Κβαντομηχανική ΙΙ

Πρόχειρες σημειώσεις του μαθήματος

Κωνσταντίνος Φαράκος,
Αν. Καθηγητής
Τομέας Φυσικής
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

26 Ιανουαρίου 2011

Περιεχόμενα

1 Θεμελίωση της κβαντομηχανικής **1**

1.1 Γραμμικοί διανυσματικοί χώροι . . . 1

1.1.1 Ευκλείδειος τριδιάστατος χώρος, Υπόδειγμα ενός Γραμμικού Διανυσματικού χώρου . . . 1

1.1.2 Ο Διανυσματικός Χώρος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων . . . 2

1.2 Τελεστές . . . 3

1.2.1 Ιδιότητες των Ερμιτιανών Τελεστών . . . 5

1.2.2 Δύο προτάσεις για τη σύνδεση μεταξύ Πειράματος και Θεωρίας . . . 6

1.3 Βασικές Στατιστικές Έννοιες . . . 8

1.3.1 Μέση τιμή . . . 8

1.3.2 Συνεχής Κατανομή, Πυκνότητα Πιθανότητας . . . 8

1.3.3 Διασπορά $(\Delta A)^2$ και Τυπική Απόκλιση ΔA . . . 8

1.3.4 Στατιστικές Ροπές . . . 9

1.4 Εξίσωση του Schrödinger . . . 9

1.4.1 Λύση της Εξίσωσης του Schrödinger . . . 11

1.4.2 Στατιστική ερμηνεία της Κυματοσυνάρτησης . . . 11

1.4.3 Ιδιότητες των Κυματοσυναρτήσεων . . . 12

1.4.4 Εξίσωση του Schrödinger για περισσότερα από ένα σωμάτια . . . 16

1.5 Μεταθετικές Ιδιότητες Τελεστών . . . 17

1.6 Χρονική Μεταβολή της Μέσης Τιμής - Διατήρηση Φυσικών Μεγεθών . . . 22

1.7 Συνεχές Φάσμα Ιδιοτιμών - Συνάρτηση δ του Dirac . . . 26

1.7.1 Αναπαραστάσεις των συναρτήσεων δ-Dirac . . . 27

1.7.2 Ιδιότητες της δ-συνάρτησης . . . 27

1.7.3 Αναπαράσταση κυματοσυναρτήσεων και τελεστών στο χώρο των ορμών . . . 28

1.8 Συμβολισμός Dirac . . . 29

1.8.1 Ανάπτυξη Κυματοσυνάρτησης σε ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων . . . 30

1.8.2 Ανισότητα του Schwartz . . . 30

1.8.3 Ορθογωνιοποίηση Schmidt . . . 31

1.8.4 Τελεστές, Γραμμικοί Μετασχηματισμοί . . . 31

1.8.5 Ιδιότητες των Μοναδιαίων Τελεστών . . . 33

1.8.6 Αναπαράσταση Γραμμικών Τελεστών με Πίνακες . . . 33

1.8.7 Πρόβλημα των Ιδιοτιμών . . . 34

2 Εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger- Μονοδιάστατα προβλήματα **37**

2.1 Συνεχές Ενεργειακό Φάσμα . . . 37

2.1.1 Ελεύθερο Σωμάτιο . . . 37

2.1.2 Ορθογώνιο Σκαλοπάτι Δυναμικού . . . 40

2.1.3 Φαινόμενο Σήραγγας . . . 44

2.2 Διακριτό Φάσμα . . . 50

2.2.1 Δυναμικό Τετραγωνικού Πηγαδιού Απείρου Βάθους . . . 50

2.2.2 Τετραγωνικό πηγάδι Δυναμικού πεπερασμένου βάθους . . . 52

2.2.3 Πηγάδι δυναμικού συνάρτησης δέλτα . . . 55
2.3 Μονοδιάστατος Αρμονικός Ταλαντωτής . . . 56
2.3.1 Αναλυτική λύση, πολυώνυμα Hermite . . . 57
2.3.2 Τελεστές Δημιουργίας και Καταστροφής . . . 61

3 Θεωρία διαταραχών 67
3.1 Διαταραχή μη εκφυλισμένων καταστάσεων . . . 67
3.1.1 Τοποθέτηση του προβλήματος . . . 67
3.1.2 Διαταραχή πρώτης τάξης . . . 69
3.1.3 Διαταραχή δεύτερης τάξης . . . 69
3.1.4 Εφαρμογές . . . 71
3.2 Διαταραχή εκφυλισμένων καταστάσεων . . . 72
3.3 Θεωρία διαταραχών εξαρτώμενη από το χρόνο . . . 76
3.3.1 Προσεγγιστικός υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης διαταρακτικά σε πρώτης τάξης προσέγγιση, διακριτό φάσμα . . . 77

4 Δυναμικό Coulomb- Λύση της εξίσωσης του Schrödinger 79
4.1 Κλασσική μηχανική - το πρόβλημα των δύο σωμάτων . . . 79
4.2 Κβαντική μηχανική - το πρόβλημα των δύο σωμάτων . . . 81
4.3 Χωρισμός μεταβλητών . . . 81
4.4 Σφαιρικές αρμονικές . . . 83
4.5 Λύση της ακτινικής εξίσωσης – Ενεργειακές ιδιοτιμές . . . 86

5 Τροχιακή Στροφορμή - spin- Πρόσθεση στροφορμών 91
5.1 Οι συνιστώσες του Τελεστή της Τροχιακής Στροφορμής σε Σφαιρικές Συντεταγμένες . . . 91
5.2 Αλγεβρικός υπολογισμός των ιδιοτιμών του τελεστή της στροφορμής . . . 94
5.3 Αναπαράσταση των τελεστών της στροφορμής με πίνακες . . . 97
5.3.1 Υπολογισμός των ιδιοσυναρτήσεων για ακέραια τιμή $j = l$ της στροφορμής . . . 98
5.4 Spin . . . 99
5.5 Πρόσθεση στροφορμών . . . 105
5.5.1 Πρόσθεση δύο spin$1/2$ . . . 108

1

Θεμελίωση της κβαντομηχανικής

1.1 Γραμμικοί διανυσματικοί χώροι

Όπως έχουμε μάθει στο εισαγωγικό μάθημα Κβαντομηχανικής στο προηγούμενο εξάμηνο, κάθε φυσικό σύστημα στο μικρόκοσμο περιγράφεται από μια μιγαδική συνάρτηση. Η συνάρτηση αυτή έχει όλη την πληροφορία για το φυσικό σύστημα και συνηθίζουμε να τη λέμε «κυματοσυνάρτηση» του συστήματος. Η κυματοσυνάρτηση περιγράφει πλήρως την κατάσταση του φυσικού συστήματος. Ακόμη, είδαμε ότι εάν δύο μιγαδικές συναρτήσεις $\Phi_1,\ \Phi_2$ είναι δυνατές καταστάσεις του συστήματος, τότε και κάθε γραμμικός συνδυασμός τους είναι μια δυνατή κατάσταση του συστήματος.
Τα μετρήσιμα φυσικά μεγέθη εκπροσωπούνται στην Κβαντομηχανική από μαθηματικές εκφράσεις, τους τελεστές. Οι τελεστές αυτοί έχουν σα βασική ιδιότητά τους τη γραμμικότητα.
Ξεκινάμε λοιπόν με τους γραμμικούς διανυσματικούς χώρους.

1.1.1 Ευκλείδειος τριδιάστατος χώρος, Υπόδειγμα ενός Γραμμικού Διανυσματικού χώρου

Ιδιότητες:

(α) Εάν τα διανύσματα $\mathbf{a}$ και $\mathbf{b}$ ανήκουν στον τριδιάστατο ευκλείδειο γραμμικό χώρο $\mathbb{S}$, τότε και το άθροισμά τους $\mathbf{a}+\mathbf{b}$ είναι διάνυσμα του χώρου $\mathbb{S}$.

Γενικότερα κάθε γραμμικός συνδυασμός $c_1\mathbf{a}+c_2\mathbf{b}$ είναι διάνυσμα του χώρου $\mathbb{S}$, όπου c_1, c_2 αυθαίρετοι σταθεροί πραγματικοί αριθμοί.

(β) Κάθε διάνυσμα $\mathbf{a}$ γράφεται στον τριδιάστατο γραμμικό χώρο σαν γραμμικός συνδυασμός τριών μοναδιαίων διανυσμάτων $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ και $\hat{\mathbf{e}}_3$, που λέμε ότι αποτελούν τη βάση του χώρου:

$$\mathbf{a} = a_1\hat{\mathbf{e}}_1 + a_2\hat{\mathbf{e}}_2 + a_3\hat{\mathbf{e}}_3$$

Τα τρία αυτά μοναδιαία διανύσματα τα επιλέγουμε έτσι ώστε να είναι μεταξύ τους κάθετα.

(γ) Το μέτρο του διανύσματος $\mathbf{a}$ δίνεται στον ευκλείδειο γραμμικό χώρο από τη σχέση:

$$|\mathbf{a}| = \left(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2\right)^{1/2}$$

(δ) Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων είναι ένας πραγματικός αριθμός και δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}|\,|\mathbf{b}|\cos\theta$$

όπου θ είναι η γωνία μεταξύ των δύο διανυσμάτων.

Για $\theta = \pi/2 \Rightarrow \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = 0 \Rightarrow$ ορθογώνια διανύσματα

(ε) Διανύσματα βάσης $\hat{\mathbf{e}}_k$

$$\hat{\mathbf{e}}_i\hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij}$$

όπου δ_{ij} το σύμβολο του Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & = & \text{για } i \neq j \\ 1, & = & \text{για } i = j \end{cases}$$

Τα $\hat{\mathbf{e}}_k$ είναι ορθοκανονικά διανύσματα. Για δύο διανύσματα $\mathbf{a} = a_1\hat{\mathbf{e}}_1 + a_2\hat{\mathbf{e}}_2 + a_3\hat{\mathbf{e}}_3$, $\mathbf{b} = b_1\hat{\mathbf{e}}_1 + b_2\hat{\mathbf{e}}_2 + b_3\hat{\mathbf{e}}_3$ ισχύει:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3$$

χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των ορθοκανονικών διανυσμάτων βάσης.

Κάθε σύνολο τριών γραμμικά ανεξάρτητων διανυσμάτων μπορεί να αποτελέσει βάση για τον τριδιάστατο γραμμικό χώρο.

1.1.2 Ο Διανυσματικός Χώρος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων

Υπάρχουν και γραμμικοί χώροι απείρων διαστάσεων. Τα διανύσματα του Ευκλείδειου χώρου αντικαθίστανται από μιγαδικές συναρτήσεις $\Psi_n(x)$ και δίνουν έναν **συναρτησιακό χώρο**, χώρος Hilbert.
Τις **συναρτήσεις βάσης** αποτελεί κάθε πλήρης ομάδα ορθοκανονικών συναρτήσεων.

Ιδιότητες:

(α) Γραμμικότητα (είναι μια ιδιότητα που επιβάλλεται στο χώρο από τα πειράματα).

Εάν $\Phi_1(x)$ και $\Phi_2(x)$ ανήκουν στο χώρο S, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός

$$\Phi(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x)$$

ανήκει επίσης στο χώρο S, με c_1, c_2, μιγαδικές σταθερές.

(β) Εσωτερικό γινόμενο

$$\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle \underset{\text{ορισμός}}{=} \int \Phi_1^\star(x)\Phi_2(x)\,\mathrm{d}x$$

όπου $\Phi_1^\star(x)$ είναι η μιγαδική συζυγής της $\Phi_1(x)$,

και $\mathrm{d}x = \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3$, εάν οι συναρτήσεις ορίζονται στον τριδιάστατο Ευκλείδειο χώρο $\mathbb{R}^3$.

Το εσωτερικό γινόμενο έχει όλες τις καλές ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου:

- $\langle \Phi_1, \Phi_1 \rangle \geq 0$,
- $\langle \Phi_1, a\Phi_2 \rangle = a\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle$
- $\langle \Phi_1, \Phi_2 + \Phi_3 \rangle = \langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle + \langle \Phi_1, \Phi_3 \rangle$

Οι κυματοσυναρτήσεις του γραμμικού χώρου είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, δηλαδή $\langle \Phi, \Phi \rangle < \infty$. Εάν $\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle = 0$ λέμε ότι οι δύο συναρτήσεις είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.

(γ) Απεικόνιση του $\mathbb{S} \to \mathbb{S}$ μέσω μιας μαθηματικής πράξης, δηλαδή ενός τελεστή $\hat{A}$:

$$\hat{A}\Phi \to \Phi', \quad \Phi \in \mathbb{S} \Rightarrow \Phi' \in \mathbb{S}$$

$$\hat{A} = A\left(x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \ldots\right)$$

(δ) Γραμμικότητα των τελεστών της Κβαντομηχανικής

$$\hat{A}(c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 + c_3\Phi_3) = c_1(\hat{A}\Phi_1) + c_2(\hat{A}\Phi_2) + c_3(\hat{A}\Phi_3)$$

1.2 Τελεστές

(1) Πρόσθεση τελεστών που δρουν σε χώρο Hilbert

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}, \quad \text{δηλαδή}: \hat{C}\Phi = (\hat{A} + \hat{B})\Phi = \hat{A}\Phi + \hat{B}\Phi$$

(2) Πολλαπλασιασμός Τελεστών

$$\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B} \Rightarrow \hat{C}\Phi = \hat{A}(\hat{B}\Phi), \ \forall \Phi \in \mathbb{S}$$

(3) Μεταθέτες Τελεστών

$$\hat{D} = [\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow \hat{D}\Phi = \hat{A}(\hat{B}\Phi) - \hat{B}(\hat{A}\Phi)$$

(γενικά, $\hat{D} \neq 0$)

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}$$

Εάν για δύο τελεστές ο μεταθέτης τους είναι μηδέν, λέμε ότι οι δύο τελεστές μετατίθενται.

Παράδειγμα

$$\hat{A} = x, \quad \hat{B} = \frac{\partial}{\partial x},$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]\Phi = x\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}(x\Phi) = -\Phi$$

$$\Rightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -1$$

Οι τελεστές αυτοί δε μετατίθενται.

---

(4) Αντίστροφος τελεστής $\hat{A}^{-1}$

$$\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} = 1$$

$$(\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1})\Phi = \hat{A}(\hat{A}^{-1}\Phi) = \Phi = \hat{A}^{-1}(\hat{A}\Phi)$$

(5) Ιδιοσυναρτήσεις και **ιδιοτιμές** Τελεστή

Λύση της εξίσωσης $\hat{A}\Phi = a\Phi$ για έναν τελεστή $\hat{A}$.

Το Φ ονομάζεται **Ιδιοσυνάρτηση** του $\hat{A}$ και το a ονομάζεται **ιδιοτιμή** του $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στην Ιδιοσυνάρτηση Φ.

Εάν οι Ιδιοτιμές είναι ένα διακριτό σύνολο, τότε το αριθμούμε και το συμβολίζουμε με a_n, οπότε

$$\Phi_n : \ \hat{A}\Phi_n = a_n\Phi_n$$

Εάν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ένας διαφορικός τελεστής τότε η **εξίσωση των ιδιοτιμών** αντιστοιχεί στη λύση μιας διαφορικής εξίσωσης.

Εάν σε μια ιδιοτιμή a του τελεστή $\hat{A}$ αντιστοιχούν δύο ή περισσότερες ιδιοσυναρτήσεις, γραμμικά ανεξάρτητες, οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές λέγονται **εκφυλισμένες**.

Οι συναρτήσεις $\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_k$ λέγονται **Γραμμικά Ανεξάρτητες** εάν, δοθείσης της

$$\beta_1\Phi_1 + \beta_2\Phi_2 + \ldots + \beta_k\Phi_k = 0$$

ισχύει

$$\beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_k = 0$$

(6) Ερμιτιανός Τελεστής $\hat{A}$ (ορισμός)

$$\int \Phi^\star(x)\Big(\hat{A}\Psi(x)\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}\Phi(x)\Big)^\star \Psi(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall \Phi, \Psi \in \mathbb{S}$$

αλλιώς από το συμβολισμό του εσωτερικού γινομένου γράφουμε:

$$\langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle$$

(7) Συζυγής Τελεστής του $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}^\dagger$

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

$$\langle \Phi, \hat{A}\Psi\rangle = \langle \hat{A}^\dagger\Phi, \Psi\rangle$$

Εφαρμογή: Υπολογισμός του $(\hat{A}\hat{B})^\dagger$.

