σειράς και αντικαθιστώντας στην (186), βρίσκουμε:

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

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

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

Οι συναρτήσεις $\bar{x}^k$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες, επομένως οι συντελεστές τους πρέπει

να εξισωθούν δύναμη προς δύναμη:

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

Καταλήξαμε λοιπόν στην αναδρομική σχέση

$$a_{k+2} = \frac{2k - 2\bar{E} + 1}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (187)$$

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

Από τη σχέση (187) προκύπτει ότι η ακολουθία a_k πρέπει να τερματίζεται για κάποιο $k = n$, δηλ. πρέπει να υπάρχει n , τέτοιο ώστε $a_{n+2} = 0$. Διαφορετικά, για μεγάλα k , έχουμε $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$, και η σειρά $\sum_k a_k \bar{x}^k$ λαμβάνει ασυμπτωτικά τη μορφή $e^{\bar{x}^2}$,⁽⁹⁷⁾ η οποία, πολλαπλασιαζόμενη με τον παράγοντα $e^{-\bar{x}^2/2}$ της εξ. (185), δίνει $\Psi \rightarrow e^{+\bar{x}^2/2}$ στο $\bar{x} \rightarrow \pm\infty$ και είναι απαράδεκτη ως κυματοσυνάρτηση. Η συνθήκη τερματισμού της σειράς, $a_{n+2} = 0$, σημαίνει μηδενισμό του αριθμητή: $2n - 2\bar{E} + 1 = 0$. Επαναφέροντας τη μεταβλητή $E = \hbar\omega\bar{E}$, λαμβάνουμε την απαίτηση η ενέργεια να λαμβάνει ιδιοτιμές της μορφής

$$E_n = (n + 1/2) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (188)$$

Αυτή είναι η ακολουθία ιδιοτιμών ενέργειας του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή. Οι λύσεις τερματιζόμενης σειράς στο n , $h_n(\bar{x}) = \sum_{k=0}^n a_k \bar{x}^k$, ονομάζονται πολυώνυμα *Hermite* (όπου στο άθροισμα λαμβάνουμε είτε μόνον τα άρτια είτε μόνον τα περιττά k , όπως συζητήθηκε πιο πάνω). Ως αρχικές συνθήκες της αναδρομικής σχέσης (187) θέτουμε $a_0 = 1$ και $a_1 = 2$, δηλ. $h_0(\bar{x}) = 1$ και $h_1(\bar{x}) = 2\bar{x}$, οι οποίες εύκολα βλέπουμε ότι επαληθεύουν τη διαφορική εξ. (186) με $\bar{E}_0 = 1/2$ και $\bar{E}_1 = 3/2$. Οι ιδιοσυναρτήσεις

⁽⁹⁷⁾Μπορούμε να πεισθούμε γι αυτό, αναπτύσσοντας σε σειρά το εκθετικό $e^{\bar{x}^2} = \sum_{\nu} \frac{1}{\nu!} (\bar{x}^{\nu})^2 = \sum_{\nu} \frac{1}{\nu!} \bar{x}^{2\nu}$. Θέτοντας $k = 2\nu$ και $a_k = \frac{1}{(k/2)!}$, έχουμε $e^{\bar{x}^2} = \sum_k \text{άρτιος } a_k \bar{x}^k$. Τότε, $a_{k+2}/a_k = (k/2)!/(k/2 + 1)! \approx 2/k$ για μεγάλα k . Για περισσότερες λεπτομέρειες, βλ. Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

δίνονται με αντικατάσταση των πολωνύμων Hermite στην εξ. (185). Υπολογίζοντας και τη σταθερά κανονικοποίησης βρίσκουμε για τις κανονικοποιημένες στη μονάδα ιδιοσυναρτήσεις ⁽⁹⁸⁾

$$\Phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} h_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \quad (189)$$

Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η

$$\Phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \quad (190)$$

με ιδιοτιμή ενέργειας $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Η Ψ_0 έχει την ιδιότητα να ελαχιστοποιεί το γινόμενο αβεβαιότητας θέσης-ορμής: $(\Delta x)_{\Psi_0}(\Delta p)_{\Psi_0} = \frac{1}{2}\hbar$, δηλ. ικανοποιείται η ισότητα στη σχέση (33).

9.3 Αλγεβρική μέθοδος επίλυσης

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

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p} \quad (191)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p} \quad (192)$$

οι οποίοι είναι ερμιτιανοί συζυγείς αλλήλων, όπως εύκολα φαίνεται από τις παραπάνω σχέσεις και από το γεγονός ότι οι $\hat{x}$ και $\hat{p}$ είναι ερμιτιανοί. Με βάση τους $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$, η Χαμιλτονιανή (181) γράφεται

$$\hat{H} = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \hbar\omega. \quad (193)$$

Εύκολα βρίσκουμε ότι η μέση τιμή της Χαμιλτονιανής (193) σε οποιαδήποτε κατάσταση Ψ είναι θετική και μάλιστα μεγαλύτερη από $\hbar\omega/2$:

$$\begin{aligned} (\Psi, \hat{H}\Psi) &= \hbar\omega(\Psi, \hat{a}^\dagger \hat{a}\Psi) + \frac{\hbar\omega}{2}(\Psi, \Psi) \\ &= \hbar\omega(\hat{a}\Psi, \hat{a}\Psi) + \frac{\hbar\omega}{2}(\Psi, \Psi) \quad (\text{διότι ο } \hat{a} \text{ είναι συζυγής ερμιτιανός του } \hat{a}^\dagger) \\ &= \hbar\omega\|\hat{a}\Psi\|^2 + \frac{\hbar\omega}{2}\|\Psi\|^2 \geq \frac{1}{2}\hbar\omega, \end{aligned} \quad (194)$$

διότι ο πρώτος όρος είναι ≥ 0 και ο δεύτερος ίσος με $\hbar\omega/2$, εφόσον η $\|\Psi\| = 1$.

⁽⁹⁸⁾Βλ. π.χ. A. Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 3rd ed., Springer 2003.

Από τη μεταθετική σχέση $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ προκύπτει⁽⁹⁹⁾

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (195)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a} \quad (196)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger. \quad (197)$$

Με τη βοήθεια των παραπάνω σχέσεων, μπορούμε να παραγάγουμε ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής, αν έχουμε δεδομένη μία, έστω την $\Psi_E \neq 0$, με ιδιοτιμή E . Δηλαδή, έστω $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$. Βρίσκουμε⁽¹⁰⁰⁾

$$\hat{H}\hat{a}\Psi_E = (E - \hbar\omega)\hat{a}\Psi_E \quad (198)$$

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger\Psi_E = (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\Psi_E \quad (199)$$

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

Στη συνέχεια δείχνουμε την ύπαρξη θεμελιώδους στάθμης. Αν επαναλάβουμε περισσότερες φορές τη δράση του $\hat{a}$ στο διάνυσμα Ψ_E , θα λάβουμε νέα ιδιοδιανύσματα με ολοένα μειούμενη ιδιοτιμή ενέργειας. Δρώντας m φορές λαμβάνουμε το ιδιοδιάνυσμα $\hat{a}^m\Psi_E$ με ιδιοτιμή $(E - m\hbar\omega)$. Για m αρκετά μεγάλο, η ιδιοτιμή θα γίνει αρνητική. Άρα, για τέτοιο m θα έχουμε $(\hat{a}^m\Psi_E, \hat{H}\hat{a}^m\Psi_E) = (E - m\hbar\omega)(\hat{a}^m\Psi_E, \hat{a}^m\Psi_E) = (E - m\hbar\omega)\|\hat{a}^m\Psi_E\|^2 \leq 0$, με την ισότητα να ισχύει στην περίπτωση $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Αυτό έρχεται σε αντίφαση με τη σχέση (194), σύμφωνα με την οποία η μέση τιμή της Χαμιλτονιανής του αρμονικού ταλαντωτή σε οποιαδήποτε κατάσταση είναι αναγκαστικά θετική, εκτός εάν $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Συνεπώς, για αρκετά μεγάλο m , θα ισχύει αναγκαστικά $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Έστω n ο μέγιστος δυνατός ακέραιος για τον οποίο $\hat{a}^n\Psi_E \neq 0$, ενώ $\hat{a}^{n+1}\Psi_E = \hat{a}(\hat{a}^n\Psi_E) = 0$. Δηλαδή, το διάνυσμα $\Psi_0 \equiv \hat{a}^n\Psi_E$ έχει το χαρακτηριστικό $\hat{a}\Psi_0 = 0$. Το ονομάζουμε θεμελιώδη κατάσταση. Η ιδιοτιμή ενέργειας $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ της θεμελιώδους κατάστασης ονομάζεται θεμελιώδης στάθμη και υπολογίζεται εύκολα:

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

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

Η Ψ_0 είναι μοναδική. Δηλαδή, αν υπάρχει $\Phi_0 \neq 0$ τέτοια, ώστε $\hat{a}\Phi_0 = 0$, τότε

⁽⁹⁹⁾Πρόβλημα 2.

⁽¹⁰⁰⁾Πρόβλημα 2.

αναγκαστικά $\Psi_0 = c\Phi_0$ με c σταθερά. Αυτό, το συμπεραίνουμε από το γεγονός ότι η ιδιοτιμή της ενέργειας της Φ_0 θα είναι ίδια με εκείνη της Ψ_0 (λόγω της παραπάνω απόδειξης) και στην ίδια ιδιοτιμή ενέργειας δεν αντιστοιχούν διαφορετικές δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα προβλήματα (απουσία εκφυλισμού σε μία διάσταση).⁽¹⁰¹⁾ Επίσης, από τα προηγούμενα είναι προφανές πως δεν υπάρχει ιδιοκατάσταση χαμηλότερης ενέργειας.

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

$$\begin{aligned}
\|\hat{a}^\dagger\Psi\|^2 &= (\hat{a}^\dagger\Psi, \hat{a}^\dagger\Psi) \\
&= (\Psi, \hat{a}\hat{a}^\dagger\Psi) \quad (\text{διότι ο } \hat{a} \text{ είναι συζυγής ερμιτιανός του } \hat{a}^\dagger) \\
&= (\Psi, (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\Psi) \quad (\text{από τη σχ. μετάθεσης 195}) \\
&= (\Psi, \hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi) + (\Psi, \Psi) \\
&= (\hat{a}\Psi, \hat{a}\Psi) + (\Psi, \Psi) \\
&= \|\hat{a}\Psi\|^2 + \|\Psi\|^2 > 0
\end{aligned}$$

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

Δεύτερον, εφόσον η θεμελιώδης κατάσταση Ψ_0 είναι ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής, ισχύει γι αυτήν η εξ. (199), δηλαδή, το διάνυσμα $\Psi_1 \equiv \hat{a}^\dagger\Psi_0$ είναι ιδιοδιάνυσμα με ιδιοτιμή $E_1 = E_0 + \hbar\omega$. Εφαρμόζοντας το επιχείρημα διαδοχικά, βρίσκουμε το εξής σύνολο ιδιοδιανυσμάτων-ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (200)$$

$$\Psi_n = (\hat{a}^\dagger)^n\Psi_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (201)$$

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = (n + 1/2)\hbar\omega \quad (202)$$

(όπου υπονοούμε $(\hat{a}^\dagger)^0 \equiv 1$). Άρα, μπορούμε να παραγάγουμε άπειρα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής, ξεκινώντας από τη θεμελιώδη στάθμη, της οποίας η ύπαρξη προκύπτει από την υπόθεση ύπαρξης ενός τουλάχιστον ιδιοδιανύσματος. Αυτά είναι σίγουρα ορθογώνια μεταξύ τους, διότι αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές.⁽¹⁰²⁾

Μπορούμε επίσης να πεισθούμε ότι το σύνολο είναι πλήρες, δηλαδή, ότι όλα τα ιδιοδιανύσματα γράφονται στη μορφή (201) (πλην πιθανού πολλαπλασιασμού με μια σταθερά). Έστω τυχαίο ιδιοδιάνυσμα Ψ_E με ιδιοτιμή E και n ο ακέραιος που δίνει $\hat{a}^n\Psi_E = \Psi_0$. Από την εξ. (198) προκύπτει ότι $E = E_0 + n\hbar\omega$, δηλ. $E = E_n$ με το

⁽¹⁰¹⁾Βλ. κεφ. 6.4, (σελ. 86).

⁽¹⁰²⁾Βλ. κεφ. 3, τελευταία παράγραφο του εδαφίου «Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές» (σελ. 12).

συμβολισμό της εξ. (202). Εφόσον λοιπόν οι ιδιοτιμές των Ψ_E και Ψ_n ταυτίζονται και εφόσον σε μία διάσταση δεν υπάρχει εκφυλισμός, τα διανύσματα Ψ_E και Ψ_n είναι γραμμικά εξαρτημένα, δηλαδή το ένα πολλαπλάσιο του άλλου, και εκφράζουν την ίδια κατάσταση. Συμπερασματικά, το σύνολο διανυσμάτων $\Psi_n \equiv (\hat{a}^\dagger)^n \Psi_0$, $n = 0, 1, 2, \dots$, είναι γραμμικά ανεξάρτητο και περιέχει όλα τα ιδιοδιανύσματα, αλλά εκκρεμεί η κανονικοποίησή τους.

