Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις VII: Διάφορα δυναμικά (Ι)

Σε αυτές τις σημειώσεις παρουσιάζουμε την λύση της εξίσωσης Schrodinger για διάφορα απλά δυναμικά. Θα συγκεντρωθούμε σε δέσμιες καταστάσεις, μια και αυτές είναι και σταθερές – και άρα οδηγούν σε «ισορροπία» και παρατηρούνται εκτενώς.

1. <u>Θεώρημα: Σε μία χωρική διάσταση κανένα από τα ενεργειακά επίπεδα ενός διακριτού φάσματος δεν είναι εκφυλισμένο</u>

(Υπενθύμιση: "εκφυλισμό" έχουμε όταν στην ίδια ιδιοτιμή αντιστοιχούν περισσότερες από μία ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις)

Απόδειξη:

Έστω ότι στην ίδια ιδιοτιμή E αντιστοιχούν δύο ιδιοσυναρτήσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ οι οποίες είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους, δηλαδή δεν υπάρχει σταθερά λ τέτοια ώστε $\psi_1(x)=\lambda_1\psi_2(x)$. Από τις σχέσεις

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_1=-\frac{2m}{\hbar^2}\big(E-V(x)\big)\psi_1 \ \text{ και } \ \frac{d^2}{dx^2}\psi_2=-\frac{2m}{\hbar^2}\big(E-V(x)\big)\psi_2 \tag{7.1}$$

θα πάρουμε (πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις στην (7.1) με ψ_2 και ψ_1 αντίστοιχα, ότι

$$\psi_2\frac{d^2}{dx^2}\psi_1=\psi_1\frac{d^2}{dx^2}\psi_2 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\left(\psi_2\frac{d}{dx}\psi_1-\psi_1\frac{d}{dx}\psi_2\right)=0 \tag{7.2}$$

και επομένως

$$\psi_2\frac{d}{dx}\psi_1-\psi_1\frac{d}{dx}\psi_2=c \tag{7.3}$$

όπου c μια σταθερά.

(Σημείωση: αν οι διαστάσεις ήταν περισσότερες (π.χ. τρεις) η σχέση (7.2) θα έπαιρνε τη μορφή:

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\psi_2\vec{\nabla}\psi_1-\psi_1\vec{\nabla}\psi_2\right)=0 \tag{7.4}$$

Η (7.4) δεν οδηγεί στο ίδιο συμπέρασμα με την σχ. (7.3) αφού κάθε συνάρτηση της μορφής $\vec{\nabla}\times\vec{A}$ ικανοποιεί, για τυχαία συνάρτηση $\vec{A}$, την εξ. (7.4)).

Η σταθερά που εμφανίζεται στην σχ. (7.3) μπορεί να προσδιοριστεί αν σκεφτούμε ότι θα πρέπει για $x\to\pm\infty$ οι συναρτήσεις μας να μηδενίζονται (αφού για να έχουμε διακριτό φάσμα πρέπει να έχουμε δέσμιες καταστάσεις). Επομένως $c=0$ και η (7.3) γράφεται

$$\psi_2 \frac{d}{dx}\psi_1 = \psi_1 \frac{d}{dx}\psi_2 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\ln\psi_1 = \frac{d}{dx}\ln\psi_2 \quad \Rightarrow \quad \ln\psi_1 = \ln\psi_2 + \sigma\tau\alpha\theta.$$

$$\Rightarrow \quad \psi_1 = \lambda\psi_2 \tag{7.5}$$

Αυτό είναι αντίθετο στην υπόθεση μας και επομένως δεν υπάρχει εκφυλισμός.

Μια άμεση συνέπεια του θεωρήματος αυτού είναι η εξής: Έστω ότι το δυναμικό σε κάποιο πρόβλημα είναι συμμετρικό, δηλ. είναι τέτοιο ώστε

$$V(-x) = V(x) \tag{7.6}$$

Μπορούμε τώρα να διαπιστώσουμε ότι αν στην εξίσωση

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{7.7}$$

κάνουμε την αλλαγή $x \to -x$ θα πάρουμε

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(-x) = E\psi(-x) \tag{7.8}$$

Αν επομένως εφαρμόσουμε το συμπέρασμα του θεωρήματος θα έχουμε:

$$\psi(x) = \lambda\psi(-x) \quad \Rightarrow \quad \psi(-x) = \lambda\psi(x) = \lambda^2 \quad \psi(-x) \quad \Rightarrow \quad \lambda^2 = 1 \tag{7.9}$$

Έτσι βλέπουμε ότι

$$\psi(-x) = \pm\psi(x) \tag{7.10}$$

Η τελευταία σχέση δηλώνει ότι στην περίπτωση που η Hamiltonian παρουσιάζεται συμμετρική στην αλλαγή $x \to -x$ οι ιδιοσυναρτήσεις της θα είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις του x.

Αυτό το δείξαμε και πρωτύτερα, με πιο φορμαλιστικό τρόπο, ορίζοντας τον τελεστή της ομοτιμίας. Συγκεκριμένα, ορίζοντας τον τελεστή $\hat{\mathbb{P}}$ ως εξής:

$$\hat{\mathbb{P}} f(x) = f(-x)$$

εύκολα βρίσκουμε τις ιδιοτιμές του $(+1 \text{ και } -1)$ μέσω της διπλής εφαρμογής του που αφήνει οποιαδήποτε συνάρτηση αναλλοίωτη:

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{\mathbb{P}} f(x) = \hat{\mathbb{P}} f(-x) = f(x)$$

Συνδυάζοντας αυτό το αποτέλεσμα με τον ορισμό των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{\mathbb{P}}$, που ορίζονται μέσω της εξίσωσης

$$\hat{\mathbb{P}} f(x) = \lambda f(x)$$

συμπεραίνουμε ότι

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{\mathbb{P}}f(x)=\hat{\mathbb{P}}\lambda f(x)=\lambda\hat{\mathbb{P}}f(x)=\lambda^2 f(x)=f(x)\Rightarrow\lambda=\pm1$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε αυτές τις δύο ιδιοτιμές είναι ζυγές και περιττές αντίστοιχα:

$$\hat{\mathbb{P}}f(x)=+f(x)\Rightarrow f(-x)=+f(x)$$

$$\hat{\mathbb{P}}f(x)=-f(x)\Rightarrow f(-x)=-f(x)$$

Το κλειδί είναι ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{\mathrm{H}}$ (Χαμιλτονιανή) και του τελεστή $\hat{\mathbb{P}}$ συμπίπτουν, αν το δυναμικό είναι άρτια συνάρτηση της θέσης, δηλ. αν είναι συμμετρικό ως προς τον μετασχηματισμό $x\to-x$. Για να δείξουμε ότι όντως συμπίπτουν, χρειάζεται να δείξουμε ότι οι δύο τελεστές μετατίθενται:

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathbb{P}}\right]=0$$

Η απόδειξη έχει ως εξής (το κάναμε στο μάθημα):

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathbb{P}}\right]=\left[\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m}+\hat{\mathrm{V}},\hat{\mathbb{P}}\right]=\frac{1}{2m}\left[\hat{\mathrm{p}}^2,\hat{\mathbb{P}}\right]+\left[\hat{\mathrm{V}},\hat{\mathbb{P}}\right]$$

Ο πρώτος μεταθέτης είναι

$$\left[\hat{\mathrm{p}}^2,\hat{\mathbb{P}}\right]\psi(x)=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{\mathbb{P}}(\psi)+\hat{\mathbb{P}}\left(\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)=-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(-x)}{\partial x^2}+\hbar^2\frac{\partial^2\psi(-x)}{\partial x^2}=0$$

Ο δεύτερος μεταθέτης υπολογίζεται με τον ίδιο τρόπο:

$$\left[\hat{\mathrm{V}},\hat{\mathbb{P}}\right]\psi(x)=V(x)\hat{\mathbb{P}}(\psi)-\hat{\mathbb{P}}\big(V(x)\psi(x)\big)=V(x)\psi(-x)-V(-x)\psi(-x)$$

και είναι προφανώς μηδέν αν το δυναμικό είναι συμμετρικό ως προς το $x=0$. οεδ.