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\hat{B}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \hat{B}\Psi\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

Όμως ισχύει επίσης:

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\hat{B}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big((\hat{A}\hat{B})^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

επομένως

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$$

Εφαρμογή: $(A^\dagger)^\dagger = A$

$$\begin{aligned}\int \Phi^\star(A\Psi)\mathrm{d}x &= \int (A^\dagger\Phi)^\star\Psi\mathrm{d}x = \left(\int (A^\dagger\Phi)\Psi^\star\mathrm{d}x\right)^\star = \left(\int \Psi^\star(A^\dagger\Phi)\mathrm{d}x\right)^\star \\ &= \left(\int \Big((A^\dagger)^\dagger\Psi\Big)^\star \Phi\mathrm{d}x\right)^\star = \int \Phi^\star(A^\dagger)^\dagger\Psi\mathrm{d}x,\ \forall\Phi,\Psi \\ &\Rightarrow A = (A^\dagger)^\dagger\end{aligned}$$

(8) Αυτοσυζυγής Τελεστής είναι αυτός για τον οποίο ισχύει

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Ο αυτοσυζυγής τελεστής είναι και ερμιτιανός.

(9) Γενικά για μια συνάρτηση $g(\hat{A})$ ενός τελεστή $\hat{A}$ ισχύει:

Παίρνουμε τη συνάρτηση $g(x)$ και την αναπτύσουμε κατά Taylor γύρω από το μηδέν:

$$g(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) x^n$$

$$\Rightarrow g(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) \hat{A}^n$$

Παράδειγμα: Να υπολογιστεί ο τελεστής της μετάθεσης $T(\alpha)$ που ορίζεται από τη σχέση

$$T(\alpha)\Psi(x) = \Psi(x+\alpha)$$

Λύση:

$$\begin{aligned}\Psi(x+\alpha) &= \Psi(x) + \Psi'(x)\alpha + \frac{1}{2}\Psi''(x)\alpha^2 + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n\Psi(x)}{\mathrm{d}x^n} \\ &= e^{\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\Psi(x) = T(\alpha)\Psi(x)\end{aligned}$$

$$\Rightarrow T(\alpha) = e^{\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} \qquad \text{μετάθεση κατά } \alpha.$$

1.2.1 Ιδιότητες των Ερμιτιανών Τελεστών

(α) Το άθροισμα δύο Ερμιτιανών Τελεστών είναι Ερμιτιανός Τελεστής.

(β) Εάν οι δύο Ερμιτιανοί Τελεστές μετατίθενται τότε το γινόμενό τους είναι Ερμιτιανός Τελεστής

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$$

(γ) Οι ιδιοτιμές ενός Ερμιτιανού Τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί.

$$\int \Phi_n^\star \hat{A} \Phi_n \, \mathrm{d}x = a_n \int \Phi_n^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x$$

Ακόμη,

$$\begin{aligned}\int \Phi_n^\star \hat{A} \Phi_n \, \mathrm{d}x &= \int (\hat{A}\Phi_n)^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = \int (\alpha_n \Phi_n)^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x \\ &= \alpha_n^\star \int \Phi_n^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x \\ &\Rightarrow \alpha_n = \alpha_n^\star\end{aligned}$$

(δ) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός Ερμιτιανού Τελεστή είναι ορθοκανονικές.

$$\int \Phi_m^\star \hat{A} \Phi_n \, \mathrm{d}x = a_n \int \Phi_m^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x$$

$$\int \Phi_m^\star \hat{A} \Phi_n \, \mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi_m)^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = \alpha_m^\star \int \Phi_m^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x$$

αλλά $\alpha_m^\star = \alpha_m$
επομένως

$$(\alpha_n - \alpha_m) \int \Phi_m^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = 0$$

Εάν $a_n \neq a_m$ έχουμε:

$$\int \Phi_m^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = 0$$

Ακόμη η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\Phi = \alpha\Phi$ είναι γραμμική, άρα μπορούμε να πολλαπλασιάσουμε τις Φ κατάλληλα ώστε

$$\begin{aligned}&\int \Phi_n^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = 1 \\ \Rightarrow &\int \Phi_m^\star \Phi_n \, \mathrm{d}x = \delta_{mn}\end{aligned}$$

(ε) Επαλληλία, πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων για τους ερμιτιανούς τελεστές της Κβαντομηχανικής.

Στην Κβαντομηχανική δεχόμαστε ότι:

Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος A ενός φυσικού συστήματος αντιστοιχούμε έναν Ερμιτιανό Τελεστή. Οι ιδιοτιμές του τελεστή συμπίπτουν με όλες τις δυνατές τιμές του A κατά τη μέτρηση. Όλοι οι Ερμιτιανοί Τελεστές που χρησιμοποιούνται στην Κβαντομηχανική έχουν ένα πλήρες σύστημα Ιδιοσυναρτήσεων, δηλαδή $\forall \Phi \in \mathbb{S}$ έχουμε:

$$\Phi = \sum_n c_n \Phi_n,$$

όπου $\hat{A}\Phi_n = \alpha_n \Phi_n$ και $\int \Phi_n^\star \Phi_m \, \mathrm{d}x = \delta_{nm}$.

Υπολογισμός των συντελεστών c_n στο ανάπτυγμα της Φ:

$$\int \Phi_n^\star \Phi \, \mathrm{d}x = \sum_m c_m \int \Phi_n^\star \Phi_m \, \mathrm{d}x = \sum_m c_m \delta_{mn}$$

επειδή $\sum_m c_m \delta_{nm} = c_n$

$$\Rightarrow c_n = \int \Phi_n^\star \Phi \, \mathrm{d}x$$

(στ) Η αναμενόμενη (μέση) τιμή ενός ερμιτιανού τελεστή είναι πάντοτε πραγματικός αριθμός.

Έστω

$$\alpha = \int \Phi^\star(\hat{A}\Phi)\,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi)^\star \Phi\,\mathrm{d}x$$

$$\alpha^\star = \left[\int \Phi^\star(\hat{A}\Phi)\,\mathrm{d}x\right]^\star = \int \Phi(\hat{A}\Phi)^\star\,\mathrm{d}x = \alpha$$

Μπορεί να δειχτεί και το **αντίστροφο**:

Εάν η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ ως προς κάθε διάνυσμα του $\mathbb{S}$ είναι πραγματικός αριθμός, τότε ο τελεστής είναι ερμιτιανός.

Απόδειξη. Παίρνουμε δύο συναρτήσεις του $\mathbb{S}$, έστω τις Φ_1 και Φ_2 και φτιάχνουμε την $\Psi = \Phi_1 + \alpha\Phi_2$, με α αυθαίρετο αριθμό.

Η αναμενόμενη τιμή της $\hat{A}$ ως προς την Ψ είναι ένας πραγματικός αριθμός, δηλαδή:

$$\int \Psi^\star \hat{A}\Psi\,\mathrm{d}x = \left(\int \Psi^\star \hat{A}\Psi\right)^\star = \int (\hat{A}\Psi)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \int (\Phi_1 + \alpha\Phi_2)^\star \hat{A}(\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\,\mathrm{d}x = \int (\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\left[\hat{A}(\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\right]^\star\,\mathrm{d}x.$$

$$\int \Phi_1^\star \hat{A}\Phi_1\,\mathrm{d}x + \alpha\int \Phi_1^\star \hat{A}\Phi_2\,\mathrm{d}x + \alpha^\star\int \Phi_2^\star \hat{A}\Phi_1\,\mathrm{d}x + |\alpha|^2\int \Phi_2^\star \hat{A}\Phi_2\,\mathrm{d}x$$

$$= \int \Phi_1(\hat{A}\Phi_1)^\star\,\mathrm{d}x + \alpha\int \Phi_2(\hat{A}\Phi_1)^\star\,\mathrm{d}x + \alpha^\star\int \Phi_1(\hat{A}\Phi_2)^\star\,\mathrm{d}x + |\alpha|^2\int \Phi_2(\hat{A}\Phi_2)^\star\,\mathrm{d}x$$

Ισχύει για κάθε $\alpha \Rightarrow$

$$\int \Phi_1^\star(\hat{A}\Phi_2)\,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi_2)^\star \Phi_1\,\mathrm{d}x \quad \forall \Phi_1, \Phi_2$$

Επομένως ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. □

1.2.2 Δύο προτάσεις για τη σύνδεση μεταξύ Πειράματος και Θεωρίας

1. Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ που είναι συνάρτηση της θέσης **(r)** και της ορμής **(p)** αντιστοιχεί ένας Ερμιτιανός Κβαντικός Τελεστής $\hat{A}(\hat{r}, \hat{p})$ που φτιάχνεται βάζοντας όπου $\hat{r} = \mathbf{r}$ και $\hat{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$.
2. Οι τιμές ενός μετρήσιμου φυσικού μεγέθους $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ ισούνται με τις ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή $\hat{A}(\hat{r}, \hat{p})$, που υπολογίζονται από την αντίστοιχη εξίσωση ιδιοτιμών

$$\hat{A}(\mathbf{r}, -i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\Phi_n(\mathbf{r})$$

Παράδειγμα 1. Δείξτε ότι ο τελεστής της ορμής $\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ είναι ερμιτιανός στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.

Λύση:

Για να είναι κανονικοποιημένες οι συναρτήσεις πρέπει να τείνουν στο μηδέν για $x \to \pm\infty$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star(\hat{p}_x\Phi_2)\,\mathrm{d}x &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star\frac{\mathrm{d}\Phi_2}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x \\
&= (-i\hbar)\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\Phi_1^\star\Phi_2)\,\mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\Phi_1^\star}{\mathrm{d}x}\Phi_2\,\mathrm{d}x\right)\right] \\
&= (-i\hbar)\left[\Phi_1^\star\Phi_2\right]\Big|_{-\infty}^{+\infty} + (i\hbar)\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\Phi_1}{\mathrm{d}x}\right)^\star\Phi_2\,\mathrm{d}x \\
&= \text{μηδέν} + \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}\Phi_1}{\mathrm{d}x}\right)^\star\Phi_2\,\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{p}_x\Phi_1)^\star\Phi_2\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Θα χρησιμοποιώ πολλές φορές τους τελεστές p_x, p_y, p_z της ορμής χωρίς το σύμβολο ˆ από επάνω.

Παράδειγμα 2. Εάν για το **δυναμικό** (δυναμική ενέργεια) ισχύει $V^\star = V$, τότε ο τελεστής της Ολικής Ενέργειας, δηλαδή η **Χαμιλτονιανή** $\hat{H}$ **του συστήματος είναι ερμιτιανός τελεστής** στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

Ας πάρουμε μόνο την $p_x = -i\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ και $\hat{V} = V(x)$.

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star \hat{H} \Phi_2 \,\mathrm{d}x &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star p_x^2 \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star V(x) \Phi_2 \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} (p_x \Phi_1)^\star p_x \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} (V(x)\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} (p_x^2 \Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} (V(x)\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{H}\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Όμοια για τα p_y^2 και p_z^2. Ακόμη, $p_x^2 \Phi_2(x) \equiv p_x(p_x \Phi_2)$.
Εάν $\Phi_2 \to 0$ για $x \to \pm\infty$ και το $\mathrm{d}\Phi_2/\mathrm{d}x \to 0$, $x \to \pm\infty$.

1.3 Βασικές Στατιστικές Έννοιες

1.3.1 Μέση τιμή

Έχουμε ένα στατιστικό μέγεθος A που παίρνει διακριτές τιμές $a_1, a_2, \ldots, a_\nu$. Σε μια σειρά μετρήσεων N έχουμε N_1 φορές το $a_1, \ldots, N_\nu$ φορές το a_ν. Η μέση τιμή του A δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \frac{N_1 a_1 + \ldots + N_\nu a_\nu}{N} = a_1\frac{N_1}{N} + \ldots + a_\nu\frac{N_\nu}{N}\\ &= a_1 f_1 + \ldots + a_\nu f_\nu = \sum_{k=1}^{\nu} a_k f_k\end{aligned}$$

όπου f_k οι συχνότητες εμφάνισης της k τιμής. Αν το $N \to \infty$ τότε $f_k \to P_k$, που είναι η πιθανότητα εμφάνισης της τιμής.

$$\Rightarrow \langle A\rangle = a_1 P_1 + \ldots + a_\nu P_\nu = \sum_{k=1}^{\nu} a_k P_k$$

και

$$\sum_{k=1}^{\nu} P_k = 1$$

Για μια τυχούσα συνάρτηση $G(A)$ ενός στατιστικού μεγέθους A, οι δυνατές τιμές είναι οι $g_\nu = G(a_\nu)$

$$\Rightarrow \langle G(A)\rangle = \sum_{k=1}^{\nu} g_k P_k = \sum_{k=1}^{\nu} G(a_k) P_k$$

1.3.2 Συνεχής Κατανομή, Πυκνότητα Πιθανότητας

Εάν οι τιμές που παίρνει ένα στατιστικό μέγεθος A είναι συνεχείς, τότε ορίζουμε την πιθανότητα να βρεθεί η τιμή του A σε ένα διάστημα απειροστό γύρω από κάποια τιμή a, δηλαδή στο διάστημα

$$\left(a - \frac{da}{2}, a + \frac{da}{2}\right) \text{ ίση με } P(a)da$$

όπου

$$\Rightarrow P(a) = \text{ πυκνότητα πιθανότητας}$$

$$\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} aP(a)da$$

$$P(a_1 < a < a_2) = \int_{a_1}^{a_2} P(a)\,da$$

και

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(a)\,da = 1$$

Για μια τυχούσα συνάρτηση $G(A)$ του στατιστικού μεγέθους A:

$$\langle G(A)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G(a)P(a)\,da$$

1.3.3 Διασπορά $(\Delta A)^2$ και Τυπική Απόκλιση ΔA

$$(\Delta A)^2 = \langle \big(A - \langle A\rangle\big)^2\rangle, \quad \Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle}$$

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a - \langle A\rangle)^2 P(a)\,da\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 P(a)\,da - 2\langle A\rangle \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} aP(a)\,da}_{\langle A\rangle} + \langle A\rangle^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} P(a)\,da}_{=1}\\ &= \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\end{aligned}$$

Για διακριτή κατανομή έχουμε:

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \sum_{k=1}^{\nu}(a_k - \langle A\rangle)^2 P(a_k)\\ &= \sum_k a_k^2 P_k - 2\langle A\rangle \sum_k a_k P_k + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2\\ &= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\end{aligned}$$

Εάν η διασπορά μιας στατιστικής κατανομής είναι μηδέν, τότε η κατανομή αποτελείται από μία μόνο τιμή με πιθανότητα 1. Άρα όλες οι μετρήσεις θα δίνουν σαν αποτέλεσμα αυτή την μοναδική τιμή.

$$(\Delta A)^2 = 0 \Rightarrow a = \langle A\rangle$$

Απόδειξη για διακριτή κατανομή.

$$\sum_{\kappa=1}^{\nu}(a_k - \langle A\rangle)^2 P_\kappa = 0$$

αλλά $P_\kappa \geq 0$ και $(a_\kappa - \langle A\rangle)^2 \geq 0$ οπότε

$$\langle A\rangle = a_{\kappa 0} \quad \text{και} \quad P_{\kappa 0} = 1,\ P_\kappa = 0 \ \text{ για κάθε } k \neq k_0,$$

διότι $\sum_\kappa P_\kappa = 1$. □

1.3.4 Στατιστικές Ροπές

Στατιστική Ροπή τάξης n (n-οστής τάξης) μιας στατιστικής κατανομής ονομάζουμε τη μέση τιμή της νιοστής δύναμης της στατιστικής μεταβλητής.

$$I_n = \langle A^n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a^n P(a)\, da$$