Εξυπηρετεί να ορίσουμε τον *τελεστή αρίθμησης* (*number operator*), $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$, που εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή (193) και είναι πρόδηλα ερμιτιανός. Συγκρίνοντας με τις σχέσεις (200) και (202) προκύπτει αμέσως ότι τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής είναι και ιδιοδιανύσματα του τελεστή αρίθμησης:

$$\hat{n}\Psi_n \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}\Psi_n = n\Psi_n. \quad (203)$$

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

Τέλος, προχωρούμε στην κανονικοποίηση των διανυσμάτων Ψ_n και συμβολίζουμε με Φ_n τις κανονικοποιημένες Ψ_n . Εφόσον η αλγεβρική μέθοδος δεν δίνει τη μορφή των κυματοσυναρτήσεων, παρά μόνο την αλγεβρική τους σχέση μέσω της δράσης τελεστών, πρέπει να δεχθούμε ότι μία κατάσταση είναι κανονικοποιημένη και να προσδιορίσουμε τον συντελεστή κανονικοποίησης των υπόλοιπων σε σχέση με αυτή. Το απλούστερο είναι να αξιώσουμε την κανονικοποίηση της θεμελιώδους κατάστασης $\Phi_0 \equiv \Psi_0$: $\|\Psi_0\|^2 = (\Psi_0, \Psi_0) = 1$. Τότε, εφαρμόζοντας τη σχέση (201), βρίσκουμε για $n \geq 1$:

$$\begin{aligned} (\Psi_n, \Psi_n) &= ((\hat{a}^\dagger)^n \Psi_0, (\hat{a}^\dagger)^n \Psi_0) \\ &= (\hat{a}^\dagger \Psi_{n-1}, \hat{a}^\dagger \Psi_{n-1}) \\ &= (\Psi_{n-1}, \hat{a} \hat{a}^\dagger \Psi_{n-1}) \quad (\text{διότι ο } \hat{a} \text{ είναι ερμιτιανός συζυγής του } \hat{a}^\dagger) \\ &= (\Psi_{n-1}, (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \Psi_{n-1}) \quad (\text{από σχ. μετάθεσης 195}) \\ &= (\Psi_{n-1}, \hat{a}^\dagger \hat{a} \Psi_{n-1}) + (\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) \\ &= (n-1)(\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) + (\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) \quad (\text{από σχ. 203}) \\ &= n(\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}). \end{aligned}$$

Καταλήξαμε λοιπόν στην αναδρομική σχέση $\|\Psi_n\|^2 = n\|\Psi_{n-1}\|^2$, η οποία, δεδομένης της παραδοχής $\|\Psi_0\| \equiv \|\Phi_0\| = 1$, δίνει $\|\Psi_n\|^2 = n!$. Δηλαδή, τα κανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής, που αποτελούν και ορθοκανονική βάση, είναι τα

$$\Phi_n \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}} \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \Phi_0. \quad (204)$$

Προκύπτει εύκολα η δράση των $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ στα διανύσματα ορθοκανονικής βάσης:⁽¹⁰³⁾

$$\hat{a}^\dagger \Phi_n = \sqrt{n+1} \Phi_{n+1} \quad (205)$$

$$\hat{a} \Phi_n = \sqrt{n} \Phi_{n-1}. \quad (206)$$

9.4 Προβλήματα

1. Δείξτε ότι η μέση τιμή της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή είναι υποχρεωτικά θετική. Χρησιμοποιήστε τη μορφή της Χαμιλτονιανής (181) και το γεγονός ότι οι τελεστές $\hat{p}$ και $\hat{x}$ είναι ερμιτιανοί, χωρίς να καταφύγετε στους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής.
2. Αποδείξτε τη σχέση (193) και τις σχέσεις μετάθεσης (195-197) των τελεστών $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ του αρμονικού ταλαντωτή. Με βάση αυτές, δείξτε την ισχύ των εξισώσεων ιδιοτιμών (198) και (198).
3. Πεισθείτε για την ισχύ των σχέσεων (204-206).
4. Βρείτε τις ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές της ακόλουθης Χαμιλτονιανής:

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

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

5. Δείξτε ότι, σε οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση Φ_n του αρμονικού ταλαντωτή, η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας και η μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας είναι ίσες: $\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{1}{2} E_n$. Δείξτε την πρόταση με τρεις διαφορετικούς τρόπους: α) Με απευθείας ολοκλήρωση των εσωτερικών γινομένων, β) χρησιμοποιώντας τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής, γ) εφαρμόζοντας το θεώρημα virial: $\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{1}{2} \langle x \partial V / \partial x \rangle_n$ για ιδιοκατάσταση Ψ_n οποιασδήποτε Χαμιλτονιανής.

⁽¹⁰³⁾Πρόβλημα 3.

10 Κίνηση σε τρεις διαστάσεις και στροφορμή

10.1 Εισαγωγικά

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

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1, \quad \mathbf{r} = (x, y, z). \quad (207)$$

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

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_1^*(\mathbf{r}) \Psi_2(\mathbf{r}) d^3r. \quad (208)$$

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

$$\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}) = -i\hbar \nabla. \quad (209)$$

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

$$\begin{aligned} [\hat{r}_\mu, \hat{r}_\nu] &= 0 \\ [\hat{p}_\mu, \hat{p}_\nu] &= 0 \\ [\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu] &= i\hbar \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu \in \{x, y, z\}. \end{aligned} \quad (210)$$

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

Η κινητική ενέργεια είναι

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \equiv \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2. \quad (211)$$

Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger (εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας) για το σω-

ματίδιο απουσία δυναμικού γράφεται

$$\hat{T}\Psi_E(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_E(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r}). \quad (212)$$

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

$$\Psi_1''(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z) + \Psi_1(x)\Psi_2''(y)\Psi_3(z) + \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3''(z) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z), \quad (213)$$

από όπου:

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)} + \frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)} + \frac{\Psi_3''(z)}{\Psi_3(z)} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (214)$$

Το δεξιό μέλος της εξίσωσης είναι μια σταθερά, ενώ το αριστερό μέλος είναι άθροισμα τριών συναρτήσεων διαφορετικών μεταβλητών. Ο μόνος τρόπος να ικανοποιείται η εξίσωση για κάθε τιμή των x, y, z είναι να είναι σταθερός ο κάθε όρος του αριστερού μέλους. Έτσι,

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)} = -\frac{2mE_1}{\hbar^2}, \quad \frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)} = -\frac{2mE_2}{\hbar^2}, \quad \frac{\Psi_3''(z)}{\Psi_3(z)} = -\frac{2mE_3}{\hbar^2}, \quad \text{με } E_1 + E_2 + E_3 = E \quad (215)$$

Οι λύσεις αυτών των εξισώσεων είναι

$$\Psi_1(x) = e^{ik_1x}, \quad \Psi_2(y) = e^{ik_2y}, \quad \Psi_3(z) = e^{ik_3z}, \quad \text{με } k_\mu = \sqrt{2mE_\mu}/\hbar. \quad (216)$$

Από εδώ και πέρα, η γενική λύση γράφεται στη μορφή

$$\Psi = \sum_{k_1, k_2, k_3} c_{k_1, k_2, k_3} e^{i(k_1x + k_2y + k_3z)} \equiv \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (217)$$

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

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

$$\Psi_E = \sum_{n_1 n_2 n_3} c_{n_1 n_2 n_3} \sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3\pi z}{L}\right), \quad n_\mu = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (218)$$

υπό τη συνθήκη

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (219)$$

Η άθροιση στη γενική λύση υφίσταται εάν περισσότερες της μίας τριάδες (n_x, n_y, n_z) ικανοποιούν τη συνθήκη (219) για την ενέργεια, οπότε και έχουμε εκφυλισμένη ιδιοτιμή. (Η τιμή $n_\mu = 0$ αποκλείεται διότι δίνει μηδενική κυματοσυνάρτηση, ενώ οι τιμές $n_\mu < 0$ παραλείπονται, διότι δίνουν μόνο μια αλλαγή προσήμου, άρα συναρτήσεις γραμμικά εξαρτημένες από τις αντίστοιχες με $n_\mu > 0$.)

Σε άλλο παράδειγμα, εάν υποθέσουμε ότι έχουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες στα $x = 0, L$, $y = 0, L$, $z = 0, L$, τότε οι λύσεις γράφονται στη μορφή (216,217), υπό τη συνθήκη $k_\mu = 2\pi n_\mu / L$, $n_\mu \in \mathbb{Z}$. (Εδώ επιτρέπεται η τιμή $n_\mu = 0$, που δίνει $\Psi_\mu = 1$, ενώ οι συναρτήσεις με $n_\mu < 0$ και $n_\mu > 0$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες.)

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

$$\Psi_E = \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \sum_{n'=\pm 1} c_{n_1 n_2 n'}(k_3) \sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right) e^{in'k_3 z}, \quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots \quad (220)$$

με την ενέργεια να λαμβάνει τιμές

$$E_{n_1 n_2}(k_3) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_1^2 + n_2^2) + \frac{\hbar^2}{2m} k_3^2, \quad k_3 \in \mathbb{R}. \quad (221)$$

Εδώ, ο κυματαριθμός k_3 μπορεί να πάρει οποιαδήποτε πραγματική τιμή (όπως επιτρέπουν οι συνοριακές συνθήκες), σε αναλογία με τη περίπτωση ελεύθερου σωματιδίου κινούμενου σε μία διάσταση χωρίς άλλο περιορισμό πέραν της εξ. (221). Το n' απορροφά το πρόσημο του κυματαριθμού, διότι πρέπει να ληφθούν υπόψη οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $e^{\pm ik_3 z}$ οι οποίες αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια. Η εξ. (221) δίνει μια παραβολή για κάθε ζεύγος (n_1, n_2) , μετατοπισμένη στον άξονα των ενεργειών κατά την ποσότητα $\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_1^2 + n_2^2)$. Η ελάχιστη δυνατή τιμή της ενέργειας είναι $E_0 \equiv E_{1,1}(0) = 2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2$. Δεδομένης μιας ενέργειας $E > E_0$, παρουσιάζεται εκφυλισμός που αντιστοιχεί στον αριθμό των τριάδων (n_1, n_2, k_3) που ικανοποιούν τη σχέση (221).

10.2 Η στροφορμή

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

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (222)$$

Υποθέτουμε ότι η συναρτήσεις $\Psi_0(r, \theta, \phi)$ και $\Psi_\gamma(r, \theta, \phi)$ είναι αναλυτικές συναρτήσεις⁽¹⁰⁴⁾ της ϕ . Τότε, δεδομένου ότι στο επιλεγμένο σύστημα συντεταγμένων η γωνία γ είναι στην κατεύθυνση της ϕ , κάνουμε ένα ανάπτυγμα Taylor:

$$\begin{aligned} \Psi_\gamma(r, \theta, \phi) = \Psi_0(r, \theta, \phi + \gamma) &= \sum_n \frac{\gamma^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \phi^n} \Psi_0(r, \theta, \phi) \\ &= \exp \left[\gamma \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \Psi_0(r, \theta, \phi) \\ &= \exp \left[i \frac{\gamma}{\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right] \Psi_0(r, \theta, \phi) \\ &\equiv \exp \left[i \frac{\gamma}{\hbar} \hat{L}_z \right] \Psi_0(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (223)$$

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

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (224)$$

Είναι απλό να δείξει κανείς ότι $\frac{\partial}{\partial \phi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$. Ωστόσο, αυτή είναι η έκφραση της συνιστώσας z του διανύσματος $\mathbf{r} \times \nabla$, δηλαδή του εξωτερικού γινομένου των διανυσμάτων θέσης και βαθμίδας. Συμπεριλαμβάνοντας τη σταθερά $-i\hbar$, και χρησιμοποιώντας τον ορισμό της ορμής σε τρεις διαστάσεις (209), γράφουμε: $\hat{L}_z = (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})_z$.

Αυτό το αποτέλεσμα γενικεύεται σε στροφές γύρω από οποιονδήποτε άξονα. Ένας τρόπος είναι να υπολογίσουμε το μετασχηματισμό του $\partial/\partial\phi$ μεταξύ του αρχικού και ενός στραμμένου συστήματος συντεταγμένων. Είναι απλούστερο να παρατηρήσουμε ότι η ποσότητα $(\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})_z = \mathbf{e}_z \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})$ είναι το εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος $(\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})$ με το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση z , $\mathbf{e}_z$. Το εσωτερικό γινόμενο

⁽¹⁰⁴⁾ Αυτός ο περιορισμός δεν είναι ουσιώδης, διότι μπορούμε να εκφράσουμε οποιαδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση ως όριο ακολουθίας αναλυτικών συναρτήσεων.

είναι βαθμωτή ποσότητα, ως εκ τούτου δεν αλλάζει τιμή σε στροφή του συστήματος συντεταγμένων. Εάν το εκφράσουμε σε νέο σύστημα συντεταγμένων, ως προς το οποίο ο προηγούμενος άξονας z βρίσκεται πλέον στην κατεύθυνση $\mathbf{e}$, καταλήγουμε στη γενική έκφραση στροφής κατά γωνία γ γύρω από άξονα $\mathbf{e}$,

$$\Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma, \mathbf{e}} \mathbf{r}) = \exp \left[i \frac{\gamma}{\hbar} \mathbf{e} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \right] \Psi_0(\mathbf{r}) \equiv \exp \left[i \frac{\gamma}{\hbar} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right] \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (225)$$

Εδώ, ορίσαμε τον διανυσματικό τελεστή της στροφορμής

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (226)$$

με συνιστώσες

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (227)$$

Ο μετασχηματισμός (225), $\Psi_0(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi_\gamma(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma, \mathbf{e}} \mathbf{r})$, είναι μια στροφή στο χώρο, η οποία αφήνει αναλλοίωτη τη νόρμα $\|\Psi_0\|^2 = \int |\Psi_0|^2 d^3r = \int |\Psi_\gamma|^2 d^3r = \|\Psi_\gamma\|^2$. Επίσης, πρόκειται εμφανώς για γραμμική απεικόνιση, και έχει πάντα αντίστροφη (την στροφή κατά $-\gamma$), δηλαδή είναι $1 - 1$. Επομένως, ο τελεστής μετασχηματισμού, $\exp \left[i \frac{\gamma}{\hbar} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right]$, είναι μοναδιαίος. Δεδομένης της φανταστικής μονάδας στον εκθέτη, η ποσότητα $\frac{\gamma}{\hbar} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ πρέπει να είναι ερμιτιανός τελεστής. Λαμβάνοντας το $\mathbf{e}$ στις κατευθύνσεις x , y , z , συμπεραίνουμε ότι οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής είναι ερμιτιανοί τελεστές, όπως φαίνεται και από τον ορισμό (227), όπου οι συνιστώσες παράγονται από γινόμενα ερμιτιανών τελεστών οι οποίοι μετατίθενται (π.χ., $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$). Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουμε αν πάρουμε την εξίσωση (224) και ολοκληρώσουμε κατά παράγοντες στη

γωνία ϕ :

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

όπου ο πρώτος όρος της ολοκλήρωσης κατά παράγοντες μηδενίστηκε επειδή η Ψ πρέπει να είναι μονότιμη συνάρτηση της γωνίας ϕ ($\Psi(r, \theta, 0) = \Psi(r, \theta, 2\pi)$). Επομένως, $(\Psi, \hat{L}_z \Psi) \in \mathbb{R}$, δηλαδή ο $\hat{L}_z$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Δεδομένου ότι οι $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$ απλώς εκφράζουν τον $\hat{L}_z$ σε στραμμένο σύστημα συντεταγμένων στο χώρο, συμπεραίνουμε ότι είναι επίσης ερμιτιανοί, χωρίς να επαναλάβουμε τις πράξεις. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουμε παρατηρώντας ότι κάθε συνιστώσα της στροφορμής (ρεφε:ανγκμομοπονεντς) αποτελείται από γινόμενα μετατιθέμενων ερμιτιανών τελεστών.