2. <u>Πηγάδι με άπειρο βάθος στην μία πλευρά</u>

Θα υπολογίσουμε τις δέσμιες καταστάσεις ενός σωματιδίου το οποίο βρίσκεται υπό την επήρεια του δυναμικού

$$V(x)=\begin{cases}\infty & -\infty<x\le 0\\ -V_0 & 0<x<L\\ 0 & L\le x<\infty\end{cases}$$

Η (χρονοανεξάρτητη) εξίσωση που έχουμε να λύσουμε είναι (προφανώς) η

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi(x)=E\varphi(x) \qquad (7.11)$$

Η (7.11) οδηγεί σε δέσμιες καταστάσεις μόνο στην περιοχή $II: 0 < x < L$ και μόνο για $-V_0 < E < 0$ (αν $E > 0$ κίνηση έως το $+\infty$ θα ήταν, προφανώς, επιτρεπτή). Πράγματι, στην περιοχή II

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V_0\right)\varphi_{II}(x) = -|E|\varphi_{II}(x) \tag{7.12}$$

και επομένως

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx) + B_{II}\cos(kx), \quad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right) \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V_0 - q^2 \geq 0 \tag{7.13}$$

Στις περιοχές $I \;:\; -\infty < x \leq 0$ και $III \;:\; L \leq x < \infty$ θα έχουμε αντίστοιχα

$$\varphi_I(x) = 0 \quad \text{και} \quad \varphi_{III}(x) = A_{III}e^{-qx} \;\;,\;\; q^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}|E| \tag{7.14}$$

Απαιτώντας συνέχεια της κυματοσυνάρτησης στα $x = 0$ και $x = L$, και της παραγώγου της στο $x = L$ (αφού προς τα δεξιά η ασυνέχεια του δυναμικού είναι πεπερασμένη) παίρνουμε

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \Rightarrow B_{II} = 0 \tag{7.15}$$

$$\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \Rightarrow A_{II}\sin(kL) = A_{III}e^{-qL} \tag{7.16}$$

$$\varphi'_{II}(L) = \varphi'_{III}(L) \Rightarrow A_{II}k\cos(kL) = -qA_{III}e^{-qL} \tag{7.17}$$

συνδυάζοντας τις παραπάνω σχέσεις βρίσκουμε

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx), \quad \tan(kL) = -\frac{k}{q} \tag{7.18}$$

Η τελευταία σχέση θα μας προσδιορίσει τα επιτρεπτά ενεργειακά επίπεδα και μπορεί να λυθεί αριθμητικά. Μπορούμε, όμως, να βγάλουμε κάποια συμπεράσματα από τη μελέτη της. Η (7.18) γράφεται ως εξής:

$$\frac{\sin^2(kL)}{1 - \sin^2(kL)} = \frac{k^2}{q^2} \quad \Rightarrow \quad \sin^2(kL) = \frac{k^2}{k^2 + q^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0} \tag{7.19}$$

Γράφοντας

$$\xi \equiv kL \;\;,\;\; \frac{\hbar^2}{2mL^2V_0} \equiv g^2 \tag{7.20}$$

η εξίσωση που έχουμε να λύσουμε γίνεται

$$\sin\xi = \pm g\xi$$

με την προϋπόθεση, λόγω της (7.18), ότι $\tan\xi \leq 0$.

Η λύση βρίσκεται «γραφικά» σχεδιάζοντας τις καμπύλες $y = \pm\sin\xi$, $y = g\xi$ και βρίσκοντας τα σημεία τομής τους. Όταν αυτά βρεθούν θα έχουμε ότι

$$\varphi_{II}\left(x\right) = A_{II}\sin\left(\frac{\xi x}{L}\right) \quad , \quad E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\xi^2 - V_0 = V_0\left(\sin^2\xi - 1\right) \le 0 \tag{7.21}$$

Η προϋπόθεση της αρνητικής εφαπτομένης σημαίνει ότι

$$\left(2n-1\right)\frac{\pi}{2} \le \xi \le n\pi \quad , \ n = 1,2,3,... \tag{7.22}$$

Αν συνδυάσουμε τον τελευταίο περιορισμό με την προφανή απαίτηση

$$\sin^2\xi = g^2\xi^2 \le 1 \Rightarrow \frac{1}{g^2} \ge \xi^2$$

βγάζουμε το συμπέρασμα ότι θα πρέπει

$$\frac{1}{g^2} \ge \left(2n-1\right)^2\frac{\pi^2}{4} \quad \Rightarrow \quad V_0 \ge \left(2n-1\right)^2\frac{\pi^2}{4}\frac{\hbar^2}{2mL^2} \tag{7.23}$$

Με άλλα λόγια στο συγκεκριμένο πρόβλημα η ύπαρξη δέσμιων καταστάσεων δεν είναι δεδομένη. Θα πρέπει το δυναμικό να είναι αρκετά "βαθύ" (δηλαδή αρκούντως ελκτικό) ώστε να συμβεί αυτό. Η ελάχιστη τιμή του δυναμικού προκειμένου να δημιουργηθεί μία δέσμια κατάσταση διαβάζεται από την (7.23) για $n = 1$:

$$V_{0,\min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \tag{7.24}$$

Για αυτή την τιμή του V_0,

$$\varphi_{II}\left(x\right) = A_{II}\sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \quad \text{και} \quad E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\frac{\pi^2}{4} - V_{0,\min} = 0 \tag{7.25}$$

Αν το βάθος του δυναμικού παραμένει στην περιοχή

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \le V_0 < 9\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \tag{7.26}$$

θα εξακολουθήσουμε να έχουμε μόνο μία δέσμια κατάσταση με ενέργεια

$$E = V_0\left(\sin^2\xi - 1\right) < 0 \tag{7.27}$$

Το ελάχιστο βάθος ώστε να έχουμε δύο δέσμιες καταστάσεις θα το διαβάσουμε από τη σχέση (7.23) για $n = 2$: $9\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$. Γενικά όταν

$$\left(2n-1\right)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \le V_0 < \left(2n+1\right)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \tag{7.28}$$

θα έχουμε n δέσμιες καταστάσεις .

Τέλος, παρατηρούμε ότι στην περιοχή $x > L$, η κυματοσυνάρτηση δίδεται ως

$$\varphi_{III}(x) \sim e^{-qx}, \quad q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$$

ο μη μηδενισμός της οποίας δηλώνει τη δυνατότητα να βρεθεί το σωμάτιο σε περιοχή όπου η συνολική ενέργεια E είναι μικρότερη της "δυναμικής" ενέργειας. Στο πλαίσιο της κλασικής φυσικής μια τέτοια περίπτωση συνιστά παράδοξο αφού η κινητική ενέργεια είναι πάντα θετική ή μηδέν. Στην κβαντική μηχανική, όμως, δεν έχει νόημα να μιλάμε ξεχωριστά για καθορισμένη "κινητική" και "δυναμική" ενέργεια αφού ορμή και θέση δεν μπορούν να καθοριστούν ταυτόχρονα. Επομένως η δυνατότητα διείσδυσης στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή δεν δημιουργεί πρόβλημα.

3. Συμμετρικό πεπερασμένο πηγάδι

Επανερχόμαστε στην εύρεση των δέσμιων καταστάσεων ενός σωματιδίου το οποίο, τώρα, βρίσκεται υπό την επήρεια του δυναμικού

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x \le -L \\ -V_0 & -L < x < L \\ 0 & L \le x < \infty \end{cases}$$

Το πρόβλημα αυτό παρουσιάζει ομοιότητες αλλά και σημαντικές διαφορές από την ενότητα 1. Καταρχάς είναι φανερό ότι στις περιοχές

$$I \;:\; -\infty < x \le -L \quad \text{και} \quad III \;:\; L \le x < \infty$$

η λύση (η οποία μηδενίζεται στο $\pm\infty$) είναι

$$\varphi_I(x) = A_I e^{qx} \quad \text{και} \quad \varphi_{III}(x) = A_{III} e^{-qx} \;, \; q^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}|E| \tag{7.29}$$

Στην κεντρική περιοχή η λύση είναι όπως και στην περίπτωση του απειρόβαθου από τη μια πλευρά:

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx) + B_{II}\cos(kx) \qquad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right) \ge 0 \tag{7.30}$$

Στο σημείο αυτό μπορούμε να διευκολυνθούμε πολύ αν παρατηρήσουμε ότι στην κεντρική περιοχή η Hamiltonian είναι συμμετρική ως προς το 0 (δηλ. έχει τη συμμετρία που αναφέραμε στο προηγούμενο θεώρημα) και επομένως οι ιδιοσυναρτήσεις της θα είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις του x. Οι περιττές θα είναι της μορφής

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx) \tag{7.31}$$

ενώ οι άρτιες θα έχουν τη μορφή

$$\varphi_{II}(x) = B_{II}\cos(kx) \tag{7.32}$$

Ας ξεκινήσουμε από την πρώτη περίπτωση. Οι απαιτήσεις συνέχειας της συνάρτησης και της παραγώγου της θα μας δώσουν

$$\begin{aligned} \varphi_I(-L) &= A_I e^{-qL} = \varphi_{II}(-L) = -A_{II}\sin(kL) \\ \varphi'_I(-L) &= qA_I e^{-qL} = \varphi'_{II}(-L) = A_{II}k\cos(kL) \end{aligned} \tag{7.33}$$

και επομένως θα πρέπει να ισχύει

$$\tan(kL) = -\frac{k}{q} \tag{7.34}$$

(Παρατηρείστε και ελέγξτε ότι οι συνοριακές απαιτήσεις στο άλλο άκρο θα σας δώσουν ακριβώς την ίδια συνθήκη-όπως θα περιμένατε λόγω της συμμετρίας του δυναμικού σας). Ο συνδυασμός των εξ. (7.31) και (7.34) δεν είναι παρά ο ίδιος που ήδη αντιμετωπίσαμε στην προηγούμενη παράγραφο:

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx) \qquad \tan(kL) = -\frac{k}{q} \tag{7.35}$$

Επαναλαμβάνοντας, επομένως, τα ίδια βήματα θα καταλήξουμε ότι τα ενεργειακά επίπεδα θα προσδιοριστούν από την

$$\sin\xi = \pm g\xi, \quad \tan\xi \le 0, \quad \text{όπου} \quad \xi = kL \;\;, \;\; \frac{\hbar^2}{2mL^2V_0} = g^2 \tag{7.36}$$