Ξέροντας τις στατιστικές ροπές I_n ($n = 1, 2, \ldots, \infty$) μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της τυχούσας συνάρτησης $G(A)$ που μπορεί να αναπτυχθεί σε δυναμοσειρά Taylor.
Εάν θεωρήσουμε τη συνάρτηση $F(A, \xi) = e^{i\xi A}$, τότε

$$\begin{aligned}f(\xi) = \langle e^{i\xi A}\rangle &= \langle \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!} A^n\rangle\\ &= \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!}\langle A^n\rangle = \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!} I_n\end{aligned}$$

Η συνάρτηση $f(\xi)$ ονομάζεται **χαρακτηριστική συνάρτηση** της στατιστικής κατανομής.

$$f(\xi) = \langle e^{i\xi A}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi a} P(a)\, da$$

και

$$P(a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi) e^{-i\xi a} \mathrm{d}\xi$$

$$\Rightarrow I_n \to f(\xi) \to P(a)$$

1.4 Εξίσωση του Schrödinger

Ένα σωματίδιο περιγράφεται στην Κβαντομηχανική από μια μιγαδική συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ του χώρου και του χρόνου, που ονομάζεται κυματοπακέτο ή **κυματοσυνάρτηση**.
Αυτή η κυματοσυνάρτηση περιέχει όλη την πληροφορία για το σύστημα.
Η διαφορική εξίσωση που μας δίνει ως λύση την $\Psi(\mathbf{r}, t)$ για ένα σωματίδιο που βρίσκεται υπό την επίδραση δυνάμεων είναι η εξίσωση του Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

Η εξίσωση αυτή δεν είναι συνέπεια κάποιου άλλου φυσικού νόμου. Αυτή η εξίσωση *είναι* ο βασικός φυσικός νόμος.
Παίρνοντας κλασσικά την ολική ενέργεια ενός σώματος, όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, έχουμε:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$$

Παίρνοντας και τον τελεστή της ορμής,

$$\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

έχουμε

$$\hat{H}(\mathbf{r},t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)$$

γενικεύοντας και για χρονικά μεταβαλλόμενες δυνάμεις. Αυτή η έκφραση είναι η Χαμιλτονιανή H του συστήματος. Οπότε η εξίσωση του Schrödinger γράφεται ως εξής:

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

Μπορούμε να βρούμε μια αντιστοιχία μεταξύ της *ορμής και ενέργειας* ενός σωματιδίου με το *μήκος κύματος και τη συχνότητα* για ένα κύμα, όταν $V(\mathbf{r},t) = 0$:

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}\Psi = E\Psi$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{κλασσικά}$$

Εαν $\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ επίπεδο μονοχρωματικό κύμα,

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \nu = \frac{E}{h}$$

$$\omega = 2\pi\nu \qquad \text{και} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = ik\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = (ik)^2\Psi = -k^2\Psi$$

Συνεπώς για να ικανοποιεί αυτό το κύμα την εξίσωση του Schrödinger έχουμε:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi$$

και επειδή $E = p^2/2m$ κλασσικά, θα έχουμε:

$$p = \hbar k \Rightarrow p = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \qquad \text{Σχέση του De Broglie}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}$$

h είναι η σταθερά του Planck και ισούται με $6,63 \times 10^{-34}$ Joule $\cdot$ sec.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}\,\text{Joule} \cdot \text{sec.}$$

Ιστορικά τα πράγματα πηγαίνουν ανάποδα:
De Broglie$\Rightarrow$ σε κάθε σωματίδιο έχουμε

$$\lambda = h/p, \quad \nu = \frac{E}{h} \quad \text{και} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Άρα ποια διαφορική εξίσωση δίνει τη λύση;
Εξίσωση από τον Schrödinger$\Rightarrow$

$$\text{ορμή}\, p = \text{ διαφορικός τελεστής } = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

1.4.1 Λύση της Εξίσωσης του Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \tag{1.1}$$

Η εξίσωση του Schrödinger μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Αναζητούμε λοιπόν λύση της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$$

Τέτοια λύση υπάρχει μόνον όταν $V = V(\mathbf{r})$. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (1.1), όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, βρίσκουμε:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi\right]\Phi = i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}\Psi$$

Διαιρούμε και τα δύο μέλη με τη $\Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$ οπότε παίρνουμε,

$$\underbrace{\frac{\hat{H}\Psi(\mathbf{r})}{\Psi(\mathbf{r})}}_{\substack{\text{συνάρτηση}\\ \text{μόνο των } x,y,z}} = \underbrace{i\hbar\frac{1}{\Phi}\frac{\partial\Phi}{\partial t}}_{\text{συνάρτηση μόνο του } t}$$

Ισχύει η ισότητα για κάθε x, y, z, t. Άρα κάθε όρος είναι ένας σταθερός αριθμός, έστω W. Επομένως παίρνουμε τις σχέσεις:

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\Psi = W\Psi \\ i\hbar\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t} = W\Phi(t) \quad \Rightarrow \quad \Phi(t) = e^{-iWt/\hbar} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iWt/\hbar}$$

Ποια είναι η φυσική σημασία της σταθεράς W; Η W είναι η ενέργεια E του σωματιδίου στην κατάσταση $\Psi(\mathbf{r})$, όπως εύκολα φαίνεται από τα προηγούμενα όταν $V = 0$. Επομένως,

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \tag{1.2}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{1.3}$$

Άρα E είναι μια ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής και $\Psi(\mathbf{r})$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα ή ιδιοσυνάρτηση. Λύνουμε λοιπόν πρώτα την (1.2) και τότε η (1.3) μας δίνει τη χρονική εξάρτηση.

1.4.2 Στατιστική ερμηνεία της Κυματοσυνάρτησης

Όταν κάνουμε μια μέτρηση δε μπορούμε να βρούμε ακριβώς τη θέση x που βρίσκεται το σώμα. Αυτό που μπορούμε να βρούμε είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σώμα σε αυτήν τη θέση, και αυτή η πιθανότητα είναι ανάλογη με την κυματοσυνάρτηση. Όσο μεγαλύτερη η κυματοσυνάρτηση σε ένα σημείο, τόσο μεγαλύτερη η πιθανότητα.

Η κυματοσυνάρτηση εκφράζει ένα **πλάτος πιθανότητας** *(κατά Born), της οποίας το τετράγωνο της απόλυτης τιμής δίνει την* **πυκνότητα της πιθανότητας** *να βρεθεί ένα σύστημα σε μια περιοχή του χώρου, κάποια χρονική στιγμή*

$$P(\mathbf{r},t) = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$$

Η ολική πιθανότητα να βρίσκεται το σωμάτιο τη χρονική στιγμή t κάπου μέσα στο χώρο εκφράζεται από το ολοκλήρωμα

$$C = \int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{d}^3x$$

και αυτή η πιθανότητα πρέπει να είναι μονάδα. Άρα αυτό το ολοκλήρωμα πρέπει να συγκλίνει για κάθε t. Με αυτό τον τρόπο κανονικοποιούμε την κυματοσυνάρτηση ώστε να δίνει πιθανότητα ένα. Συναρτήσεις με αυτή την ιδιότητα ονομάζονται **τετραγωνικά ολοκληρώσιμες**.

Θα δείξουμε τώρα ότι το C είναι ανεξάρτητο του χρόνου (για μία διάσταση μόνο).

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

αλλά

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

και

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = (\hat{H}\Psi)^*$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \qquad \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi)^*$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{H}\Psi)^*\Psi\,\mathrm{d}x - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(\hat{H}\Psi)\,\mathrm{d}x$$

Ο τελεστής $\hat{H}$ είναι ερμιτιανός

$$\Rightarrow \int(\hat{H}\Psi)^*\Psi\,\mathrm{d}x = \int\Psi^*(\hat{H}\Psi)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = 0$$

και η ολική πιθανότητα $\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Άρα κανονικοποιώντας για ένα συγκεκριμένο $t = t_0$ ισχύει για κάθε t.

1.4.3 Ιδιότητες των Κυματοσυναρτήσεων

α) Οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r},t)$ που περιγράφουν ένα φυσικό σύστημα σε μια κατάσταση και οι ιδιοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r})$ του τελεστή $\hat{H}$ της ολικής ενέργειας, καθώς και οι πρώτες παράγωγοί τους πρέπει να είναι συνεχείς, μονότιμες και πεπερασμένες σε όλο το χώρο ορισμού των. (Για να είναι δεκτές λύσεις της $\hat{H}\Psi = E\Psi$)
Ακόμη, θέλουμε το

$$\int_V \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{d}^3x$$

να είναι πεπερασμένο. Δηλαδή ο γραμμικός χώρος των κυματοσυναρτήσεων αποτελείται από τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες μιγαδικές συναρτήσεις.
Έστω ότι πάμε σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\mathrm{d}^3x = r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$$

Εάν $|\Psi(r)| \xrightarrow[r\to\infty]{} r^\alpha$ τότε,

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi \xrightarrow[r\to\infty]{} r^{2\alpha}$$

$$\Rightarrow \int\Psi^*\Psi\mathrm{d}^3x \xrightarrow[r\to\infty]{} \int r^{2\alpha+2}\,\mathrm{d}r$$

Για να συγκλίνει αυτό το ολοκλήρωμα θέλουμε

$$2\alpha + 2 < -1 \Rightarrow 2\alpha + 3 < 0$$

$$\Rightarrow \alpha < -\frac{3}{2}$$

Εάν $2\alpha + 2 = -1$ τότε

$$\int \frac{\mathrm{d}r}{r} \simeq \ln r,$$

το οποίο αποκλίνει. Εάν $2\alpha + 2 > -1$ το ολοκλήρωμα δίνει θετική δύναμη του r και αποκλίνει και πάλι.

β) Αρχή της Επαλληλίας: Εάν $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ είναι ιδιοσυνάρτηση του ερμιτιανού τελεστή της ολικής Ενέργειας με ιδιοτιμή E_n, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός των $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ που ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες δίνει μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ που θα μπορούσε να περιγράψει το σύστημα σε μια κατάσταση

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}, t)$$

οι αριθμοί α_n ($0 \leq \alpha_n \leq 1$) εκφράζουν το βαθμό συμμετοχής κάθε Ψ_n στην Ψ. Η ποσότητα $|\alpha_n|^2 = \alpha_n^* \alpha_n$ σχετίζεται με την πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής E_n σε μια μέτρηση του μεγέθους E. Ακόμη,

$$\alpha_n = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x$$

και

$$\sum_n |\alpha_n|^2 = \sum_n \alpha_n^* \alpha_n = 1$$

για να δίνει το $|\Psi|^2$ την πυκνότητα πιθανότητας.
Ισχύει

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

και

$$\int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^3 x = \delta_{nm}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x &= \sum_m \alpha_m \int \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^3 x e^{-i(E_m - E_n)/\hbar} \\ &= \sum_m \alpha_m \delta_{nm} e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} = \alpha_n \end{aligned}$$

εφόσον η $\Psi(\mathbf{r}, t)$ είναι κυματοσυνάρτηση ενός φυσικού συστήματος, απαιτούμε

$$\int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x = 1$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 1 = \int_V \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}^3 x &= \sum_n \sum_m \alpha_n^* \alpha_m \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(r) \Psi_m(r) e^{-i(E_m - E_n)t} \, \mathrm{d}^3 x \\ &= \sum_n \sum_m \alpha_n^* \alpha_m \delta_{nm} e^{-i(\Delta E_{nm})t} \\ &= \sum_n \alpha_n^* \alpha_n \end{aligned}$$

Η $\Psi(\mathbf{r}, t)$, που είναι γραμμική επαλληλία των Ψ_n, ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger. Πράγματι:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_n \alpha_n (i\hbar) \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \sum_n \alpha_n \hat{H} \Psi_n = \hat{H} \Psi$$

Οι αριθμοί α_n είναι σταθεροί στο χρόνο και μπορούν να υπολογιστούν εάν ξέρουμε τη συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ για μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή t_0, έστω $t_0 = 0$

$$\Rightarrow \alpha_n = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, 0) \, \mathrm{d}^3 x$$

Χρονική Εξέλιξη Κυματοσυνάρτησης

Εάν ξέρουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},0)$, μπορούμε να ορίσουμε έναν τελεστή $\hat{S}(t)$ έτσι ώστε

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{S}(t)\Psi(\mathbf{r},0)$$

Η Ψ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger:

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},0) = \hat{H}\hat{S}(t)\Psi(\mathbf{r},0)$$

$$\Rightarrow \left[i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t} - \hat{H}\hat{S}\right]\Psi(\mathbf{r},0) = 0 \quad \forall t \quad \text{και} \quad \forall\Psi$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t} = \hat{H}\hat{S}, \quad \text{εάν } \frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$\Rightarrow \hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar},$$

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \sum_n \alpha_n\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r},t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Psi(\mathbf{r},0) = \sum_n \alpha_n e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$= \sum_n \alpha_n\Psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_nt/\hbar}$$

διότι

$$\mathrm{e}^{-i\mathbf{H}t}\Psi_n(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\Psi_n(\mathbf{r})$$

εάν $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$.

γ) Ιδιοκαταστάσεις ή στάσιμες καταστάσεις ενός συστήματος

Έστω η $\Psi_n(\mathbf{r},t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος σε μια κατάσταση με ενέργεια E_n. Η **πυκνότητα πιθανότητας** είναι

$$\Psi_n^*(\mathbf{r},t)\Psi_n(\mathbf{r},t) = \Psi_n^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r})e^{iE_nt/\hbar}e^{-iE_nt/\hbar} = \Psi_n^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r})$$

και είναι **ανεξάρτητη του χρόνου**. Αυτές οι καταστάσεις λέγονται **στάσιμες καταστάσεις**, και αντιστοιχούν σε **σταθερή ενέργεια**.
Εάν όμως έχουμε την κυματοσυνάρτηση του συστήματος να είναι ένας γραμμικός συνδυασμός από $\Psi_n(\mathbf{r},t)$, τότε

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n\Psi_n(\mathbf{r},t)$$

και

$$\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_l^*a_n\Psi_l^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r}) + \sum_{\substack{n,l\\ n\neq l}} a_n^*a_l\Psi_n^*\Psi_l e^{-i(E_l-E_n)t/\hbar}$$

δηλαδή η πυκνότητα πιθανότητας δεν είναι σταθερή με το χρόνο, και εκτελεί γενικά ταλάντωση με γωνιακή συχνότητα π.χ.

$$\omega_{nl} = \frac{E_n - E_l}{\hbar}$$

ανάμεσα στις Ψ_n, Ψ_l ιδιοκαταστάσεις του συστήματος.

δ) Μέση ή Αναμενόμενη Τιμή

Εφόσον $P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ είναι η πιθανότητα το σωματίδιο να είναι στη θέση x τότε η μέση τιμή της θέσης είναι:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,t)^*(\hat{x}\Psi(x,t))\,\mathrm{d}x$$

όπου $\hat{x}\Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$.

Αυτός ο τύπος ισχύει για κάθε δύναμη του $\hat{x}^n$:

$$\langle x^k \rangle = \int \Psi^*(x,t) x^k \Psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

Γενικεύοντας λοιπόν έχουμε ότι η **μέση τιμή** για κάθε φυσικό μέγεθος A που δίνεται από τον τελεστή $\hat{A}$, όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση Ψ, ειναι

$$\langle A \rangle = \int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}^3x$$

και όμοια,

$$\langle A^k \rangle = \int \Psi^* \hat{A}^k \Psi\,\mathrm{d}^3x$$

Άρα ειδικά για την ενέργεια έχουμε, εάν:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r},t), \qquad \hat{H}\Psi_n(\mathbf{r}) = E_n\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi\,\mathrm{d}^3x$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n$$

Εάν $\Phi(\mathbf{r},t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση για έναν ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ, τότε

$$\hat{A}\Phi = \lambda\Phi$$

και η μέση τιμή του $\hat{A}$ είναι:

$$\langle A \rangle = \int \Phi^* \hat{A}\Phi\,\mathrm{d}^3x = \lambda \int \Phi^*\Phi\,\mathrm{d}^3x = \lambda$$

και η διασπορά είναι

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0$$

Άρα η μόνη τιμή που παίρνουμε κατά τη μέτρηση της ποσότητας A είναι η λ.