Περαιτέρω, ορίζουμε το μέτρο του τετραγώνου της στροφορμής ως

$$\hat{L}^2 = (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (228)$$

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

Οι σχέσεις μετάθεσης των τελεστών στροφορμής (227) προκύπτουν απευθείας από τις σχέσεις μετάθεσης των συνιστοσών της θέσης και της ορμής (210). Χρησιμοποιώντας τον κανόνα μεταθετών $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$, βρίσκουμε

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\
[\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\
[\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y
\end{aligned} \quad (229)$$

που συνοψίζονται

$$[\hat{L}_\mu, \hat{L}_\nu] = i\hbar \sum_{\kappa} \epsilon_{\mu\nu\kappa} \hat{L}_\kappa \quad (230)$$

όπου εμφανίζεται το αντισυμμετρικό σύμβολο Levi-Civita,

$$\epsilon_{\mu\nu\kappa} = \begin{cases} 1, & \text{αν τα } (\mu, \nu, \kappa) \text{ είναι άρτια μετάθεση των } (x, y, z), \\ -1, & \text{αν τα } (\mu, \nu, \kappa) \text{ είναι περιττή μετάθεση των } (x, y, z), \\ 0, & \text{αν κάποια από τα } (\mu, \nu, \kappa) \text{ ταυτίζονται.} \end{cases} \quad (231)$$

Επίσης, βρίσκουμε εύκολα:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (232)$$

10.3 Συζήτηση περί των σχέσεων μετάθεσης των τελεστών στροφορμής

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

Αντίθετα, η μεταθετικότητα των τριών συνιστωσών του $\hat{L}^2$ με οποιαδήποτε των τριών συνιστωσών (εξ. 232) σημαίνει ότι υπάρχει βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_x$, άλλη βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_y$, και άλλη βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ (οι τρεις βάσεις δεν είναι δυνατόν να ταυτίζονται). Ας θεωρήσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, την περίπτωση κοινής βάσης $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$. Όπως θα δούμε, με εξαίρεση την ιδιοτιμή μηδενικής στροφορμής, κάθε ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$ αντιστοιχεί σε περισσότερες της μίας ιδιοτιμές του $\hat{L}_z$. Επομένως, εάν μια συλλογή φιλτραριστεί ως προς ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$, το φιλτράρισμα είναι ατελές (δεν δίνει κυματοσυνάρτηση), και απαιτείται επιπλέον φιλτράρισμα ως προς το μέγεθος $\hat{L}_z$ για να προσδιοριστεί πλήρως η κατάσταση. Αλλά και αντίστροφα, αν φιλτραριστεί μια συλλογή ως προς ιδιοτιμή του $\hat{L}_z$, το φιλτράρισμα είναι επίσης ατελές, διότι υπάρχουν πολλές (άπειρες, όπως θα δούμε) ιδιοτιμές του $\hat{L}^2$ που αντιστοιχούν σε δεδομένη ιδιοτιμή του $\hat{L}_z$. Θα χρειαστεί τότε επιπλέον φιλτράρισμα ως προς το μέγεθος $\hat{L}^2$ για να προσδιοριστεί πλήρως μια κυματοσυνάρτηση. Συνεπώς, οι τελεστές $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ ανήκουν σε πλήρες σύστημα μετατιθεμένων μεγεθών.

Στην πραγματικότητα, βέβαια, η ταυτόχρονη γνώση των ιδιοτιμών των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ δεν αρκεί για πλήρη προσδιορισμό της κυματοσυνάρτησης, διότι η ακτινική εξάρτηση της κυματοσυνάρτησης δημιουργεί επιπλέον εκφυλισμό (γραμμικά ανεξάρτητες κυματο-

συναρτήσεις ενδέχεται να ταυτίζονται ως προς την ιδιοτιμή τόσο του $\hat{L}^2$ όσο και του $\hat{L}_z$, δεδομένου ότι η στροφορμή χαρακτηρίζει το σύστημα μόνον ως προς τη γωνιακή συμπεριφορά). Τότε απαιτούνται επιπλέον μεγέθη (π.χ., η ενέργεια) για να συμπληρωθεί το πλήρες σύστημα. Αυτές οι έννοιες θα διασαφηνιστούν περισσότερο στη μελέτη του ατόμου του Υδρογόνου.

10.4 Ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές της στροφορμής

Θα αναζητήσουμε τις ιδιοτιμές και τα κοινά ιδιοδιανύσματα των τελεστών $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$. Τα ιδιοδιανύσματα των $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ προκύπτουν από εκείνα του $\hat{L}_z$, φέρνοντας τον άξονα z στον x ή στον y με χρήση της σχέσης (225), ενώ οι αντίστοιχες ιδιοτιμές παραμένουν αναλλοίωτες, καθώς πρόκειται απλώς για έκφραση της ίδιας ποσότητας σε άλλο σύστημα συντεταγμένων.

Για την εξίσωση ιδιοτιμών του $\hat{L}_z$ χρησιμοποιούμε τη μορφή (224). Δεδομένου ότι ο τελεστής περιέχει τη σταθερά $\hbar$, εξυπηρετεί να ορίσουμε την ιδιοτιμή ως $m\hbar$. Έχουμε

$$\hat{L}_z f_m(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} f_m(\phi) = \hbar m f_m(\phi), \quad (233)$$

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

Η εύρεση των ιδιοτιμών του $\hat{L}^2$ είναι πιο περίπλοκη.⁽¹⁰⁵⁾ Για λόγους όμοιους με πριν, εξυπηρετεί να ορίζουμε τις ιδιοτιμές ως $\lambda\hbar^2$ με το λ άγνωστο προς εύρεση. Γράφοντας την εξίσωση ιδιοτιμών ως

$$\hat{L}^2 Y = \hat{L}_x^2 Y + \hat{L}_y^2 Y + \hat{L}_z^2 Y = \lambda\hbar^2 Y, \quad (234)$$

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

Μετασχηματίζοντας το $\hat{L}^2$ από καρτεσιανές σε σφαιρικές συντεταγμένες, και συγκρίνοντας με το ∇^2 επίσης σε σφαιρικές συντεταγμένες, προκύπτει ότι η δράση του $\hat{L}^2$ είναι η ίδια με αυτή του γωνιακού μέρους ∇^2 (πλέον του πολλαπλασιαστικού παράγοντα

⁽¹⁰⁵⁾Εδώ ακολουθούμε την αναλυτική μέθοδο επίλυσης της αντίστοιχης διαφορικής εξίσωσης, ενώ υπάρχει και η αλγεβρική μέθοδος. Οι μέθοδοι παρουσιάζονται π.χ. στο βιβλίο του Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

$-\hbar^2$ και ενός παράγοντα r^2). Η έκφραση για το ∇^2 είναι:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \right] \quad (235)$$

$$= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) + \frac{(-1)}{\hbar^2} \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \Psi \quad (236)$$

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

$$\hat{L}^2 Y = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = \lambda \hbar^2 Y, \quad (237)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial \cos \theta} \left[(1 - \cos^2 \theta) \frac{\partial Y}{\partial \cos \theta} \right] + \frac{1}{1 - \cos^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -\lambda Y. \quad (238)$$

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

$$Y(\theta, \phi) = P(\cos \theta) f(\phi) = P(u) f(\phi), \quad -1 < u < 1. \quad (239)$$

Πολλαπλασιάζοντας τα δύο μέλη της (238) με $(1 - u^2)$ και διαιρώντας με $Y = Pf$, λαμβάνουμε

$$(1 - u^2) \frac{1}{P} \frac{\partial}{\partial u} \left[(1 - u^2) \frac{\partial P}{\partial u} \right] + \lambda (1 - u^2) = -\frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}. \quad (240)$$

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

$$\frac{1}{f(\phi)} \frac{\partial^2 f(\phi)}{\partial \phi^2} = -\lambda_1 \quad (241)$$

που έχει ως λύση $f(\phi) = e^{\pm i\sqrt{\lambda_1}\phi}$, για $\lambda_1 \neq 0$, και $f(\phi) = a\phi + b$, για $\lambda_1 = 0$. Αλλά πρέπει $f(2\pi) = f(0)$, επομένως μένει μόνο η δυνατότητα $e^{\pm i\sqrt{\lambda_1}\phi}$ με $\sqrt{\lambda_1} = 0, 1, 2, \dots$. Υιοθετώντας το συμβολισμό της (233), θέτουμε $\pm\sqrt{\lambda_1} = m \in \mathbb{Z}$. Για δεδομένο m , από τις δύο ορθογώνιες συναρτήσεις $e^{\pm im\phi}$ μέσω γραμμικών συνδυασμών μπορούμε να φτιάξουμε άπειρα ζεύγη ορθογώνιων συναρτήσεων που να ικανοποιούν την (241) (π.χ., τις $\cos m\phi$ και $\sin m\phi$), αλλά παρατηρούμε ότι ειδικά η επιλογή του ζεύγους $e^{\pm im\phi}$ ικανοποιεί ταυτόχρονα και την (233), δηλαδή δίνει ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$

ταυτόχρονα. Συνεπώς, υιοθετούμε τις

$$f_m(\phi) = e^{im\phi}, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (242)$$

με την (240) να γίνεται (αντικαθιστώντας $\lambda_1 = m^2$ στο δεξιό μέλος και διαιρώντας με $(1 - u^2)$)

$$\frac{\partial}{\partial u} \left[(1 - u^2) \frac{\partial P(u)}{\partial u} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - u^2} \right) P(u) = 0. \quad (243)$$

Έχουμε λοιπόν, για κάθε ιδιοτιμή m του $\hat{L}_z$, μια εξίσωση για τις ιδιοσυναρτήσεις $Y(\theta, \phi) = P(\cos \theta) e^{im\phi}$ και τις ιδιοτιμές λ του $\hat{L}^2$. Θα συζητήσουμε την επίλυση της (243) για $m = 0$ και θα δώσουμε τις λύσεις για $m \neq 0$.⁽¹⁰⁶⁾

Για $m = 0$, η (243) γράφεται

$$\frac{\partial}{\partial u} \left[(1 - u^2) \frac{\partial P(u)}{\partial u} \right] + \lambda P(u) = 0, \quad -1 < u < 1. \quad (244)$$

Επιχειρώντας λύση εκφρασμένη σε δυναμοσειρά, θέτουμε

$$P(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k. \quad (245)$$

Με αντικατάσταση στην (244) και επαναρίθμηση του πρώτου όρου, λαμβάνουμε

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+2)a_{k+2} - (k(k+1) + \lambda)a_k] u^k = 0. \quad (246)$$

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

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - \lambda}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (247)$$

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

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (248)$$

⁽¹⁰⁶⁾ Ακολουθούμε το βιβλίο του Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{L}^2$ για $m = 0$ είναι της μορφής $\hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Εξάλλου, παρατηρούμε ότι η σχέση (247) συνδέει κάθε δεύτερο k , δηλαδή είτε τα άρτια k μεταξύ τους είτε τα περιττά k μεταξύ τους. Αυτό συμφωνεί με την ιδιότητα των συντελεστών της διαφορικής εξίσωσης (244) να είναι άρτιες συναρτήσεις του u , επομένως οι λύσεις θα είναι είτε άρτιες είτε περιττές, περιλαμβάνοντας είτε μόνον άρτιες είτε μόνον περιττές δυνάμεις του u .

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

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1 \\ P_1(u) &= u \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1) \\ P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u) \end{aligned} \quad (249)$$

Τα πολυώνυμα Legendre μπορούν να παραχθούν από τη σχέση του Rodriguez

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (250)$$

και υπακούουν την ακόλουθη σχέση ορθογωνιότητας:

$$\int_{-1}^1 P_l(u) P_{l'}(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (251)$$

Επομένως, οι αντίστοιχες κανονικοποιημένες συναρτήσεις είναι οι

$$\sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(u) \quad (252)$$

οι οποίες αποτελούν ορθοκανονική βάση στον χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στο $[-1, 1]$. Η σχέση πληρότητας είναι η

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2}{2l+1} P_l(u) P_l(u') = \delta(u - u') = \delta(\cos \theta - \cos \theta'). \quad (253)$$

Για $m \neq 0$, οι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης (243) είναι τα συναφή πολυώνυμα

Legendre,

$$P_{l,m}(u) = (-1)^m (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad m > 0, \quad m \leq l \quad (254)$$

$$P_{l,-m}(u) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{l,m}(u)$$

Ο περιορισμός $|m| \leq l$ προκύπτει από το γεγονός ότι η m -οστή παραγώγιση στην πρώτη εξίσωση μηδενίζει το αποτέλεσμα για $m > l$, μια και το $P_l(u)$ είναι πολυώνυμο βαθμού l . (Για $m = 0$, $P_{l,0}(u) = P_l(u)$.)

Οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις $Y = P(\cos \theta) f(\phi)$ των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ μπορούν πλέον να γραφούν ως εξής:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l,m}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad -l \leq m \leq l \quad (255)$$

Αυτές οι συναρτήσεις ονομάζονται *σφαιρικές αρμονικές*. Ικανοποιούν την ταυτότητα $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}$. Για κάθε ιδιοτιμή $l(l+1)\hbar^2$ του $\hat{L}^2$ έχουμε $2l+1$ ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{L}_z$, με $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Ο αριθμητικός παράγοντας μπροστά φροντίζει για την κανονικοποίηση των σφαιρικών αρμονικών, που ικανοποιούν τη σχέση ορθογωνιότητας

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (256)$$

και τη σχέση πληρότητας

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos \theta - \cos \theta') \quad (257)$$

και αποτελούν βάση στο χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων ορισμένων στη μοναδιαία σφαίρα. Συνεπώς, οποιαδήποτε συνάρτηση $\Psi(\theta, \phi)$ αναπτύσσεται σε σφαιρικές αρμονικές ως

$$\Psi(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (258)$$

με

$$a_{lm} = (Y_{lm}, \Psi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) \Psi(\theta, \phi). \quad (259)$$

Οι πρώτες μερικές σφαιρικές αρμονικές δίνονται παρακάτω.

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\
Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)
\end{aligned} \tag{260}$$

10.5 Φυσική ερμηνεία του φάσματος

Είδαμε ότι το μέτρο και η συνιστώσα z της στροφορμής είναι κβαντισμένες ποσότητες: δεν μπορούν να λάβουν οποιαδήποτε τιμή, διότι το φάσμα τους είναι διακριτό.

Αναμένουμε ότι, σε μια μέτρηση, το μέτρο της στροφορμής δεν μπορεί να είναι μικρότερο από το μέτρο της συνιστώσας z . Αυτό προκύπτει μαθηματικά από τον περιορισμό $-l \leq m \leq l$, ο οποίος συνεπάγεται $|m|\hbar \leq l\hbar < \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Η ποσότητα $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ ερμηνεύεται ως ιδιοτιμή του μέτρου της στροφορμής, δεδομένου ότι το $l(l+1)\hbar^2$ είναι η ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$. Άρα, για κάθε μετρημένη τιμή του μέτρου της στροφορμής, η μετρημένη τιμή της συνιστώσας z είναι αυστηρά μικρότερη κατ' απόλυτη τιμή (με μόνη εξαίρεση την κατάσταση μηδενικής ολικής στροφορμής, $l = 0$, για την οποία υποχρεωτικά $m = 0$).

Διαισθητικά, αυτό σημαίνει ότι η στροφορμή ποτέ δεν μπορεί να είναι πλήρως παράλληλη στον άξονα z (ή οποιοδήποτε άξονα, μια και ο z επιλέγεται αυθαίρετα). Αυτό είναι ένα καθαρά κβαντικό φαινόμενο και συνδέεται με τις σχέσεις μετάθεσης (229) των $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ και $\hat{L}_z$. Εφόσον οι μεταθέτες δεν μηδενίζονται, μια συλλογή προετοιμασμένη σε ιδιοκατάσταση της $\hat{L}_z$, με $\hat{L}_z\Psi = m\hbar\Psi$, θα έχει υποχρεωτικά διασπορά ως προς μετρήσεις των $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$. Οι τιμές της διασποράς στη δεδομένη Ψ θα ικανοποιούν τη σχέση αβεβαιότητας (30):

$$(\Delta L_x)(\Delta L_y) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \rangle \right| = \frac{1}{2} \left| i\hbar \langle \hat{L}_z \rangle \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \langle \Psi, \hat{L}_z \Psi \rangle \right| = |m| \frac{\hbar^2}{2}. \tag{261}$$

Παράλληλα, η μέση τιμή $\langle \hat{L}_x \rangle$ και $\langle \hat{L}_y \rangle$ μηδενίζεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{L}_z$, διότι οι

σχέσεις μετάθεσης (229) δίνουν

$$\begin{aligned} i\hbar\langle\hat{L}_x\rangle &= \langle[\hat{L}_y, \hat{L}_z]\rangle = (\Psi, [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\Psi) = (\Psi, \hat{L}_y\hat{L}_z\Psi) - (\hat{L}_z\Psi, \hat{L}_y\Psi) \\ &= \hbar m (\Psi, \hat{L}_y\Psi) - \hbar m (\Psi, \hat{L}_y\Psi) = 0 \end{aligned} \quad (262)$$

(και όμοια για την $\langle\hat{L}_y\rangle$). Συνεπώς, οι συνιστώσες x και y της στροφορμής έχουν υποχρεωτικά διασπορά περί το μηδέν σε ιδιοκαταστάσεις της $\hat{L}_z$. Ακόμα και για τη μέγιστη δυνατή προβολή της στροφορμής στον άξονα z , $m = l$, οι μετρήσεις θα δώσουν μη μηδενική προβολή της στροφορμής στους άξονες x και y , άρα η προβολή στον z πρέπει να είναι μικρότερη από το μέτρο της στροφορμής. Πέραν της σχέσης αβεβαιότητας, μπορούμε να υπολογίσουμε και το μέτρο της προβολής της στροφορμής στο επίπεδο xy . Αυτό δίνεται από τον τελεστή $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$. Επομένως, οι κοινές ιδιοκαταστάσεις των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ είναι επίσης ιδιοκαταστάσεις του $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$. Αν Ψ_{lm} μια τέτοια κατάσταση με $\hat{L}^2\Psi_{lm} = l(l+1)\hbar^2\Psi_{lm}$ και $\hat{L}_z\Psi_{lm} = m\hbar\Psi_{lm}$, τότε

$$(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)\Psi_{lm} = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)\Psi_{lm} = [l(l+1) - m^2]\hbar^2\Psi_{lm}. \quad (263)$$

Δηλαδή, το μέτρο της προβολής της στροφορμής στο επίπεδο xy είναι $\sqrt{l(l+1) - m^2}\hbar$ με μηδενική διασπορά. Η ελάχιστη δυνατή τιμή του προκύπτει για $m = \pm l$ να είναι $\sqrt{l}\hbar$.

Η σχέση (261) αφήνει ένα ερωτηματικό σε σχέση με την περίπτωση $m = 0$. Μπορεί κανείς να δείξει ότι το μόνο κοινό ιδιοδιάνυσμα Ψ των $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$ για το οποίο $(\Delta L_x)_\Psi(\Delta L_y)_\Psi = 0$ είναι εκείνο για το οποίο $l = m = 0$. Πράγματι, αν $(\Delta L_x)_\Psi(\Delta L_y)_\Psi = 0$, τότε ένας από τους δύο παράγοντες θα μηδενίζεται. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, έστω $(\Delta L_x)_\Psi = 0$, δηλαδή δεν υπάρχει διασπορά του $\hat{L}_x$ στη δεδομένη Ψ . Τότε, η Ψ θα είναι εξ ορισμού ιδιοδιάνυσμα του $\hat{L}_x$. Μπορούμε να βρούμε και την αντίστοιχη ιδιοτιμή: εφόσον πιο πάνω είδαμε ότι $(\Psi, \hat{L}_x\Psi) = 0$ για οποιοδήποτε ιδιοδιάνυσμα του $\hat{L}_z$, συμπεραίνουμε ότι $\hat{L}_x\Psi = 0$, δηλαδή η δεδομένη Ψ αντιστοιχεί σε ιδιοτιμή μηδέν. Συνοψίζοντας, ως τώρα έχουμε βρει $\hat{L}_z\Psi = \hat{L}_x\Psi = 0$. Αλλά από εδώ βρίσκουμε και τη δράση του $\hat{L}_y$, αξιοποιώντας τις σχέσεις μετάθεσης: $i\hbar\hat{L}_y\Psi = [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\Psi = [0 \cdot m - m \cdot 0]\Psi = 0$. Άρα, η Ψ είναι ιδιοδιάνυσμα και του $\hat{L}_y$ με ιδιοτιμή μηδέν. Τέλος, από την (261) γνωρίζουμε ήδη ότι για να έχουμε $(\Delta L_x)_\Psi(\Delta L_y)_\Psi = 0$ πρέπει υποχρεωτικά $m = 0$, δηλαδή η Ψ έχει μηδενική ιδιοτιμή και ως προς την $\hat{L}_z$. Συμπεραίνουμε:

$$\hat{L}^2\Psi = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)\Psi = (0 + 0 + 0)\Psi = 0. \quad (264)$$

Καταλήγουμε ότι η Ψ είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{L}^2$ μηδενικής ιδιοτιμής, άρα $l = 0$.

Τα παραπάνω ισχύουν και για τις ιδιοσυναρτήσεις είτε του $\hat{L}_x$ είτε του $\hat{L}_y$ στη θέση

του $\hat{L}_z$, δεδομένου ότι η επιλογή του άξονα z στο χώρο ήταν εξ αρχής αυθαίρετη.

11 Κίνηση σε κεντρικό δυναμικό—το άτομο του Υδρογόνου

11.1 Διατήρηση της στροφορμής

Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο σε κεντρικό δυναμικό, δηλαδή, σε δυναμικό για το οποίο $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ($r \equiv |\mathbf{r}|$). Το σύστημα παρουσιάζει ισοτροπία, δηλαδή δεν υπάρχει προτιμητέα κατεύθυνση στο χώρο στη Χαμιλτονιανή (και συνεπώς στη χρονική εξέλιξη). Αυτό είναι φανερό από τη μορφή του δυναμικού και από το γεγονός ότι η κινητική ενέργεια είναι επίσης ισοτροπική.

Έστω μια κυματοσυνάρτηση $\Psi_0(\mathbf{r}; 0)$ σε χρόνο $t = 0$, η οποία εξελίσσεται χρονικά στην

$$\Psi_0(\mathbf{r}; t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}; 0). \quad (265)$$

Εξετάζουμε παράλληλα μιαν άλλη κυματοσυνάρτηση, η οποία συνδέεται με την πρώτη μέσω μιας στροφής στο χώρο $\mathcal{R}_{\gamma, \mathbf{e}}$ κατά γωνία γ γύρω από άξονα $\mathbf{e}$:

$$\Psi_\gamma(\mathbf{r}; 0) = \Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma, \mathbf{e}}\mathbf{r}; 0) = e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}; 0) \quad (266)$$

σύμφωνα με τον τύπο (225).

Λόγω της ισοτροπίας του συστήματος, αναμένουμε ότι είτε πάρουμε τη χρονική εξέλιξη τις στραμμένης κυματοσυνάρτησης σε χρόνο t , είτε πάρουμε τη χρονική εξέλιξη της μη στραμμένης και τη στρέψουμε σε χρόνο t , θα έχουμε το ίδιο αποτέλεσμα. Δηλαδή αναμένουμε

$$\Psi_\gamma(\mathbf{r}; t) = e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}; t) \quad (267)$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις στο αριστερό και δεξιό μέλος, λαμβάνουμε

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}; 0) = e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}; 0) \quad (268)$$

Η ισότητα πρέπει να ισχύει για οποιαδήποτε Ψ_0 , επομένως έχουμε ισότητα των τελεστών στα δύο μέλη:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} = e^{i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (269)$$

Αλλά αυτή η έκφραση σημαίνει ότι οι δύο μοναδιαίοι τελεστές, εκείνος της χρονικής εξέλιξης και εκείνος της τυχαίας στροφής στο χώρο, μετατίθενται. Γράφοντας τον τελεστή χρονικής εξέλιξης για μικρό χρόνο, $\exp[-i\hat{H}t/\hbar] \approx 1 - i(t/\hbar)\hat{H}$, και εκείνον της στροφής για μικρή γωνία, $\exp[i\gamma \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar] \approx 1 + i(\gamma/\hbar)\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}$, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$(1 - i\frac{t}{\hbar}\hat{H})(1 + i\frac{\gamma}{\hbar}\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}) = (1 + i\frac{\gamma}{\hbar}\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}})(1 - i\frac{t}{\hbar}\hat{H})$$

από όπου προκύπτει αμέσως $\hat{H} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}} \hat{H}$, δηλαδή οι δύο ερμιτιανοί τελεστές, $\hat{H}$ και $\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ μετατίθενται. Εφόσον αυτό ισχύει για άξονα περιστροφής γύρω από τυχαία διεύθυνση $\mathbf{e}$, θα ισχύει για κάθε συνιστώσα της στροφορμής $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$. Καταλήγουμε λοιπόν στη σχέση

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0, \quad i \in x, y, z \quad (270)$$

Αλλά αυτή η σχέση σημαίνει ότι η στροφορμή είναι διατηρούμενο μέγεθος (βλ. εδάφιο 5.1). Επομένως, καταλήγουμε στο ακόλουθο συμπέρασμα: Σε ισοτροπικά συστήματα, και ειδικότερα στην περίπτωση κεντρικού δυναμικού, η στροφορμή είναι διατηρούμενο μέγεθος.

11.2 Κινητική ενέργεια και στροφορμή

Στο εδάφιο (11.1) καταλήξαμε στη διατήρηση της στροφορμής υπό την προϋπόθεση ότι έχουμε ισοτροπικό σύστημα. Ένα κεντρικό δυναμικό είναι προφανώς ισοτροπικό, διότι εξαρτάται μόνο από την απόσταση από το κέντρο των αξόνων. Η κινητική ενέργεια είναι επίσης ισοτροπική, διότι εξαρτάται από το $\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, το οποίο είναι εσωτερικό γινόμενο, επομένως μένει αναλλοίωτο σε στροφές στο χώρο.