Η διερεύνηση που ακολουθούσε την αντίστοιχη σχέση του προηγουμένου δυναμικού ισχύει και εδώ αλλά πριν αναφερθούμε σ' αυτή ας δούμε και την περίπτωση των άρτιων συναρτήσεων. Εδώ οι συνοριακές απαιτήσεις είναι:

$$\begin{aligned} \varphi_I(-L) &= A_I e^{-qL} = \varphi_{II}(-L) = B_{II}\cos(kL) \\ \varphi'_I(-L) &= qA_I e^{-qL} = \varphi'_{II}(-L) = B_{II}k\sin(kL) \end{aligned} \tag{7.37}$$

και επομένως θα πρέπει να ισχύει

$$\tan(kL) = \frac{q}{k} \tag{7.38}$$

Έτσι για τις άρτιες λύσεις θα έχουμε

$$\varphi_{II}(x) = B_{II}\cos(kx) \qquad \tan(kL) = \frac{q}{k} \tag{7.39}$$

Μπορούμε τώρα να διαπιστώσουμε ότι

$$\frac{1-\cos^2(kL)}{\cos^2(kL)} = \frac{q^2}{k^2} \;\;\Rightarrow\;\; \cos^2(kL) = \frac{k^2}{k^2+q^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0}$$

ή ότι

$$\cos\xi = \pm g\xi \qquad \text{με την προϋπόθεση ότι} \qquad \tan\xi \geq 0 \tag{7.40}$$

Συνοψίζοντας: οι ενεργειακές στάθμες των περιττών ιδιοσυναρτήσεων θα προσδιοριστούν από τις

$$\sin\xi = \pm g\xi, \quad \tan\xi \leq 0 \ \text{ και των άρτιων από τις } \ \cos\xi = \pm g\xi, \ \tan\xi \geq 0 \tag{7.41}$$

όπου

$$\xi = kL, \ \ k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right)}, \ \ \frac{\hbar^2}{2mL^2V_0} = g^2$$

Ας κάνουμε τώρα μια διερεύνηση των εξισώσεων (7.41). Ο περιορισμός της θετικής εφαπτομένης στη δεύτερη από τις εξισώσεις αυτές ικανοποιείται στην περιοχή

$$\left(n-1\right)\pi \leq \xi \leq \left(2n-1\right)\frac{\pi}{2} \ \ , \ n = 1,2,3,.... \tag{7.42}$$

ενώ ο περιορισμός της αρνητικής ικανοποιείται (όπως είδαμε και στο προηγούμενο πρόβλημα) στην περιοχή

$$\left(2n-1\right)\frac{\pi}{2} \leq \xi \leq n\pi \ \ , \ n = 1,2,3,.... \tag{7.43}$$

Για να υπάρχουν , επομένως τουλάχιστον n άρτιες δέσμιες καταστάσεις θα πρέπει

$$\cos^2\xi = g^2\xi^2 \leq 1 \ \Rightarrow \ \frac{1}{g^2} \geq \xi^2 \ \Rightarrow \ \frac{1}{g^2} \geq (n-1)^2\pi^2$$

ή

$$V_0 \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(n-1\right)^2\pi^2 \tag{7.44}$$

Όπως φαίνεται από την τελευταία σχέση (και αφού $V_0 > 0$) το πρόβλημά μας έχει τουλάχιστον μία δέσμια κατάσταση.

Για να έχουμε και περιττές δέσμιες καταστάσεις θα πρέπει (όπως είδαμε και στο προηγούμενο πρόβλημα) να είναι

$$\frac{1}{g^2} \geq \left(2n-1\right)^2\frac{\pi^2}{4} \quad \text{ή} \quad V_0 \geq \frac{\hbar^2}{8mL^2}\left(2n-1\right)^2\pi^2 \tag{7.45}$$

και επομένως η ελάχιστη τιμή του δυναμικού για να εμφανισθεί και περιττή δέσμια κατάσταση είναι

$$V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}$$

Μπορούμε εύκολα τώρα να κάνουμε τη γενική περιγραφή: αν το βάθος του δυναμικού είναι στην περιοχή

$$0 < V_0 < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} \text{ ή όταν } 0 < \frac{1}{g} < \frac{\pi}{2} \tag{7.46}$$

η γωνιακή μεταβλητή είναι στην περιοχή $0 < \xi < \pi/2$ και έχουμε **μόνο μία δέσμια** κατάσταση η οποία είναι άρτια:

$$\varphi_{II}(x) = B_{II} \cos\left(\frac{\xi x}{L}\right) \text{ με ενέργεια } E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\xi^2 - V_0 < 0 \tag{7.47}$$

Στην περιοχή

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} \le V_0 < \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \text{ ή όταν } \frac{\pi}{2} \le \frac{1}{g} < \pi \tag{7.48}$$

η γωνιακή μεταβλητή είναι στην περιοχή $0 < \xi < \pi$ και μπορούμε να έχουμε δύο δέσμιες καταστάσεις:

- μία άρτια

$$\varphi_{II}(x) = B_{II} \cos\left(\frac{\xi_1 x}{L}\right) \text{ με ενέργεια } E_1 = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\xi_1^{\,2} - V_0 < 0,\ \ 0 < \xi_1 < \frac{\pi}{2} \tag{7.49}$$

- και μία περιττή

$$\varphi_{II}(x) = A_{II} \sin\left(\frac{\xi_2 x}{L}\right) \text{ με ενέργεια } E_1 < E_2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\xi_2^{\,2} - V_0 < 0,\ \ \frac{\pi}{2} < \xi_2 < \pi \tag{7.50}$$

Γενικά, στην περιοχή

$$(n-1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \le V_0 < (2n-1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$$

Έχουμε n άρτιες και $n-1$ περιττές δέσμιες καταστάσεις οι οποίες εναλλάσσονται μεταξύ τους. Στην περιοχή

$$(2n-1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \le V_0 < (n+1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

έχουμε n άρτιες και n περιττές δέσμιες καταστάσεις οι οποίες εναλλάσσονται μεταξύ τους. Σε κάθε περίπτωση η κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας είναι άρτια.

4. <u>Συνάρτηση δέλτα</u>

Γυρνάμε τώρα στις δέσμιες καταστάσεις ενός σωματιδίου που βρίσκεται στο δυναμικό

$$V(x) = -\lambda\delta(x) \quad \lambda > 0$$

Το δυναμικό αυτό είναι οριακή περίπτωση του δυναμικού του προηγουμένου παραδείγματος όταν $L \to 0$ και $V_0 \to \infty$ με τέτοιο τρόπο ώστε $LV_0 \to \lambda / 2$. Πράγματι, στην περίπτωση που συζητάμε το δυναμικό είναι διάφορο του μηδενός μόνο στη θέση $x = 0$ και έτσι:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) = -\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = -\lambda$$

Στο προηγούμενο πρόβλημα είχαμε

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) = -\int_{-L}^{L} dx V_0 = -2LV_0$$

οπότε όταν $L \to 0$ θα πρέπει $V_0 \to \infty$ με τρόπο ώστε $LV_0 \to \lambda / 2$.

Η εξίσωση που έχουμε να λύσουμε είναι η

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(\lambda\delta(x) - |E|)\varphi(x) \tag{7.51}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι για δέσμιες καταστάσεις $E < 0$. Για $x \neq 0$ η (7.51) γίνεται

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}|E|\varphi(x) \equiv q^2\varphi(x) \tag{7.52}$$

και η λύση της είναι

$$\varphi(x) = Ae^{qx} \text{ όταν } -\infty < x < 0 \text{ και } \varphi(x) = Ae^{-qx} \text{ όταν } 0 < x < \infty \tag{7.53}$$

(Ο συντελεστής είναι ο ίδιος λόγω της συνέχειας της συνάρτησης.)

Επειδή στο μηδέν η ασυνέχεια του δυναμικού είναι άπειρη η παράγωγος της κυματοσυνάρτησης θα πρέπει να είναι ασυνεχής. Αυτό μπορούμε να το διαπιστώσουμε αμέσως αν ολοκληρώσουμε την εξίσωση (7.51) στη γειτονιά του σημείου $x = 0$

$$\lim_{\varepsilon \to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = \lim_{\varepsilon \to 0}\left[\frac{2m}{\hbar^2}|E|\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\varphi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\delta(x)\varphi(x)\right] = -\frac{2m}{\hbar^2}\lambda\varphi(0)$$

ή

$$\varphi'(+0) - \varphi'(-0) = -\frac{2m}{\hbar^2}\lambda\varphi(0) \tag{7.54}$$

Συνδυάζοντας τις εξ. (7.53) και (7.54) έχουμε:

$$-qA - qA = -\frac{2m}{\hbar^2}\lambda A \Rightarrow q = \frac{m}{\hbar^2}\lambda \Rightarrow E = -\frac{m}{2\hbar^2}\lambda^2 \tag{7.55}$$

Επομένως έχουμε μία δέσμια κατάσταση με την ενέργεια που δηλώνεται στην προηγούμενη σχέση και κυματοσυνάρτηση

$$\varphi(x) = A\exp\left(-\frac{m\lambda}{\hbar^2}|x|\right) \tag{7.56}$$

Η σταθερά κανονικοποίησης μπορεί να υπολογισθεί εύκολα:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2q|x|} = |A|^2 \left(\int_{-\infty}^{0} dx e^{2qx} + \int_{0}^{\infty} dx e^{-2qx} \right) = |A|^2 \frac{1}{q} \Rightarrow |A| = \sqrt{q} = \sqrt{\frac{m\lambda}{\hbar^2}} \tag{7.57}$$

