Πανεπιστήμιο Αθηνών

Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις V: Συνεχές Φάσμα, Χώρος των Ορμών και Ελεύθερο σωμάτιο

Θέλουμε να βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις των δυο βασικών μεγεθών, της θέσης, x, και της ορμής p, βάσει των οποίων μπορούμε να υπολογίσουμε οποιαδήποτε φυσική ποσότητα, $A(x,p)$. Το νέο χαρακτηριστικό που εισάγουν οι δυο αυτές φυσικές ποσότητες είναι ότι οι τιμές που μπορούν να πάρουν (η θέση και η ορμή) είναι συνεχείς, ενώ έως τώρα έχουμε αναφερθεί σε φυσικές ποσότητες που παίρνουν διακριτές, αριθμήσιμες τιμές (π.χ. η ενέργεια σωματιδίου σε απειρόβαθο πηγάδι).

Στην περίπτωση της ορμής πρέπει να λύσουμε την εξίσωση

$$\hat{p} f_p(x) = p f_p(x) \tag{5.1}$$

δηλ. πρέπει να βρούμε τις $f_p(x)$ και τις αντίστοιχες τιμές της ορμής p. Αντικαθιστώντας τη μορφή του $\hat{p}$ στο χώρο των θέσεων, η (5.1) γίνεται:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} f_p(x) = p f_p(x)$$

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar} \tag{5.2}$$

όπου A μια σταθερά κανονικοποίησης. Παρατηρούμε ότι η (5.2) πληροί την (5.1) και δεν υπάρχει κάποιος περιορισμός στην παράμετρο p.

1. <u>Θεώρημα πληρότητας για τις</u> $f_p(x)$

Η έκφραση (5.2) παρουσιάζει δυο νέα χαρακτηριστικά, σε σχέση με ό,τι έχουμε κάνει ως τώρα:

α) δεν κανονικοποιείται!

Η αδυναμία κανονικοποίησης είναι προφανής αφού το αντίστοιχο ολοκλήρωμα δεν συγκλίνει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| f_p(x) \right|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty$$

β) η ιδιοτιμή p, δεν παίρνει διακριτές τιμές, δηλ. αριθμήσιμες μέσω κάποιου δείκτη, έστω n. Αντ' αυτού, η p μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή. Λέμε ότι το «φάσμα» της ορμής είναι «συνεχές». [Εν αντιθέσει, π.χ. με το φάσμα της ενέργειας στο απειρόβαθο πηγάδι, που έχει μόνο τις τιμές $E_1, E_2, E_3, \ldots$].

Το συνεχές του φάσματος έχει ως αποτέλεσμα ότι δεν ξέρουμε πως να εκφράσουμε την καθετότητα δυο ιδιοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές, έστω p_1 και p_2, αφού το Kronecker δέλτα, δ_{mn}, ορίζεται μόνο για ακέραια m και n, και όχι για συνεχή p_1, p_2. Χρειαζόμαστε τη γενίκευση του δ στην περίπτωση συνεχών «δεικτών». Η απάντηση, όπως θα δείξουμε, είναι η "συνάρτηση δ" του Dirac, $\delta(p_1 - p_2)$.

Για να δείξουμε το ως άνω, θεωρούμε τη μέτρηση μιας συνεχούς ποσότητας, έστω της ορμής. Έστω ότι η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου $\psi(x)$ είναι γνωστή, και θέλουμε να υπολογίσουμε την πιθανότητα εμφάνισης μιας συγκεκριμένης τιμής της ορμής, έστω της p_1. Για να γίνει αυτό, πρέπει να εκφράσουμε την $\psi(x)$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{\mathrm{p}}$, δηλ. των $f_p(x)$. Χρειαζόμαστε το ανάλογο της έκφρασης

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x) \tag{5.3}$$

που είχαμε στην περίπτωση που θέλαμε να μετρήσουμε την ενέργεια ενός σωματιδίου με κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ σε απειρόβαθο πηγάδι. Μόνο που τώρα, ο δείκτης n στη $\varphi_n(x)$ δεν είναι αριθμήσιμος. Έστω λοιπόν ότι ο δείκτης είναι μια συνεχής ποσότητα. Σε αυτή την περίπτωση,

$$\sum_n \to \int dn \quad \text{και} \quad c_n \to c(n)$$

Οπότε, όταν το n δεν είναι ακέραιος, η (5.3) γράφεται

$$\psi(x) = \int dn\, c(n) \varphi_n(x) \tag{5.4}$$

Το μόνο που απομένει είναι να βρούμε τη συνάρτηση $c(n)$. Σε αναλογία με τους συντελεστές c_n στην (5.3), η πιθανότητα εμφάνισης της τιμής n θα είναι

$$|c(n)|^2\, dn \tag{5.5}$$

Ο συμβολισμός στην (5.5) δεν είναι καλός επειδή έχουμε συνηθίσει να συμβολίζουμε με "n" ακέραιους αριθμούς. Για να θυμόμαστε πιο άμεσα ότι η φυσική ποσότητα είναι συνεχής αλλάζουμε το σύμβολο σε "a", όπου $a \in \mathbb{R}$.

Επαναλαμβάνοντας τα βήματα υπολογισμού των c_n στο διακριτό φάσμα, θα έχουμε:

$$\psi(x) = \sum_m c_m f_m(x) \quad \leftrightarrow \quad \psi(x) = \int da\; c(a) f_a(x)$$

Το κλειδί στον υπολογισμό των c_m (5.3) είναι η καθετότητα των f_m για διαφορετικές τιμές του m:

$$f_n \circ f_m = (f_n, f_m) = \int f_n^*(x) f_m(x) dx = \delta_{nm} \tag{5.6}$$

Η αντίστοιχη συνθήκη όταν n και m είναι συνεχείς αριθμοί, έστω a και b, θα είναι

$$f_a \circ f_b = (f_a, f_b) = \int f_a^*(x) f_b(x) dx = \delta(a - b) \tag{5.7}$$

Το σκεπτικό που οδηγεί στη (5.7) είναι: ότι για να είναι εφικτός ο υπολογισμός του $c(a)$, πρέπει να ισχύει μια εξίσωση της μορφής

$$\int f^*_a(x) f_b(x)\, dx = "\delta"_{a,b}$$

όπου $"\delta"_{a,b}$ είναι μια ποσότητα ίση με μηδέν όταν $a \neq b$ και επιπλέον πρέπει να έχει την εξής ιδιότητα:

$$\begin{aligned} f_n \circ \psi &= \sum_m c_m f_n \circ f_m & \leftrightarrow \quad f_b \circ \psi &= \int da\, c(a) f_b \circ f_a \\ &= \sum_m c_m \delta_{nm} & &= \int da\, c(a) "\delta"_{ba} \\ &= c_n & &= c(b) \end{aligned} \tag{5.8}$$

Η (5.8) είναι ο ορισμός της κατανομής Dirac: η $"\delta"_{b,a}$ είναι απλώς η συνάρτηση δ του Dirac, $\delta(b-a)$. Άρα θα πρέπει να ισχύει

$$\int da c(a) \delta(a-b) = c(b)$$

για $\forall$ συνάρτηση $c(a)$. Για $c(a) = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} da\delta(a-b) = 1 \Rightarrow \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} da\delta(a-b) = 1 \ \Rightarrow \delta(a-b)$ για $a = b$ είναι "∞". Τέτοιο ώστε $\int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} da\delta(a-b) = 1$.

Περισσότερα για την Dirac δ και τις ιδιότητές της στο μαθηματικό συμπλήρωμα. Στο παρόν θα χρειαστούμε την αναπαράσταση της στην (5.80):

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx$$

Εφαρμόζοντας την (5.7) στην περίπτωση της ορμής, βλέπουμε ότι τώρα μπορούμε να κανονικοποιήσουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της ορμής. Έστω δυο ιδιοσυναρτήσεις με ιδιοτιμές p και p' αντίστοιχα:

$$f_p(x) = Ae^{ipx/\hbar} \qquad\qquad f_{p'}(x) = Ae^{ip'x/\hbar}$$

Η (5.7) δίνει

$$f_{p'} \circ f_p = \delta(p - p')$$

Αντικαθιστώντας τις f_p και $f_{p'}$:

$$A^* A \int e^{ipx/\hbar} \cdot e^{-ip'x/\hbar} dx = \delta(p-p') \Rightarrow |A|^2 \cdot 2\pi\hbar\delta(p-p') = \delta(p-p') \Rightarrow |A| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

και άρα, η ιδιοσυνάρτηση της ορμής στο χώρο των θέσεων, για τιμή p της ορμής, δηλ. η $f_p(x)$, δίδεται ως:

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tag{5.9}$$

Συχνά δουλεύουμε με τον κυματαριθμό $k = p/\hbar$. Η ιδιοσυνάρτηση $f_p(x)$ ως προς το k γράφεται $f_k(x)$ και δίδεται ως

$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \tag{5.10}$$

Παρατηρούμε ότι η σχέση των $f_p(x)$ και $f_k(x)$ δίδεται ως

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} f_k(x) \tag{5.11}$$

Ο πρόσθετος παράγοντας $\sqrt{\hbar}$ στον παρονομαστή της (5.11), οφείλεται στην απαίτηση και η $\tilde{\psi}(p)$ και η $\tilde{\psi}(k)$ να είναι κανονικοποιημένες, δηλ. στο

$$\int \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2 dp = \int \left|\tilde{\psi}(k)\right|^2 dk = 1 \tag{5.12}$$

και εφόσον $dp = \hbar dk$ για να ισχύει η (5.12) πρέπει να ισχύει η (5.10).