Εδώ θα γράψουμε τον τελεστή της κινητικής ενέργειας σε άλλη μορφή, η οποία αναδεικνύει την εξάρτησή της από τη στροφορμή. Αυτό γίνεται σε αναλογία με την κλασική μηχανική, όπου χωρίζουμε το πρόβλημα του κεντρικού δυναμικού σε ακτινική και γωνιακή κίνηση, ορίζουμε την ακτινική συνιστώσα της ορμής, $p_r = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/r$ και γράφουμε την κινητική ενέργεια στη μορφή $\frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{1}{r^2}L^2)$, με L τη στροφορμή. Όμοια, εδώ ορίζουμε την ακτινική συνιστώσα της ορμής,

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} \right) \quad (271)$$

$$= -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (272)$$

Η ποσότητα $\hat{\mathbf{r}}/r$ είναι ο τελεστής που αντιστοιχεί στο μοναδιαίο διάνυσμα στην ακτινική κατεύθυνση. Λόγω του ότι η ορμή και η θέση δεν μετατίθενται, τόσο ο πρώτος όσο και ο δεύτερος όρος του δεξιού μέλους της (271) δεν είναι ερμιτιανοί τελεστές, όμως ο συμμετροποιημένος τελεστής $\hat{p}_r$ είναι ερμιτιανός. Η μορφή (272) προκύπτει αν γράψουμε την (271) σε σφαιρικές συντεταγμένες, χρησιμοποιώντας την αντίστοιχη μορφή του ∇ που υπεισέρχεται στην ορμή. Η δράση του (272) σε κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r})$ δίνει $\hat{p}_r \Psi(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \Psi(r, \theta, \phi)]$. Για την κινητική ενέργεια, που περιέχει το τετράγωνο της ορμής, θα χρειαστούμε τον τελεστή

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \quad (273)$$

με δράση $\hat{p}_r^2 \Psi(r, \theta, \phi) = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r \Psi(r, \theta, \phi)]$.⁽¹⁰⁷⁾

Δεδομένου ότι $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$, μπορούμε, με βάση τις εξ. (236) και (273) να γράψουμε

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2. \quad (274)$$

Καταλήγουμε στην ακόλουθη έκφραση για τον τελεστή κινητικής ενέργειας:

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \quad (275)$$

όπου ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους εξαρτάται μόνον από το r και ο δεύτερος μόνον από τις (θ, ϕ) . Αυτό είναι το κβαντικό ανάλογο της κλασικής έκφρασης στην οποία αναφερθήκαμε στην αρχή του εδαφίου.

Η έκφραση (275) είναι καλά ορισμένη παντού εκτός από την αρχή των αξόνων, λόγω του όρου $1/r$ στο $\hat{p}_r^2$ και του $1/r^2$ που συνοδεύει το $\hat{L}^2$. Ως αποτέλεσμα, η δράση της σε κυματοσυνάρτηση (και ειδικότερα κατά την εύρεση ιδιοσυναρτήσεων της Χαμιλτονιανής) χρειάζεται έλεγχο στο όριο $r \rightarrow 0$.

Συνεπεία της έκφρασης (275) και του γεγονότος ότι ο όρος $\hat{p}_r^2$ εξαρτάται μόνον από το r , ενώ η στροφορμή είναι ανεξάρτητη του r , καταλήγουμε στο συμπέρασμα

$$[\hat{T}, \hat{\mathbf{L}}] = [\hat{T}, \hat{L}^2] = 0. \quad (276)$$

το οποίο ειχαμε δικαιολογήσει στο εδάφιο 11.1 με βάση τη φυσική απαίτηση ισοτροπίας της κινητικής ενέργειας. Εάν η Χαμιλτονιανή περιέχει και κεντρικό δυναμικό, γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r), \quad (277)$$

με αποτέλεσμα να μετατίθεται με κάθε συνιστώσα και με το τετράγωνο της στροφορμής:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_i] = 0, \quad i \in x, y, z. \quad (278)$$

11.3 Χωρισμός μεταβλητών και ακτινική εξίσωση

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για σωματίδιο σε κεντρικό δυναμικό γράφεται πλέον στη μορφή

$$(\hat{T} + \hat{V}) \Psi(r, \theta, \phi) = \left[\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi). \quad (279)$$

⁽¹⁰⁷⁾ Σημειώνουμε ότι $\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$.

Επιχειρούμε επίλυση με τη μέθοδο του χωρισμού μεταβλητών. Γράφοντας $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$, η εξίσωση ιδιοτιμών γίνεται

$$\left[\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} l(l+1)\hbar^2 + V(r) \right] R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = E R(r)Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (280)$$

μια και ο τελεστής $\hat{L}^2$ δρα μόνο στη συνάρτηση $Y_{lm}(\theta, \phi)$, δίνοντας την ιδιοτιμή $l(l+1)\hbar^2$. Από την άλλη, ο τελεστής $\hat{p}_r^2$ δρα μόνο στην ακτινική συνάρτηση $R(r)$. Επομένως, η Y_{lm} απλοποιείται και λαμβάνουμε την *ακτινική εξίσωση* για την $R(r)$ εξαρτώμενη από την ιδιοτιμή l , η οποία υπεισέρχεται ως παράμετρος και με την οποία στο εξής δεικτοδοτούμε την ακτινική συνάρτηση, γράφοντας $R_l(r)$:

$$\left[\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} l(l+1)\hbar^2 + V(r) \right] R_l(r) = E R_l(r). \quad (281)$$

Αντικαθιστώντας την έκφραση (273) για το $\hat{p}_r^2$, πολλαπλασιάζοντας με r και θέτοντας

$$u_l(r) = r R_l(r), \quad (282)$$

λαμβάνουμε

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r). \quad (283)$$

Έχουμε λοιπόν μια εξίσωση για τη συνάρτηση $u_l(r)$, η οποία είναι φορμαλιστικά ίδια με τη μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger στο διάστημα $(0, \infty)$, εάν εκείνη είχε δυναμικό

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r). \quad (284)$$

Το $V_{\text{eff}}(r)$ καλείται *ενεργό δυναμικό*. Ο όρος $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ είναι πάντα θετικός (ή μηδέν, για $l = 0$) και καλείται *φυγοκεντρικό δυναμικό*, κατ' αναλογία προς την κλασική μηχανική. Απλοποιούμε περαιτέρω τη μορφή της εξίσωσης, θέτοντας $k^2 = 2mE/\hbar^2$:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] u_l(r) = k^2 u_l(r). \quad (285)$$

Διερεύνηση της ακτινικής συνάρτησης για $r \rightarrow 0$

Διερευνούμε τη συμπεριφορά της λύσης για $r \rightarrow 0$, διότι η διαφορική εξίσωση δεν ορίζεται μεν στο $r = 0$, όμως η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη σε όλο το χώρο, μαζί με το $r = 0$. Κοντά στο $r = 0$, για τα δυναμικά που εξετάζουμε ($V(r) \sim 1/r$ ή $V(r) \rightarrow (\text{σταθ.})$ για $r \rightarrow 0$), ο όρος του δυναμικού και ο όρος στο δεξιό μέλος γίνονται αμελητέοι σε σχέση με το φυγοκεντρικό δυναμικό (για $l > 0$). Έχουμε

τότε

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0, \quad \text{για } r \rightarrow 0, \quad l \geq 1. \quad (286)$$

Εάν υποθέσουμε ότι $u_l(r) \rightarrow r^s$, καθώς $r \rightarrow 0$, μπορούμε να βρούμε τη σταθερά s με αντικατάσταση στην παραπάνω εξίσωση και να καταλήξουμε $s(s-1) = l(l+1)$ με λύσεις $s = l+1$ και $s = -l$. Εξετάζουμε την τετραγωνική ολοκληρωσιμότητα των λύσεων. Το ολοκλήρωμα της $|\Psi|^2$ εντός μιας σφαίρας μικρής ακτίνας a κοντά στο μηδέν συμπεριφέρεται ως $\int d^3r |\Psi|^2 \sim \int_0^a dr r^2 |R_l(r)|^2 = \int_0^a dr |u_l(r)|^2$. Διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις

- Αν $s = l+1$, τότε $\int_0^a dr |u_l(r)|^2 \sim \int_0^a dr r^{l+1} < \infty$, δηλαδή έχουμε τετραγωνική ολοκληρωσιμότητα.
- Αν $s = -l$, τότε $\int_0^a dr |u_l(r)|^2 \sim \int_0^a dr r^{-l} \rightarrow \infty$ (για $l \geq 1$), δηλαδή δεν έχουμε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, επομένως η λύση απορρίπτεται.

Για $l = 0$, το φυγοκεντρικό δυναμικό μηδενίζεται. Αν $V(r) \rightarrow C = (\text{σταθ.})$ για $r \rightarrow 0$, έχουμε

$$u_0''(r) + q^2 u_0(r) = 0, \quad r \rightarrow 0, \quad l = 0, \quad (287)$$

όπου $q^2 = 2m(E-C)/\hbar^2$, με γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $u_0 = \sin qr$ και $u_0 = \cos qr$, δηλαδή $R_0(r) = \sin qr/(qr) \sim r^0$ και $R_0(r) = \cos qr/(qr) \sim r^{-1}$. Από αυτές, η πρώτη είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο μηδέν, εφόσον τείνει σε μια σταθερά. Η δεύτερη είναι επίσης τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, διότι $\int d^3r |r^{-1}|^2 \sim \int_0^a dr r^2 r^{-2} = \int_0^a dr < \infty$. Ωστόσο, η λύση r^{-1} δεν ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση του Schrödinger σε τρεις διαστάσεις στο ειδικό σημείο $r = 0$, διότι είναι γνωστό πως $\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$. Άρα και πάλι δεχόμαστε μόνο λύσεις της μορφής $u_0(r) \rightarrow r$, δηλαδή $R_0(r) \rightarrow r^0 = (\text{σταθ.})$, για $r \rightarrow 0$.

Μια όμοια διερεύνηση για την περίπτωση $V(r) \sim 1/r$ και $l = 0$ δίνει $u_0(r) \sim r$ άρα $R_0(r) \sim r^0 = (\text{σταθ.})$.

Συνοψίζοντας, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι, αν $V(r) \rightarrow (\text{σταθ.})$ ή $V(r) \rightarrow C/r$ για $r \rightarrow 0$, τότε οι αποδεκτές λύσεις έχουν την ασυμπτωτική συμπεριφορά

$$u_l(r) \sim r^{l+1} \quad \text{και} \quad R_l(r) \sim r^l, \quad r \rightarrow 0, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (288)$$

Διερεύνηση της ακτινικής συνάρτησης για $r \rightarrow \infty$, αν $V(r) \rightarrow 0$

Διερευνούμε στη συνέχεια τη συμπεριφορά της λύσης ασυμπτωτικά, εάν το δυναμικό $V(r) \rightarrow 0$ για $r \rightarrow \infty$ (όπως είναι η περίπτωση του δυναμικού Coulomb ή του ελεύθερου σωματιδίου). Τότε η εξίσωση γράφεται $u_l''(r) + k^2 u_l(r) = 0$, που έχει ως γενική λύση

$$u_l(r) = k^{-1}(A \sin kr + B \cos kr) \quad \text{και} \quad R_l(r) = A \frac{\sin kr}{kr} + B \frac{\cos kr}{kr}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (289)$$

όπου η σταθερά k^{-1} τέθηκε για διευκόλυνση αργότερα (θα μπορούσε να απορροφηθεί στα A και B).

11.4 Η λύση για το ελεύθερο σωματίδιο

Η απλούστερη εφαρμογή των παραπάνω συμπερασμάτων γίνεται στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου, $V(r) = 0$. Η εξίσωση (285) γράφεται

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = k^2 u_l(r). \quad (290)$$

Ειδικά για $l = 0$, έχουμε $u_0''(r) + k^2 u_0(r) = 0$ με γενική λύση την (289) σε όλο το διάστημα $(0, \infty)$. Εδώ, η συνοριακή συνθήκη (288) επιβάλλει να δεχτούμε μόνο τον όρο $A \sin kr/(kr)$, διότι συγχλίνει στο $r \rightarrow 0$ ($\sin kr/(kr) \rightarrow 1$), ενώ η λύση $B \cos kr/(kr)$ αποκλίνει ως $B/(kr)$ για $r \rightarrow 0$ και απορρίπτεται (δηλ. πρέπει $B = 0$).

Στη γενικότερη περίπτωση ($l \geq 0$), οι λύσεις $R_l(r) = u_l(r)/r$ που συγχλίνουν στο μηδέν (ικανοποιούν την 288) ονομάζονται *σφαιρικές συναρτήσεις Bessel* και παράγονται από τη σχέση⁽¹⁰⁸⁾

$$R_l(r) = j_l(kr) = (-1)^l (kr)^l \left(\frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)} \right)^l \left(\frac{\sin kr}{kr} \right). \quad (291)$$

Οι λύσεις εξαρτώνται από το γινόμενο kr , διότι αν διαιρεθούν τα δύο μέλη της εξ. (290) με k^2 , και κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής $\rho = kr$, $k^{-2} \partial^2 / \partial r^2 = \partial^2 / \partial \rho^2$, προκύπτει $[-\partial^2 / \partial \rho^2 + l(l+1)/\rho^2] u_l = u_l$, δηλαδή εξάρτηση της u_l μόνο από το γινόμενο $\rho = kr$.

Οι πρώτες μερικές συναρτήσεις Bessel είναι

$$\begin{aligned} j_0(kr) &= \frac{\sin kr}{kr} \\ j_1(kr) &= \frac{\sin kr}{(kr)^2} - \frac{\cos kr}{kr} \\ j_2(kr) &= \left(\frac{3}{(kr)^2} - \frac{1}{kr} \right) \sin kr - \frac{3}{(kr)^2} \cos kr \end{aligned} \quad (292)$$

Εξέταση των παραπάνω συναρτήσεων επιβεβαιώνει τη συμπεριφορά $j_l(kr) \sim (kr)^l$ στο όριο $kr \rightarrow 0$. Πρόκειται για στάσιμα σφαιρικά κύματα μήκους κύματος $2\pi/k$.

Οι λύσεις του ελεύθερου σωματιδίου στην αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων, δηλαδή οι λύσεις σε σφαιρικές συντεταγμένες που είδαμε στο παρόν εδάφιο, πρέπει να συνδέονται με τις λύσεις επιπέδων κυμάτων που βρισκόμαστε σε καρτεσιανές συντεταγ-

⁽¹⁰⁸⁾Βλ. π.χ. S. Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015), κεφ. 8.