Τα αποτελέσματα αυτά θα μπορούσαμε να τα πάρουμε και από το περατό πηγάδι στο όριο $L \to 0$, $V_0 \to \infty$. Πράγματι. Ξεκινώντας από τη σχέση (7.30) του προηγουμένου προβλήματος θα έχουμε:

$$k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\left(1 - \frac{|E|}{V_0}\right) \Rightarrow \xi^2 = k^2 L^2 = \frac{m\lambda}{\hbar^2} L \left(1 - \frac{|E|}{V_0}\right)$$

και αφού

$$g^2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2 V_0} = \frac{\hbar^2}{m\lambda L}$$

θα πάρουμε ότι

$$g^2 \xi^2 = 1 - \frac{|E|}{V_0}$$

Βλέπουμε, δηλαδή, ότι ο αριθμός ξ είναι πολύ μικρός ενώ ο αριθμός g πολύ μεγάλος έτσι ώστε το γινόμενο τους να είναι λίγο μικρότερο από τη μονάδα. Έτσι, από τις εξισώσεις

$$\cos^2 \xi = g^2 \xi^2 \quad \text{και} \quad \sin^2 \xi = g^2 \xi^2$$

μόνο η πρώτη έχει λύση:

$$\cos^2 \xi \approx \left(1 - \frac{1}{2}\xi^2\right)^2 \approx 1 - \xi^2 = g^2 \xi^2 = 1 - \frac{|E|}{V_0} \;\Rightarrow\; |E| \approx \xi^2 V_0 \approx \frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

Μία ενδιαφέρουσα άσκηση που εφαρμόζει πολλά από τα ως άνω είναι η εξής: έστω σωμάτιο που βρίσκεται δεσμευμένο υπό την επίδραση του δυναμικού

$$V(x) = -\lambda \delta(x) \qquad \lambda > 0$$

(α) Προσδιορίστε την πιθανότητα να βρεθεί στην περιοχή $|x| < a$ και βρείτε για ποιο a η εν λόγω πιθανότητα γίνεται $1/2$.

(β) Βρείτε τη διασπορά της θέσης του σωματίου.

(γ) Προσδιορίστε την πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο με ορμή μεταξύ p και $p + dp$

(δ) Βρείτε τη διασπορά της ορμής του σωματίου.

Λύση:

(α) Στην ανάλυση του δυναμικού-δέλτα βρήκαμε ότι

$$\varphi(x)=\sqrt{q}\exp(-q|x|),\quad q=\frac{m\lambda}{\hbar^2} \tag{7.58}$$

Επομένως

$$P(|x|<a)=\int_{-a}^{a}dx|\varphi(x)|^2=q\int_{-a}^{a}dxe^{-2q|x|}=q\int_{-a}^{0}dxe^{2qx}+q\int_{0}^{a}dxe^{-2qx}=$$

$$=2q\int_0^a dxe^{-2qx}=1-e^{-2qa} \tag{7.59}$$

και

$$P(|x|<a)=1/2\quad\Rightarrow\quad 1-e^{-2qa}=1/2\quad\Rightarrow\quad a=\frac{1}{2q}\ln 2 \tag{7.60}$$

(β) Η μέση θέση του σωμάτιου θα είναι

$$\langle x\rangle=q\int_{-\infty}^{\infty}dxxe^{-2q|x|}=0 \tag{7.61}$$

αφού η πυκνότητα πιθανότητας είναι άρτια συνάρτηση του x (συμμετρική γύρω από το 0).

Για τη διασπορά χρειαζόμαστε και την ποσότητα

$$\langle x^2\rangle=q\int_{-\infty}^{\infty}dxx^2e^{-2q|x|}=2q\int_0^{\infty}dxx^2e^{-2qx}=2q\frac{2!}{(2q)^3}=\frac{1}{2q^2} \tag{7.62}$$

και επομένως

$$(\Delta x)=\frac{1}{q\sqrt{2}}=\frac{\hbar^2\sqrt{2}}{2m\lambda} \tag{7.63}$$

(γ) Το πλάτος πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο με ορμή p δίνεται από τη σχέση

$$g(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}\varphi(x)e^{-i\frac{px}{\hbar}} \tag{7.64}$$

και επομένως

$$g(p)=\sqrt{\frac{q}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left(-q|x|-i\frac{px}{\hbar}\right)=\sqrt{\frac{q}{2\pi\hbar}}\left[\int_{-\infty}^{0}dx\exp\left(qx-i\frac{px}{\hbar}\right)+\int_0^{\infty}dx\exp\left(-qx-i\frac{px}{\hbar}\right)\right]=$$

$$=\sqrt{\frac{q}{2\pi\hbar}}\left(\frac{1}{q-ip/\hbar}+\frac{1}{q+ip/\hbar}\right)=\sqrt{\frac{q}{2\pi\hbar}}\frac{2q}{q^2+p^2/\hbar^2} \tag{7.65}$$

Η ζητούμενη πυκνότητα πιθανότητας θα είναι:

$$\left|g\left(p\right)\right|^{2}=\frac{2q^{3}}{\pi\hbar}\frac{1}{\left(q^{2}+p^{2}/\hbar^{2}\right)^{2}} \tag{7.66}$$

(δ) Η μέση ορμή του σωματίου θα είναι μηδέν:

$$\left\langle p\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dpp\left|g\left(p\right)\right|^{2}=0 \tag{7.67}$$

αφού η πυκνότητα πιθανότητας (7.66) είναι άρτια συνάρτηση. Στη συνέχεια μπορούμε να δούμε ότι

$$\left\langle p^{2}\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dpp^{2}\left|g\left(p\right)\right|^{2}=\frac{2q^{3}}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{p^{2}}{\left(q^{2}+p^{2}/\hbar^{2}\right)^{2}}=\frac{2q^{3}}{\pi\hbar}\frac{\pi\hbar^{3}}{2q}=\hbar^{2}q^{2} \tag{7.68}$$

Το ολοκλήρωμα που εμφανίζεται στο τελευταίο βήμα υπολογίζεται εύκολα:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{p^{2}}{\left(a+bp^{2}\right)^{2}}=-\frac{\partial}{\partial b}\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{1}{a+bp^{2}}\underset{p=x\sqrt{a/b}}{=}-\frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{\partial}{\partial b}\frac{1}{\sqrt{b}}\right)\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{1}{1+x^{2}}=\frac{1}{2\sqrt{ab^{3}}}\arctan x\Big|_{-\infty}^{+\infty}=\frac{\pi}{2\sqrt{ab^{3}}}$$

και επομένως:

$$\left(\Delta p\right)=\hbar q\quad\Rightarrow\quad\left(\Delta x\right)\left(\Delta p\right)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}>\frac{\hbar}{2} \tag{7.69}$$

5. <u>Απλός Αρμονικός Ταλαντωτής</u>

Το δυναμικό του Απλού Αρμονικού Ταλαντωτή (ΑΑΤ) είναι της μορφής $V\left(x\right)=\frac{1}{2}kx^{2}$ όπου k θετική σταθερά, και ο παράγοντας $1/2$ έχει γραφθεί έτσι ώστε η κλασσική λύση του συστήματος να δίδεται ως εξής:

$$F\left(x\right)=-\frac{dV}{dx}=-kx=m\ddot{x}\Rightarrow x\left(t\right)=A\cos\omega t+B\sin\omega t$$

όπου $\omega=\sqrt{k/m}$ και A,B δυο σταθερές που βρίσκονται από τις αρχικές συνθήκες, π.χ. την τιμή της θέσης και της ταχύτητας σε κάποιο χρόνο, έστω $t=0$: $x\left(0\right)$ και $u\left(0\right)$.

Το δυναμικό του ΑΑΤ είναι εξαιρετικά σημαντικό επειδή όλα τα δυναμικά που παρουσιάζουν κάποιο τοπικό ελάχιστο, για μικρές μετατοπίσεις γύρω από το ελάχιστο έχουν τη μορφή του ΑΑΤ. Αυτό δείχνεται με μια ανάπτυξη του δυναμικού $V\left(x\right)$ σε σειρά Taylor γύρω από το ελάχιστο, έστω στο x_{0}:

$$V\left(x\right)=V\left(x_{0}\right)+\frac{dV}{dx}\bigg|_{x=x_{0}}\left(x-x_{0}\right)+\frac{1}{2!}\frac{d^{2}V}{dx^{2}}\bigg|_{x=x_{0}}\left(x-x_{0}\right)^{2}+\ldots$$

Εφόσον η $V(x)$ έχει ελάχιστο στο x_0, $dV/dx\big|_{x=x_0}=0$ και $d^2V/dx^2\big|_{x=x_0}=k>0$ (k σταθερός αριθμός). Δηλαδή:

$$V(x)\approx V(x_0)+\frac{1}{2}k(x-x_0)^2$$

5.1 <u>ΑΑΤ: Επίλυση εξίσωσης Schrödinger</u>

Γυρνάμε τώρα στην Κβαντική Μηχανική. Αντικαθιστώντας το δυναμικό του ΑΑΤ στην εξίσωση Schrödinger, έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{7.70}$$

Μπορούμε να μετατρέψουμε την (7.70) σε εξίσωση ως προς μια αδιάστατη μεταβλητή, y, ως εξής:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\varphi(x)=0 \tag{7.71}$$

Θέτουμε $y=\beta x$ όπου $\beta^2=\dfrac{m\omega}{\hbar}$. Οπότε η (7.71) γράφεται

$$\beta^2\frac{d^2\varphi}{dy^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\beta^2y^2\right)\varphi(y)=0$$