Εάν $\Phi_n(\mathbf{r},t)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$ και του $\hat{H}$ συγχρόνως, τότε γράφουμε τη λύση του συστήματος $\Psi(\mathbf{r},t)$ σαν επαλληλία των Φ_n και έχουμε:

$$\Psi = \sum_n a_n \Phi_n, \quad a_n \text{ σταθερές στο χρόνο}$$

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x = \sum_n a_n^* a_n \lambda_n$$

ανεξάρτητη του χρόνου. Δηλαδή, $|a_n|^2 = \alpha_n^* a_n = P_n =$ Πιθανότητα να βρούμε την τιμή λ_n για το φυσικό μέγεθος A σε μια μέτρηση.

Το μέγεθος A με μέση τιμή ανεξάρτητη του χρόνου λέμε ότι είναι **διατηρήσιμο μέγεθος**.

Εάν οι ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$ δεν είναι και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$, τότε εάν το σύστημα είναι στην κατάσταση $\Phi(\mathbf{r},t)$ με $\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r},t)$:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

Η μέση τιμή του μεγέθους A είναι:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int \Phi^* \hat{A}\Phi \,\mathrm{d}^3x = \sum_{n,m} a_n^* a_m \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x \\ &= \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar} \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r})\hat{A}\Psi_m(\mathbf{r}) \,\mathrm{d}^3x\end{aligned}$$

Ορίζουμε $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$. Το

$$A_{nm} = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r})\hat{A}\Psi_m(\mathbf{r}) \,\mathrm{d}^3x$$

είναι το στοιχείο (n,m) του πίνακα A. Επειδή ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός συνεπάγεται ότι $A_{nm} = A_{mn}^*$.

$$\Rightarrow \langle A\rangle = \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i\omega_{mn}t} A_{nm}$$

είναι χρονικά εξαρτημένη.

$$A_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x, \qquad A_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{A}\Psi_n \,\mathrm{d}^3x$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow (A_{mn})^* &= \left(\int \Psi_m^*(\hat{A}\Psi_n) \,\mathrm{d}^3x\right)^* = \int (\hat{A}\Psi_n)^*\Psi_m \,\mathrm{d}^3x \\ &= \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x = A_{nm}\end{aligned}$$

Το ότι ο $\hat{A}$ είναι Ερμιτιανός Τελεστής συνεπάγεται ότι ο $A_{k\lambda}$ είναι Ερμιτιανός Πίνακας.

1.4.4 Εξίσωση του Schrödinger για περισσότερα από ένα σωμάτια

Εάν ένα σύστημα αποτελείται από N σωμάτια με συντεταγμένες $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$ και ορμές $\mathbf{p}_k = (p_{xk}, p_{yk}, p_{zk})$, τότε η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = \sum_{k=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + V(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$$

Αντικαθιστώντας τα φυσικά μεγέθη με τους αντίστοιχους τελεστές θέσης και ορμής έχουμε:

$$\mathbf{p}_k = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial y_k}, \frac{\partial}{\partial z_k}\right)$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{k=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_k}\nabla_k^2 + V(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \\ \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) &= i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)\end{aligned}\right\}$$

Η πιθανότητα το σώμα 1 να βρεθεί γύρω από τη θέση $\mathbf{r}_1$, ..., το σώμα N να βρεθεί γύρω από τη θέση $\mathbf{r}_N$ είναι:

$$P(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)dV_1 \cdots dV_N = \Psi^*(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)\mathrm{d}\mathbf{V}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{V} = \mathrm{d}V_1 \cdots \mathrm{d}V_N = \mathrm{d}^3x_1 \cdots \mathrm{d}^3x_N$$

με

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) = \Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)\Phi(t)$$

$$\Rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi \qquad \text{και} \qquad \Phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

1.5 Μεταθετικές Ιδιότητες Τελεστών

Ως **Μεταθέτης** δύο τελεστών $\hat{A}, \hat{B}$ έχει οριστεί η σχέση

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Εάν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, λέμε ότι οι δύο **τελεστές μετατίθενται**.

Όταν οι τελεστές δύο μεγεθών A, B μετατίθενται τότε τα δύο αυτά μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα και με απόλυτη ακρίβεια. Τα μεγέθη A, B λέγονται **συμβιβαστά**, αλλιώς εάν $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ λέγονται **ασυμβίβαστα**.

(1) Όταν δύο μεγέθη είναι συμβιβαστά, δηλαδή μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως (και με απόλυτη ακρίβεια) τότε οι τελεστές τους μετατίθενται.

Απόδειξη. Όταν ένα μέγεθος A μετριέται, το σύστημα βρίσκεται μετά τη μέτρηση σε μια ιδιοσυνάρτηση Ψ_k του τελεστή $\hat{A}$:

$$\hat{A}\Psi_k = \alpha_k \Psi_k$$

του τελεστή $\hat{A}$, αλλά τότε η Ψ_k είναι και ιδιοσυνάρτηση του B: $\hat{B}\Psi_k = \beta_k \Psi_k$. Άρα κάθε ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$ είναι και ιδιοσυνάρτηση του $\hat{B}$ και ανάποδα. Άρα,

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_k = \alpha_k\beta_k\Psi_k - \beta_k\alpha_k\Psi_k = 0$$

Κάθε κυματοσυνάρτηση γράφεται σαν επαλληλία των Ψ_k: $\Psi = \sum_k c_k \Psi_k$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi &= \hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) - \hat{B}(\hat{A}\Psi) \\
&= \hat{A}(\sum_k c_k\beta_k\Psi_k) - \hat{B}(\sum_k c_k\alpha_k\Psi_k) \\
&= \sum_k c_k\beta_k\alpha_k\Psi_k - \sum_k c_k\alpha_k\beta_k\Psi_k = 0
\end{aligned}$$

□

(2) Αν οι δύο τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ μετατίθενται και ο ένας, έστω ο $\hat{A}$ έχει μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις, τότε αυτές θα είναι ιδιοσυναρτήσεις και του άλλου, του $\hat{B}$. Άρα τα δύο μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα.

Εάν $\hat{A}\Psi_k = \alpha_k\Psi_k$ μη εκφυλισμένη ιδιοσυνάρτηση, τότε

$$\left.\begin{aligned}
\hat{B}(\hat{A}\Psi_k) &= \hat{A}(\hat{B}\Psi_k) \\
\hat{B}(\hat{A}\Psi_k) &= \alpha_k\hat{B}\Psi_k
\end{aligned}\right\} \Rightarrow \hat{A}(\hat{B}\Psi_k) = \alpha_k(\hat{B}\Psi_k)$$

άρα η συνάρτηση $\Phi = \hat{B}\Psi_k$ ιδιοσυνάρτηση του A με ιδιοτιμή α_k μη εκφυλισμένη. Συνεπάγεται ότι η Φ είναι ανάλογη της Ψ_k και άρα $\Phi = \beta_k\Psi_k$

$$\Rightarrow \hat{B}\Psi_k = \beta_k\Psi_k$$

(3) Αν δύο τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ μετατίθενται και ο ένας από αυτούς έχει εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις, τότε με κατάλληλο γραμμικό συνδυασμό αυτών μπορούμε να κατασκευάσουμε ιδιοσυναρτήσεις του άλλου. Δηλαδή μπορούμε να κατασκευάσουμε κοινές ιδιοσυναρτήσεις και των δύο τελεστών.

Ιδιότητες των μεταθετών

- $[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{B}, \hat{A}] = 0$
- $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$
- $[\hat{A}, \lambda\hat{B} + \mu\hat{C}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] + \mu[\hat{A}, \hat{C}]$

- $[\alpha\hat{A}+\beta\hat{B},\hat{C}]=\alpha[\hat{A},\hat{C}]+\beta[\hat{B},\hat{C}]$
- $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}\pm\hat{B}\hat{A}\hat{C}$
  $=[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$
- $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}]=?=[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\hat{D}+\hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B}+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D}+\hat{C}\hat{A}[\hat{B},\hat{D}]$

Μνημονικός Κανόνας. Παίρνουμε όλους τους δυνατούς μεταθέτες:

$$[\hat{A},\hat{C}],\quad [\hat{A},\hat{D}],\quad [\hat{B},\hat{C}],\quad [\hat{B},\hat{D}]$$

και πολλαπλασιάζουμε τον κάθε μεταθέτη με τους υπόλοιπους τελεστές: Όλους τους «εξ αριστερών» τελεστές και των δύο γινομένων προς τα αριστερά του απλού μεταθέτη και όλους τους «εκ δεξιών» προς τα δεξιά, όπως κατωτέρω:

$$\begin{aligned}[A_1A_2\cdots A_n,\ B_1B_2\cdots B_k]&=\sum_{ij}(A_1\cdots A_{i-1})(B_1\cdots B_{j-1})[A_i,B_j](B_{j+1}\cdots B_k)(A_{i+1}\cdots A_n)\\&=\sum_{ij}(B_1\cdots B_{j-1})(A_1A_{i-1})[A_iB_j](A_{i+1}\cdots A_n)(B_{j+1}\cdots B_k)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}\hat{E}]&=[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\hat{D}\hat{E}+\hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B}\hat{E}+\hat{C}\hat{D}[\hat{A},\hat{E}]\hat{B}\\&+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D}\hat{E}+\hat{C}\hat{A}[\hat{B},\hat{D}]\hat{E}+\hat{C}\hat{D}\hat{A}[\hat{B},\hat{E}]\end{aligned}$$

Μεταθέτες Φυσικών Μεγεθών

(1) $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar,\qquad [\hat{p},\hat{x}]=-i\hbar$

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}]\Psi(x)&=\hat{x}\hat{p}\Psi(x)-\hat{p}\hat{x}\Psi(x)=-i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}+i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x\Psi)\\&=\cancel{-i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}}+\cancel{i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}}+i\hbar\Psi\\&=i\hbar\Psi(x),\quad\forall\Psi(x).\end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}^2]&=\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}\\&=i\hbar\hat{p}+i\hbar\hat{p}=2i\hbar\hat{p}\\&=i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{p}^2}{\mathrm{d}\hat{p}}\end{aligned}$$

$$[\hat{x},\hat{p}^k]=-i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{p}^k}{\mathrm{d}\hat{p}}=i\hbar k\hat{p}^{k-1}$$

$$[\hat{x},\hat{A}(\hat{x},\hat{p})]=i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}},$$

απόδειξη με ανάπτυξη του $A(\hat{x},\hat{p})$ σε σειρά Taylor ως προς $\hat{p}$ γύρω από το μηδέν.

(3)

$$\begin{aligned}[\hat{p}, \hat{x}^2] &= \hat{x}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{x} = -2i\hbar\hat{x} \\ &= -i\hbar\frac{\partial \hat{x}^2}{\partial \hat{x}}\end{aligned}$$

$$[\hat{p}, \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})] = -i\hbar\frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{x}}$$

(4) Εξ ορισμού: $[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$

και

$$[x, p_y] = [x, p_z] = 0$$

Όμοια για τις άλλες μεταθέσεις.

(5) $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, τελεστής της Στροφορμής

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} \hat{L}_x & = & \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y & = & \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z & = & \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y), (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)] \\ &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + 0 + 0 + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z\end{aligned}$$

Όμοια,

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \qquad \text{και} \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

Ορίζουμε το σύμβολο (αντισυμμετρικό τανυστή) των Levi-Civita ϵ_{ijk}

$$\epsilon_{123} = 1$$

$$\epsilon_{\kappa\kappa\lambda} = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ i, j, k = 1, 2, 3 \end{array} \right\}$$

Οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής δε μετατίθενται μεταξύ τους. Άρα δεν έχουν κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων, άρα δε μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως. Η **ολική στροφορμή** είναι:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow [L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= 0 + L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \\ &= -i\hbar\cancel{L_yL_z} - i\hbar\cancel{L_zL_y} + i\hbar\cancel{L_zL_y} + i\hbar\cancel{L_yL_z} = 0 \\ \Rightarrow [L^2, L_k] &= 0, \quad \forall k\end{aligned}$$

Επομένως η στροφορμή και μια συνιστώσα της μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως.

Για κάθε μετρήσιμο διανυσματικό φυσικό μέγεθος $\mathbf{A}$ έχουμε:

$$[L_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k$$

και

$$[L_i, \mathbf{A}^2] = 0.$$

Η γενικευμένη Σχέση Αβεβαιότητας

(1) Ανισότητα του Schwartz

Για κάθε ζευγάρι τετραγωνικά ολοκληρώσιμων μιγαδικών συναρτήσεων ισχύει:

$$\left(\int \Psi^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x\right)\cdot\left(\int \Phi^*(x)\Phi(x)\,\mathrm{d}x\right) \geq \left|\int \Psi^*(x)\Phi(x)\,\mathrm{d}x\right|^2$$

$$\langle\Psi,\Psi\rangle\cdot\langle\Phi,\Phi\rangle \geq |\langle\Psi,\Phi\rangle|^2$$

Απόδειξη.

$$\Psi_1 = \Phi - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi,$$

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi_1,\Psi_1\rangle \geq 0\\
\Rightarrow\ &\langle\Psi_1,\Psi_1\rangle = \int\left(\Phi^\star - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle^\star}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi^\star\right)\left(\Phi - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi\right)\mathrm{d}x\\
&= \int \Phi^\star\Phi\mathrm{d}x - \langle\Psi,\Phi\rangle^\star\frac{\langle\Psi^\star,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle} \geq 0\\
\Rightarrow\ &\langle\Phi,\Phi\rangle\langle\Psi,\Psi\rangle \geq \langle\Psi,\Phi\rangle^\star\langle\Psi,\Phi\rangle
\end{aligned}$$

□

(2) Ένας τελεστής $\hat{C}$ μπορεί να γραφτεί με το πραγματικό του και το φανταστικό του μέρος:

$$\left\{\begin{array}{ccc}\hat{C} & = & \hat{C}_1 + i\hat{C}_2\\ \hat{C}^\dagger & = & \hat{C}_1 - i\hat{C}_2\end{array}\right\}$$

όπου $\hat{C}_1, \hat{C}_2$ ερμιτιανοί τελεστές.

Απόδειξη. Ορίζουμε πρώτα τους $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$:

$$\hat{C}_1 = \frac{\hat{C}+\hat{C}^\dagger}{2}, \qquad \hat{C}_2 = \frac{\hat{C}-\hat{C}^\dagger}{2i}$$

$$\Rightarrow C_1^\dagger = \frac{1}{2}(\hat{C}^\dagger + \hat{C}) = C_1$$

$$\hat{C}_2^\dagger = -\frac{1}{2i}(\hat{C}^\dagger - \hat{C}) = C_2$$

και

$$\hat{C}_1 + i\hat{C}_2 = \hat{C}, \qquad \hat{C}_1 - i\hat{C}_2 = \hat{C}^\dagger$$

□

(3) Για δύο ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη A και B και για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση ισχύει η γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας:

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}\,|\langle[A,B]\rangle|}$$

Απόδειξη.

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

$$(\Delta B)^2 = \langle B\rangle^2 - \langle B\rangle^2$$

Υποθέτουμε ότι $\langle A\rangle = 0$, $\langle B\rangle = 0$. Αλλιώς εισάγουμε τους τελεστές $\tilde{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$ και $\tilde{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$.

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle = \int \Psi^* A^2\Psi\,\mathrm{d}^3x = \int (A\Psi)^*(A\Psi)\,\mathrm{d}^3x$$

και

$$(\Delta B)^2 = \langle B^2 \rangle = \int \Psi^* B^2 \Psi \, \mathrm{d}^3x = \int (B\Psi)^*(B\Psi) \, \mathrm{d}^3x$$

διότι ο τελεστής A είναι ερμιτιανός, όπως επίσης και ο B.