Περίληψη:

Στο διακριτό φάσμα, έχουμε

$$\sum_n c_n f_n(x), \;\; p(q_n) = |c_n|^2$$

Στο συνεχές έχουμε

$$\int c(a) f_a(x) da, \;\; dP(a) = |c(a)|^2 da$$

Αν έχουμε την κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων, $\psi(x)$, μπορούμε να βρούμε την κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών, $c(p)$, γράφοντας την $\psi(x)$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων της ορμής, $f_p(x)$:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp \tag{5.13}$$

ή, πιο απλά:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk \tag{5.14}$$

Οι (5.13) και (5.14) δείχνουν ότι οι $c(p)$ και $c(k)$ είναι απλώς ο μετασχηματισμός Fourier της $\psi(x)$! Επομένως η (5.13) μπορεί να αντιστραφεί χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Fourier, δίνοντας μας την $\tilde{\psi}(p)$ ως συνάρτηση της $\psi(x)$:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \tag{5.15}$$

όπου γράψαμε $c(p) = \tilde{\psi}(p)$. Ή, για $k = p/\hbar$,

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \qquad (5.16)$$

Άρα τώρα ξέρουμε πως να υπολογίσουμε την πιθανότητα εμφάνισης μιας τιμής της ορμής: υπολογίζουμε την $\tilde{\psi}(k)$ και το $|\tilde{\psi}(k)|^2 dk$ μας δίνει την πιθανότητα μέτρησης της τιμής $p = \hbar k$ για την ορμή!

2. Παραδείγματα υπολογισμού της πιθανότητας της p

2.1 Επίπεδο κύμα

Έστω επίπεδο κύμα με μόνο ένα κυματαριθμό, k_0 (δηλ. με μόνο μια ορμή, $p_0 = \hbar k_0$):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_o x}$$

Η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των "ορμών" (για να είμαστε ακριβείς, στο χώρο των "κυματαριθμών", αλλά αφού οι δυο χώροι διαφέρουν μόνο κατά τη σταθερά $\hbar$, παραλείπουμε το "κυματαριθμών" και αναφερόμαστε στις "ορμές") $\tilde{\psi}(k)$, δίδεται ως:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k_0 - k)x} dx = \delta(k - k_o)$$

Όπως αναμέναμε, μόνο μια τιμή του κυματαριθμού είναι δυνατή, η k_0. (και η ορμή, $p = \hbar k_0$).

2.2 Επίπεδο κύμα στο $|x| < L/2$

Έστω το ίδιο επίπεδο κύμα με ένα κυματαριθμό, k_0, που όμως τώρα έχει κοπεί για τιμές $|x| > L/2$. Η κυματοσυνάρτηση στο χώρο δίδεται ως:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_0 x} \text{ για } -\frac{L}{2} \le x \le +\frac{L}{2} \quad \text{και} \quad \psi(x,0) = 0 \text{ για } |x| > \frac{L}{2}$$

Για να βρούμε την πιθανότητα εμφάνισης της τιμής $p = \hbar k$ της ορμής, πρέπει να υπολογίσουμε την $\tilde{\psi}(k)$ (ή την $\tilde{\psi}(p)$). Χρησιμοποιούμε την (5.16):

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \int e^{i(k_0 x)} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \cdot \frac{1}{i(k_0 - k)} e^{i(k_0 - k)x} \Big|_{-L/2}^{+L/2}$$

$$= \frac{2}{\sqrt{2\pi L}(k_0 - k)} \cdot \sin\left\{\frac{(k_0 - k)L}{2}\right\}$$

Και επομένως η πιθανότητα μέτρησης της τιμής k δίδεται ως:

$$|\tilde{\psi}(k)|^2 dk = \frac{2}{\pi L (k_0 - k)^2} \cdot \sin^2\left\{\frac{(k_0 - k)L}{2}\right\} dk \qquad (5.17)$$

Η (5.17) παίρνει σημαντικές τιμές όσο $\left|\tilde{\psi}(k)\right|^2 \neq 0$. Οι ρίζες της είναι:

$$\frac{(k_0 - k)L}{2} = \pm\pi \Rightarrow k = k_0 \pm \frac{2\pi}{L}$$

Στο χώρο των θέσεων, το εύρος της $\psi(x,0)$ είναι $\Delta x \sim L/2$. Βλέπουμε ότι $\Delta x \cdot \Delta k \sim 1 : L \cdot \frac{2\pi}{L} \sim 2\pi$.

2.3 <u>Βήμα στο χώρο των ορμών</u>

Έστω η κυματοσυνάρτηση $\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}$ για $|k - k_0| \leq \varepsilon$ και $\tilde{\psi}(k) = 0$ για $|k - k_0| > \varepsilon$. Στο χώρο των θέσεων:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \int_{k_0-\varepsilon}^{k_0+\varepsilon} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} \cdot \frac{1}{2ix} \cdot e^{ikx} \Big|_{k_0-\varepsilon}^{k_0+\varepsilon} = \frac{e^{ik_0x}}{\sqrt{\pi\varepsilon}\, 2ix} \cdot \left\{ e^{i\varepsilon x} - e^{-i\varepsilon x} \right\}$$

$$= \frac{e^{ik_0x}}{\sqrt{\pi\varepsilon} x} \cdot \left(\frac{e^{i\varepsilon x} - e^{-i\varepsilon x}}{2i} \right) = e^{ik_0x} \frac{\sin(\varepsilon x)}{\left(\sqrt{\varepsilon} x\right) \cdot \sqrt{\pi}}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = e^{ik_0x} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \frac{\sin \varepsilon x}{\varepsilon x} \Rightarrow |\psi(x)|^2 = \frac{\varepsilon}{\pi} \left(\frac{\sin \varepsilon x}{\varepsilon x} \right)^2 \qquad (5.18)$$

Η (5.18) μηδενίζεται για $\varepsilon x = n\pi \Rightarrow x = n\frac{\pi}{\varepsilon}$ και το εύρος στο χώρο είναι $\Delta x \sim \frac{\pi}{\varepsilon} \Rightarrow \Delta x \varepsilon \sim \pi$.

2.4 <u>Εκθετική συνάρτηση στο χώρο</u>

Έστω ότι η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου δίδεται ως $\psi(x) = e^{-x/x_0}$. Η μορφή αυτή συναντάται σε μποζόνιο μάζας M που αντιστοιχεί σε δύναμη με εύρος R_0:

$$e^{-Mr} \text{ με } M = \frac{1}{R_0} \qquad (\hbar = 1)$$

Στο συγκεκριμένο παράδειγμα θα περιοριστούμε σε μια διάσταση. Ο μετασχηματισμός Fourier είναι

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} e^{-ikx} e^{-\frac{x}{x_0}} dx = \left(-\frac{1}{ik + \frac{1}{x_0}} \right) e^{-\left(\frac{1}{x_0} + ik\right)x} \Bigg|_0^{+\infty} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi x_0}} \cdot \frac{1}{\frac{1}{x_0} + ik}$$

Επομένως

$$\left|\tilde{\psi}(k)\right|^2 = \frac{1}{2\pi^2 x_0} \cdot \frac{1}{\frac{1}{x_0^2} + k^2} = \frac{1}{k^2 + M^2}$$

Αναγνωρίζουμε τη μορφή του διαδότη (από την «Εισαγωγή στην Πυρηνική και Στοιχειώδη Σωμάτια»).

2.5 Gaussian στο χώρο των θέσεων

Έστω ένα πακέτο με κατανομή κατά Gauss (Gaussian):

$$\varphi(x) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\lambda x^2/2} \tag{5.19}$$

όπου $\lambda > 0$. Είναι εύκολο να επιβεβαιώσουμε ότι η $\varphi(x)$ είναι κανονικοποιημένη:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 \, dx = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^{1/2} = 1$$

Όπου χρησιμοποιήσαμε το γκαουσιανό ολοκλήρωμα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Θέλουμε να βρούμε τις πιθανές τιμές της ορμής και την πιθανότητα εμφάνισης της κάθε τιμής.