Ο παράγοντας $\varepsilon=\dfrac{mE}{\hbar^2\beta^2}$ είναι καθαρός αριθμός (χωρίς διαστάσεις):

$$\varepsilon=\frac{mE}{\hbar^2\beta^2}=\frac{E}{\hbar\omega} \tag{7.72}$$

και επομένως, η διαφορική εξίσωση που έχουμε να λύσουμε είναι η εξής:

$$\frac{d^2\varphi}{dy^2}+\left(2\varepsilon-y^2\right)\varphi(y)=0 \tag{7.73}$$

με συνοριακές συνθήκες που απορρέουν από την ολοκληρωσιμότητα της $\varphi(y)$, δηλαδή από την ύπαρξη του ολοκληρώματος

$$\int\left|\varphi(y)\right|^2dy<\infty\Rightarrow\lim_{y\to\pm\infty}\varphi(y)=0 \tag{7.74}$$

Η επίλυση της (7.73) διευκολύνεται αν θεωρήσουμε τη συμπεριφορά της $\varphi(y)$ στο $y\to\pm\infty$. Στο όριο αυτό η (7.73) γράφεται

$$\varphi''(y)-y^2\varphi(y)=0 \tag{7.75}$$

Δοκιμάζοντας λύση της μορφής

$$\varphi(y) \sim e^{-\lambda y^2}$$

και αντικαθιστώντας στην (7.75), βρίσκουμε εύκολα ότι

$$\lambda = \pm\frac{1}{2}$$

Η λύση με $\lambda < 0$ αποκλείεται λόγω της (7.74). Επομένως, μπορούμε να γράφουμε

$$\varphi(y) = e^{-y^2/2} H(y) \tag{7.76}$$

όπου $H(y)$ μια συνάρτηση του y που στο όριο $y \to \infty$ θα πρέπει να μην αυξάνεται πιο γρήγορα από την $e^{y^2/2}$.

Αντικαθιστώντας την (7.76) στην (7.73) παίρνουμε μια διαφορική εξίσωση για την $H(y)$:

$$H''(y) - 2yH'(y) + (2\varepsilon - 1)H(y) = 0 \tag{7.77}$$

που είναι γνωστή και ως διαφορική εξίσωση Hermite. Η (7.77) μπορεί να λυθεί με ανάπτυξη της $H(y)$ σε σειρά:

$$H(y) = \sum_k a_k y^k \tag{7.78}$$

Αντικαθιστώντας την (7.78) στην (7.77) παίρνουμε:

$$\sum_k \left\{(k+2)(k+1)a_{k+2} + (2\varepsilon - 1)a_k - 2ka_k\right\} y^k = 0 \tag{7.79}$$

και εφόσον η (7.79) ισχύει για $\forall y \in \mathbb{R}$, ο κάθε όρος του πολυωνύμου θα είναι μηδέν, και επομένως καταλήγουμε στη συνθήκη που πρέπει να πληρούν οι a_k:

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)} \tag{7.80}$$

Η (7.80) είναι και η επιθυμητή λύση της $H(y)$ αφού, δεδομένου ενός a_j, μπορούμε μέσω της (7.80) να υπολογίσουμε όλους τους υπόλοιπους συντελεστές. Ως παράδειγμα, δεδομένου του a_1, μπορούμε να βρούμε, από την (7.80), τους $a_3, a_5, ..., a_{2\rho+1}$. Αξίζει να παρατηρήσουμε επίσης ότι η $H(y)$ πρέπει να είναι άρτια ή περιττή, αφού η $\varphi(y)$ πρέπει επίσης να είναι ιδιοσυνάρτηση της ομοτιμίας, μιας και η εξίσωση Schrödinger (λόγω του δυναμικού) είναι συμμετρική ως προς το μετασχηματισμό $y \to -y$. Συμπεραίνουμε ότι αν $a_1 \neq 0$, τότε αναγκαστικά $a_0 = 0$, που σημαίνει $a_2 = a_4 = ... = a_{2\rho} = 0$, ενώ αν $a_0 \neq 0$, τότε $a_1 = 0$ και άρα $a_3 = a_5 = ... = a_{2\rho+1} = 0$.

Τέλος πρέπει να σιγουρευτούμε ότι η (7.80) συγκλίνει. Βλέπουμε ότι

$$\lim_{k\to\infty}\frac{a_{k+2}}{a_k}=\frac{2}{k}$$

που σημαίνει ότι η ασυμπτωτική συμπεριφορά της $H(y)$ είναι

$$H(y)\propto e^{y^2} \tag{7.81}$$

Σε συνδυασμό με την (7.76), συμπεραίνουμε ότι

$$\varphi(y)\to e^{y^2/2}\to+\infty$$

που, προφανώς, δεν πληροί την (7.74).

Ο μόνος τρόπος να αποφύγουμε το πρόβλημα αυτό είναι η σειρά (7.78) με τους συντελεστές που δίδονται από την (7.80) να μην είναι άπειρη. Αυτό σημαίνει ότι τερματίζεται σε κάποια δύναμη του y, δηλαδή για κάποια τιμή του k, έστω την n, έχουμε

$$a_{n+2}=a_n\cdot\frac{2n-2\varepsilon+1}{(n+2)(n+1)}=0 \tag{7.82}$$

Από την (7.82) συμπεραίνουμε ότι

$$2n-2\varepsilon+1=0 \tag{7.83}$$

και άρα

$$\varepsilon=n+\frac{1}{2} \tag{7.84}$$

που μας λέει ότι για να ισχύει η συνοριακή συνθήκη (7.74), η παράμετρος ε πρέπει να είναι της μορφής (7.83). Από τον ορισμό του ε (7.70) παίρνουμε αμέσως τις επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας:

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{7.85}$$

και άρα το φάσμα των ενεργειών του ΑΑΤ δίδεται ως

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\ \frac{3}{2}\hbar\omega,\ \frac{5}{2}\hbar\omega,\ ...\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,...$$

Όπως έχουμε δει στο κεφάλαιο της σχέσης αβεβαιότητας, το γεγονός ότι η ελάχιστη τιμή της ενέργειας σε ένα ΑΑΤ είναι $\neq 0$, οφείλεται στη θεμελιώδη σχέση

$$\Delta x\Delta p\geq\frac{\hbar}{2} \tag{7.86}$$

5.2 <u>ΑΑΤ: Πολυώνυμα Hermite</u>

Οι ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε αυτές τις ιδιοτιμές της ενέργειας βρίσκονται με χρήση της (7.80) δεδομένου του n. Από την ανάλυση που κάναμε, συμπεραίνουμε ότι οι $\varphi(y)$ δίδονται από την (7.76), όπου η $H(y)$ είναι ένα περατό πολυώνυμο, βαθμού n. Γράφοντας το αναλυτικά: η $H_n(y)$ πληροί την εξίσωση

$$H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$$

όπου $n = 0, 1, 2, \ldots$, και η λύση είναι το πολυώνυμο $H_n(y) = \sum_{k=0}^{n} a_k y^k$ με a_k από την (7.80). Τα πολυώνυμα $H_n(y)$ λέγονται πολυώνυμα Hermite και υπολογίζονται εύκολα. Ως παράδειγμα, για $n = 0$ έχουμε

$$H_0(y) = a_0 y^0 = a_0$$

Για $n = 1$, $H_1(y) = a_1 y$

Για $n = 2$, $H_2(y) = a_0 + a_2 y^2$

όπου

$$a_2 = a_0 \cdot \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot 2}{2 - 1} = -2a_0$$

δηλ.

$$H_2(y) = a_0\left(1 - 2y^2\right)$$

Και με τον ίδιο τρόπο, βρίσκουμε τα $H_3(y), \ldots, H_n(y)$, αφήνοντας μόνο έναν ελεύθερο συντελεστή, το a_0 ή τον a_1, που υπολογίζεται από την κανονικοποίηση της $\varphi(y)$:

$$\int \left|\varphi(y)\right|^2 dy = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} \left|H_n(y)\right|^2 dy = 1 \tag{7.87}$$

Εφαρμόζοντας την (7.87) για $n = 0$,

$$\int e^{-y^2} a_0^{\ 2} dy = 1 \Rightarrow \sqrt{\pi} a_0^{\ 2} = 1 \Rightarrow a_0 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4}$$

Αντίστοιχα, υπολογίζουμε το a_0 για $n = 2, 4, \ldots$ και τον a_1 για τις περιττές λύσεις.

Να σημειώσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση ως συνάρτηση του x έχει έναν πρόσθετο όρο που προέρχεται από την κανονικοποίηση

$$\int \left|\varphi(x)\right|^2 dx = 1 \tag{7.88}$$

Η διαφορά των (7.87) και (7.88) προέρχεται από το διαφορικό (dx έναντι dy) και άρα

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta^2 x^2/2}$$

5.3 ΑΑΤ: Ιδιότητες των λύσεων

Οι λύσεις του ΑΑΤ, έχουν τη μορφή $\varphi_n(x) = H_n(\beta x) e^{-\beta^2 x^2/2}$. Παρά την πολυπλοκότητα, οι $\varphi_n(x)$ έχουν τρεις πολύ σημαντικές ιδιότητες:

1. Η πιο σημαντική είναι η προφανής: οι λύσεις είναι άρτιες ή περιττές, ανάλογα με το δείκτη n. Αυτό απορρέει από τη συμμετρία του δυναμικού: $V(-x) = V(x)$.