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A\Psi, A\Psi \rangle, \quad (\Delta B)^2 = \langle B\Psi, B\Psi \rangle$$

Από την ανισότητα του Schwartz, παίρνουμε

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2$$
$$\Rightarrow (\Delta A) \cdot (\Delta B) \geq |\langle A\Psi, B\Psi \rangle|$$

αλλά

$$\langle A\Psi, B\Psi \rangle = \int (A\Psi)^*(B\Psi) \, \mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(AB\Psi) \, \mathrm{d}^3x = \langle AB \rangle$$
$$\Rightarrow (\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle AB \rangle|$$

Ο τελεστής AB δεν είναι ερμιτιανός άρα έχει πραγματικό και φανταστικό μέρος.

$$C = AB$$
$$\Rightarrow C^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$$
$$\Rightarrow \frac{AB + BA}{2} = C_1$$
$$\Rightarrow \frac{AB - BA}{2i} = \frac{[A, B]}{2i} = C_2$$
$$\Rightarrow C = C_1 + iC_2$$

Οι τελεστές C_1 και C_2 είναι ερμιτιανοί και η μέση τιμή ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικός αριθμός,

$$\langle AB \rangle = \langle C \rangle = \langle C_1 \rangle + i\langle C_2 \rangle$$
$$\Rightarrow |\langle AB \rangle| = \sqrt{\langle C_1 \rangle^2 + \langle C_2 \rangle^2} \geq |\langle C_2 \rangle| = \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right| = \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

Δείξαμε λοιπόν ότι:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \qquad \square$$

(4) **(i)**

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2} |\langle [x, p] \rangle|$$
$$\Rightarrow (\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2} \hbar$$

(ii)

$$(\Delta x)(\Delta E) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [x, \hat{H}] \rangle \right|$$
$$[x, \hat{H}] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_x} = -i\hbar \frac{p_x}{m}$$

όπου p_x, x είναι ανεξάρτητες μεταβλητές,

$$\Rightarrow (\Delta x)(\Delta E) \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p_x \rangle|$$

Εάν το σύστημα είναι σε μια δέσμια κατάσταση, τότε έχουμε:

$$\Delta E = 0 \Rightarrow (\Delta x)(\Delta E) = 0 \Rightarrow \langle p_x \rangle = 0.$$

Όμοια υπολογίζονται τα

$$(\Delta p_k)(\Delta E) \geq \dots$$
$$(\Delta L_k)(\Delta E) \geq \dots$$

(iii)

$$(\Delta L_x)(\Delta L_z) \geq \frac{1}{2}|\langle [L_x, L_z]\rangle|$$
$$[L_x, L_z] = -i\hbar L_y$$
$$\Rightarrow (\Delta L_x)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2}|\langle L_y\rangle|$$

(5) Για τους τελεστές $\hat{x}, \hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ το κυματοπακέτο με την ελάχιστη αβεβαιότητα ($(\Delta x)\cdot(\Delta p) = \hbar/2$) είναι λύση της εξίσωσης:

$$(x - \langle x\rangle)\Psi = i\alpha(\hat{p}_x - \langle p_x\rangle)\Psi$$
$$\Rightarrow \Psi(x) = Ae^{-\alpha(x-\langle x\rangle)^2/2\hbar}e^{i\langle p\rangle x/\hbar}$$

Απόδειξη. Για δύο γενικούς τελεστές A, B, η ανισότητα του Schwartz γίνεται ισότητα όταν:

$$\tilde{A}\Psi = \lambda\tilde{B}\Psi$$

και η δεύτερη ανισότητα γίνεται ισότητα όταν $\langle C_1\rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle\tilde{A}\tilde{B}\rangle = -\langle\tilde{B}\tilde{A}\rangle$$
$$\int \Psi^*\tilde{A}\tilde{B}\Psi\,\mathrm{d}x = -\int \Psi^*\tilde{B}\tilde{A}\Psi\,\mathrm{d}x$$
$$\int (\tilde{A}\Psi)^*\tilde{B}\Psi\,\mathrm{d}x = -\int (\tilde{B}\Psi)^*\tilde{A}\Psi\,\mathrm{d}x$$
$$\lambda^*\int (\tilde{B}\Psi)^*(\tilde{B}\Psi)\,\mathrm{d}x = -\lambda\int (\tilde{B}\Psi)^*(\tilde{B}\Psi)\,\mathrm{d}x$$
$$\Rightarrow \lambda^* = -\lambda \Rightarrow \lambda = i\alpha$$

Η εξίσωση που ικανοποιεί η κυματοσυνάρτηση με την ελάχιστη αβεβαιότητα είναι:

$$\tilde{A}\Psi = ia\tilde{B}\Psi,$$

όπου a πραγματικός αριθμός. □

1.6 Χρονική Μεταβολή της Μέσης Τιμής - Διατήρηση Φυσικών Μεγεθών

(α) Θα δείξουμε ότι εάν $\hat{A}$ είναι ένας τελεστής ενός φυσικού μεγέθους στην Κβαντομηχανική και $\hat{H}$ ο τελεστής της Χαμιλτονιανής, τότε:

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle$$

Απόδειξη.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$
$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^\star}{\partial t} = (\hat{H}\Psi)^*$$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \Psi^*(\hat{A}\Psi)\,\mathrm{d}^3x = \int \frac{\partial\Psi^\star}{\partial t}\hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \int \Psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \int \Psi^*\hat{A}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,\mathrm{d}^3x \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int (\hat{H}\Psi)^*\hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*\hat{A}\hat{H}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*(-\hat{H}\hat{A} + \hat{A}\hat{H})\Psi\,\mathrm{d}^3x + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle
\end{aligned}$$

□

Οι τελεστές της Κβαντομηχανικής στην πλειοψηφία τους δεν εξαρτώνται ρητά από το χρόνο, που συνεπάγεται ότι $\dfrac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$.

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle \hat{A} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

Εάν λοιπόν ένα μέγεθος *μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή* τότε η μέση τιμή του παραμένει σταθερή, και το μέγεθος αυτό λέμε ότι είναι **διατηρήσιμο**.

Εάν $[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}^n, \hat{H}] = 0 \; \forall n$

που συνεπάγεται ότι για κάθε συνάρτηση του A θα έχουμε

$$[f(\hat{A}), \hat{H}] = 0$$

(β) Στην Κλασσική Μηχανική η ενέργεια διατηρείται εάν το δυναμικό δεν εξαρτάται με οποιονδήποτε τρόπο από το χρόνο.

Η ορμή διατηρείται εάν έχουμε ανεξαρτησία του δυναμικού από τις μετατοπίσεις στο χώρο.

Η στροφορμή διατηρείται εάν έχουμε συμμετρία (ανεξαρτησία του δυναμικού) ως προς τις περιστροφές στο χώρο.

(γ) Ενέργεια

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{H} \rangle = \langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \rangle, \qquad \text{διότι } [\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

$$\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \rangle = \langle \frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \rangle$$

Εάν το δυναμικό του συστήματος είναι $V(\mathbf{r})$, *ανεξάρτητο του χρόνου*, τότε

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{H} \rangle = 0$$

και η ενέργεια διατηρείται, δηλαδή η μέση τιμή της ενέργειας παραμένει σταθερή στο χρόνο.

(δ) Ορμή

Ο τελεστής της ορμής δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο, δηλαδή

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle$$

αλλά

$$[\hat{p}_k, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial H}{\partial x_k} = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_k} = i\hbar F_k$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{p}_k \rangle = \frac{i\hbar}{i\hbar}\langle F_k \rangle = \langle F_k \rangle$$

Διατήρηση της ορμής συνεπάγεται δύναμη μηδέν. Άρα το δυναμικό ανεξάρτητο της x_k συντεταγμένης. Άρα έχουμε συμμετρία κατά τη μεταφορά σε αυτή τη χωρική διεύθυνση.

Εάν ένα σύστημα περιλαμβάνει πολλά σωματίδια τα οποία ασκούν δυνάμεις μεταξύ τους, τότε το δυναμικό εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των σωματιδίων και είναι ανεξάρτητο από τη θέση του κέντρου μάζας, δηλαδή των συντεταγμένων $x_{\text{ΚΜ}}$, οπότε η παραγώγιση ως προς αυτήν δίνει μηδέν και η αντίστοιχη ορμή, δηλαδή η ορμή του ΚΜ (ολική ορμή του συστήματος) διατηρείται.

(ε) Στροφορμή

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

Για τις συνιστώσες της στροφορμής έχουμε: $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_i, \hat{H}] &= \epsilon_{ijk} x_j [p_k, H] + \epsilon_{ijk} [x_j, H] p_k \\
&= \epsilon_{ijk} x_j (-i\hbar) \frac{\partial H}{\partial x_k} + \epsilon_{ijk} (i\hbar) \frac{\partial H}{\partial p_j} p_k \\
&= -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial V}{\partial x_k} + i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{p_j}{m} p_k \\
&= i\hbar \epsilon_{ijk} x_j F_k + \text{ μηδέν}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{H}] = i\hbar (\mathbf{r} \times \mathbf{F})_i$$

και τελικά

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathbf{L} \rangle = \langle \mathbf{r} \times \mathbf{F} \rangle = \langle \mathbf{N} \rangle$$

Εάν $(\mathbf{r} \times \mathbf{F})_k = 0$

$$\Rightarrow [\hat{L}_k, \hat{H}] = 0$$

που συνεπάγεται ότι διατηρείται η $k-$συνιστώσα της Στροφορμής.

(στ) Εξισώσεις Κίνησης Κλασικής Μηχανικής - Θεώρημα του Ehrenfest

Ορίζουμε την ταχύτητα:

$$\langle v \rangle = \langle \frac{p}{m} \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{i\hbar}{i\hbar} \langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \rangle = \langle \frac{p}{m} \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle v \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{-i\hbar}{i\hbar} \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F(x) \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle F \rangle, \qquad \text{«Νόμος του Newton»}$$

Εάν $F(x) = 0$ τότε $\dfrac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = 0$

$$\Rightarrow \langle p \rangle = \text{ σταθερή } = \langle p \rangle_0$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle \frac{p}{m} \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} = \frac{\langle p \rangle_0}{m} = \langle v \rangle_0$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \langle v \rangle_0 t + \langle x \rangle_0$$

Εάν $F(x) = F$ σταθερή, τότε

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(x,t) F \Psi(x,t) \mathrm{d}x = F \int \Psi^* \Psi \mathrm{d}x = F \text{ ανεξάρτητο του χρόνου}$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = F \Rightarrow \langle p \rangle_t = Ft + \langle p \rangle_0$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{F}{m} t + \langle v \rangle_0$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \frac{1}{2} \frac{F}{m} t^2 + \langle v \rangle_0 t + \langle x \rangle_0$$

$$\frac{F}{m} = a = \text{ επιτάχυνση}$$

(ζ) Parity ή Ισοτιμία (ομοτιμία) ή Κατοπτρισμός:

Αντιστροφή του χώρου, $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$

Το μέγεθος αυτό (η ομοτιμία) είναι ένα κβαντομηχανικό μέγεθος που έχει σχέση με τη μεταβολή της κυματοσυνάρτησης ενός συστήματος κάτω από την αντιστροφή του χώρου.

Η κυματοσυνάρτηση λοιπόν $\Psi(\mathbf{r})$ θα γίνει $\Psi(-\mathbf{r})$. Η αλλαγή αυτή επιτυγχάνεται με τη δράση ενός ερμιτιανού τελεστή:

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \hat{P}\Big(\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\Big) = \hat{P}\Big(\Psi(-\mathbf{r})\Big) = \Psi(\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \hat{P}^2 = 1$$

Ζητάμε τις ιδιοτιμές του $\hat{P}$.

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \lambda\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$$
$$\Psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\Big(\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\Big) = \lambda\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \lambda^2\Psi(\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$
$$\hat{P}\Psi_+(\mathbf{r}) = \Psi_+(\mathbf{r}), \qquad \hat{P}\Psi_-(\mathbf{r}) = -\Psi_-(\mathbf{r})$$

Οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_+ λέγονται **άρτιες** $(+)$

Οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_- λέγονται **περιττές** $(-)$

Ο όρος ομοτιμία ή ισοτιμία έρχεται από το γεγονός ότι το μέγεθος της κυματοσυνάρτησης δεν αλλάζει.

Απόδειξη ότι ο τελεστής της Parity είναι ερμιτιανός:

$$\int\limits_{\text{άπειρο όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r})\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(-\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x$$
$$= \int (\hat{P}\Psi(\mathbf{r}))^*\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x$$

διότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(-x)\,\mathrm{d}x = -\int_{\infty}^{-\infty} \Psi^*(-\omega)\Psi(\omega)\,d\omega$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(-\omega)\Psi(\omega)\,d\omega$$

Εάν $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ τότε κάτω από την αντιστροφή του χώρου $(\mathbf{r} \to -\mathbf{r})$ η $\hat{H}$ παραμένει αναλλοίωτη,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \to \frac{\partial^2}{\partial(-x)^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

όταν $x \to -x$. Άρα,

$$\hat{P}(\hat{H}\Psi) = \hat{H}(-\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r}) = \hat{H}\Psi(-\mathbf{r})$$

και

$$\hat{H}(\hat{P}\Psi) = \hat{H}\Big(\Psi(-\mathbf{r})\Big)$$
$$\Rightarrow (\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P})\Psi = 0 \Rightarrow [\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

Άρα η Parity διατηρείται με το χρόνο. Άρα εάν η Ψ είναι άρτια μια χρονική στιγμή θα παραμένει άρτια συνάρτηση συνέχεια.

Το ίδιο για τις περιττές κυματοσυναρτήσεις.

1.7 Συνεχές Φάσμα Ιδιοτιμών - Συνάρτηση δ του Dirac

Στη φύση υπάρχουν μεγέθη με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών.

$$\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a$$

όπου ο a είναι πραγματικός αριθμός που παίρνει συνεχείς τιμές.
Οι ιδιοσυναρτήσεις του συνεχούς φάσματος δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και συνεπώς δεν είναι κανονικοποιήσιμες, κατά το συνήθη τρόπο.
Η σχέση ορθοκανονικότητας έχει τη μορφή:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_a^*(x)\Psi_{a'}(x)\,\mathrm{d}x = \delta(a, a')$$

όπου

$$\delta(a, a') = \begin{cases} 0, & a' \neq a \\ \text{άπειρο}, & a' = a \end{cases}$$

Η ιδιάζουσα αυτή συνάρτηση που χρησιμοποιούμε στην κανονικοποίηση είναι μια **γενικευμένη συνάρτηση**. Ο σωστός τρόπος για να την περιγράψουμε είναι μέσω μιας οριακής (διαδικασίας) αναπαράστασης από ομαλές συναρτήσεις που έχουν όριο τη γενικευμένη συνάρτηση. Η συνάρτηση που περιγράψαμε προηγουμένως, και η οποία χρησιμοποιείται πολύ συχνά στην Κβαντομηχανική λέγεται **δ-συνάρτηση του Dirac** και συμβολίζεται με $\delta(a - a')$.

Ιδιότητα ορισμού: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0)$

Εάν

$$f(x) \equiv 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

Αυτό ισχύει εάν ολοκληρώσουμε σε οποιοδήποτε διάστημα (α, β) που περιέχει το μηδέν. Ακόμη μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - \alpha)\,\mathrm{d}x = f(\alpha)$$

ή

$$\int_{\beta}^{\gamma} f(x)\delta(x - \alpha)\,\mathrm{d}x = f(\alpha), \quad \text{εάν}\, \beta < \alpha < \gamma.$$

Για έναν τελεστή $\hat{A}$ με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών a, και ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_a(x)$ τότε οποιαδήποτε συνάρτηση $\Psi(x)$ γράφεται ως εξής:

$$\Psi(x) = \int\limits_{[\text{πεδίο τιμών της } a]} c(a)\Psi_a(x)\,\mathrm{d}x$$

Εισάγοντας τη συνάρτηση δ-Dirac για την ορθοκανονικότητα της Ψ_a παίρνουμε τη σχέση ορισμού των $c(a)$:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{a'}^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a c(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{a'}^*(x)\Psi_a(x)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}a \\ &= \int_a c(a)\delta(a - a')\,da = c(a')\end{aligned}$$

$$c(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_a^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

1.7.1 Αναπαραστάσεις των συναρτήσεων δ-Dirac

$$\delta(x) = \lim_{L\to\infty} \frac{\sin xL}{\pi x}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin xL}{\pi x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} \frac{\sin xL}{x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} \frac{\sin y}{y}\,\mathrm{d}y = \frac{2}{\pi}\frac{\pi}{2} = 1$$

$$\lim_{x\to 0} \frac{\sin xL}{\pi x} = \frac{L}{\pi}$$

άρα απειρίζεται για $L \to 0$ και έχει περίοδο $2\pi/L \to 0$ για $L \to \infty$. Ακόμη το πλάτος της συνάρτησης τείνει στο μηδέν για $x \to \infty$.