Θυμόμαστε ότι η γενική μορφή της Gaussian $G(x; x_0, \sigma)$, γράφεται

$$G(x; x_0, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{5.20}$$

Η (5.20) έχει ως ιδιότητες:

$$\langle x \rangle = x_0 \qquad (\Delta x)^2 = \sigma^2 \tag{5.21}$$

Η πυκνότητα πιθανότητας στο χώρο δίδεται ως

$$\rho(x) = \frac{dP}{dx} = |\varphi(x)|^2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\lambda x^2} \tag{5.22}$$

Συγκρίνοντας με τις (5.20) και (5.21) έχουμε:

$$\langle x \rangle = 0 \qquad 2\Delta x^2 = \frac{1}{\lambda} \Rightarrow \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \tag{5.23}$$

Για να βρούμε την πυκνότητα πιθανότητας στο χώρο των ορμών, δηλ. την πυκνότητα πιθανότητας της εμφάνισης της κάθε τιμής της ορμής (και επομένως του κυματαριθμού), πρέπει να βρούμε την $\tilde{\varphi}(k)$ στο ανάπτυγμα

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{\varphi}(k) e^{ikx} dk \tag{5.24}$$

Με την $\tilde{\varphi}(k)$ γνωστή, η πιθανότητα εύρεσης του κυματαριθμού k_0 είναι $\left|\tilde{\varphi}(k_0)\right|^2 dk$. Για να βρούμε την $\tilde{\varphi}(k)$, χρησιμοποιούμε τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier, δηλ. την αντίστροφη της (5.24):

$$\tilde{\varphi}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\varphi(x)e^{-ikx}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{\lambda}{2}x^2-ikx}dx \tag{5.25}$$

Το ολοκλήρωμα στην (5.25) είναι της μορφής:

$$I(a,b)=\int e^{-ax^2+\beta x}dx=\int e^{-a\left(x^2-\frac{\beta}{a}x+\frac{\beta^2}{4a^2}+-\frac{\beta^2}{4a^2}\right)}dx=\int e^{-a\left[x-\frac{\beta}{2a}\right]^2}e^{\beta^2/4a}dx=\left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}\cdot e^{\beta^2/4a} \tag{5.26}$$

Επομένως η $\tilde{\varphi}(k)$ γράφεται

$$\tilde{\varphi}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}I\left(\frac{\lambda}{2},-ik\right)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}}e^{\beta^2/4a}$$

Στο συγκεκριμένο ολοκλήρωμα

$$\beta=-ik \quad \text{και} \quad a=\frac{\lambda}{2}\Rightarrow\frac{\beta^2}{4a}=-\frac{k^2}{2\lambda}$$

και άρα:

$$\tilde{\varphi}(k)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-k^2/2\lambda}=\left(\frac{1}{\pi\lambda}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-k^2/2\lambda}$$

Η δε πυκνότητα πιθανότητας της ορμής k, $(\hbar k)$ δίδεται από την έκφραση

$$\left|\tilde{\varphi}(k)\right|^2=\frac{1}{\sqrt{\pi\lambda}}\cdot e^{-k^2/\lambda} \tag{5.27}$$

Βλέπουμε ότι όπως η θέση του σωματιδίου στο χώρο δεν έχει μόνο μια δυνατή τιμή, (έχουμε μια κατανομή πιθανότητας να βρεθεί σε οποιοδήποτε σημείο, έστω x_0) και η ορμή του δεν έχει μια συγκεκριμένη τιμή, έστω $p_0=\hbar k_0$, αλλά ένα εύρος τιμών (και μια αντίστοιχη κατανομή πιθανότητας εμφάνισης της κάθε τιμής). Η δε κατανομή της πιθανότητας στο χώρο των ορμών είναι επίσης μια Gaussian. Η μέση θέση, $\langle x\rangle=0$, και το ίδιο ισχύει για τη μέση ορμή $\langle p\rangle=0$. Ας υπολογίσουμε τη διασπορά των x και p, Δx και Δp $(=\hbar\Delta k)$.

$$\left.\begin{array}{l}\text{Εύρος της } \left|\varphi(x)\right|^2 : \text{Από τις (5.15) και (5.14)} : \dfrac{1}{2\sigma_x^{\ 2}} = \lambda \Rightarrow \Delta x = \sigma_x = \left(\dfrac{1}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \text{Εύρος της } \left|\varphi(k)\right|^2 : \text{Από τις (5.20) και (5.14)} : \dfrac{1}{2\sigma_k^{\ 2}} = \dfrac{1}{\lambda} \Rightarrow \Delta k = \sigma_k = \left(\dfrac{1}{2}\lambda\right)^{\frac{1}{2}}\end{array}\right\} \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta k = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{2}} = \frac{1}{2}$$

Και επειδή $\Delta p = \hbar \Delta k$ συμπεραίνουμε ότι $\Delta x \Delta p = \dfrac{\hbar}{2}$

Εν ολίγοις, όσο πιο "στενή" είναι η Gaussian στο χώρο των θέσεων, τόσο πιο φαρδιά είναι στο χώρο των ορμών.

Αυτό είναι γενική ιδιότητα του μετασχηματισμού Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \tag{5.28}$$

Τα εύρη των $f(x)$ και $\tilde{f}(k)$, Δx και Δk αντίστοιχα, πληρούν τη συνθήκη $\Delta x \Delta k >\sim 1$

Ευριστικά, μπορούμε να δούμε ότι αυτό ισχύει ως εξής:

έστω ότι η $\tilde{f}(k)$ έχει κάποιο ακρότατο στο k_0. Αναπτύσσοντας την $\tilde{f}(k)$ γύρω από το k_0:

$$\tilde{f}(k) = \tilde{f}(k_0) + \delta k \tilde{f}'(k_0) + \frac{1}{2!}\delta k^2 \tilde{f}''(k_0)$$

Έστω ότι η $\tilde{f}(k)$ είναι συμμετρική γύρω από το k_0, δηλ. $k = k_0 + u$. Η (5.28) γράφεται

$$f(x) = \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k_0 + u) e^{iux} du$$

Βλέπουμε ότι η συνάρτηση στο ολοκλήρωμα θα έχει μεγάλες ταλαντώσεις (και άρα θα «σβήνει») εκτός από την περιοχή $\Delta u \Delta x <\sim 1$.

3. <u>Ελεύθερο σωμάτιο και χρονική εξέλιξη</u>

Έστω ότι για $t = 0$, η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων δίδεται από την (5.19).

Πως θα εξελιχθεί η $\psi(x,0)$ στο χρόνο;

$$\psi(x,0) = Ae^{ikx}, \qquad k = p/\hbar \rightarrow \psi(x,t) = Ae^{ikx}e^{-i\omega t}$$

Η ταχύτητα φάσης του κύματος είναι

$$\upsilon_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m} = \upsilon_{\sigma\omega\mu}/2$$

Επομένως δεν μπορεί να έχουμε $\omega = (\text{σταθ}) \cdot k$. Για να «διαδοθεί» η $\psi(x,0)$ κάτι πρέπει να περιορισθεί χωρικά, δηλαδή δεν μπορεί να αποτελείται από μόνο ένα επίπεδο κύμα (δηλ. μια ορμή, έστω k_0) αλλά από άθροισμα ορμών:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}(k)e^{ikx}dk$$

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=e^{-it\hat{H}/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}dke^{ikx}\tilde{\psi}(k)\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{+\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}(k)\left(e^{-it\hat{H}/\hbar}e^{ikx}\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}(k)e^{i(kx-\omega t)}\end{aligned}\tag{5.29}$$

3.1 <u>Πακέτο Gaussian</u>

Ας πάρουμε την περίπτωση του Gaussian πακέτου:

$$\psi(x,0)=\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\lambda x^2/2}$$

για το οποίο βρήκαμε

$$\tilde{\psi}(p)=\frac{1}{\left(\lambda\pi\hbar^2\right)^{1/4}}\cdot e^{-p^2/2\lambda\hbar^2}\quad \text{ή}\quad \tilde{\psi}(k)=\frac{1}{(\pi\lambda)^{1/4}}\cdot e^{-k^2/2\lambda}$$

Από την (5.29) παίρνουμε:

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(\lambda\pi)^{1/4}}\cdot e^{-k^2/2\lambda}\cdot e^{ikx}\cdot e^{-i\left(\hbar k^2/2m\right)t}dk\\&=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\cdot\frac{1}{(\lambda\pi)^{1/4}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-\left(\frac{1}{2\lambda}+\frac{i\hbar t}{2m}\right)k^2+ixk\right\}dk\\&=\mathrm{N}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-ak^2+bk\right\}dk=\mathrm{N}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{a}}\cdot e^{+b^2/4a}\end{aligned}$$

όπου θέσαμε $N=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\cdot\frac{1}{(\lambda\pi)^{1/4}}$, $a=\frac{1}{2\lambda}+\frac{i\hbar t}{2m}$ και $b=ix$.