Χρησιμοποιώντας αυτό το στοιχείο, συμπεραίνουμε ότι

$$\langle x \rangle_n = 0$$

όπου $\langle x \rangle_n$ είναι η μέση τιμή της θέσης στην κατάσταση n. [Το ολοκλήρωμα είναι περιττό]. Ωστόσο, η $\langle x^2 \rangle_n$ είναι πιο δύσκολη:

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{1}{\beta^3} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} \left| H_n(x) \right|^2 dx \tag{7.89}$$

και το ολοκλήρωμα (7.89) θέλει πολλή άλγεβρα. Για τον υπολογισμό τέτοιων ολοκληρωμάτων, προσφέρεται η «αλγεβρική μέθοδος», την οποία θα δούμε σε λίγο.

2. Δεύτερη ιδιότητα είναι ότι οι ενεργειακές διαφορές ανάμεσα σε διαδοχικές καταστάσεις είναι σταθερές και ίσες με $\hbar\omega$.

3. Η τρίτη και εξαιρετικά σημαντική ιδιότητα είναι ότι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας έχει $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$, σε πλήρη αντίθεση με την κλασσική λύση! Αυτό είναι απόρροια της Αρχής Αβεβαιότητας του Heisenberg (όπως είδαμε σε προηγούμενο κεφάλαιο). Η ενέργεια αυτή ονομάζεται «ενέργεια κενού». Μπορούμε να τη μετρήσουμε και άρα να επαληθεύσουμε ότι στη χαμηλότερη δυνατή ενεργειακή στάθμη, $E_0 \neq 0$, χρησιμοποιώντας διατομικά μόρια με διαφορετικά ισότοπα του ίδιου στοιχείου, π.χ το BO, με ^{10}B ή ^{11}B. Η Χαμιλτονιανή για τις ταλαντώσεις έχει τη μορφή

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{B}}{}^2}{2m_B} + \frac{\hat{\mathrm{p}}_0}{2m_0} + V(\hat{\mathrm{x}}_{\mathrm{B}}, \hat{\mathrm{x}}_0) \tag{7.90}$$

όπου $\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{B}}$, $\hat{\mathrm{x}}_{\mathrm{B}}$ και $\hat{\mathrm{p}}_0$, $\hat{\mathrm{x}}_0$ η ορμή και θέση του B και του O αντίστοιχα, και το δυναμικό έχει τη μορφή $V(x_B, x_o) = \frac{1}{2} C (x_B - x_o)^2$.

Η (7.90) μπορεί να γραφθεί και ως

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2\mu} + V(x) \tag{7.91}$$

όπου

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_O} \quad \text{και} \quad x = x_B - x_O$$

Συμπεραίνουμε ότι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας σε ένα τέτοιο μόριο θα είναι

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \omega = \sqrt{C/\mu}$$

Επειδή δεν γνωρίζουμε το ω (αφού δεν έχουμε τη σταθερά C στο δυναμικό) μπορούμε να μετρήσουμε τη διαφορά στην ενέργεια ιονισμού. Αν $V_{\min}$ είναι το δυναμικό στο ελάχιστο,

$$E_{ion} = V_{\min} - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Άρα οι ενέργειες ιονισμού του ^{11}BO και του ^{10}BO θα είναι διαφορετικές, μολονότι χημικά πρόκειται για την ίδια ένωση. Η διαφορά των δυο ενεργειών ιονισμού μας δίνει το $\hbar\omega$.

Και γιατί δεν ιονίζονται τα άτομα στις «θερμοκρασίες δωματίου»;

Ηλεκτρόνιο περιορισμένο σε άτομο, δηλ. σε μια περιοχή με έκταση όσο ~ η ακτίνα του Bohr, a_0, θα έχει ενέργεια (λόγω της αβεβαιότητας στην ορμή, και άρα και ορμή):

$$E_e \sim \frac{p^2}{m} = \frac{\hbar^2}{m{a_0}^2} \simeq 6-7\text{eV}$$

Η ενέργεια διάσπασης του δυναμικού θα δίδεται

$$ka^2 \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow k \sim \frac{\hbar^2}{ma^4} = \frac{m{E_e}^2}{\hbar^2} \tag{7.92}$$

Θερμική ενέργεια:

$$E_\theta \sim \hbar\omega \sim \hbar\sqrt{\frac{k}{M_p}} \tag{7.93}$$

Αντικαθιστώντας την (7.92) στην (7.93):

$$E_\theta \sim \sqrt{\frac{m}{M_p}} \cdot E_e$$

και επομένως

$$E_\theta \sim E_e \cdot (1800)^{-1/2} \sim \frac{1}{40}E_e$$

Η ταλαντωτική ενέργεια σε θερμοκρασία δωματίου είναι

$$KT(\text{δωμ}) \sim \frac{1}{40}eV$$

Η ταχύτητα που αντιστοιχεί σε αυτήν την ενέργεια είναι

$$\frac{1}{2}M\upsilon^2=\frac{1}{2}\hbar\omega\Rightarrow M\upsilon^2=\hbar\omega\sim\frac{1}{40}\text{eV}$$

$$M_pc^2\frac{\upsilon^2}{c^2}\sim\frac{1}{40}\text{eV}\Rightarrow\frac{\upsilon^2}{c^2}\sim\frac{1}{40}\cdot10^{-9}=2,5\times10^{-11}\Rightarrow\upsilon\sim5\times10^{-5}$$

$$\upsilon\sim5\times10^{-5}\times3\times10^{5}\,\frac{\text{km}}{\text{s}}\sim1,5\,\text{km/s}\quad\left(\sim5.500\,\text{km/h}\right)$$

5.4 <u>ΑΑΤ: Χρονική εξέλιξη</u>

Έστω μια κατάσταση, $\psi\left(x\right)$, ενός σωματιδίου σε ΑΑΤ:

$$\psi\left(x\right)=\frac{\varphi_0\left(x\right)+\varphi_1\left(x\right)}{\sqrt{2}}dx$$

Σε χρόνο t, η $\psi\left(x\right)$ εξελίσσεται στην

$$\psi\left(x,t\right)=\frac{\varphi_0\left(x\right)e^{-i\omega_0 t}+\varphi_1\left(x\right)e^{-i\omega_1 t}}{\sqrt{2}}$$

όπου $\omega_1=3\omega_0$. Η μέση θέση σε χρόνο t δίδεται ως

$$\left\langle x\left(t\right)\right\rangle=\int x\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2=\frac{1}{2}\int x\varphi_0^{\,2}\left(x\right)+\int x\varphi_1^{\,2}\left(x\right)dx+\int\varphi_0\left(x\right)\varphi_1\left(x\right)xdx\left(e^{i\omega_0 t-i\omega_1 t}+e^{-i\omega_0 t+i\omega_1 t}\right)$$

Θέτοντας $\Delta\omega=\omega_1-\omega_0$,

$$\left\langle x\left(t\right)\right\rangle=\frac{1}{2}\left[\int x\varphi_0\left(x\right)\varphi_1\left(x\right)dx\right]\cdot2\cos\left(\Delta\omega t\right)\tag{7.94}$$

Το ολοκλήρωμα στην (7.94) είναι απλώς ένας αριθμός, με διαστάσεις μήκους, οπότε η (7.94) είναι απλώς

$$\left\langle x\left(t\right)\right\rangle=x_0\cos\left(\Delta\omega t\right)$$

Είναι εύκολο να βρούμε το $\left\langle p\left(t\right)\right\rangle$:

$$\begin{aligned}\left\langle p\left(t\right)\right\rangle&=\int\psi^*\left(x,t\right)\hat{\mathrm{p}}\psi\left(x,t\right)\\&=\frac{1}{2}\int dx\left(\varphi_0\left(x\right)e^{+i\omega_0 t}+\varphi_1e^{+i\omega_1 t}\right)\left(-i\hbar\right)\cdot\left(\frac{d\varphi_0}{dx}e^{-i\omega_0 t}+\frac{d\varphi_1}{dx}e^{-i\omega_1 t}\right)\\&=\frac{\left(-i\hbar\right)}{2}\left[\int dx\varphi_0\left(x\right)\frac{d\varphi_0}{dx}dx+\int dx\varphi_1\left(x\right)\frac{d\varphi_1}{dx}dx+\int dx\varphi_0\left(x\right)\frac{d\varphi_1}{dx}e^{-i\Delta\omega t}+\int dx\varphi_1\left(x\right)\frac{d\varphi_0}{dx}e^{+i\Delta\omega t}\right]\end{aligned}$$

Τα δυο ολοκληρώματα της μορφής $\int dx\varphi_n\left(x\right)\frac{d\varphi_n}{dx}=0$, $\left(n=0,1,...\right)$.

Επιπλέον με ολοκλήρωση κατά παράγοντες,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_0(x)\frac{d\varphi_1(x)}{dx}dx=\varphi_0(x)\varphi_1(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_1(x)\frac{d\varphi_0}{dx}dx$$

και επομένως

$$\langle p(t)\rangle=\frac{\hbar}{2i}\left[\int dx\varphi_1(x)\frac{d\varphi_0}{dx}\right]\cdot\left[e^{i\Delta\omega t}-e^{-i\Delta\omega t}\right]=p_0\sin(\Delta\omega t)$$

όπου $p_0=\hbar\int dx\varphi_1(x)\frac{d\varphi_0}{dx}$.