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

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}x &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{-L}^{L} e^{ikx}\,dk \\
&= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\frac{1}{x}\int_{xL}^{xL} e^{iy}\,\mathrm{d}y = \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2i\pi x}(e^{ixL} - e^{-ixL}) \\
&= \lim_{L\to\infty}\frac{\sin(xL)}{\pi x} = \delta(x) \quad \text{εξ' ορισμού}
\end{aligned}$$

1.7.2 Ιδιότητες της δ-συνάρτησης

(α) $\delta(\alpha x) = \dfrac{1}{|\alpha|}\delta(x)$

(β) $x\delta(x) = 0$

(γ) $\delta(-x) = \delta(x)$

(δ) $\delta(x^2 - \alpha^2) = \dfrac{1}{2|\alpha|}[\delta(x-\alpha) + \delta(x+\alpha)]$

(ε) $\delta\Big(f(x)\Big) = \sum_k \dfrac{\delta(x - x_k)}{\left|\left(\frac{df}{\mathrm{d}x}\right)_{x=x_k}\right|}, \quad$ με $f(x_k) = 0$

«και άλλες πολλές ιδιότητες».

Απόδειξη.

(β)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [x\delta(x)]f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)[xf(x)]\,\mathrm{d}x = 0f(0) = 0 \qquad \forall f$$

(α) Έστω $\alpha > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\alpha x)f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{a}\right)\mathrm{d}y = \frac{1}{\alpha}f(0) = \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)\mathrm{d}x$$

Για $\alpha < 0$: $\alpha = -|\alpha|,\ y = \alpha x$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\alpha x)f(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{\alpha}\int_{+\infty}^{-\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\mathrm{d}y = \frac{-1}{|\alpha|}\int_{+\infty}^{-\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{|\alpha|}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\mathrm{d}y = \frac{f(0)}{|\alpha|} = \frac{1}{|\alpha|}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

(γ) Αποδεικνύεται από την (α) με $\alpha = -1$.

(δ+ε) Αναλύουμε την $f(x)$ γύρω από μια ρίζα της.

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

$$f(x_k) = 0 \Rightarrow f(x) = f'(x_k)(x - x_k)$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta\Big(f(x)\Big)\phi(x)\,\mathrm{d}x &= \sum_k \int_{x_k-\epsilon}^{x_k+\epsilon} \delta\Big(f'(x_k)(x - x_k)\Big)\phi(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \sum_k \frac{1}{|f'(x_k)|}\int_{x_k-\epsilon}^{x_k+\epsilon} \delta(x - x_k)\phi(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \sum_k \frac{\phi(x_k)}{|f'(x_k)|} = \sum_k \frac{1}{|f'(x_k)|}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_k)\phi(x)\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

$$\delta\left(f(x)\right) = \sum_k \frac{\delta(x - x_k)}{|f'(x_k)|}$$

$$\Rightarrow f(x) = x^2 - \alpha^2 \Rightarrow f'(x) = 2x, \quad x_1 = -\alpha, \quad x_2 = \alpha$$

Ιδιοσυνάρτηση του τελεστή θέσης:
Γενικά

$$\hat{x}\Psi_a(x) = x\Psi_a(x)$$

και

$$\begin{aligned}\hat{x}\Psi_a(x) = a\Psi_a(x) &\Rightarrow (x - a)\Psi_a(x) = 0 \\ &\Rightarrow \Psi_a(x) = \delta(x - a)\end{aligned}$$

□

1.7.3 Αναπαράσταση κυματοσυναρτήσεων και τελεστών στο χώρο των ορμών

Ιδιοσυνάρτηση του τελεστή της ορμής:

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi_p(x)}{\mathrm{d}x} = p\Psi_p(x) \Rightarrow \frac{\mathrm{d}\Psi_p(x)}{\mathrm{d}x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi_p(x)$$

$$\Rightarrow \Psi_p(x) = Ne^{(ip/\hbar)x}$$

Ορισμός του συντελεστή κανονικοποίησης N.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x)\Psi_{p'}(x)\,\mathrm{d}x = \delta(p - p')$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow N^*N\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)}\,\mathrm{d}x &= N^*N2\pi\delta\left(\frac{1}{\hbar}(p - p')\right) \\ &= |N|^2 2\pi\hbar\delta(p - p') = \delta(p - p')\end{aligned}$$

$$\Rightarrow |N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\Psi_p(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow c(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

Πιθανότητα να βρούμε την ορμή να έχει τιμή στο διάστημα Δp γύρω από το p είναι:

$$P(p) = |c(p)|^2$$

$$c(p) \longrightarrow \text{ μετασχηματισμός Fourier της } \Psi(x)$$

Ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} c^*(p)c(p)\mathrm{d}p$$

άρα η συνάρτηση της ορμής $c(p)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και $c(p) \to 0$ όταν $p \to \pm\infty$.

Εάν ζητάμε τη μέση τιμή της ορμής:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\hat{p}\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} p|c(p)|^2\,dp$$

όμοια

$$\langle p^k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^k|c(p)|^2\,dp$$

Λέμε ότι η $\Psi(x)$ είναι η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων και η $c(p)$ η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών. Ο τελεστής της ορμής στο χώρο των ορμών είναι ο $\hat{p} = p$ και ο τελεστής θέσης στο χώρο των ορμών $\hat{x} = i\hbar d/dp_x$.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c^*(p)\hat{x}c(p)\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)x\Psi(x)\mathrm{d}x$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)x\Psi(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}c^*(p)\mathrm{d}p\right)x\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-iqx/\hbar}c(q)\mathrm{d}q\right)\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}c^*(p)\mathrm{d}p\right)(-i\hbar)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} c(q)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q\right)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

Έχουμε τώρα ότι

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} c(q)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(c(q)\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q - \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\mathrm{d}q \\ &= 0 - \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}q}\mathrm{d}q\end{aligned}$$

διότι $c(q \to \pm\infty) = 0$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \langle x \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar}(i\hbar)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\mathrm{d}q c^*(p)\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{i(q-p)x/\hbar}\mathrm{d}x \\ &= i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\mathrm{d}q c^\star(p)\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\delta(q-p) = i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p c^*(p)\frac{\mathrm{d}c(p)}{\mathrm{d}p} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\hat{x}c(p)\mathrm{d}p\end{aligned}$$

όπου

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$$

□

1.8 Συμβολισμός Dirac

Σε κάθε κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ αντιστοιχούμε το σύμβολο $|\Psi\rangle$ και το λεμε *ket της* Ψ. Ενώ στη μιγαδική συζυγή Ψ^* όπως εμφανίζεται στο εσωτερικό γινόμενο αντιστοιχούμε το σύμβολο $\langle\Psi|$ και το λέμε *bra της* Ψ.
Το εσωτερικό γινόμενο γράφεται ως εξής:

$$\int \Phi^*\Psi dx = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

Ακόμη

$$\langle\Phi|\Psi\rangle^* = \left(\int \Phi^*\Psi dx\right)^* = \int \Psi^*\Phi dx = \langle\Psi|\Phi\rangle$$

Εάν

$$|\Psi_3\rangle = \alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle$$

τότε

$$\langle\Psi_4|\Psi_3\rangle = \alpha\langle\Psi_4|\Psi_1\rangle + \beta\langle\Psi_4|\Psi_2\rangle$$

ενώ

$$\langle\Psi_3|\Psi_4\rangle = \alpha^*\langle\Psi_1|\Psi_4\rangle + \beta^*\langle\Psi_2|\Psi_4\rangle$$

Μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$:

$$\langle\Phi|A\Psi\rangle = \langle\Phi|A|\Psi\rangle = \int \Phi^*\hat{A}\Psi dx$$

1.8.1 Ανάπτυξη Κυματοσυνάρτησης σε ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n\Psi_n(\mathbf{r}) \quad \text{με } a_n = \int \Psi_n^*\Psi \mathrm{d}^3x = \langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n \langle\Psi_n|\Psi\rangle|\Psi_n\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

Στο γραμμικό χώρο των $|\Psi_n\rangle$ έχουμε προβολή του $|\Psi\rangle$ στα ιδιοδιανύσματα $|\Psi_n\rangle$. Εάν έχουμε δύο κυματοσυναρτήσεις $|\Phi\rangle$ και $|\Psi\rangle$

$$|\Phi\rangle = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Phi\rangle, \qquad |\Psi\rangle = \sum_k |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Phi|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Psi_k|\Phi\rangle^*\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

και ομοίως

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Psi|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*\Psi \mathrm{d}^3x = \sum_k \beta_k^*\alpha_k, \quad \beta_k = \langle\Psi_k|\Phi\rangle, \quad \alpha_k = \langle\Psi_k, \Psi\rangle$$

1.8.2 Ανισότητα του Schwartz

Θα αποδείξουμε την ανίσοτητα

$$\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle \cdot \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle \geq |\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle|^2$$

Παίρνουμε την κατάσταση

$$|\Psi\rangle = |\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}|\Psi_1\rangle$$

Έχουμε $\langle\Psi|\Psi\rangle \geq 0$, ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου. Επομένως

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle &= \left[\langle\Psi_2| - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}\langle\Psi_1|\right]\left[|\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}|\Psi_1\rangle\right] \\ &= \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle} \geq 0\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle \cdot \langle\Psi_1|\Psi_1\rangle \geq \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

1.8.3 Ορθογωνιοποίηση Schmidt

Με τη μέθοδο αυτήν κατασκευάζουμε ένα σύνολο ορθογωνίων διανυσμάτων $|\Psi_k\rangle$ με $k = 1, 2, \ldots, N$ από ένα σύνολο **μη** ορθογωνίων διανυσμάτων $|\Phi_i\rangle$ με $i = 1, 2, \ldots, M \geq N$.

Παίρνουμε τυχαία το πρώτο, $|\Psi_1\rangle = N_1|\Phi_1\rangle$ επειδή $\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = N_1^* N_1 \langle\Phi_1|\Phi_1\rangle = 1$

$$\Rightarrow N_1 = \frac{1}{\sqrt{\langle\Phi_1|\Phi_1\rangle}} = \langle\Phi_1|\Phi_1\rangle^{-1/2}$$

$$\Rightarrow |\Psi_1\rangle = \frac{|\Phi_1\rangle}{[\langle\Phi_1|\Phi_1\rangle]^{1/2}}$$

Κατόπιν παίρνουμε τυχαία το $|\Phi_2\rangle$ και ορίζουμε

$$|\Psi_2\rangle = N_2(|\Phi_2\rangle + \alpha_{12}|\Psi_1\rangle)$$

με

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0 \qquad \text{και} \qquad \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle = 1$$

$$\Rightarrow \langle\Psi_1|\Phi_2\rangle + \alpha_{12}\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_{12} = -\langle\Psi_1|\Phi_2\rangle$$

$$\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle = N_2^2\left(\langle\Phi_2|\Phi_2\rangle - |\alpha_{12}|^2\right) = 1$$

$$\Rightarrow N_2 = \left(\langle\Phi_2|\Phi_2\rangle - |\alpha_{12}|^2\right)^{-1/2}$$

Ομοίως ορίζουμε:

$$|\Psi_3\rangle = N_3\Big(|\Phi_3\rangle + \alpha_{13}|\Psi_1\rangle + \alpha_{23}|\Psi_2\rangle\Big)$$

και συνεχίζουμε.

1.8.4 Τελεστές, Γραμμικοί Μετασχηματισμοί

Ο τελεστής μετασχηματίζει ένα διάνυσμα ενός γραμμικού χώρου σε ένα άλλο διάνυσμα.

Ιδιοσυναρτήσεις και Ιδιοτιμές

$$Q|\Psi_n\rangle = q_n|\Psi_n\rangle$$

Εκφυλισμός

Μια ιδιοτιμή q ενός τελεστή Q είναι n φορές εκφυλισμένη, όταν υπάρχουν n γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, που είναι ιδιοδιανύσματα του Q με την ίδια ιδιοτιμή q.

Συναφής ή Συζυγής ενός Τελεστή Q

$$\langle\Psi_1|Q\Psi_2\rangle = \langle Q^\dagger\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

Όταν ο Q δρα στο ket $Q|\Psi\rangle$, τότε ο συζυγής του δρα στο bra, $\langle\Psi|Q^\dagger$.

$$(Q^\dagger)^\dagger = Q, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger, \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad \text{για οποιοδήποτε άθροισμα.}$$

Αυτοσυναφής Τελεστής $Q^\dagger = Q$, Ερμιτιανός Τελεστής

Το γινόμενο δύο Ερμιτιανών Τελεστών είναι Ερμιτιανός εάν οι Τελεστές μετατίθενται.
Ένας Ερμιτιανός Τελεστής έχει πραγματικές Ιδιοτιμές και ορθογώνια Ιδιοδιανύσματα.

Αντίστροφος ενός Τελεστή, Q^{-1}

$$QQ^{-1} = Q^{-1}Q = 1$$

Μοναδιαίος (Unitary) Τελεστής, U

Ορισμός:

$$U^\dagger = U^{-1}$$

Οι τελεστές αυτοί διατηρούν το Εσωτερικό Γινόμενο

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle, \qquad |\Phi'\rangle = U|\Phi\rangle$$

$$\langle\Phi'|\Psi'\rangle = \langle U\Phi|U\Psi\rangle = \langle\Phi|U^\dagger U\Psi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

διότι

$$U^\dagger U = 1, \qquad UU^\dagger = 1$$

Κανονικός Τελεστής

Μετατίθεται με το συζυγή του

$$[Q, Q^\dagger] = 0$$

Εφόσον μετατίθενται έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.

Θεώρημα 1.8.1. *Για έναν κανονικό Τελεστή ισχύει:*
Εάν

$$Q|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle$$

τότε

$$Q^\dagger|\Psi\rangle = q^*|\Psi\rangle$$

Απόδειξη.

$$Q\Psi = q\Psi, \quad Q^\dagger\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \lambda^* = \int (Q^\dagger\Psi)^*\Psi \mathrm{d}x = \int \Psi^* Q\Psi \mathrm{d}x = q \qquad \square$$

Για έναν Μοναδιαίο Τελεστή (κάθε Μοναδιαίος Τελεστής είναι κανονικός) έχουμε

$$QQ^\dagger = 1 \Rightarrow QQ^\dagger|\Psi\rangle = q^*Q|\Psi\rangle = q^*q|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

$$qq^* = 1 \Rightarrow q = \mathrm{e}^{i\theta}$$

Τελεστής Προβολής

Έχουμε μια ορθοκανονική βάση και ορίζουμε τον τελεστή

$$P_k = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$$

$$P_k|\Psi\rangle = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

Ισχύει $P_k^2 = P_k$, διότι

$$\begin{aligned} P_k^2|\Psi_k\rangle &= P_k|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle \\ &= |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = P_k|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Για μια ορθοκανονική πλήρη βάση έχουμε

$$|\Psi\rangle = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = \sum_k P_k|\Psi\rangle \quad \text{για κάθε } \Psi$$

άρα

$$\sum_k P_k = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k| = 1$$

1.8.5 Ιδιότητες των Μοναδιαίων Τελεστών

Ένας μοναδιαίος Τελεστής μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$U = \mathrm{e}^{iA}$$

με A έναν *Ερμιτιανό* Τελεστή.
$U^\dagger = \mathrm{e}^{-iA}$, απόδειξη με ανάπτυξη σε σειρά.
Απόδειξη με ανάπτυξη σε σειρά ότι $\mathrm{e}^{-iA}\mathrm{e}^{iA} = 1$.