Για να εφαρμόσουμε την (5.26), υπολογίζουμε τον εκθετικό όρο:

$$e^{\beta^2/4a}=\exp\left(-\frac{x^2}{4\cdot\left(\frac{1}{2\lambda}+\frac{i\hbar t}{2m}\right)}\right)=\exp\left(-\lambda(t)x^2/2\right)$$

όπου ορίσαμε το $\lambda(t)$:

$$\lambda(t)=\left(\frac{1}{\lambda}+\frac{i\hbar t}{m}\right)^{-1}=\frac{m\lambda}{m+i\hbar\lambda t}$$

Επομένως, με χρήση της (5.26), έχουμε:

$$\psi(x,t)=\mathrm{N}(t)\cdot e^{-\lambda(t)x^2/2}\tag{5.30}$$

Η πυκνότητα πιθανότητας είναι

$$\Rightarrow \left|\psi(x,t)\right|^2 = \left|\mathrm{N}(t)\right|^2 \cdot e^{-\lambda(t)x^2/2} . e^{-\lambda^*(t)x^2/2}$$
$$= \left|\mathrm{N}(t)\right|^2 \cdot e^{-\left(\lambda(t)+\lambda^*(t)\right)x^2/2}$$
$$= \left|N(t)\right|^2 \cdot e^{-\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}x^2}$$

$$\lambda(t) = \frac{m\lambda}{m+i\lambda\hbar t} = \frac{m\lambda(m-i\lambda\hbar t)}{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2} = \frac{m^2\lambda}{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2} - i\frac{m\lambda^2\hbar t}{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2}$$

Επομένως

$$\mathrm{Re}\{\lambda(t)\} = \frac{m^2\lambda}{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2}$$

και άρα

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \left|\mathrm{N}(t)\right|^2 \cdot e^{-\left(m^2\lambda/\left(m^2+\lambda^2\hbar^2t^2\right)\right)x^2} \tag{5.31}$$

όπου

$$\left|\mathrm{N}\right|^2 = \frac{1}{2\pi}\cdot\frac{1}{(\lambda\pi)^{1/2}}\cdot\left|\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2\lambda}+\frac{i\hbar t}{2m}}}\right|^2 = \frac{1}{2\pi}\cdot\frac{1}{\sqrt{\lambda\pi}}\cdot\frac{\pi\cdot 2\lambda m}{\left|m+i\lambda\hbar t\right|}$$
$$= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\frac{m}{\sqrt{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2}} = \sqrt{\frac{\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}}{\pi}}$$

Η πυκνότητα πιθανότητας στο χώρο είναι

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \left[\frac{\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}}{\pi}\right]^{1/4} e^{-\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}x^2} \tag{5.32}$$

Το εύρος στο x, δίδεται ως:

$$2\sigma_x^{\ 2}(t) = \frac{1}{\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}} \Rightarrow \sigma_x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\,\mathrm{Re}\{\lambda(t)\}}} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\cdot\sqrt{\frac{m^2+\lambda^2\hbar^2t^2}{m^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\cdot\sqrt{1+\frac{\lambda^2\hbar^2t^2}{m^2}}$$

και εφόσον $\Delta x_0 = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$, αντικαθιστώντας το λ βρίσκουμε τη διασπορά στο x σε χρόνο t, Δx_t, ως συνάρτηση της διασποράς σε χρόνο 0, Δx_0, ως:

$$\Delta x_t = (\Delta x_0)\cdot\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4(\Delta x_0)^4 m^2}}$$

Βλέπουμε ότι όσο περνάει ο χρόνος, η αβεβαιότητα στο x αυξάνεται: το κυματοπακέτο «απλώνεται» στο χώρο.

Μπορούμε να εφαρμόσουμε το αποτέλεσμα αυτό στην περίπτωση ενός ηλεκτρονίου σε άτομο υδρογόνου. Θεωρούμε ότι με κάποιο τρόπο περιορίζουμε το ηλεκτρόνιο στο 1/100 της $a_0 = 10^{-2}\overset{0}{\mathrm{A}} = 10^{-10}\mathrm{cm}$, $m_e = 10^{-30}kg = 10^{-27}g$

$$\frac{\hbar t}{2m\left(\Delta x_0\right)^2} = \frac{1{,}1\cdot 10^{-27}\cdot t}{2\cdot 10^{-27}\cdot 10^{-20}} = 10^{20}t$$

$$\Rightarrow \left(\Delta x\right)_t = \left(\Delta x_0\right)\sqrt{1+10^{40}t^2} = \left(\Delta x_0\right)\cdot 10^{20}t \text{ (ένας τρομακτικός αριθμός!)}$$

Η "περίοδος" της κίνησης του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου είναι:

$$T = \frac{2\pi a_0}{v} = \frac{2\pi a_0}{\alpha c} = 10^{-16}s$$

Σε μια περίοδο, $\left(\Delta x\right)_t = 10^4\Delta x_0 = 100a_0$ δηλ. το κυματοπακέτο του ηλεκτρονίου έχει απλωθεί τόσο πολύ που η αβεβαιότητα στη θέση είναι $\Delta x_t = 100$ ακτίνες!

Θεωρείστε τώρα ένα κόκκο σκόνης με μάζα 1 mg και ακρίβεια θέσης 1 mm και έστω ότι θέλουμε να δούμε τον κόκκο να αποκτά αβεβαιότητα $1^0/_{00}$ μεγαλύτερη. Ο χρόνος που θα απαιτηθεί γι' αυτό δίδεται ως:

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\hbar t}{2m\left(\Delta x_0\right)^2} \simeq \frac{1{,}1\cdot 10^{-27}\cdot t}{2\cdot 10^{-3}\cdot 10^{-2}} \simeq 10^{-22}t\\ &\Delta x_t = \Delta x_0\sqrt{1+10^{-44}t^2} = 1{,}001\Delta x_0\end{aligned}\right\} \Rightarrow 1+10^{-44}t^2 \sim \left(1{,}001\right)^2 \approx 1+2\times 10^{-3} \Rightarrow t \sim 10^{20}\sec \sim 10^{12} \text{ έτη(!)}$$

3.2 Γενικότερη θεώρηση της χρονικής εξέλιξης

Η συμπεριφορά του κυματοπακέτου στις (5.30) και (5.31) οφείλεται στη μη γραμμική εξάρτηση του ω από το k. Συγκεκριμένα, για ένα φωτόνιο με μόνο ένα μήκος κύματος λ_0, που αντιστοιχεί σε κυματαριθμό $k_0 = 2\pi/\lambda_0$, η χρονική εξάρτηση είναι πολύ διαφορετική. Από την (5.29), και με $\omega = ck$, έχουμε:

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}\left(k\right)e^{i\left(kx-ckt\right)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}\left(k\right)e^{ik\left(x-ct\right)} = \psi\left(x-ct,0\right) \qquad (5.33)$$

Εν ολίγοις, η συνάρτηση έχει απλώς μετακινηθεί προς τα δεξιά, κατά μια απόσταση $\Delta x = ct$.

Αντίθετα, για $\omega = \omega\left(k\right)$ όπου $\omega\left(k\right)$ μια μη γραμμική συνάρτηση, η (5.33) θα είναι

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}\left(k\right)e^{i\left(kx-\omega\left(k\right)t\right)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\tilde{\psi}\left(k\right)e^{ik\left(x-\frac{\omega\left(k\right)}{k}t\right)} \neq \psi\left(x-\frac{\omega\left(k\right)}{k}t\right) \qquad (5.34)$$

Η ταχύτητα μετάδοσης του κυματοπακέτου βρίσκεται αναπτύσσοντας το $\omega\left(k\right)$ σε σειρά κατά Taylor, γύρω από ένα μέγιστο της $\tilde{\psi}\left(k\right)$, έστω το k_0:

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2!}\left.\frac{d^2\omega}{dk^2}\right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \ldots$$

Με την αλλαγή μεταβλητής $k \to k - k_0 = k'$ στην (5.34), έχουμε:

$$\psi(x,t) = e^{ik_0 x} e^{-i\omega(k_0)t} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int dk' \tilde{\psi}(k') e^{ik'\left(x - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} t\right)} \tag{5.35}$$

και βλέπουμε ότι η ταχύτητα μετάδοσης της $\tilde{\psi}(k)$ είναι

$$\upsilon_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0}$$

Ο όρος έξω από το ολοκλήρωμα, δίνει τη φάση του κύματος:

$$e^{i(k_o x - \omega(k_0)t)}$$

αφού το $\omega(k_o)$ είναι ένας συγκεκριμένος αριθμός.

4. <u>Χώρος ορμών</u>

Θεώρημα Parseval: ο μετασχηματισμός Fourier διατηρεί το μέτρο, δηλαδή

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k)\psi(k)dk \tag{5.36}$$

Η (5.36) θα πρέπει να ισχύει αν, όντως, η $\tilde{\psi}(k)$ είναι η κυματοσυνάρτηση στον χώρο των ορμών.