5.5 Εναλλακτική επίλυση του ΑΑΤ: η αλγεβρική μέθοδος

Κοιτάζοντας τη διαδικασία επίλυσης του ΑΑΤ (δηλ. της εύρεσης των ιδιοσυναρτήσεων και ιδιοτιμών της $\hat{\mathrm{H}}$), βλέπουμε ότι η βασική δυσκολία βρίσκεται στην επίλυση μιας διαφορικής εξίσωσης δευτέρου βαθμού. Υπάρχει μια μέθοδος (η λεγόμενη και «αλγεβρική») η οποία μας επιτρέπει να λύσουμε τον ΑΑΤ μέσω διαφορικής εξίσωσης πρώτου βαθμού, γράφοντας, σχηματικά, την $\hat{\mathrm{H}}$ ως γινόμενο δυο τελεστών, $\hat{\mathrm{T}}_1$ και $\hat{\mathrm{T}}_2$, $\hat{\mathrm{H}}=\hat{\mathrm{T}}_1\hat{\mathrm{T}}_2$, και ο κάθε $\hat{\mathrm{T}}$ έχει μόνο πρώτη δύναμη του $\hat{\mathrm{p}}$. Παραγοντοποιώντας την $\hat{\mathrm{H}}$, έχουμε:

$$\hat{\mathrm{H}}=\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathrm{x}}^2=\frac{m\omega^2}{2}\left(\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{m^2\omega^2}+\hat{\mathrm{x}}^2\right)$$

Αν οι τελεστές $\hat{\mathrm{p}}$ και $\hat{\mathrm{x}}$ μετατίθεντο, η $\hat{\mathrm{H}}$ θα γραφόταν αμέσως ως

$$\frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{\mathrm{x}}+\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right)\left(\hat{\mathrm{x}}-\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right)=\hat{\mathrm{Q}}\hat{\mathrm{Q}}^\dagger$$

Ωστόσο, επειδή $[\hat{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{p}}]\neq 0$:

$$\hat{\mathrm{H}}\neq\hat{\mathrm{Q}}\hat{\mathrm{Q}}^\dagger$$

Μπορούμε ωστόσο να προσθαφαιρέσουμε τους διασταυρούμενους όρους:

$$\hat{\mathrm{Q}}\hat{\mathrm{Q}}^\dagger=\frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{\mathrm{x}}^2+\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{m^2\omega^2}-i\frac{\hat{\mathrm{x}}\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}+i\frac{\hat{\mathrm{p}}\hat{\mathrm{x}}}{m\omega}\right)\Rightarrow\hat{\mathrm{H}}=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\hbar\omega\left(\hat{\mathrm{Q}}\hat{\mathrm{Q}}^\dagger+\frac{i\hat{\mathrm{x}}\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}-\frac{i\hat{\mathrm{p}}\hat{\mathrm{x}}}{m\omega}\right)\quad(7.95)$$

Επομένως,

$$\hat{\mathrm{H}}=\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger-\frac{1}{2}\right)\quad(7.96)$$

όπου για συντομία, στην (7.96) ορίσαμε $\beta^2=m\omega/\hbar$ και δύο τελεστές: τον $\hat{a}$ και τον ερμιτιανό συζυγή του, $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{a}=\frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathrm{x}}+\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right)\ \text{και}\ \hat{a}^\dagger=\frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathrm{x}}-\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right)\quad(7.97)$$

Οι τελεστές $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ δεν μετατίθενται μεταξύ τους:

$$\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right]=\frac{\beta^2}{2}\left[\hat{\mathrm{x}}+\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega},\hat{\mathrm{x}}-\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right]=\frac{\beta^2}{2}\left(\left[\hat{\mathrm{x}},-\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right]+\left[\frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega},\hat{\mathrm{x}}\right]\right)=-\frac{\beta^2 i}{m\omega}\left[\hat{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{p}}\right]=-\frac{\beta^2 ii\hbar}{m\omega}=1$$

δηλαδή η $\left[\hat{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{p}}\right]=i\hbar$ έχει ως αποτέλεσμα

$$\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right]=1 \tag{7.98}$$

Με τη χρήση της (7.98), η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{\mathrm{H}}=\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+1-\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2}\right) \tag{7.99}$$

Καταφέραμε αυτό που θέλαμε, δηλαδή να εκφράσουμε την $\hat{\mathrm{H}}$ ως γινόμενο τελεστών που έχουν το πολύ μια δύναμη του $\hat{\mathrm{p}}$. Η εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων και των ιδιοτιμών του ΑΑΤ, απαιτεί επομένως, την επίλυση

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi=E\varphi$$

5.5.1. <u>Εύρεση ιδιοσυναρτήσεων και ιδιοτιμών</u>

Προχωρούμε ως εξής. Έστω ότι $\varphi_m\left(x\right)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή E_m, δηλ. :

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi_m\left(x\right)=E_m\varphi_m\left(x\right)$$

Τότε η $\hat{a}\varphi_m\left(x\right)$ είναι επίσης ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή $E_m-\hbar\omega$. Για να το δείξουμε, θα δράσουμε με την $\hat{\mathrm{H}}$ στην $\hat{a}\varphi_m$:

$$\hat{\mathrm{H}}\hat{a}\varphi_m\left(x\right)=\left(\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{a}\right]+\hat{a}\hat{\mathrm{H}}\right)\varphi_m\left(x\right) \tag{7.100}$$

Ο μεταθέτης $\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{a}\right]$ βρίσκεται εύκολα:

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{a}\right]=\hbar\omega\left[\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2},\hat{a}\right]=\hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right)$$

Χρησιμοποιώντας την (7.98),

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}=\left(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right]\right)\hat{a}$$

και επομένως

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{a}\right]=-\hbar\omega\hat{a}$$

Η (7.100) γράφεται

$$\begin{aligned}\hat{\mathrm{H}}\hat{a}\varphi_m\left(x\right)&=-\hbar\omega\hat{a}\varphi_m\left(x\right)+\hat{a}\hat{\mathrm{H}}\varphi_m\left(x\right)\\&=-\hbar\omega\hat{a}\varphi_m\left(x\right)+\hat{a}E_m\varphi_m\left(x\right)\\&=\left(E_m-\hbar\omega\right)\hat{a}\varphi_m\left(x\right)\end{aligned} \tag{7.101}$$

Η (7.101) αποδεικνύει ότι η $\hat{a}\varphi_m(x)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή $E_m - \hbar\omega$. Είναι πλέον προφανές ότι και η $\hat{a}^2\varphi_m(x)$ θα είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή $E_m - 2\hbar\omega$. Και γενικότερα, οποιαδήποτε δύναμη του $\hat{a}$, έστω $\hat{a}^{\ell}\varphi_m(x)$ δίδει ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$, αρκεί η ποσότητα $(E_m - \ell\hbar\omega) \geq 0$. Η τελευταία αυτή συνθήκη απορρέει από την θετικότητα της μέσης τιμής της ενέργειας σε οποιαδήποτε ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$:

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{\mathrm{x}}^2 \right\rangle \geq 0 \qquad (7.102)$$

Η (7.102) ισχύει επειδή για οποιοδήποτε ερμιτιανό τελεστή $\hat{\mathrm{A}}$, ισχύει:

$$\left\langle \hat{\mathrm{A}}^2 \right\rangle = \int \psi^* \hat{\mathrm{A}}^2 \psi \, dx = \int \psi^* \hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{A}} \psi \, dx = \int \left(\hat{\mathrm{A}}\psi\right)^* \hat{\mathrm{A}}\psi \, dx = \int \left|\hat{\mathrm{A}}\psi\right|^2 dx \geq 0$$

και επομένως $\langle E \rangle \geq 0$.

Έστω τώρα ότι μετά από πολλές εφαρμογές του $\hat{a}$, έστω ℓ, φθάνουμε σε μια ιδιοσυνάρτηση του $\hat{\mathrm{H}}$, τέτοια ώστε η ενέργειά της να είναι μικρότερη του $\hbar\omega$. Αν συμβολίσουμε αυτή την ιδιοσυνάρτηση με $\varphi_{\min}(x)$, θα πρέπει η εφαρμογή του $\hat{a}$ στην $\varphi_{\min}(x)$ να δίνει μηδέν:

$$\hat{a}\varphi_{\min}(x) = 0 \qquad (7.103)$$

Αν δεν ίσχυε η (7.103), τότε η $\hat{a}\varphi_{\min}(x)$ θα ήταν ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή < 0 (που αποκλείεται).

Επαναλαμβάνοντας την ως άνω διαδικασία για τον $\hat{a}^\dagger$, είναι εύκολο να αποδείξουμε ότι αν $\hat{\mathrm{H}}\varphi_m(x) = E_m\varphi_m(x)$, τότε

$$\hat{\mathrm{H}}\hat{a}^\dagger\varphi_m(x) = (E_m + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\varphi_m(x) \qquad (7.104)$$

Η διαδικασία είναι πανομοιότυπη με εκείνη την αντίστοιχη για το $\hat{a}\phi_m$:

$$\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\left[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

$$\hat{\mathrm{H}}\hat{a}^\dagger\varphi_m = \left(\hat{a}^\dagger\hat{\mathrm{H}} + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\right)\varphi_m = \left(\hat{a}^\dagger E_m + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\right)\varphi_m = (E_m + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\varphi_m$$

Η τελευταία σχέση είναι απλώς η (7.104): η $\hat{a}^\dagger\varphi_m$ είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{\mathrm{H}}$ με ιδιοτιμή $(E_m + \hbar\omega)$. Μαζεύοντας τα δυο αποτελέσματα, έχουμε:

$$\begin{aligned} \hat{a}\varphi_n &= C(E_n)\varphi_{E_n - \hbar\omega} \\ \hat{a}^\dagger\varphi_n &= C'(E_n)\varphi_{E_n + \hbar\omega} \end{aligned} \qquad (7.105)$$

όπου $C(E_n)$ και $C'(E_n)$ είναι δυο αριθμοί (που μπορεί να εξαρτώνται από το E_n), τους οποίους και θα υπολογίσουμε λίγο αργότερα.