Μετασχηματισμός Ομοιότητας

Εάν

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | Q | \Psi \rangle$$

και μετασχηματίσουμε την κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi\rangle \to |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

όπου U ο μοναδιαίος τελεστής, η μέση τιμή του Q δεν αλλάζει εάν μετασχηματίσουμε επίσης τον τελεστή Q:

$$Q \to Q' = UQU^\dagger$$

Απόδειξη.

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | Q | \Psi \rangle$$

$$\begin{aligned}\langle Q' \rangle &= \langle \Psi' | Q' | \Psi' \rangle = \langle U\Psi | UQU^\dagger | U\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \underbrace{U^\dagger U}_{1} Q \underbrace{U^\dagger U}_{1} | \Psi \rangle = \langle \Psi | Q | \Psi \rangle\end{aligned}$$

□

1.8.6 Αναπαράσταση Γραμμικών Τελεστών με Πίνακες

Έστω ότι έχουμε μια ορθοκανονική βάση, $|\Psi_n\rangle$, τότε αναπτύσουμε μια κυματοσυνάρτηση $|\Psi\rangle$ σε αυτή τη βάση.

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\Psi_n\rangle$$

όπου $a_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle$.
Το σύνολο των α_n με $n = 1, 2, \ldots, N, \ldots$ φτιάχνει ένα διάνυσμα $\hat{n}$, μια στήλη ενός πίνακα

$$|\Psi\rangle \to \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \\ \vdots \end{pmatrix} = |\alpha\rangle$$

Εάν ένας γραμμικός τελεστής Q δράσει στην $|\Psi\rangle$

$$\Rightarrow |\Phi\rangle = Q|\Psi\rangle = \sum_k Q|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \beta_n = \langle \Psi_n | \Phi \rangle = \langle \Psi_n | Q | \Psi \rangle = \sum_k \langle \Psi_n | Q | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_N \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & Q & \\ & & \end{pmatrix}_{ij} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$Q_{ij} = \langle \Psi_i | Q | \Psi_j \rangle = \int \Psi_i^* Q \Psi_j \mathrm{d}x$$

και

$$\beta_i = \sum_j Q_{ij} \alpha_j$$

(i) Ανάστροφος ενός πίνακα $(\tilde{Q})_{ij} = Q_{ji}$

(ii) Συζυγής ενός πίνακα $(Q^\dagger)_{ij} = Q^*_{ji}$

$$(Q^*)_{ij} = \langle \Psi_i | Q^\dagger | \Psi_j \rangle = \langle Q\Psi_i | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_j | Q\Psi_i \rangle^* = Q^*_{ji}$$

(iii) Ερμιτιανός Πίνακας $Q^\dagger = Q$

$$\Rightarrow (Q^\dagger)_{ij} = Q^*_{ji} = Q_{ij}$$

(iv) Μοναδιαίος Πίνακας $U^\dagger = U^{-1}$

$$(U^\dagger)_{ij} = (U^{-1})_{ij}$$

Μετασχηματισμός από μια ορθοκανονική βάση σε μια άλλη ορθοκανονική βάση γίνεται μόνο μέσω ενός μοναδιαίου μετασχηματισμού

$$|\Psi'_k\rangle = \sum_l u_{kl} |\Psi_l\rangle, \qquad \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \qquad \text{και} \qquad \langle \Psi'_i | \Psi'_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle \Psi'_m | \Psi'_k \rangle = \sum_{n,l} u^*_{mn} u_{kl} \langle \Psi_n | \Psi_l \rangle = \sum_l u^*_{ml} u_{kl} = \delta_{mk}$$

Έστω A ένας μοναδιαίος πίνακας, τότε:

$$AA^\dagger = I \Rightarrow \sum_l A_{kl} (A^\dagger)_{lm} = \sum_l A_{kl} A^*_{ml} = \delta_{mk}$$

$$A^\dagger A = I \Rightarrow \sum_l (A^\dagger)_{ml} (A)_{lk} = \delta_{mk} = \sum_l A^*_{lm} A_{lk}$$

άρα ο U είναι μοναδιαίος.

Οι πίνακες Q', Q που αναπαριστούν τον ίδιο τελεστή στις δύο διαφορετικές ορθοκανονικές βάσεις συνδέονται ως εξής:

$$Q' = U^\dagger Q U$$

1.8.7 Πρόβλημα των Ιδιοτιμών

$$Q|\Psi\rangle = \lambda |\Psi_\lambda\rangle$$
$$(Q - \lambda I)|\Psi_\lambda\rangle = 0$$

όπου I ο ταυτοτικός τελεστής.
Αναπαριστώντας τον τελεστή Q με τον αντίστοιχο πίνακα και την $|\Psi\rangle$ με τη στήλη a_n, για να έχουμε μη-μηδενική λύση για τα a_n πρέπει να ισχύει

$$\det(Q - \lambda I) = 0$$

Λύνοντας την πολυωνυμική εξίσωση ως προς λ, βρίσκουμε τις ιδιοτιμές λ και για κάθε ιδιοτιμή το ιδιοδιάνυσμα $|\Psi_\lambda\rangle$. Σε αυτή τη βάση ο πίνακας είναι διαγώνιος.

Οι ιδιοσυναρτήσεις (ιδιοδιανύσματα) των Ερμιτιανών και των μοναδιαίων τελεστών είναι ορθογώνιες μεταξύ τους και φτιάχνουν ένα πλήρες σύστημα συναρτήσεων (διανυσμάτων).

Ποιος πίνακας διαγωνοποιεί τον Q;

Έστω ότι έχουμε μια βάση $|\Phi_l\rangle$ και βρίσκουμε τα στοιχεία του πίνακα Q

$$Q_{kl} = \langle \Phi_k | Q | \Phi_l \rangle$$

Βρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $|\Psi_n\rangle$ του $Q\cdot$ αυτές φτιάχνουν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύστημα (για τους τελεστές $\rightarrow$ πίνακες της κβαντομηχανικής)

$$Q|\Psi_n\rangle = \lambda_n|\Psi_n\rangle$$

$$I = \sum_l |\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|$$

$$Q'_{nm} = \langle\Psi_n|Q|\Psi_m\rangle = \sum_{k,l}\langle\Psi_n|\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|Q|\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|\Psi_m\rangle = \sum_{k,l} U^*_{kn}Q_{kl}U_{lm}$$

Ο πίνακας $U \rightarrow U_{ij} = \langle\Phi_i|\Psi_j\rangle$ είναι μοναδιαίος

$$\Rightarrow Q' = U^\dagger QU$$

για $j =$ σταθερό το i δίνει τις συνιστώσες του ιδιοδιανύσματος $|\Psi_j\rangle$ στη βάση $|\Phi_i\rangle$.

Εισαγάγοντας τον Προβολικό Τελεστή ισοδύναμα γράφουμε

$$|\Psi_m\rangle = \sum_l |\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|\Psi_m\rangle = \sum_l \langle\Phi_l|\Psi_m\rangle|\Phi_l\rangle$$

δηλαδή ο U έχει στήλες τα ιδιοδιανύσματα.

2

Εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger - Μονοδιάστατα προβλήματα

2.1 Συνεχές Ενεργειακό Φάσμα

2.1.1 Ελεύθερο Σωμάτιο

Έχουμε σε αυτή την περίπτωση $F = 0$, δηλαδή $V(x,t) =$ σταθερό και τη σταθερή αυτή τιμή τη βάζουμε ίση με μηδέν. Η εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

στη μία διάσταση, έστω τη x.
Λύση της εξίσωσης $\Psi(x,t) = \Psi(x)\Phi(t)$. Χωρίζουμε τις μεταβλητές στην εξίσωση

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi \Rightarrow i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = E\Phi$$

$$\Rightarrow \Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Θέτουμε

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Θέτουμε $E = \hbar\omega$.

$$\boxed{\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}}$$

όπου A, B μιγαδικοί αριθμοί που προσδιορίζονται από τις αρχικές συνθήκες του προβλήματος.

Ο πρώτος όρος δίνει ένα κύμα που οδεύει κατά τη διεύθυνση $(+x)$, ο δεύτερος στην $(-x)$.

Εάν ξέρουμε (κατασκευάζουμε) ότι το σωματίδιο κινείται κατά τη θετική φορά του άξονα, τότε $B = 0$. Εάν κινείται μόνο κατά την αρνητική φορά, τότε $A = 0$.

Στην περίπτωσή μας δεν έχουμε περιορισμούς στις δυνατές τιμές της ενέργειας και το ω μπορεί να πάρει κάθε πιθανή τιμή στο συνεχές. Η

$$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m}k^2}$$

αποτελεί τη **σχέση διασποράς** για το ελεύθερο σωματίδιο.

• Εάν υποθέσουμε, π.χ. $B = 0$, τότε:

$$P(x,t) = \Psi_+^*(x,t)\Psi_+(x,t) = |A|^2$$

που είναι ανεξάρτητη του x και του t, άρα το σώμα μπορεί να είναι παντού· δηλαδή $\Delta x = \infty$, συμβατό με τη σχέση αβεβαιότητας αφού $\Delta P = 0$ και $(\Delta x)(\Delta P) \geq \hbar/2$.

• Για να είναι η $P(x,t)$ συνάρτηση της θέσης x, πρέπει να έχουμε $\Delta x =$ πεπερασμένο, $\Delta P =$ πεπερασμένο, και παίρνουμε επαλληλία κυμάτων:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int A(k) e^{i(kx-\omega t)}\, dk + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int B(k) e^{-i(kx+\omega t)}\, dk$$

με $\omega = \omega(k) = \dfrac{\hbar}{2m} k^2$.

$$\hat{p} e^{ikx} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = (-i\hbar)(ik) e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$$

$$p = \hbar k$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Κυματοσυνάρτηση Ελεύθερου σωματιδίου στις 3 διαστάσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$$

$$\Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad E > 0.$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2\Psi + \partial_y^2\Psi + \partial_z^2\Psi) = E\Psi$$

$$\partial_x^2\Psi + \partial_y^2\Psi + \partial_z^2\Psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = -k^2\Psi \tag{2.1}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Η Εξίσωση χωριζομένων μεταβλητών είναι

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$$

και διαιρούμε την εξίσωση (2.1) με την Ψ:

$$\Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\Psi_2}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} + \frac{1}{\Psi_3}\frac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} = -k^2$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{1}{\Psi_1}\dfrac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} & = & \lambda \\ \dfrac{1}{\Psi_2}\dfrac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} & = & \mu \\ \dfrac{1}{\Psi_3}\dfrac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} & = & \nu \end{array}\right\} \quad \text{με } \lambda + \mu + \nu = -k^2$$

και οι επιτρεπτές λύσεις είναι επίπεδα κύματα, διότι όλα τα σημεία του χώρου είναι ισοδύναμα.

$$\Rightarrow \lambda = -k_x^2, \quad \mu = -k_y^2, \quad \nu = -k_z^2$$

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}) = e^{\pm ik_x x} e^{\pm ik_y y} e^{\pm ik_z z} = e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{k} = \hat{\mathbf{e}}_1 k_x + \hat{\mathbf{e}}_2 k_y + \hat{\mathbf{e}}_3 k_z, \qquad \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

και τα k_x, k_y, k_z έχουν μόνο αυτόν τον περιορισμό.

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + Be^{-k(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \omega t)}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

Εκφυλισμός: για την ίδια τιμή της Ενέργειας E έχουμε πολλές και διαφορετικές τιμές των k_x, k_y, k_z.

Ρεύμα πιθανότητας

Μέχρι τώρα μιλούσαμε για ένα μόνο σωματίδιο και την πυκνότητα πιθανότητας $P(x,t) = \Psi^*\Psi$ να βρούμε το σωματίδιο γύρω από τη θέση x τη χρονική στιγμή t, και από την κανονικοποίηση έχουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x = 1$$

Εάν έχουμε ένα μεγάλο αριθμό σωματιδίων με την ίδια μάζα και ταχύτητα (όπως σε ένα πείραμα σκέδασης) που κινούνται σε μία κατεύθυνση, έχουμε μία **δέσμη**. Αυτή η δέσμη σωματιδίων χαρακτηρίζεται από την **ένταση** της δέσμης.

Ως Ένταση της δέσμης ορίζουμε τον αριθμό των σωματιδίων που περνάνε ανά μονάδα επιφανείας και ανά μονάδα χρόνου από μια επιφάνεια κάθετη στη διεύθυνση κίνησής τους.

$$J = \frac{n}{\Delta s \cdot \Delta t},$$

εάν πάρουμε $v = \Delta x/\Delta t$, δηλαδή τα σωματίδια διανύουν απόσταση Δx μέσα σε χρόνο Δt. Τότε:

$$J = \frac{n}{\Delta s \cdot \Delta t} \cdot \frac{\Delta x}{\Delta x} = \frac{n}{\Delta V} v$$

$$\Rightarrow J = \rho v$$

όπου ρ η πυκνότητα σωματιδίων ανά μονάδα όγκου (για x, t) και v η ταχύτητα που κινούνται τα σωματίδια (στη θέση x, t).
δηλαδή όσα σωματίδια μπαίνουν από τη μία επιφάνεια Δs του όγκου ΔV τόσα βγαίνουν από την άλλη μεριά. Διανυσματικά,

$$\boldsymbol{J} = \rho\mathbf{v}$$

Εξίσωση διατήρησης μάζας (φορτίου)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_V \rho\,\mathrm{d}^3x = -\oint_S \boldsymbol{J} \cdot \mathrm{d}\mathbf{a}$$

Κβαντομηχανικά η πιθανότητα να βρούμε ένα σωματίδιο στη θέση (x,t) είναι $\Psi^*\Psi$, κανονικοποιώντας στη μονάδα.

Μπορούμε να κανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση Ψ έτσι ώστε να μας δίνει τον ολικό αριθμό των σωματιδίων της δέσμης, και να λύνει συγχρόνως την εξίσωση του Schrödinger για το ένα σωματίδιο. Υποθέτοντας ότι τα σωματίδια της δέσμης δεν αλληλεπιδρούν ισχυρά μεταξύ τους, έχουμε την **πυκνότητα πιθανότητας** που δίνει τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου γύρω από τη θέση $\mathbf{r}$, τη χρονική στιγμή t.

$$\Rightarrow P = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$$

και

$$\int_{\text{χώρο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}^3x = N,$$

όπου N ο ολικός αριθμός σωματιδίων στη δέσμη, και από τον προηγούμενο ορισμό του ρ και της εξίσωσης συνέχειας θα βρούμε το **ρεύμα πιθανότητας**, δηλαδή την ένταση της δέσμης. Αποδεικνύεται ότι:

$$\boldsymbol{J} = -i\frac{\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right\}$$

Απόδειξη: Έχουμε,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$
$$P = \Psi^*\Psi, \qquad V = V(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \frac{\partial\Psi^\star}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} \\
&= \Psi^*\left[\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi\right] + \Psi\left[-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi^*\right] \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\nabla^2\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi\nabla^2\Psi^*\right\} \\
&= -\frac{\hbar}{i2m}\left\{\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*\right\} \\
&= -\frac{\hbar}{i2m}\boldsymbol{\nabla}[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*] \\
&= -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{J} = -i\frac{\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right\}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}, \qquad P = \Psi^*\Psi$$

2.1.2 Ορθογώνιο Σκαλοπάτι Δυναμικού

Εξετάζουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα με δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x < 0 \\ V_0 & \text{για } x > 0 \end{cases}$$

Λύνουμε τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

Α. Ενέργεια σωματιδίου $E < V_0$

Κλασσικά το σωματίδιο κινείται μόνο στην περιοχή $-\infty < x < 0$ και για $x = 0$ ανακλάται και γυρίζει πίσω. Έχουμε για την ενέργεια:

$$E = E_{\text{κιν}} + V, \text{ με } E_{\text{κιν}} > 0.$$

Κβαντομηχανικά λύνουμε την εξίσωση του Schrödinger για $-\infty < x < +\infty$ χωρίζοντας την περιοχή σε δύο υποπεριοχές:

(i) **Περιοχή Ι:** $-\infty < x < 0 \Rightarrow \Psi_1$

(ii) **Περιοχή ΙΙ:** $0 < x < +\infty \Rightarrow \Psi_2$

Εδώ το $E > 0$ (γιατί;)

$$\langle E\rangle = \langle H\rangle = \langle T+V\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle, \quad V=0$$
$$\Rightarrow \langle E\rangle = \langle T\rangle$$

Θα δείξουμε ότι $\langle T\rangle \geq 0$ πάντα.

$$\langle T\rangle = \int \Psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi \,\mathrm{d}x = \frac{1}{2m}\int (\hat{p}\Psi)^*(\hat{p}\Psi)\,\mathrm{d}x$$
$$= \frac{1}{2m}\int \Phi^*\Phi\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2m}\langle \Phi,\Phi\rangle \geq 0$$

όπου $\Phi = \hat{p}\Psi$.
Ενώνουμε τις δύο περιοχές σε μία λύση απαιτώντας από τις Ψ_1, Ψ_2 να ικανοποιούν ορισμένες οριακές συνθήκες:

- Η κυματοσυνάρτηση είναι συνεχής και μονότιμη.
- Η πρώτη παράγωγος της Ψ πρέπει να είναι συνεχής και μονότιμη.
- Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να παραμένει πεπερασμένη ή να τείνει στο μηδέν όταν $x \to \pm\infty$.