Απόδειξη της (5.36):

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k_1)e^{+ik_1x}dk_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k_2)e^{-ik_2x}dk_2 \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_1\tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2\psi(k_2)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_1-k_2)x}dx \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_1\tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2\psi(k_2)2\pi\delta(k_1-k_2) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1\tilde{\psi}^*(k_1)\psi(k_1)
\end{aligned}$$

Επίσης, εφόσον η $\tilde{\psi}(k)$ είναι η κυματοσυνάρτηση στο χώρο της ορμής, θα πρέπει να ισχύει:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p)\hat{p}\tilde{\psi}(p)dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p)p\psi(p)dp$$

Αυτό αποδεικνύεται ξεκινώντας από τον υπολογισμό της $\langle p \rangle$ στο χώρο των θέσεων:

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\,dx \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k_1) e^{-ik_1x} dk_1 \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(k_2) e^{+ik_2x} dk_2 \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \psi(k_2)\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ik_1x}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{+ik_2x} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \psi(k_2)\hbar k_2 2\pi\delta(k_2-k_1) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1)\hbar k_1 \psi(k_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^*(p)\, p\psi(p)
\end{aligned}
$$

Και ο τελεστής της θέσης στον χώρο των ορμών; Αυτός βρίσκεται από το θεώρημα μέσης τιμής του $\hat{x}$:

$$
\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x)\,dx = \frac{1}{2\pi}\int dx \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1) e^{-ik_1x}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 x\tilde{\psi}(k_2) e^{+ik_2x}
$$

Γράφοντας $xe^{ik_2x} = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k_2}\left(e^{ik_2x}\right)$, το ολοκλήρωμα ως προς k_2 μπορεί να γραφεί ως:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 x\tilde{\psi}(k_2) e^{ik_2x} &= \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \tilde{\psi}(k_2)\frac{\partial}{\partial k_2}\left(e^{ik_2x}\right) \\
&= \frac{1}{i}\tilde{\psi}(k_2) e^{ik_2x}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_2x}\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial k_2} dk_2
\end{aligned}
$$

Ο πρώτος όρος μηδενίζεται (η κυματοσυνάρτηση πρέπει να τείνει στο 0 όταν k τείνει στο άπειρο). Αντικαθιστώντας στην εξίσωση για το $\langle x \rangle$ έχουμε:

$$
\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 i\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial k_2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{2\pi} e^{i(k_2-k_1)x} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1)\int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 i\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial k_2}\delta(k_2-k_1) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \tilde{\psi}^*(k_1) i\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial k_1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k)\left(i\frac{\partial}{\partial k}\right)\tilde{\psi}(k)
\end{aligned}
$$

Αλλάζοντας τη μεταβλητή k σε $\hbar k = p$, συμπεραίνουμε ότι στο χώρο των ορμών,

$$
\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \qquad \hat{p} = p
$$

Να θυμηθούμε ότι στον χώρο των θέσεων ισχύει

$$
\hat{x} = x \qquad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}
$$

Τι παραμένει αναλλοίωτο; Η σχέση μετάθεσης:

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

Όντως, είναι εύκολο να επιβεβαιώσουμε ότι ισχύει στον χώρο των ορμών. Έστω μια συνάρτηση της ορμής, $g(p)$:

$$\left[\hat{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{p}}\right]g(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\left(pg(p)\right) - pi\hbar\frac{\partial}{\partial p}\left(g(p)\right) = i\hbar g(p) \tag{5.37}$$

Και εφόσον η (5.37) ισχύει για $\forall g(p)$ συμπεραίνουμε ότι $\left[\hat{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{p}}\right] = i\hbar$.

5. <u>Εναλλακτική θεώρηση του ελεύθερου σωματιδίου</u>

Μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα της εύρεσης των καταστάσεων ενός ελεύθερου σωματιδίου θεωρώντας ότι, καταρχήν, το σωμάτιο είναι δεσμευμένο στην περιοχή $[-L/2, L/2]$ μέσω ενός απειρόβαθου δυναμικού, δηλαδή μέσω ενός δυναμικού που παίρνει τιμές ∞ για $|x| > L/2$ και να πάρουμε (στο τέλος του οποιουδήποτε υπολογισμού μας ενδιαφέρει) το όριο $L \to \infty$.

Έχουμε δει ότι οι ιδιοσυναρτήσεις της Hamiltonian δίδονται ως

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L} + \frac{n\pi}{2}\right) \tag{5.38}$$

Για $n = 2m$, με $m = 1,2,3,\ldots$, και αφού $\sin(m\pi) = 0$ και $\cos(m\pi) = (-1)^m$, η σχέση (5.38) δίνει

$$\varphi_{n=2m}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2m\pi x}{L}\right) \tag{5.39}$$

Για $n = 2m-1$, με $m = 1,2,3\ldots$, έχουμε $\sin\left(\frac{2m-1}{2}\pi\right) = (-1)^{m+1}$ και $\cos\left(\frac{2m-1}{2}\pi\right) = 0$.

Επομένως,

$$\varphi_{n=2m-1}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{2m\pi x}{L} - \frac{\pi x}{L}\right) \tag{5.40}$$

Η κρίσιμη παρατήρηση εδώ είναι ότι στο όριο $L \to \infty$ μόνο πολύ μεγάλοι αριθμοί $n \to \infty$ θα έχουν σημασία αφού μόνο γι' αυτούς ο λόγος $n\pi x/L$ μπορεί να μην είναι μηδέν και για πεπερασμένες τιμές του x. Έτσι ο όρος $\pi x/L$ στην σχ. (5.40) φαίνεται να μην έχει σημασία για τα τελικά αποτελέσματα (για $x = \pm L/2$ η σχ. (5.40) γίνεται $(-1)^m\sqrt{2/L}$ και επομένως μηδενίζεται στο όριο $L \to \infty$). Από την ανάλυση αυτή φαίνεται ότι οι κυματοσυναρτήσεις (5.39) και (5.40) δεν είναι παρά γραμμικοί συνδυασμοί των $e^{2im\pi x/L}/\sqrt{L}$ και $e^{-2im\pi x/L}/\sqrt{L}$.

Η πιο γενική συνάρτηση η οποία περιγράφει ένα σωμάτιο στο δυναμικό του προηγουμένου προβλήματος είναι (λόγω της πληρότητας και ορθοκανονικότητας των ιδιοσυναρτήσεων της Hamiltonian)

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty} c_n\sin\left(\frac{n\pi x}{L} + \frac{n\pi}{2}\right) \tag{5.41}$$

όπου

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L} + \frac{n\pi}{2}\right) \tag{5.42}$$

Με λίγη άλγεβρα[1] και χρησιμοποιώντας τις προσεγγίσεις της ανάλυσης που προηγήθηκε είναι εύκολο να δείξουμε ότι

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m e^{2im\pi x/L} \tag{5.43}$$

όπου

$$b_m = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-2im\pi x/L} \psi(x) \tag{5.44}$$

Συνοψίζοντας τις τελευταίες σχέσεις θα λέγαμε (έχοντας πάντα στο μυαλό μας ότι μας ενδιαφέρει το όριο $L \to \infty$) ότι μπορούμε να περιγράψουμε ένα ελεύθερο σωμάτιο αν στείλουμε τα όρια του απειρόβαθου πηγαδιού στο άπειρο και χρησιμοποιήσουμε ως ιδιοσυναρτήσεις της Hamiltonian τις $\varphi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2im\pi x/L}$ οι οποίες αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων.

Είναι φανερό ότι στο όριο $L \to \infty$ η μεταβλητή $k = \frac{2\pi}{L} m$ είναι σχεδόν συνεχής όταν $m \to m+1$, $k \to k + \frac{2\pi}{L}$ και επομένως η μεταβολή της είναι $\delta k = \frac{2\pi}{L} \to 0$.

Ξαναγράφοντας τώρα τις (5.43) και (5.44) :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\sqrt{\delta k} b_m) e^{i(m\delta k)x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta k f(m\delta k) e^{i(m\delta k)x} \tag{5.45}$$

όπου θέτουμε

$$\sqrt{\delta k} b_m = \delta k f\left(m\delta k\right)$$

Η αντίστροφη σχέση, δίδεται ως

$$\sqrt{\delta k} b_m = \frac{\delta k}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-i(m\delta k)x} \psi(x) \equiv \delta k f(m\delta k) \tag{5.46}$$

Το όριο $L \to \infty$ είναι τώρα εύκολο, και παίρνοντας $m\delta k = k$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx} \quad , \quad f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-ikx} \tag{5.47}$$

Αναγνωρίζουμε και πάλι, στις σχέσεις (5.47) δυο συναρτήσεις, $\psi\left(x\right)$ και $f\left(k\right)$: η μια είναι ο μετασχηματισμός Fourier της άλλης. Είναι βολικό να αλλάξουμε μεταβλητές $k = p/\hbar$ και να γράψουμε:

[1] Λεπτομέρειες στο Μαθηματικό Συμπλήρωμα

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}g(p)e^{ipx/\hbar} \quad , \quad g(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x)e^{-ipx/\hbar} \tag{5.48}$$

Να παρατηρήσουμε εδώ ότι η κανονικοποίηση των $g(p)$ και $f(k)$ είναι τέτοια ώστε

$$g(p)=\frac{1}{\sqrt{\hbar}}f\left(\frac{p}{\hbar}\right)$$

6. <u>Περίληψη</u>

Για να περιγράψουμε μια κατάσταση συγκεκριμένης ορμής, p, στο χώρο των θέσεων, χρησιμοποιούμε τις ιδιοσυναρτήσεις

$$\varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \tag{5.49}$$

όπου η μεταβλητή p είναι συνεχής.