μένες. Η σύνδεση γίνεται μέσω της ταυτότητας του Bauer,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\mathbf{k}) Y_{lm}(\mathbf{r}), \quad (293)$$

όπου υπονοείται πως λαμβάνονται η πολική και η αζιμουθιακή γωνία, θ, ϕ , του διανύσματος στο όρισμα των σφαιρικών αρμονικών.

11.5 Λύσεις δέσμιων καταστάσεων για το άτομο του Υδρογόνου

Το άτομο του Υδρογόνου χαρακτηρίζεται από το ελκτικό δυναμικό Coulomb

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad (294)$$

όπου e το φορτίο του ηλεκτρονίου.⁽¹⁰⁹⁾⁽¹¹⁰⁾ Δεδομένου ότι $V(r) < 0$ και $V(r) \rightarrow 0$ για $r \rightarrow \infty$, αναμένουμε ότι οι λύσεις αρνητικής ενέργειας θα αφορούν το άτομο του Υδρογόνου, δηλαδή ηλεκτρόνιο δεσμευμένο στο δυναμικό του πυρήνα, ενώ οι λύσεις θετικής ενέργειας θα αφορούν το σύστημα ηλεκτρονίου και πρωτονίου που αλληλεπιδρούν μεν αλλά τελικά απομακρύνονται μεταξύ τους, δηλαδή επί της ουσίας δεν αποτελούν άτομο Υδρογόνου. Αναζητούμε επομένως τις λύσεις της εξ. (283) για $E < 0$. Θέτουμε για συντομία

$$\kappa^2 = \frac{2m(-E)}{\hbar^2} > 0. \quad (295)$$

Τότε, η ακτινική εξίσωση παίρνει τη μορφή (285), με $-\kappa^2$ στη θέση του k^2 :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m e^2}{\hbar^2 r} \right] u_l(r) = -\kappa^2 u_l(r). \quad (296)$$

Ορίζουμε επίσης την ακτίνα Bohr,⁽¹¹¹⁾

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529\text{\AA}. \quad (297)$$

⁽¹⁰⁹⁾Για υδρογονοειδή ιόντα ατομικού αριθμού Z , π.χ. το He^+ με $Z = 2$ ή το Li^{2+} με $Z = 3$, το δυναμικό γίνεται $-Ze^2/r$ και η επίλυση είναι ουσιαστικά ίδια.

⁽¹¹⁰⁾Εδώ χρησιμοποιήθηκε το σύστημα μονάδων Gauss, στο οποίο το e^2 έχει μονάδες [ενέργεια] $\times$ [μήκος]. Στο SI έχουμε $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$, με ϵ_0 την ηλεκτρική διαπερατότητα του κενού.

⁽¹¹¹⁾Στο σύστημα SI, η ακτίνα Bohr είναι $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2)$.

Διευκολυνόμαστε ορίζοντας τη νέα, αδιάστατη μεταβλητή

$$\rho = 2\kappa r, \quad (298)$$

οπότε η ακτινική εξίσωση γράφεται στην αδιάστατη μορφή

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{1}{\kappa a_0} \frac{1}{\rho} - \frac{1}{4} \right] u_l = 0. \quad (299)$$

Η ιδιοτιμή της ενέργειας περιέχεται στη σταθερά κ .

Ασυμπτωτικά στο μηδέν, ξέρουμε ήδη από το εδάφιο 11.3 ότι $u_l(\rho) \sim \rho^{l+1}$. Ασυμπτωτικά στο $\rho \rightarrow \infty$, οι όροι ανάλογοι του $1/\rho^2$ και $1/\rho$ μηδενίζονται, οπότε έχουμε $u_l'' - \frac{1}{4}u_l = 0$, η οποία έχει λύσεις τις $u_l \sim e^{\pm\rho/2}$. Από αυτές, μόνον η $u_l \sim e^{-\rho/2}$ είναι αποδεκτή, διότι η $u_l \sim e^{+\rho/2}$ οδηγεί σε μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση. Γράφουμε λοιπόν τη λύση u_l ως γινόμενο τριών συναρτήσεων,

$$u_l(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} v_l(\rho), \quad (300)$$

όπου $v_l(\rho)$ άγνωστη συνάρτηση προς προσδιορισμό. Αντικαθιστώντας στην (299) λαμβάνουμε την ακόλουθη εξίσωση για τη v_l :

$$\left[\rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} - \left(l+1 - \frac{1}{\kappa a_0} \right) \right] v_l(\rho) = 0. \quad (301)$$

Επιχειρούμε ανάπτυγμα της λύσης σε σειρά:

$$v_l(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j \rho^j \quad v_l'(\rho) = \sum_{j=1}^{\infty} b_j j \rho^{j-1} \quad v_l''(\rho) = \sum_{j=2}^{\infty} b_j j(j-1) \rho^{j-2}$$

Αντικαθιστώντας στην (301) και εξισώνοντας τους συντελεστές ομοβάθμιων όρων, καταλήγουμε στην αναδρομική σχέση

$$b_{j+1} = \frac{l+j+1 - (\kappa a_0)^{-1}}{(2l+2+j)(j+1)} b_j. \quad (302)$$

Για μεγάλες τιμές του j ($j \gg l, j \gg (\kappa a_0)^{-1}$) η σχέση δίνει $b_{j+1}/b_j \approx 1/(j+1)$, δηλαδή $b_j \sim 1/j!$, ως ασυμπτωτική συμπεριφορά. Αλλά τότε, ασυμπτωτικά, $v_l(\rho) \sim \sum_j \rho^j/j! = e^\rho$. Αυτό σημαίνει ότι $u_l(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} v_l(\rho) \sim e^{+\rho/2}$, οπότε η u_l θα προέκυπτε μη κανονικοποιήσιμη. Εξαίρεση αποτελεί η περίπτωση τερματισμού της σειράς σε κάποιο j , δηλαδή εκείνες οι τιμές του κ για τις οποίες συμβαίνει να μηδενίζεται ο αριθμητής

της (302) για κάποια τιμή $j = n'$. Τότε, η σειρά είναι ένα πολυώνυμο βαθμού n' :

$$v_l(\rho) = \sum_{j=0}^{n'} b_j \rho^j, \quad \text{για } (\kappa a_0)^{-1} = l + n' + 1. \quad (303)$$

Αυτή είναι η συνθήκη χβάντωσης, δηλαδή, η συνθήκη που καθορίζει τις φυσικά αποδεκτές, διακριτές τιμές του κ και επομένως της ενέργειας. Βάσει της (295), η συνθήκη γράφεται:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{(l + n' + 1)^2}, \quad n' = 0, 1, 2, \dots \quad (304)$$

Ο ακέραιος $n = l + n' + 1$ που εμφανίζεται στον παρονομαστή είναι κοινός για όλους τους συνδυασμούς των ακέραιων $l \geq 0$, $n' \geq 0$ που δίνουν άθροισμα θετικό ακέραιο. Αυτό σημαίνει εκφυλισμό ως προς τα l : στην ίδια τιμή ενέργειας, δεδομένης από τον ακέραιο δείκτη $n \geq 1$, αντιστοιχούν όλες οι τιμές $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$, με αντίστοιχες τιμές $n' = n-1, n-2, \dots, 1, 0$. Επιπλέον, υπάρχει εκφυλισμός ως προς τις δυνατές τιμές του⁽¹¹²⁾ $m_l = -l, \dots, +l$, το πλήθος των οποίων είναι $(2l+1)$ για δεδομένο l . Λαμβάνοντας υπ' όψη τον ορισμό του a_0 , οι ιδιοτιμές της ενέργειας γράφονται

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad m_l = -l, \dots, l \quad (305)$$

Ο εκφυλισμός της ενέργειας E_n είναι

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (306)$$

Ο ακέραιος n ονομάζεται *κύριος κβαντικός αριθμός*. Η θεμελιώδης στάθμη είναι η

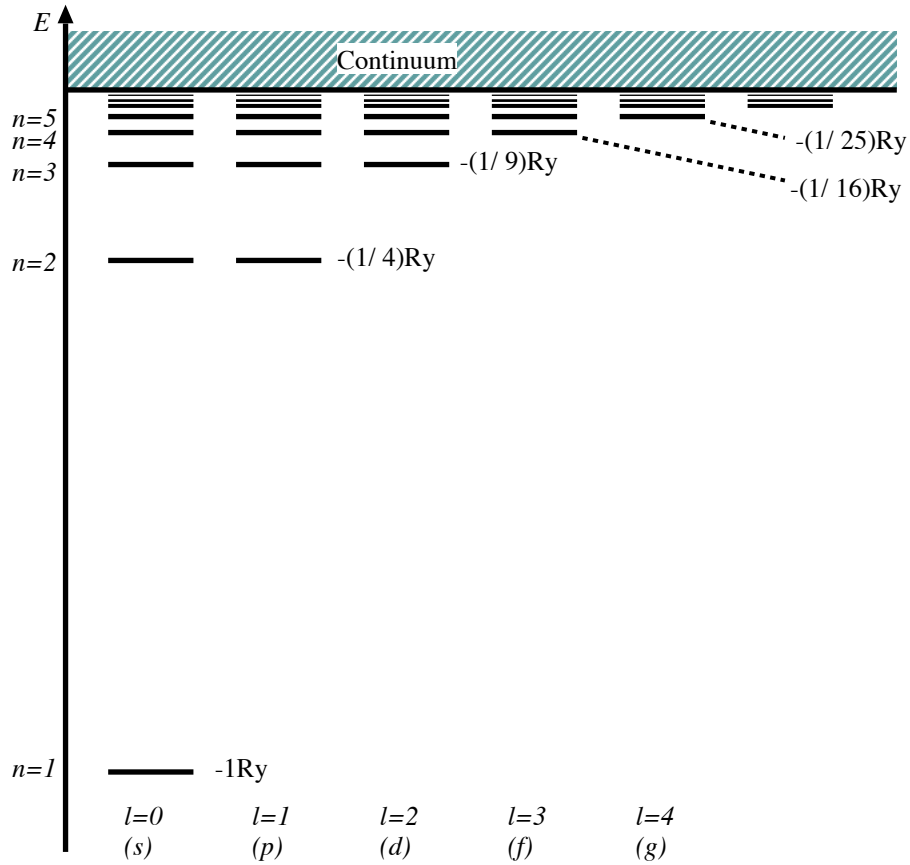
$$E_1 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0} = -1\text{Ry} \approx -13,6\text{eV} \quad (307)$$

και είναι μη εκφυλισμένη.

Οι ακτινικές ιδιοσυναρτήσεις των δέσμιων καταστάσεων δίνονται από την (300), με τους συντελεστές του πολυώνυμου $v_l(\rho)$ να ικανοποιούν την αναδρομική σχέση (302) και τη συνθήκη τερματισμού (303). Δεδομένου ότι $n = l + n' + 1$, η συνθήκη γράφεται ισοδύναμα

$$v_l(\rho) = \sum_{j=0}^{n-l-1} b_j \rho^j, \quad \text{για } (\kappa a_0)^{-1} = n = 1, 2, 3, \dots \quad (308)$$

⁽¹¹²⁾Ο κβαντικός αριθμός της ιδιοτιμής του $\hat{L}_z$ συμβολίζεται εδώ με m_l , για να διαφοροποιηθεί από τη μάζα m .



Σχήμα 8: Αναπαράσταση του ενεργειακού φάσματος του ατόμου του Υδρογόνου. Παρουσιάζονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας E_n σε σχέση με τον κύριο κβαντικό αριθμό $n = 1, 2, 3, \dots$ και τον δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό της στροφορμής $l = 0, 1, 2, \dots$. Για κάθε ζεύγος (n, l) υπάρχει εκφυλισμός τάξης $(2l + 1)$ λόγω του μαγνητικού κβαντικού αριθμού m . Η θεμελιώδης στάθμη είναι η $E_1 = -1\text{Ry} \approx -13,6\text{eV}$. Για $E > 0$ έχουμε το συνεχές ενεργειακό φάσμα των καταστάσεων εκέδασης.

Τα πολυώνυμα $v_l(\rho)$ ονομάζονται *συναφή πολυώνυμα Laguerre* και, για δεδομένο n , λαμβάνουν τη μορφή⁽¹¹³⁾

$$v_l(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \sum_{j=0}^{n-l-1} (-1)^j \frac{(n-l-1)! (2l+1)!}{(n-l-1-j)! (2l+1+j)! j!} \rho^j. \quad (309)$$

Η ακτινική συνάρτηση $u_l = rR_l$ έχει $n-l-1$ κόμβους για $r > 0$, ίδια τιμή με το βαθμό του πολυωνύμου v_l . (Υπάρχει και ένας επιπλέον μηδενισμός στο $r = 0$ λόγω του όρου r^{l+1} .)⁽¹¹⁴⁾

Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η $\Psi_{1,0,0} = R_{1,0}Y_{00}$ (όπου η $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ δεν έχει εξάρτηση από τις γωνίες), με

$$R_{1,0} = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0}, \quad (310)$$

όπου συμπεριλάβουμε και τη σταθερά κανονικοποίησης. Από αυτήν προκύπτουν οι μέσες τιμές σχετιζόμενες με την απόσταση r του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{1,0} &= \int_0^\infty dr r^2 R_{1,0}^2(r) = \frac{3}{2} a_0 \\ \langle r^2 \rangle_{1,0} &= 3 a_0^2 \\ (\Delta r)^2 &= \langle r^2 \rangle_{1,0} - \langle r \rangle_{1,0}^2 = \frac{3}{4} a_0^2 \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{1,0} &= \frac{1}{a_0} \end{aligned} \quad (311)$$

Από την τελευταία έκφραση φαίνεται ότι η δυναμική ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης είναι, κατά μέση τιμή, ίδια με τη δυναμική ενέργεια κλασικού ηλεκτρονίου σε απόσταση a_0 : $\langle V \rangle_{1,0} = -e^2/a_0$.