Η ενέργεια της $\varphi_{\min}$ βρίσκεται εύκολα από την (7.103):

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi_{\min} = \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\varphi_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega\varphi_{\min}$$

Επίσης, είναι προφανές ότι μετά από n εφαρμογές του $\hat{a}^{\dagger}$ στην $\varphi_{\min}$, θα έχουμε την $\varphi_n(x)$ με ενέργεια:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{7.106}$$

Οι $\varphi_n(x)$ μπορούν να βρεθούν (το κάνουμε πιο κάτω) από τον τύπο:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^n \varphi_{\min}(x) \tag{7.107}$$

Από την (7.107) βλέπουμε ότι ξεκινώντας από την $\varphi_{\min}$ μπορούμε να βρούμε μια σειρά από ιδιοσυναρτήσεις τις $\varphi_{\min} \to \varphi_1 \to \varphi_2 \to \varphi_3 \to \dots$.

Το ερώτημα που τίθεται είναι αν το σύνολο των $\varphi_n(x)$ στην (7.107) είναι πλήρες, δηλ. αν υπάρχουν άλλες ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής. Η απάντηση είναι πως δεν υπάρχουν άλλες ιδιοσυναρτήσεις. Το σκεπτικό είναι πως αν υπήρχε κάποια φ_{new} που δεν ανήκει στο σύνολο των (7.107), θα πρέπει να αντιστοιχεί σε κάποια άλλη $\varphi_{\min}$, την $\varphi'_{\min}$.

Θα πρέπει να ισχύει και πάλι: $\hat{a}\varphi'_{\min} = 0$. Τότε $\hat{\mathrm{H}}\varphi'_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega\varphi'_{\min}$. Και εφόσον σε μια διάσταση δεν υπάρχει εκφυλισμός $\Rightarrow \varphi'_{\min} = \varphi_{\min}$. Εφόσον υπάρχει μόνο μια τέτοια συνάρτηση με ενέργεια $E_{\min} < \hbar\omega$, την συμβολίζουμε με φ_0. Άρα, οι $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ είναι το πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων της $\hat{\mathrm{H}}$.

Η $\varphi_0(x)$ βρίσκεται ως λύση της $\hat{a}\varphi_0(x) = 0$. Κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $u = \beta x$ (όπως και στο υποκεφάλαιο 5.1), έχουμε:

$$\hat{a} = \frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathrm{x}} + \frac{i\hat{\mathrm{p}}}{m\omega}\right) = \frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right)$$

$$\hat{a}\varphi_0 = 0 \Rightarrow \left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right)\varphi_0 = 0 \Rightarrow \varphi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2}$$

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi_0(x) = \hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\varphi_0(x) = \frac{1}{2}\hbar\omega\varphi_0(x)$$

Η $\varphi_1(x)$ βρίσκεται εύκολα από την:

$$\varphi_1(u) = A_1\left(u - \frac{\partial}{\partial u}\right)e^{-u^2/2} = A_1(u+u)e^{-u^2/2} = 2uA_1 e^{-u^2/2}$$

Και γενικότερα:

$$\varphi_n(u) = A_n\left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2}$$

Το Πολυώνυμο Hermite ορίζεται ως:

$$\left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} = H_n(u)e^{-u^2/2}$$

5.5.2 <u>Εύρεση των σταθερών (7.105)</u>

Υπολογισμός των $C(E_n)$ και $C'(E_n)$ στην (7.105): Η μέση τιμή της ενέργειας όταν το σύστημα βρίσκεται στην φ_n κατάσταση είναι:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle_n &= \int \varphi_n^*(x)\hat{\mathrm{H}}\varphi_n(x)dx = \hbar\omega\int \varphi_n^*(x)\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\varphi_n(x)dx \\ &= \hbar\omega\int\left(\hat{a}\varphi_n(x)\right)^*\hat{a}\varphi_n(x)dx + \frac{1}{2}\hbar\omega \\ &= \hbar\omega\int\left|\hat{a}\varphi_n(x)\right|^2 dx + \frac{1}{2}\hbar\omega \\ &= \hbar\omega\left|C(E_n)\right|^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega\end{aligned}$$

και επομένως $\left|C(E_n)\right|^2 = n \Rightarrow C(E_n) = \sqrt{n}$.

Με ακριβώς το ίδιο σκεπτικό, αλλά γράφοντας την Χαμιλτονιανή ως $\hat{\mathrm{H}} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}$, παίρνουμε

$$\langle E_n\rangle = \hbar\omega\int \varphi_n^*(x)\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}\right)\varphi_n dx = \hbar\omega\int\left|\hat{a}^\dagger\varphi_n\right|^2 dx - \frac{\hbar\omega}{2}$$

και άρα

$$\int\left|\hat{a}^\dagger\varphi_n\right|^2 dx = n+1 \Rightarrow \left|C'(E_n)\right|^2 = n+1$$

Συνοψίζοντας, οι (7.105) γράφονται ως εξής:

$$\hat{a}\varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) \quad \text{και} \quad \hat{a}^\dagger\varphi_n(x) = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) \tag{7.108}$$

Η (7.107) αποδεικνύεται με διαδοχικές εφαρμογές της (7.108).

5.5.3 <u>Υπολογισμός μέσης τιμής και διασποράς</u>

Έχουμε ήδη αποδείξει ότι $\langle x\rangle = 0$ και $\langle p\rangle = 0$ με χρήση των πολυωνύμων Hermite:

$$\langle x\rangle_n = \int \varphi_n^* x\varphi_n dx = |A_n|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left|H_n(u)\right|^2 e^{-u^2}\frac{u}{\beta^2}du = 0$$

εφόσον το ολοκλήρωμα περιέχει μια περιττή συνάρτηση.

Το ίδιο ισχύει για τη μέση ορμή:

$$\langle p \rangle = \int \varphi_n^* \hat{\mathrm{p}} \varphi_n dx = |A_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(u) e^{-u^2/2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) H_n(u) e^{-u^2/2} du$$

Το ίδιο αποτέλεσμα εξάγεται με την αλγεβρική μέθοδο, με χρήση των τελεστών $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$. Αντιστρέφοντας τις (7.97):

$$\hat{\mathrm{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \text{ και } \hat{\mathrm{p}} = \frac{m\omega}{i\sqrt{2}\beta}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)$$

Οπότε

$$\langle x \rangle_n = \int \varphi_n^* \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \varphi_n dx = 0 \tag{7.109}$$

Η (7.109) μηδενίζεται επειδή η δράση των $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ στη φ_n δίνει αντίστοιχα $\sim \varphi_{n-1}$ και $\sim \varphi_{n+1}$, και οι φ_n, φ_{n-1} είναι κάθετες μεταξύ τους (όπως και οι φ_n, φ_{n+1}).

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο παίρνουμε $\langle p \rangle = 0$.

Υπολογισμός $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \frac{1}{2\beta^2} \int \varphi_n^* \left(\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \right) \varphi_n dx \\
&= \frac{1}{2\beta^2} \int \varphi_n^* \left(2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 \right) \varphi_n dx \\
&= \frac{1}{\beta^2} \int \varphi_n^* \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \varphi_n dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\hbar}{m\omega}
\end{aligned}$$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε το $\langle p^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= -\frac{m^2\omega^2}{2\beta^2} \int \varphi_n^* \left(\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \right) \varphi_n dx \\
&= \frac{m^2\omega^2}{2\beta^2} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) m\omega\hbar
\end{aligned}$$

Επομένως

$$\left.\begin{aligned}
\Delta x_n^2 &= \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} \\
\Delta p_n^2 &= \langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar m\omega
\end{aligned}\right\} \Rightarrow \Delta x_n \Delta p = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

6. Μαθηματικό συμπλήρωμα

Ένα χρήσιμο ολοκλήρωμα:

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-x^2} dx = \frac{(n-1)(n-3)\ldots 3\cdot 1}{2^{n/2}} \pi^{1/2}$$

Απόδειξη:

Με ολοκλήρωση κατά παράγοντες παίρνουμε:

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^n}{(-2x)} \cdot \frac{d\left(e^{-x^2}\right)}{dx} dx = -\frac{1}{2} x^{n-1} e^{-x^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{n-1}{2} x^{n-2} e^{-x^2} dx = +\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} (n-1) x^{n-2} dx = \frac{n-1}{2} I_{n-2}$$

Είναι δε προφανές ότι

$$I_0 = \sqrt{\pi}$$

Άρα, $I_n = \frac{n-1}{2} I_{n-2} = \frac{n-1}{2} \cdot \frac{n-3}{2} I_{n-4} = \frac{(n-1)(n-3)\cdot\ldots\cdot 1}{2^{n/2}} \sqrt{\pi}$.