Οι (5.49), ως ιδιοσυναρτήσεις ερμιτιανού τελεστή (του $\hat{p}$), είναι κάθετες μεταξύ τους:

$$\int\varphi_p^{*}(x)\varphi_{p'}(x)dx=\delta(p-p')$$

Σημειώνεται ότι η ενέργεια που αντιστοιχεί στην $\varphi_p(x)$ είναι επίσης συνεχής:

$$E_p=\frac{p^2}{2m} \tag{5.50}$$

Όπου, δε, προκύπτουν προβλήματα ερμηνείας, (π.χ. η (5.49) δεν είναι κανονικοποιήσιμη: $\int_{-\infty}^{\infty}dx\left|\varphi_p(x)\right|^2=\int_{-\infty}^{\infty}dx=\infty$), θα σκεπτόμαστε την κατάσταση ως οριακή συμπεριφορά ενός σωματιδίου σε ένα απειρόβαθο πηγάδι του οποίου τα "τοιχώματα" έχουν τραβηχτεί έως το άπειρο…

7. Μαθηματικό συμπλήρωμα. Σειρές Fourier, μετασχηματισμός Fourier και συνάρτηση δέλτα.

7.1 Συναρτήσεις σε περατό διάστημα

Έστω μια συνεχής (και σχετικά ομαλή) συνάρτηση $f(x)$, $x \in [0, L]$ με $f(0) = f(L) = 0$. Μια τέτοια συνάρτηση μπορεί πάντα να γραφεί ως άπειρη σειρά ημιτόνων:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{5.51}$$

όπου

$$A_n = \frac{2}{L}\int_0^L dx f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{5.52}$$

Για να ελέγξουμε τον ισχυρισμό αυτό ας ξεκινήσουμε από την (5.51), την οποία πολλαπλασιάζουμε με $\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)$ και ολοκληρώνουμε:

$$\int_0^L dx f(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_0^L dx \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{5.53}$$

Χρησιμοποιώντας $2\sin a \sin b = \cos(a-b) - \cos(a+b)$, το τελευταίο ολοκλήρωμα χωρίζεται σε δύο μέρη:

$$\int_0^L dx \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{1}{2}\int_0^L dx \cos\left(\frac{m-n}{L}\pi x\right) - \frac{1}{2}\int_0^L dx \cos\left(\frac{m+n}{L}\pi x\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{L}{\pi(m-n)} \sin\left(\frac{m-n}{L}\pi x\right)\Bigg|_0^L - \frac{1}{2}\frac{L}{\pi(m+n)} \sin\left(\frac{m+n}{L}\pi x\right)\Bigg|_0^L =$$

$$= \frac{L}{2}\left\{\frac{\sin\left[\pi(m-n)\right]}{\pi(m-n)} - \frac{\sin\left[\pi(m+n)\right]}{\pi(m+n)}\right\} \tag{5.54}$$

Ο τελευταίος όρος της (5.54) είναι πάντα μηδέν αφού το άθροισμα $m+n$ είναι πάντα ένας θετικός ακέραιος. Ο πρώτος όρος είναι κι αυτός μηδέν αν $m \neq n$. Για $m = n$ το αποτέλεσμα είναι $L/2$.

Συνοψίζοντας:

$$\frac{2}{L}\int_0^L dx \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \delta_{mn} \equiv \begin{cases} 1 & \text{αν } m = n \\ 0 & \text{αν } m \neq n \end{cases} \tag{5.55}$$

Η σχέση (5.55) δείχνει ότι οι συναρτήσεις $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ είναι ορθοκανονικές:

$$\int_0^L dx \varphi_m(x)\varphi_n(x) = \delta_{m,n}$$

Τέλος, αντικαθιστώντας στην (5.53), έχουμε τη σχέση $\int_0^L dx f(x)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) = \frac{L}{2}\sum_{n=1}^{\infty} A_n \delta_{mn} = \frac{L}{2} A_m$, που αποδεικνύει την (5.52).

Για την πλήρη απόδειξη της ανάλυσης (5.51)-(5.52) πρέπει να πάμε και αντίστροφα: Από τη σχέση (5.52) να καταλήξουμε στην (5.51). Επειδή αυτό είναι πιο πολύπλοκο το αφήνουμε για την ώρα και, οπλισμένοι με το θάρρος του υπολογισμού που ήδη κάναμε, θεωρούμε το ζευγάρι των σχέσεων (5.51)-(5.52) δεδομένο.

7.2 <u>Περιοδικές συναρτήσεις</u>

Την προηγούμενη λογική μπορούμε να την εφαρμόσουμε και σε άλλες περιπτώσεις όπως, ας πούμε, σε συνεχείς συναρτήσεις $f(x)$, $x \in [-L, L]$ για τις οποίες ισχύει ότι $f(-L) = f(L)$.

Εδώ ο ισχυρισμός είναι ότι οποιαδήποτε τέτοια συνάρτηση μπορούμε να τη γράψουμε

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{5.56}$$

όπου

$$\begin{aligned} &n = 1, 2, \ldots : A_n = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} dx f(x)\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\ B_n = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} dx f(x)\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\ &n = 0 : B_0 = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dx f(x) \end{aligned} \tag{5.57}$$

Μπορεί κανείς να ελέγξει τη διαδρομή (5.56)$\rightarrow$(5.57) ακολουθώντας τη λογιστική του προηγουμένου παραδείγματος αλλά, για λόγους που θα φανούν στη συνέχεια, θα προχωρήσουμε λίγο διαφορετικά.

Γράφοντας

$$\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{1}{2i}\left(e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L}\right), \quad \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{1}{2}\left(e^{in\pi x/L} + e^{-in\pi x/L}\right)$$

η σχέση (5.56) θα πάρει τη μορφή:

$$\begin{aligned} f(x) &= B_0 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}(B_n - iA_n)e^{in\pi x/L} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}(B_n + iA_n)e^{-in\pi x/L} = \\ &= B_0 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}(B_n - iA_n)e^{in\pi x/L} + \frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{-1}(B_{-n} + iA_{-n})e^{in\pi x/L} \end{aligned} \tag{5.58}$$

Από τις σχέσεις (5.57) βλέπουμε ότι $A_{-n} = -A_n$, $A_0 = 0$ και $B_{-n} = B_n$. Επομένως,

$$f(x) = B_0 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}(B_n - iA_n)e^{in\pi x/L} + \frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{-1}(B_n - iA_n)e^{in\pi x/L} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L} \tag{5.59}$$

όπου

$$a_n = \frac{1}{2}\left(B_n - iA_n\right) = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dxf\left(x\right)\left[\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) - i\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right] = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dxf\left(x\right)e^{-in\pi x/L} \tag{5.60}$$

Ξαναγράψαμε, επομένως, τις σχέσεις (5.56) και (5.57) με τη μορφή

$$f\left(x\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L}, \quad a_n = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dxf\left(x\right)e^{-in\pi x/L} \tag{5.61}$$

Αν θεωρήσουμε δεδομένη την πρώτη απ' αυτές είναι εύκολο να αποδείξουμε τη δεύτερη:

$$\int_{-L}^{L} dxe^{-i\pi mx/L} f\left(x\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \int_{-L}^{L} dxe^{i\pi(n-m)x/L} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \frac{L}{i\pi\left(n-m\right)} e^{i\pi(n-m)x/L}\Big|_{-L}^{+L} =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \frac{L}{i\pi\left(n-m\right)}\left(e^{i\pi(n-m)} - e^{-i\pi(n-m)}\right) = 2L\sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \frac{\sin\left[\pi\left(n-m\right)\right]}{\pi\left(n-m\right)} = 2L\sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \delta_{m,n} = 2La_m$$

Είναι συνηθισμένο (αλλά όχι απαραίτητο) να χρησιμοποιούμε μια πιο «συμμετρική» γραφή, στην οποία ο παράγοντας $2L$ στην (5.61) μοιράζεται σε δυο ίσους παράγοντες $\sqrt{2L}$:

$$f\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2L}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n e^{in\pi x/L}, \quad b_n = \frac{1}{\sqrt{2L}}\int_{-L}^{L} dxf\left(x\right)e^{-in\pi x/L} \tag{5.62}$$

Με τη γνωστή ορολογία, οι συναρτήσεις

$$\varphi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{in\pi x/L}$$

αποτελούν ένα **ορθοκανονικό** σύνολο συναρτήσεων: $\int_{-L}^{L} dx\varphi_n\left(x\right)\varphi_m^*\left(x\right) = \delta_{n,m}$

Και εδώ, όπως και στο πρώτο παράδειγμα, η αντίστροφη διαδρομή είναι πιο απαιτητική και την αφήνουμε για την ώρα.