Κλείνοντας, σημειώνουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές ενέργειας υδρογονοειδών ατόμων, δηλαδή ιόντων με ατομικό αριθμό $Z > 1$ αλλά μόνον ένα ηλεκτρόνιο, δίνονται από τους ίδιους τύπους με την αντικατάσταση $e^2 \rightarrow Ze^2$ (η αντικατάσταση πρέπει να γίνει και στον ορισμό της ακτίνας Bohr a_0 , εξ. (297)).

⁽¹¹³⁾Τα συναφή πολυώνυμα Laguerre δίνονται σε διαφορετικές, ισοδύναμες μορφές από διαφορετικούς συγγραφείς. Για τη μορφή που παρουσιάζεται εδώ, βλ. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. I, North Holland (1991).

⁽¹¹⁴⁾Η ακόλουθη ονοματολογία υιοθετείται στη φασματοσκοπία: οι κβαντικοί αριθμοί $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ συμβολίζονται με s, p, d, f, g, h , αντίστοιχα. Οι καταστάσεις με κβαντικούς αριθμούς (n, l) συμβολίζονται ως $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$, κλπ.

11.6 Το άτομο του Υδρογόνου ως σύστημα δύο χβαντι- κών σωματιδίων

Το άτομο του Υδρογόνου αντιμετωπίστηκε στο εδάφιο 11.5 ως ένα χβαντικό σωματίδιο (ηλεκτρόνιο) σε δυναμικό Coulomb. Αυτή είναι μια καλή προσέγγιση, μια και η μάζα του πυρήνα (μάζα πρωτονίου) είναι περίπου 1836 φορές μεγαλύτερη από τη μάζα του ηλεκτρονίου. Ωστόσο, στην πραγματικότητα πρόκειται για δύο χβαντικά σωματίδια σε αλληλεπίδραση. Εδώ, θα δούμε πώς μπορεί να γίνει ακριβέστερη αντιμετώπιση του προβλήματος, λαμβάνοντας υπόψη αυτό το γεγονός.

Ας θεωρήσουμε το σύστημα των δύο σωματιδίων, πυρήνα, με χωρικές συντεταγμένες θέσης $\mathbf{r}_N$ και μάζα m_N , και ηλεκτρονίου, με χωρικές συντεταγμένες θέσης $\mathbf{r}_e$ και μάζα m_e . Ο χώρος των καταστάσεων του συστήματος είναι εκείνος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων έξι μεταβλητών (τριών από την $\mathbf{r}_N$ και τριών από την $\mathbf{r}_e$):

$$\Psi(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) \in \mathbb{C}, \text{ με } \int d^3r_N \int d^3r_e |\Psi(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e)|^2 = 1. \quad (312)$$

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται κατά γενίκευση της περίπτωσης του ενός σωματιδίου από τη σχέση

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int d^3r_N \int d^3r_e \Psi_1^*(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) \Psi_2(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) \quad (313)$$

Ο χώρος των καταστάσεων παράγεται από γινόμενα κυματοσυναρτήσεων ενός σωματιδίου. Δηλαδή, αν $\Psi_N(\mathbf{r}_N)$ μια κυματοσυνάρτηση του πυρήνα εάν το ηλεκτρόνιο απουσιάζει, και $\Psi_e(\mathbf{r}_e)$ μια κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου εάν ο πυρήνας απουσιάζει, τότε τα γινόμενα του τύπου

$$\Psi_{\text{prod}}(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) = \Psi_N(\mathbf{r}_N) \Psi_e(\mathbf{r}_e) \quad (314)$$

είναι κυματοσυναρτήσεις του συστήματος των δύο σωματιδίων. Όμως, μπορεί κανείς να πάρει γραμμικούς συνδυασμούς, πεπερασμένων ή άπειρων σε αριθμό όρων, από κυματοσυναρτήσεις γινόμενα και να κατασκευάσει νέες κυματοσυναρτήσεις του συστήματος με τη μορφής

$$\Psi(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) = \sum_n a_n \Psi_{\text{prod},n}(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) = \sum_{i,j} a_{ij} \Psi_{N,i}(\mathbf{r}_N) \Psi_{e,j}(\mathbf{r}_e) \quad (315)$$

οι οποίες δεν είναι παραγοντοποιήσιμες, δηλαδή δεν μπορούν γενικά να γραφούν ως ένα γινόμενο από δύο κυματοσυναρτήσεις, μία του πυρήνα και μία του ηλεκτρονίου. Ωστόσο, οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση του συστήματος δύο σωματιδίων, παραγοντοποιήσιμη ή μη, μπορεί να γραφεί ως τέτοιος γραμμικός συνδυασμός.

Η ορμή του πυρήνα και του ηλεκτρονίου δίνονται, αντίστοιχα, από τους τελεστές

$$\hat{\mathbf{p}}_N = -i\hbar\nabla_N \text{ και } \hat{\mathbf{p}}_e = -i\hbar\nabla_e \quad (316)$$

όπου ∇_N ο τελεστής παραγώγισης ως προς τις συντεταγμένες του πυρήνα,

$$\nabla_N = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x_N} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y_N} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z_N}, \quad (317)$$

και όμοια ∇_e ο τελεστής παραγώγισης ως προς τις συντεταγμένες του ηλεκτρονίου.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος δίνεται από την κινητική ενέργεια του κάθε σωματιδίου συν την ενέργεια αλληλεπίδρασης,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_N} \hat{p}_N^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_e^2 + V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N|) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 + V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N|). \end{aligned} \quad (318)$$

Στην τετριμμένη περίπτωση απουσίας αλληλεπίδρασης, $V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N|) = 0$, η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger προσφέρεται για χωρισμό μεταβλητών, οπότε η ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$ γράφονται στη μορφή (314):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \right) \Psi_N(\mathbf{r}_N) \Psi_e(\mathbf{r}_e) = E \Psi_N(\mathbf{r}_N) \Psi_e(\mathbf{r}_e) \quad (319)$$

η οποία ξαναγράφεται

$$-\frac{1}{\Psi_N(\mathbf{r}_N)} \frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 \Psi_N(\mathbf{r}_N) - \frac{1}{\Psi_e(\mathbf{r}_e)} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \Psi_e(\mathbf{r}_e) = E \quad (320)$$

Ο μόνος τρόπος να είναι το άθροισμα των δύο όρων του αριστερού μέλους σταθερό (E) για κάθε τιμή των $\mathbf{r}_N$ και $\mathbf{r}_e$, είναι να είναι ο κάθε όρος ίσος με μια σταθερά. Άρα:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Psi_N(\mathbf{r}_N)} \frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 \Psi_N(\mathbf{r}_N) &= E_N \\ -\frac{1}{\Psi_e(\mathbf{r}_e)} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \Psi_e(\mathbf{r}_e) &= E_e \end{aligned} \quad (321)$$

με $E_N + E_e = E$. Η λύση αυτών των εξισώσεων είναι

$$\begin{aligned} \Psi_N(\mathbf{r}_N) &= \exp(i\mathbf{k}_N \cdot \mathbf{r}_N) \\ \Psi_e(\mathbf{r}_e) &= \exp(i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}_e) \end{aligned} \quad (322)$$

υπό τις συνθήκες $\mathbf{k}_N^2 = 2m_N E_N / \hbar^2$ και $\mathbf{k}_e^2 = 2m_e E_e / \hbar^2$. Δηλαδή, απουσία δυναμι-

κού αλληλεπίδρασης, οι ειδικές λύσεις είναι επίπεδα κύματα και η γεννική λύση είναι επαλληλία επιπέδων κυμάτων ίδιας ενέργειας.

Αν $V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N|) \neq 0$, ο χωρισμός μεταβλητών του τύπου (314) δεν είναι δυνατός εν γένει. Όμως, χάρη στην εξάρτηση του δυναμικού από τη διαφορά $\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N$, το πρόβλημα προσφέρεται για ένα μετασχηματισμό σε νέο σύστημα συντεταγμένων, στο οποίο είναι δυνατός ο χωρισμός μεταβλητών. Το νέο σύστημα είναι οι συντεταγμένες κέντρου μάζας, $\mathbf{R}$, και σχετικής θέσης, $\mathbf{r}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{R} &= \frac{m_N \mathbf{r}_N + m_e \mathbf{r}_e}{m_N + m_e} = \frac{m_N}{M} \mathbf{r}_N + \frac{m_e}{M} \mathbf{r}_e \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N.\end{aligned}\quad (323)$$

Ορίζουμε την ολική μάζα του συστήματος, M , και την ανηγμένη μάζα, (*reduced mass*) m , ως

$$\begin{aligned}M &= m_N + m_e \\ m &= \frac{m_N m_e}{m_N + m_e}.\end{aligned}\quad (324)$$

Η ανηγμένη μάζα γράφεται και ως

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_N} + \frac{1}{m_e} \quad (325)$$

και, λόγω του ότι $m_N \approx 1836 m_e$, είναι λίγο μικρότερη από τη μάζα του ηλεκτρονίου ($m \approx 0,99946 m_e$).

Ως προς τις νέες συντεταγμένες (323) ορίζονται οι αντίστοιχοι τελεστές παραγωγής: ∇_{CM} ως προς τις συντεταγμένες κέντρου μάζας και ∇ ως προς τις σχετικές συντεταγμένες. Μπορούμε να βρούμε τις αντίστοιχες εκφράσεις αν αντιστρέψουμε τις σχέσεις (323), εκφράζοντας τα $\mathbf{R}$ και $\mathbf{r}$ συναρτήσει των $\mathbf{r}_N$ και $\mathbf{r}_e$, και χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας στην παραγωγή. Για την ν -οστή συνιστώσα του ∇_{CM} έχουμε

$$(\nabla_{\text{CM}})_{\nu} = \frac{\partial}{\partial R_{\nu}} = \sum_{\nu'} \left[\frac{\partial r_{N,\nu'}}{\partial R_{\nu}} \frac{\partial}{\partial r_{N,\nu'}} + \frac{\partial r_{e,\nu'}}{\partial R_{\nu}} \frac{\partial}{\partial r_{e,\nu'}} \right]. \quad (326)$$

Για το ∇ έχουμε την ίδια σχέση, μόνο με το r_{ν} στη θέση του R_{ν} . Με βάση τους νέους τελεστές παραγωγής, ορίζουμε τη συζυγή ορμή ως προς $\mathbf{R}$ και ως $\mathbf{r}$:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{CM}} = -i\hbar \nabla_{\text{CM}} \quad \text{και} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (327)$$

Προκύπτει η ακόλουθη σχέση μεταξύ των τελεστών ορμής στις αρχικές και στις νέες

συντεταγμένες:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}_{\text{CM}} &= \hat{\mathbf{p}}_{\text{N}} + \hat{\mathbf{p}}_{\text{e}} \\ \hat{\mathbf{p}} &= \frac{m_{\text{N}}\hat{\mathbf{p}}_{\text{e}} - m_{\text{e}}\hat{\mathbf{p}}_{\text{N}}}{m_{\text{N}} + m_{\text{e}}} = \frac{m}{m_{\text{e}}}\hat{\mathbf{p}}_{\text{e}} - \frac{m}{m_{\text{N}}}\hat{\mathbf{p}}_{\text{N}}\end{aligned}\quad (328)$$

Δηλαδή, $\hat{\mathbf{P}}_{\text{CM}}$ είναι η ολική ορμή του συστήματος και $\hat{\mathbf{p}}$ ένα σταθμισμένο άθροισμα ορμών των δύο σωματιδίων. Δεδομένου ότι $m \approx m_{\text{e}}$ και $m \ll m_{\text{N}}$, αναμένουμε η ορμή $\hat{\mathbf{p}}$ να είναι σχεδόν ίση με την ορμή του ηλεκτρονίου, σε σύστημα αναφοράς όπου το κέντρο μάζας είναι ακίνητο.

Από τον ορισμό (316) προκύπτουν οι σχέσεις μετάθεσης θέσης-ορμής για το ηλεκτρόνιο και τον πυρήνα:

$$[\hat{r}_{\text{N},\mu}, \hat{p}_{\text{N},\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad [\hat{r}_{\text{e},\mu}, \hat{p}_{\text{e},\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad (329)$$

και οι υπόλοιποι μεταθέτες μεταξύ θέσεων, μεταξύ ορμών, και μεταξύ τελεστών θέσης/ορμής του πυρήνα και τελεστών ορμής/θέσης του ηλεκτρονίου μηδενίζονται. Από αυτές τις σχέσεις μετάθεσης, μαζί με τον ορισμό (327) ή, εναλλακτικά, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (328) και εφαρμόζοντας κανόνες μεταθετών, καταλήγουμε στις σχέσεις μετάθεσης θέσης-ορμής για το σύστημα κέντρου μάζας και σχετικής κίνησης. Βρίσκουμε

$$[\hat{R}_{\mu}, \hat{P}_{\text{CM},\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad [\hat{r}_{\mu}, \hat{p}_{\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad (330)$$

και οι υπόλοιποι μεταθέτες μεταξύ θέσεων, μεταξύ ορμών, και μεταξύ τελεστών θέσης/ορμής του συστήματος κέντρου μάζας και τελεστών ορμής/θέσης του συστήματος σχετικής κίνησης μηδενίζονται.