7.3 <u>Συναρτήσεις σε άπειρο διάστημα</u>

Οι σχέσεις (5.62) μπορούν να επεκταθούν και στην περίπτωση που $L \to \infty$. Αυτό γίνεται μέσω μιας οριακής διαδικασίας την οποία ξεκινάμε γράφοντας $\pi / L = \delta k$ και επομένως δίνοντας στις (5.62) τη μορφή:

$$f\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\sqrt{\delta k} b_n\right)e^{i(n\delta k)x}, \quad \sqrt{\delta k} b_n = \frac{\delta k}{\sqrt{2\pi}}\int_{-L}^{L} dxf\left(x\right)e^{-i(n\delta k)x} \equiv \delta k\tilde{f}\left(n\delta k\right) \tag{5.63}$$

Μπορούμε τώρα να πάρουμε το όριο $\delta k \to 0$:

$$f\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta k\tilde{f}\left(n\delta k\right)e^{i(n\delta k)x} \underset{\delta k \to 0}{=} \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\tilde{f}\left(k\right)e^{ikx} \tag{5.64}$$

Η δε αντίστροφη εξίσωση είναι:

$$\tilde{f}(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}f(x)e^{-ikx} \qquad (5.65)$$

Το ζευγάρι των σχέσεων (5.64)-(5.65) ορίζει τον μετασχηματισμό Fourier και τον αντίστροφό του. Παρόλο που η πορεία που ακολουθήσαμε είναι, ίσως, ικανή να μας πείσει για την ισχύ των σχέσεων αυτών η άμεση απόδειξή τους είναι λίγο πιο πολύπλοκη εργασία.

7.4 <u>Συνάρτηση δέλτα</u>

Θέλουμε η $"\delta"_{b,a}$, όπου b,a πραγματικοί αριθμοί, να πληροί τη σχέση

$$\int da\, c(a)"\delta"_{b,a}=c(b)$$

για κάθε συνάρτηση $c(a)$. Αυτός είναι ο ορισμός της «συνάρτησης δέλτα» του Dirac. Αντί του $"\delta"_{a,b}$ γράφουμε $\delta(a-b)$.

Η Dirac-δ είναι κατανομή που ορίζεται από τις εξής δυο ιδιότητες:

$$\begin{aligned} &a)\ \delta(a-b)=0 \quad \forall a\neq b \\ &b)\ \int_{-\infty}^{+\infty}f(a)\delta(a-b)da=f(b) \quad \forall f(a) \end{aligned} \qquad (5.66)$$

Στην ειδική περίπτωση $f(a)=1$, η (b) στην (5.66) δίνει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(a-b)da=1$$

Επομένως, η Dirac-δ αναπαριστά μια συνάρτηση που είναι μηδέν παντού εκτός από ένα σημείο (στο σημείο όπου η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι μηδέν). Το δε ολοκλήρωμα της Dirac-δ είναι 1.

Για να χρησιμοποιήσουμε ένα συμβολισμό πιο "εύκολο" στο μάτι, ξαναγράφουμε τις (5.66) χρησιμοποιώντας το x ως εσωτερική μεταβλητή της ολοκλήρωσης:

$$\delta(x-x_0)=0 \ \ \forall x\neq x_0 \quad \text{και} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)f(x)=f(x_0) \qquad (5.67)$$

Η (5.67) θα πρέπει να ισχύει και για μικρότερο εύρος ολοκλήρωσης, αφού για $\forall x\neq x_0$, η $\delta(x-x_0)=0$. Άρα αρκεί να ολοκληρώσουμε *γύρω* από το σημείο x_0 ώστε να ισχύει η (5.67):

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\delta(x-x_0)f(x)=f(x_0)$$

και φυσικά

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\delta(x-x_0)=1$$

Η "συνάρτηση" δέλτα είναι αυτό που ονομάζεται **γενικευμένη συνάρτηση** ή **κατανομή**: Ορίζεται μόνο μέσω της ολοκλήρωσης της, δηλαδή μέσω της (5.67), για οποιαδήποτε συνάρτηση $f(x)$ (η οποία στη γειτονιά του x_0 είναι ομαλή). Είναι προφανές από τον ορισμό ότι η συνάρτηση δ έχει μη μηδενική συνεισφορά μόνο στη γειτονιά του σημείου x_0.

Για να αποκτήσουμε μια αίσθηση της συνάρτησης αυτής θεωρούμε τη διακριτή έκδοση του ολοκληρώματος (5.67):

$$\sum_n \varepsilon f(n\varepsilon)\delta(n\varepsilon - m\varepsilon) = f(m\varepsilon) \qquad (5.68)$$

Στην (5.68) διακριτοποιήσαμε μια περιοχή γύρω από το x_0 με βήμα ε: $x_0 = m\varepsilon$ και το x διατρέχει τις τιμές $n\varepsilon$, όπου το n "τρέχει" και αθροίζεται. Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα:

$$\sum_n f(n\varepsilon)\delta_{nm} = f(m\varepsilon) \qquad (5.69)$$

όπου δ_{mn} το σύμβολο του Kronecker: $\delta_{nm} \equiv 1$ για $n = m$ και 0 για $n \neq m$, βλέπουμε ότι οι (5.68) και (5.69) δίνουν

$$\delta(n\varepsilon - m\varepsilon) = \frac{\delta_{nm}}{\varepsilon} \qquad (5.70)$$

Τέλος η συνάρτηση δ ανακτάται από την (5.70) στο όριο $\varepsilon \to 0$. Η (5.70) μας μαθαίνει αρκετά πράγματα για τη συνάρτηση δ, πάντα στο όριο $\varepsilon \to 0$:

1) Όταν $n \neq m$ μπορούμε στην (5.70) να πάρουμε το όριο $\varepsilon \to 0$ και επομένως να βγάλουμε το συμπέρασμα ότι $\delta(x - y) = 0$ όταν $x \neq y$.

2) Όταν $n = m$ το όριο $\varepsilon \to 0$ οδηγεί την (5.70) σε απειρισμό και επομένως δεν μπορούμε να ορίσουμε τη συνάρτηση $\delta(x - y)$ όταν $x = y$. Εντούτοις το όριο

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \sum_n \varepsilon f(n\varepsilon) \frac{\delta_{nm}}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} f(m\varepsilon) = f(x_0)$$

είναι υπαρκτό και αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο λειτουργεί ο ορισμός (5.67).

Αντιλαμβανόμαστε λοιπόν ότι για την αναπαράσταση της Dirac-δ χρειαζόμαστε μια οριακή διαδικασία, που δεν είναι κατ' ανάγκη η διακριτοποίηση του ολοκληρώματος. Εκείνο που χρειάζεται είναι να βρούμε μια (συνηθισμένη) συνάρτηση $\delta(x - x_0, \varepsilon)$ η οποία να είναι τέτοια ώστε

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \delta(x - x_0, \varepsilon) = 0 \text{ για } x \neq x_0 \text{ και } \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x - x_0, \varepsilon) = f(x_0) \qquad (5.71)$$

Οποιαδήποτε τέτοια συνάρτηση ορίζει την Dirac-δ:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x - x_0, \varepsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x - x_0) \equiv f(x_0) \qquad (5.72)$$

Είναι προφανές ότι μπορούμε να βρούμε πολλές συναρτήσεις που να αναπαραστούν τη δ-συνάρτηση (με την έννοια της (5.71)).

7.4.1 <u>Αναπαραστάσεις της δ</u>

Η Dirac-δ δεν είναι μια «κανονική συνάρτηση», αλλά μια κατανομή. Υπάρχουν άπειρες αναπαραστάσεις της Dirac-δ:

1) Η γνωστή καμπύλη ενός συντονισμού:

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{(x-x_0)^2+\varepsilon^2} \tag{5.73}$$

Όσο μικρότερο το ε, τόσο πιο μικρή είναι και η περιοχή του x στην οποία η $\delta(x-x_0)$ έχει μεγάλες τιμές. Ωστόσο, όσο μικρό και να πάρουμε το ε, το ολοκλήρωμα της $\delta(x-x_0)$ είναι 1:

$$\int dx\,\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int dx\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2+(x-x_0)^2}=\frac{1}{\pi\varepsilon}\lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{dx}{1+(x-x_0)^2/\varepsilon^2}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{d(x-x_0)/\varepsilon}{1+(x-x_0)^2/\varepsilon^2}=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int\frac{dy}{1+y^2}=\frac{1}{\pi}\tan^{-1}(y)|_{-\infty}^{+\infty}=1$$

2) Ως δεύτερο παράδειγμα μπορούμε να αναφέρουμε τη συνάρτηση

$$\delta(x-x_0,\varepsilon)=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\pi}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\varepsilon}\right] \tag{5.74}$$

που έχει τη μορφή κατανομής Gauss τόσο πιο συγκεντρωμένης γύρω από το x_0 όσο πιο μικρό γίνεται το ε. Ο συντελεστής μπροστά από το εκθετικό φροντίζει για την κανονικοποίηση και επομένως θα πρέπει

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}dx\delta(x-x_0,\varepsilon)=1 \tag{5.75}$$

Χρησιμοποιώντας το γνωστό γκαουσιανό ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\alpha x^2}=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ πιστοποιούμε εύκολα ότι επιλέξαμε τον συντελεστή στην (5.74) ώστε να ικανοποιείται η (5.75). Ας δούμε τώρα το ολοκλήρωμα της (5.74) με κάποια τυχαία συνάρτηση $f(x)$:

$$I_\varepsilon(x_0)=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\varepsilon}\right] \tag{5.76}$$

Μπορούμε να αλλάξουμε μεταβλητές στο ολοκλήρωμα: $x=x_0+w\sqrt{\varepsilon}$ και να γράψουμε

$$I_\varepsilon(y)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dwf\left(x_0+w\sqrt{\varepsilon}\right)e^{-w^2}$$

αφού η συνάρτηση f δεν έχει πρόβλημα στη θέση x_0 μπορούμε να πάρουμε το όριο στην προηγούμενη σχέση

$$\lim_{\varepsilon\to 0}I_\varepsilon(x_0)=\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\delta(x-x_0,\varepsilon)=f(x_0)\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dwe^{-w^2}=f(x_0) \tag{5.77}$$

και επομένως πράγματι η συνάρτηση (5.74) αντιπροσωπεύει (με την έννοια της (5.72)) τη δ-συνάρτηση.

3) Άλλες αναπαραστάσεις της $\delta(x)$:

$$\delta(x)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} \tag{5.78}$$

$$\delta(x)=\lim_{a\to\infty}\frac{\sin^2(x)}{\pi a x^2} \tag{5.79}$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}dk \tag{5.80}$$

$$\delta(x-x_0)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\theta(x-x_0+\varepsilon)-\theta(x-x_0)}{\varepsilon}=\frac{d}{dx}\theta(x-x_0) \tag{5.81}$$

Απόδειξη της (5.80):

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}dk=\frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}e^{ikx}dk=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}=\delta(x)$$

Προφανώς, οι (5.74) έως (5.77) μετατρέπονται σε $\delta(x-x_0)$ με απλή αντικατάσταση $x\to x_0$. Ως παράδειγμα η (5.80) δίνει

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x_0)}dk$$

7.4.2 <u>Ιδιότητες της Dirac δ</u>

Ιδιότητες της στο $\delta(x)$:

1. $\delta(-x)=\delta(x)$ και $\delta(x-a)=\delta(a-x)$
2. $f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$
3. $\int_c^d \delta(a-x)\delta(x-b)dx=\delta(a-b)$ για $c\le a\le d,\ \ c\le b\le d$
4. $\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$
5. $\delta\left[f(x)\right]=\sum_i\frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i)$ όπου x_i οι ρίζες: $f(x_i)=0$
6. $x\delta(x)=0$
7. $x\delta'(x)=-\delta(x)$

Ενδεικτικές αποδείξεις:

- $\int x\delta(x)f(x)dx=\int\delta(x)\left[xf(x)\right]dx=\left[xf(x)\right]_{x=0}=0=\int 0 f(x)dx\Rightarrow x\delta(x)=0$
- $\int\delta(ax)f(x)dx=\frac{1}{|a|}\int\delta(y)f\left(\frac{y}{a}\right)dy=\frac{1}{|a|}f(0)=\frac{1}{|a|}\int\delta(x)f(x)dx\Rightarrow\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$
- Μετασχηματισμός Fourier: $\forall f(x)$ μπορεί να γραφτεί

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx}\tilde{f}(k)dk \tag{5.82}$$

δηλ. υπάρχει $\tilde{f}(k)$ που να πληροί την (5.82). Το θεώρημα Fourier δίνει την $\tilde{f}(k)$ ως συνάρτηση της $f(x)$:

$$\tilde{f}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}f(x)dx \tag{5.83}$$

Παίρνοντας $f(x)=\delta(x-x_0)$ και αντικαθιστώντας στην (5.83) παίρνουμε:

$$\tilde{f}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}\delta(x-x_0)dx=\frac{e^{-ikx_0}}{\sqrt{2\pi}}$$

Αντικαθιστώντας πίσω στην (5.82):

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx}\frac{e^{-ikx_0}}{\sqrt{2\pi}}dk=\frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x_0)}dk$$

- Παράγωγος της Dirac-δ:

$$\frac{d\delta(x)}{dx}=\delta'(x)=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}ke^{ikx}dk$$

Ο άλλος τρόπος υπολογισμού της παραγώγου είναι με ολοκλήρωση κατά παράγοντες:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta'(x-a)dx=f(x)\delta(x-a)\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}f'(x)\delta(x-a)dx=-f'(a)$$

δηλαδή $\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta'(x-a)dx=-f'(a)$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta''(x-a)dx=(-1)^2 f''(a)$$

και γενικά

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta^{(n)}(x-a)dx=(-1)^n f^{(n)}(a)$$

7.5 Αναπτύγματα Fourier

Ας ξαναγυρίσουμε στα αναπτύγματα Fourier για ορισμένες επιπλέον παρατηρήσεις. Θα ξεκινήσουμε, καταρχήν, από τη σχέση (5.52) και θα προσπαθήσουμε να φθάσουμε στην (5.51). Πολλαπλασιάζουμε την (5.52) με $\sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right)$ και αθροίζουμε:

$$\sum_{n=1}^{\infty}A_n\sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right)=\frac{2}{L}\int_0^L dxf(x)\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \tag{5.84}$$

Θα πρέπει τώρα να αποδείξουμε ότι το αποτέλεσμα είναι η συνάρτηση $f(y)$. Είναι προφανές ότι για να συμβαίνει αυτό θα πρέπει

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right)=\delta(x-y) \tag{5.85}$$

Η απόδειξη της τελευταίας έχει το δικό της ενδιαφέρον αλλά για τώρα ας τη θεωρήσουμε δεδομένη. Η (5.85) λέει ότι οι ορθοκανονικές συναρτήσεις $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ ικανοποιούν τη σχέση **πληρότητας**

$$\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_n(x)\varphi_n(y)=\delta(x-y) \tag{5.86}$$

και αποτελούν ένα **ορθοκανονικό** και **πλήρες** σύνολο συναρτήσεων.

Το σημαντικό εδώ είναι το εξής: οποιαδήποτε συνάρτηση, στο διάστημα $[0,L]$ είναι τέτοια ώστε $f(0)=f(L)=0$, μπορεί να γραφτεί ως:

$$f(x)=\int_0^L dyf(y)\delta(x-y)\underset{(6.48)}{=}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_n(x)\left[\int_0^L dyf(y)\varphi_n(y)\right]=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{5.87}$$

Με την ίδια λογική για να αποδείξουμε την (5.74) αρκεί να δείξουμε ότι το ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων $\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2L}}e^{in\pi x/L}$ είναι πλήρες:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\varphi_n(x)\varphi_n^*(y)=\frac{2}{L}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{in\pi(x-y)/L}=\delta(x-y) \tag{5.88}$$

Και εδώ δεν θα ασχοληθούμε με την απόδειξη της (5.88). Η ισχύς της, ωστόσο, είναι σημαντική γιατί χάρις σ' αυτήν, οποιαδήποτε συνάρτηση στο διάστημα $x\in[-L,L]$ ικανοποιεί τις συνοριακές απαιτήσεις $f(-L)=f(L)$, μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$f(x)\underset{(6.35)}{=}\int_{-L}^{L}dyf(y)\delta(x-y)\underset{(6.48)}{=}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_n(x)\left[\int_{-L}^{L}dyf(y)\varphi_n^*(y)\right]=\sum_{n=-\infty}^{\infty}a_ne^{in\pi x/L} \tag{5.89}$$

Τελειώνουμε με τον μετασχηματισμό Fourier.

Με δεδομένες τις σχέσεις (5.64) και (5.65), διαπιστώνουμε ότι

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\tilde{f}(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy}{\sqrt{2\pi}}e^{-iky}f(y)=\int_{-\infty}^{\infty}dyf(y)[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-y)}]$$

και επομένως

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-y)}=\delta(x-y) \tag{5.90}$$

Λίγη σκέψη θα μας πείσει ότι η σχέση αυτή δεν είναι παρά η επέκταση της (5.88) στο όριο $L \to \infty$ και επομένως εκφράζει την **πληρότητα των** συναρτήσεων $\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Το αντίστροφο είναι και εδώ σημαντικό: Αν θεωρήσουμε δεδομένη την πληρότητα, οποιαδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, γράφεται

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y)\delta(x-y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-iky} f(y) \right] e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k) e^{ikx}$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x} \tilde{f}(k') = \int_{-\infty}^{\infty} dk' \tilde{f}(k') \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k'-k)x} \right]$$

μας οδηγεί σε συμπέρασμα ανάλογο με αυτό της σχέσης (5.90)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k'-k)x} = \delta(k'-k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) \tag{5.91}$$

το οποίο εκφράζει την ορθοκανονικότητα των συναρτήσεων φ_k.