Προκύπτουν, επίσης, οι ακόλουθες σχέσεις

$$m_{\text{N}} m_{\text{e}} = M m \quad (331)$$

$$\frac{1}{2m_{\text{N}}}\hat{p}_{\text{N}}^2 + \frac{1}{2m_{\text{e}}}\hat{p}_{\text{e}}^2 = \frac{1}{2M}\hat{P}_{\text{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \quad (332)$$

$$\hat{\mathbf{L}}_{\text{N}} + \hat{\mathbf{L}}_{\text{e}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{l}}, \quad (333)$$

όπου ορίσαμε τη στροφορμή για κάθε επιμέρους σύστημα (πυρήνα, ηλεκτρονίου, κέντρου μάζας και σχετικής κίνησης):

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}_{\text{N}} &= \mathbf{r}_{\text{N}} \times \hat{\mathbf{p}}_{\text{N}}, & \hat{\mathbf{L}}_{\text{e}} &= \mathbf{r}_{\text{e}} \times \hat{\mathbf{p}}_{\text{e}} \\ \hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}}_{\text{CM}}, & \hat{\mathbf{l}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}.\end{aligned}\quad (334)$$

Με βάση τα προηγούμενα, η Χαμιλτονιανή του συστήματος μετασχηματίζεται στις

νέες μεταβλητές ως εξής:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_N}\hat{p}_N^2 + \frac{1}{2m_e}\hat{p}_e^2 + V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N|) \\ &= \frac{1}{2M}\hat{P}_{\text{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(r).\end{aligned}\quad (335)$$

Σε αυτή τη μορφή της Χαμιλτονιανής, η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger προσφέρεται για χωρισμό μεταβλητών ως προς τις νέες μεταβλητές, $\mathbf{R}$ και $\mathbf{r}$. Θέτοντας για την ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής

$$\Psi(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_e) \rightarrow \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}), \quad (336)$$

η εξίσωση ιδιοτιμών γράφεται

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi &= \left(\frac{1}{2M}\hat{P}_{\text{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(r) \right) \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r}) \\ &= \phi(\mathbf{r})\frac{1}{2M}\hat{P}_{\text{CM}}^2\Phi(\mathbf{R}) + \Phi(\mathbf{R})\frac{1}{2m}\hat{p}^2\phi(\mathbf{r}) + V(r)\phi(\mathbf{r}) \\ &= E \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (337)$$

Προκύπτουν λοιπόν δύο ανεξάρτητες εξισώσεις, μία για το σύστημα κέντρου μάζας και μία για τη σχετική κίνηση:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2M}\hat{P}_{\text{CM}}^2 \Phi(\mathbf{R}) &= E_{\text{CM}} \Phi(\mathbf{R}) \\ \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \phi(\mathbf{r}) + V(r)\phi(\mathbf{r}) &= E_{\text{H}} \phi(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (338)$$

με $E = E_{\text{CM}} + E_{\text{H}}$ την ολική ενέργεια. Η πρώτη των εξισώσεων έχει τις γνωστές λύσεις επίπεδων κυμάτων,

$$\Phi(\mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}), \quad K^2 = 2ME_{\text{CM}}/\hbar^2, \quad (339)$$

και αντιστοιχεί στην ελεύθερη κίνηση του ατόμου. Η δεύτερη εξίσωση είναι πανομοιότυπη με την εξίσωση σωματιδίου σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ και ισοδύναμη με την εξίσωση (279), με τη διαφορά ότι εδώ εμφανίζεται η ανηγμένη μάζα στη θέση της μάζας του σωματιδίου. Εάν το δυναμικό είναι αυτό του ατόμου του Υδρογόνου, τότε οι λύσεις της είναι πανομοιότυπες με αυτές που γράψαμε για το άτομο του Υδρογόνου, με την ανηγμένη μάζα να εμφανίζεται στη θέση της μάζας του ηλεκτρονίου. Από την εξ. (305) βλέπουμε πως οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι ευθέως ανάλογες της μάζας, επομένως τα φάσματα εκπομπής και απορρόφησης (διαφορά ενέργειας μεταξύ σταθμών) διαμορφώνονται αντίστοιχα. Ωστόσο, η μεταβολή είναι μικρή, δεδομένου ότι $m \approx 0,99946 m_e$.

Στην περίπτωση του Δευτερίου (με ένα νετρόνιο και ένα πρωτόνιο στον πυρήνα, δηλαδή μάζα πυρήνα περίπου διπλάσια αυτής του ατόμου Υδρογόνου), η διαφορά είναι ακόμα μικρότερη: εκεί, $m \approx 0,99973 m_e$.

Παράρτημα Α: Η συνάρτηση δ

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

1. Για τυχαία συνάρτηση f συνεχή σε μια περιοχή γύρω από το μηδέν,
$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int f(x) \delta_\eta(x) dx = f(0).$$
2. Η $\delta_\eta(x)$ είναι αυθαίρετα πολλές φορές διαφορίσιμη.

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

$$\delta_\eta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\eta} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\eta}\right)^2}. \quad (340)$$

Αλλά και για οποιαδήποτε κατανομή $\rho(x) \geq 0$, κανονικοποιημένη στη μονάδα ($\int \rho(x) dx = 1$) μπορούμε να ορίσουμε μια αναπαράσταση της συνάρτησης δ ως $\delta_\eta(x) = \frac{1}{\eta} \rho\left(\frac{x}{\eta}\right)$. Στην πράξη διευκολύνουν οι άρτιες κατανομές ($\rho(x) = \rho(-x)$, οπότε και $\delta_\eta(x) = \delta_\eta(-x)$). Η διαφορισιμότητα της ρ , άρα και της δ_η , δεν είναι απαραίτητη εάν οι εκφράσεις που θα χειριστούμε δεν περιλαμβάνουν την παραγωγή της $\delta(x)$.

Αν το σύνολο συναρτήσεων $f(x)$ στις οποίες δρα η $\delta(x)$ δεν πέφτει αρκετά γρήγορα στο άπειρο, πρέπει να απαιτήσουμε από την $\rho(x)$ να μηδενίζεται εκτός ενός διαστήματος (το οποίο, καθώς $\eta \rightarrow 0$, θα γίνεται αυτόματα ολοένα και στενότερο και τα άκρα του θα πλησιάζουν το μηδέν).⁽¹¹⁵⁾

Συνήθως παραλείπουμε, χάριν συντομίας, να γράψουμε το δείκτη η και το σύμβολο $\lim_{\eta \rightarrow 0}$, και αναφερόμαστε απλώς στη συνάρτηση $\delta(x)$. Ωστόσο, η συνάρτηση δ αποκτά νόημα όταν περιλαμβάνεται σε ολοκλήρωμα με το προαναφερθέν όριο, δηλ.

⁽¹¹⁵⁾ Σημειώνουμε ότι υπάρχουν συναρτήσεις, θετικά ορισμένες και άπειρες φορές διαφορίσιμες, που μηδενίζονται εκτός κάποιου διαστήματος. Μια τέτοια είναι η $\rho(x) = \mathcal{N} \exp[1/(x^2-1)]$, για $-1 < x < 1$, και $\rho(x) = 0$, για $|x| \geq 1$, όπου $\mathcal{N} = 1/\int_{-1}^1 \exp[1/(x^2-1)] dx$ ο συντελεστής κανονικοποίησης.

$\int \delta(x)f(x) dx \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0} \int f(x)\delta_\eta(x) dx$. Από τον ορισμό προκύπτουν τα ακόλουθα:⁽¹¹⁶⁾

$$\delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x) \quad (341)$$

$$\int \delta(x - x_0)f(x) dx = f(x_0) \quad (342)$$

$$\int \delta'(x - x_0)f(x) dx = -f'(x_0) \quad (\text{προκύπτει με παραγοντική ολοκλήρωση}) \quad (343)$$

$$\int \delta''(x - x_0)f(x) dx = +f''(x_0) \quad (344)$$

$$x \delta(x) = 0 \quad (345)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \quad (346)$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x - x_i) \quad (347)$$

όπου x_i οι ρίζες της εξίσωσης $f(x) = 0$ (υποθέτοντας ότι πρόκειται για απλές ρίζες) και όπου η f είναι επαρκώς ομαλή συνάρτηση. Η διαφορισιμότητα της κατανομής δ_η δεν απαιτείται για όλες τις ιδιότητες, παρά μόνον για εκείνες που περιλαμβάνουν παραγώγους. Επίσης, η συνάρτηση δ είναι η παράγωγος της συνάρτησης μοναδιαίου βήματος,

$$\delta(x) = \frac{\partial \theta(x)}{\partial x}, \quad (348)$$

με $\theta(x) = 0$, για $x < 0$, και $\theta(x) = 1$ για $x > 0$. Οι μονάδες της συνάρτησης $\delta(x)$ είναι $1/[x]$ (όπου $[x]$ οι μονάδες του μεγέθους x), όπως προκύπτει από την απαίτηση το ολοκλήρωμα $\int \delta(x) dx = 1$ να είναι αδιάστατο.

Προβλήματα

1. Αποδείξτε τις ιδιότητες (341-348) της συνάρτησης δέλτα. Επαληθεύστε ότι

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x - a) + \delta(x + a)].$$

Για την ιδιότητα (348), θεωρήστε το ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^x \delta(x')dx'$ και συγκρίνετέ το με τη $\theta(x)$. Σημειώστε πως η τιμή $\theta(0)$ δεν παίζει ρόλο εδώ.

2. Θεωρήστε τις συναρτήσεις $\delta_\eta(x) = 1/[\eta \cosh^2(x/\eta)]$ και $\theta_\eta(x) = \tanh(x/\eta)$. Δείξτε ότι, στο όριο $\eta \rightarrow 0$, η ταυτότητα $\partial \tanh(x/\eta)/\partial x = 1/[\eta \cosh^2(x/\eta)]$ καταλήγει στην (348).

⁽¹¹⁶⁾Πρόβλημα 1

Παράρτημα Β: Χρήσιμες μαθηματικές σχέσεις

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}-c}, \quad a > 0$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}a^n}, \quad a > 0, n \in \mathbb{N} \quad (2n-1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}, \quad a > 0, n \in \mathbb{N}_0$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx = n!$$

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x dx = \int_0^{\pi} \cos^2 x dx = \pi/2$$

$$\cos \theta \cos \varphi = \frac{1}{2}(\cos(\theta - \varphi) + \cos(\theta + \varphi))$$

$$\sin \theta \sin \varphi = \frac{1}{2}(\cos(\theta - \varphi) - \cos(\theta + \varphi))$$

$$\sin \theta \cos \varphi = \frac{1}{2}(\sin(\theta + \varphi) + \sin(\theta - \varphi))$$

$$\cos \theta \sin \varphi = \frac{1}{2}(\sin(\theta + \varphi) - \sin(\theta - \varphi))$$

$$\sin(2\theta) = 2 \sin \theta \cos \theta$$

$$\cos(2\theta) = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = 2 \cos^2 \theta - 1$$

$$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} z^n, \quad z \in \mathbb{C}$$

$$\sin(z) = \frac{1}{2i}(e^{iz} - e^{-iz}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} z^{2n+1}$$

$$\cos(z) = \frac{1}{2}(e^{iz} + e^{-iz}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} z^{2n}$$

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

$$\frac{2}{L} \int_0^{\pi} \sin(nx) \sin(n'x) dx = \delta_{nn'}, \quad \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(nx) \sin(nx') = \delta(x - x') \quad x, x' \in [0, \pi]$$

Ευρετήριο

αβεβαιότητα

ενέργειας-χρόνου, 52

θέσης-ορμής, 20

ακτινική εξίσωση, 134

αναπαράσταση

θέσης, 61

ορμής, 61

ανηγμένη μάζα, 144

ανισότητα Cauchy-Schwarz, 8

αξίωμα προβολής, 16

αρχή

της αβεβαιότητας, 19

της απροσδιοριστίας, 19

της επαλληλίας, 15

αρμονικός ταλαντωτής, 108

ατομο

υδρογονοειδές, 141

Υδρογόνου, 137

εκφυλισμός ενέργειας, 139

ιδιοτιμές ενέργειας, 139

θεμελιώδης κατάσταση, 141

δυναμικό

ενεργό, 134

φυγοκεντρικό, 134

εκφυλισμός, 55

επίπεδα κύματα, 57

ερμηνεία άγνοιας, 15

εσωτερικό γινόμενο, 7

εξίσωση συνέχειας, 53

εξίσωση του Schrödinger

χρονικά ανεξάρτητη, 56

χρονικά εξαρτώμενη, 48

θεώρημα

virial, 76

ιδιοκατάσταση, 11

γενικευμένη, 64

ιδιοσυνάρτηση

γενικευμένη, 64

ιδιοτιμή, 11

εκφυλισμένη, 17, 55

κανονικοποίηση, 5

κατάσταση

βασική, 85

δέσμια, 82

θεμελιώδης, 85

χβαντική, 5

σκέδασης, 87

κατανομή πιθανότητας, 5

κυματοπακέτο, 60

κυματοσυνάρτηση, 5

τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, 5

μέση τιμή, 6

μεγέθη

ασύμβατα, 14

διατηρούμενα, 51

κανονικά συζυγή, 14

μετρήσιμα, 5, 7

συμβατά, 14, 19

μεταθέτης, 14

νόρμα, 8

ορθογώνιες κυματοσυναρτήσεις, 8

ορθοκανονική βάση, 28

πιθανότητα μετάβασης, 17

πλάτος

ανάκλασης, 90

διέλευσης, 90

πλάτος μετάβασης, 17

πλήρες σύστημα μετατιθέμενων μεγεθών,

18

πολυώνυμα

Hermite, 110	φραγμένος, 44
Laguerre, 141	τυπική απόλιση, 11
Legendre, 126	φαινόμενο σήραγγας, 96
πυκνότητα καταστάσεων, 74	φάση, 6
πυκνότητα πιθανότητας, 5	χώρος Hilbert, 28
ρεύμα πιθανότητας, 53	χαμιλτονιανή, 48
ροπές κατανομής, 9	
σχέση	
διασποράς, 60	
πληρότητας, 29	
του Ehrenfest, 50	
σφαιρικές αρμονικές, 127	
σφαιρικές συναρτήσεις Bessel, 136	
στάθμη	
βασική, 85	
θεμελιώδης, 85	
στροφορμή, 120	
συλλογή, 9	
συνάρτηση δ , 148	
συντονισμός σκέδασης, 91	
ταυτότητα του Bauer, 137	
τελεστής	
αντιστροφής χώρου, 81	
αρίθμησης, 114	
δημιουργίας, 111	
ερμιτιανός, 7	
ερμιτιανός συζυγής, 35	
θέσης, 6	
γενικευμένη ιδιοσυνάρτηση, 67	
καταστροφής, 111	
μοναδιαίος, 37	
ομοτιμίας, 80	
ορμής, 6	
προβολικός, 10	