Λύση στην περιοχή I:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi_1 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1$$

Ορίζουμε $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} > 0$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Ο πρώτος όρος αντιπροσωπεύει το προσπίπτον σώμα που κινείται προς τα δεξιά. Ο δεύτερος όρος το ανακλώμενο που κινείται προς τα αριστερά.

Λύση στην περιοχή II:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} + V_0\Psi_2 = E\Psi_2$$
$$\Rightarrow \frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\Psi_2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\Psi_2$$

Ορίζουμε

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E) > 0$$
$$\Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Από την τρίτη συνοριακή συνθήκη παίρνουμε $D=0$, αλλιώς θα είχαμε άπειρη πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο για $x=\infty$ στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή.

Από την πρώτη συνοριακή συνθήκη, για $x=0$:

$$\Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0)$$
$$\Rightarrow A+B=C$$

Από τη δεύτερη ΣΣ:

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}$$
$$\Rightarrow ik_1A - ik_1B = -k_2C$$

Λύνουμε το σύστημα:

$$\left\{\begin{array}{lcl} A+B &=& C \\ A-B &=& \dfrac{ik_2}{k_1}C \end{array}\right\} \Rightarrow 2A = C\left[1+\frac{ik_2}{k_1}\right]$$

$$\Rightarrow C = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}A, \qquad B = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}A$$

Χωρίς περιορισμούς στην E (μόνο $E < V_0$) άρα το φάσμα των ενεργειακών ιδιοτιμών είναι συνεχές.

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + \dfrac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}Ae^{-ik_1x} \\ \\ \Psi_2(x) &= \dfrac{2k_1}{k_1 + ik_2}Ae^{-k_2x} \end{cases}$$

- Δεν υπάρχει λύση για $C = 0$ εάν το V_0 είναι πεπερασμένο!
- Η κυματοσυνάρτηση για $x > 0$ φθίνει εκθετικά.
- Εάν $V_0 \to \infty$

$$\Rightarrow k_2 \to \infty \text{ και } \Psi \to 0 \text{ για } x > 0 \Rightarrow \Psi_2(x > 0) \to 0,$$

  οπότε για $V_0 = \infty$ έχουμε λύση με $C = 0$. Τότε $\Psi_1(x) = A \sin k_1 x$ και $\Psi_1(x = 0) = 0$, εφαρμόζουμε μόνο τη συνθήκη για τη συνέχεια της κυματοσυνάρτησης.
- Βάθος διείσδυσης του σωματιδίου προς τα δεξιά:

$$\Delta x = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

$$\Psi_{\text{π}} = Ae^{ik_1x}$$
$$\Psi_{\text{α}} = A\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}e^{-ik_1x}$$
$$\Psi_{\delta} = A\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}e^{-k_2x}$$

Υπολογίζουμε τα ρεύματα πιθανότητας για την *προσπίπτουσα δέσμη* $J_{\text{πρ}}$, την *ανακλώμενη* συνιστώσα της δέσμης $J_{\text{αν}}$ και τη *διερχόμενη* δεξιά συνιστώσα της δέσμης, J_{δ}.

$$\begin{aligned} J_{\text{πρ}} &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*_{\text{π}}\partial_x\Psi_{\text{π}} - \Psi_{\text{π}}\partial_x\Psi^*_{\text{π}}) \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\left\{A^*A(ik_1) - A^*A(-ik_1)\right\} = 2\frac{\hbar k_1}{2m}A^*A = \frac{\hbar k_1}{m}A^*A \end{aligned}$$

αλλά $p_1 = \hbar k_1, \quad v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar}{m}k_1$

$$\Rightarrow J_{\text{πρ}} = A^*Av_1$$

$$\begin{aligned} J_{\text{αν}} &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*_a\partial_x\Psi_a - \Psi_a\partial_x\Psi^*_a) \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\left\{A^*A\frac{(k_1 - ik_2)(k_1 + ik_2)}{(k_1 + ik_2)(k_1 - ik_2)}(-2ik_1)\right\} = -\frac{\hbar k_1}{m}A^*A \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_{\delta} &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*_{\delta}\partial_x\Psi_{\delta} - \Psi_{\delta}\partial_x\Psi^*_{\delta}) \\ &= \frac{-i\hbar}{1m}\left\{\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\frac{2k_1}{k_1 - ik_2}\left[e^{-k_2x}(-k_2)e^{-k_2x} - e^{-k_2x}(-k_2)e^{-k_2x}\right]\right\} \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2}[\text{μηδέν}] = \text{μηδέν} \end{aligned}$$

Δηλαδή κλασσικά θα μπορούσαμε να πούμε ότι τα σωματίδια περνάνε για $x > 0$, επιβραδύνονται, σταματούν και επιταχύνονται προς τα αριστερά!!!

Ορίζουμε το **συντελεστή Ανάκλασης** R και το **συντελεστή Διέλευσης** T:

$$R = \frac{|J_{\text{αν}}|}{J_{\text{πρ}}}, \quad T = \frac{J_{\text{δ}}}{J_{\text{πρ}}}, \qquad T + R = 1$$

Τα R και T είναι η πιθανότητα ανάκλασης και η πιθανότητα διέλευσης, αντίστοιχα.
Εδώ έχουμε:

$$J_{\text{πρ}} = \frac{\hbar k_1}{2m}|A|^2, \quad J_{\text{αν}} = -\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2, \quad J_{\text{δ}} = 0$$
$$\Rightarrow T = 0, \quad R = 1$$

Άρα όλα τα σωματίδια ανακλώνται τελικά· ακόμη και αυτά που περνούν, μέχρι κάποιο βάθος, το σκαλοπάτι δυναμικού προς τα δεξιά.

Β. Ενέργεια σωματιδίου $E > V_0$

Λύση στην περιοχή Ι:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

Λύση στην περιοχή ΙΙ:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\Psi_2$$
$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$
$$\Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + \cancelto{0}{De^{-ik_2x}}$$

$D = 0$: Δεν υπάρχουν για $x > 0$ σωματίδια που να οδεύουν αριστερά, προσπίπτουσα δέσμη από αριστερά.
Ικανοποιούμε τις συνθήκες για την $\Psi(x)$:

$$\begin{cases} A + B &= C \\ ik_1A - ik_1B &= ik_2C \end{cases}$$
$$\Rightarrow C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A, \qquad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A$$

Για δεδομένο V_0, όταν $E \to \infty$ έχουμε $k_2 \to k_1 \Rightarrow R \to 0, T \to 1$

$$\begin{cases} \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + A\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}e^{-ik_1x}, & x < 0 \\ \Psi_2(x) = A\dfrac{2k_1}{k_1 + k_2}e^{ik_2x}, & x > 0 \end{cases}$$

Άρα έχουμε οδεύον κύμα ανακλώμενο προς τα αριστερά για $x < 0$ και οδεύον κύμα που διέρχεται προς τα δεξιά για $x > 0$.
Δεν υπάρχει λύση για $B = 0$, δηλαδή χωρίς ανάκλαση.
Επίσης έχουμε

$$R = \frac{|J_{\text{αν}}|}{J_{\text{πρ}}} = \frac{|B|^2v_1}{|A|^2v_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$
$$T = \frac{J_{\text{δ}}}{J_{\text{πρ}}} = \frac{|C|^2v_2}{|A|^2v_1} = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$
$$R + T = 1$$

Εάν εναλλάξουμε το k_1 με το k_2, δηλαδή εάν το σωμάτιο ερχόταν από δεξιά προς τα αριστερά, θα βρούμε τα ίδια ακριβώς R και T.
Άρα η ανάκλαση οφείλεται μόνο στην ανομοιογένεια του δυναμικού γύρω από το $x = 0$.

2.1.3 Ορθογώνιο Φράγμα δυναμικού - Φαινόμενο Σήραγγας

Εξετάζουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα με δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x < 0 \\ V_0, & \text{για } 0 < x < a \\ 0, & \text{για } x > a \end{cases}$$

υποθέτοντας και πάλι ότι αρχικά για $x \to -\infty$ ένα σωματίδιο συγκεκριμένης ενέργειας κινείται για $x < 0$ από αριστερά προς τα δεξιά.

A. Ενέργεια σωματιδίου $E < V_0$

(i) $\boxed{x < 0}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

(ii) $\boxed{0 < x < a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \Rightarrow \Psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

(iii) $\boxed{x > a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0 \Rightarrow \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

Συνοριακές συνθήκες του προβλήματος: $B_3 = 0$. Από δεξιά $(x > a)$ υπάρχει μόνο το κύμα (σωματίδιο) που πέρασε δηλαδή το A_3, δεν υπάρχει προσπίπτον από δεξιά.

Οριακές συνθήκες για $x = 0$ και $x = a$:
Στην περιοχή $0 < x < a$ δεν έχουμε διάδοση κύματος, αλλά $\Psi(x) \neq 0$

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \Psi_1(x=0) & = & \Psi_2(x=0) \\ \dfrac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}(x=0) & = & \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=0) \\ \Psi_2(x=a) & = & \Psi_3(x=a) \\ \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=a) & = & \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=a) \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathcal{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right\}$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \tag{2.2}$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \tag{2.3}$$

$$e^{k_2 a} A_2 + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \tag{2.4}$$

$$k_2 A_2 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a} \tag{2.5}$$

Λύνω για να βρω τους συντελεστές A, B. Υπάρχει μια αυθαίρετη σταθερά, που ορίζεται από την κανονικοποίηση, η A_1, όλα θα εκφραστούν μέσω της A_1.

Ενδιαφέρομαι κυρίως για την A_3, διότι έτσι θα βρω το **συντελεστή διέλευσης** του σωματιδίου μέσω του φράγματος $E < V_0$

$$T = \frac{J_\delta}{J_{\pi\rho}} = \frac{|A_3|^2 \hbar k_1/m}{|A_1|^2 \hbar k_1/m} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

όπου A_1 το πλάτος προσπίπτοντος κύματος, B_1 το πλάτος ανακλώμενου κύματος και A_3 το πλατος διαδιδόμενου δεξιά κύματος.

Διαιρώ την εξίσωση (2.3) με ik_1 και προσθέτω στην (2.2):

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ A_1 - B_1 &= \frac{k_2}{ik_1} A_2 - \frac{k_2}{ik_1} B_2 \\ \hline 2A_1 &= A_2 \left(1 + \frac{k_2}{ik_1}\right) + B_2 \left(1 - \frac{k_2}{ik_1}\right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow A_1 = A_2 \frac{ik_1 + k_2}{2ik_1} + B_2 \frac{ik_1 - k_2}{2ik_1} \tag{2.6}$$

Διαιρώ την (2.5) με k_2 και από τις (2.4), (2.5) έχω:

$$\begin{aligned} A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ A_2 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \frac{ik_1}{k_2} \\ \hline 2A_2 e^{k_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \\ 2B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_2 = A_3 e^{(ik_1 - k_2)a} \dfrac{k_2 + ik_1}{2k_2} & (2.7) \\ B_2 = A_3 e^{(ik_1 + k_2)a} \dfrac{k_2 - ik_1}{2k_2} & (2.8) \end{cases}$$

Βάζοντας τις (2.7) και (2.8) στην (2.6) έχουμε:

$$A_1 = A_3 \frac{(k_2 + ik_1)^2}{4ik_1k_2} e^{(ik_1 - k_2)a} - A_3 \frac{(k_2 - ik_1)^2}{4ik_1k_2} e^{(ik_1 + k_2)a}$$

$$\Rightarrow A_1 = A_3 \frac{e^{ik_1 a}}{4ik_1k_2} \left[(k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right]$$

Άρα εάν υπάρχει λύση για μη μηδενική κυματοσυνάρτηση, $A_1 \neq 0$ τότε και $A_3 \neq 0$ αναγκαστικά.
Άρα έχουμε πάντα διέλευση από το φράγμα δυναμικού αν και κλασσικά απαγορεύεται όταν $E < V_0$.

> Το καθαρά κβαντικό αυτό φαινόμενο λέγεται **φαινόμενο σήραγγας**. Θα το δούμε στα αγγλόφωνα βιβλία σαν "tunneling". Η εκπομπή ακτινοβολίας α-σωματιδίου από ραδιενεργούς πυρήνες π.χ. οφείλεται στο φαινόμενο σήραγγας μέσω του πυρηνικού δυναμικού.

Προσοχή: Εάν $k_2 a \gg 1$ τότε, αμελώντας το $\mathrm{e}^{-k_2 a}$ στην προηγούμενη σχέση έχουμε:

(1)

$$A_3 \simeq A_1 e^{-ik_1 a} \frac{4ik_1k_2}{(k_2 - ik_1)^2} e^{-k_2 a}$$
$$\Rightarrow T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \approx \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_2^2+k_1^2)^2} \mathrm{e}^{-2k_2 a} \tag{2.9}$$

(2)

$$\Psi_2(0) = A_2 + B_2 = A_3 e^{ik_1 a}[\Gamma e^{-k_2 a} + \Gamma^* e^{k_2 a}]$$
$$\Psi_2(a) = A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}[\Gamma + \Gamma^*]$$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_2(0)}{\Psi_2(a)} \simeq \Gamma^* e^{k_2 a} \Rightarrow \frac{\Psi_2(a)}{\Psi_2(0)} \simeq \frac{e^{-k_2 a}}{\Gamma^*} \Rightarrow \frac{|\Psi_2(a)|^2}{|\Psi_2(0)|^2} \simeq T$$

όπου

$$\Gamma = \frac{k_2 + ik_1}{2k_2} \qquad \text{και} \qquad \Gamma + \Gamma^* = 1$$

Υπολογισμός του συντελεστή διέλευσης

$$A_1^* A_1 = \frac{A_3^* A_3}{16k_1^2k_2^2} \left\{ \left[(k_2+ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right] \cdot \right.$$
$$\left. \cdot \left[(k_2-ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2+ik_1)^2 e^{k_2 a}\right] \right\} \tag{2.10}$$

Το γινόμενο των δύο όρων ισούται με:

$$\begin{aligned}
&= (k_2+ik_1)^2(k_2-ik_1)^2 e^{-2k_2 a} - (k_2+ik_1)^4 - (k_2-ik_1)^4 + \\
&\quad + (k_2+ik_1)^2(k_2-ik_1)^2 e^{2k_2 a} \\
&= (k_2^2+k_1^2)^2(e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a}) - \left[(k_2+ik_1)^4 + (k_2-ik_1)^4\right] \\
&= (k_2^2+k_1^2)^2(e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a}) - 4(k_2^2-k_1^2)^2 + 2(k_2^2+k_1^2)^2 \\
&= (k_2^2+k_1^2)^2[e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a} + 2] - 4(k_2^2-k_1^2)^2 \\
&= (k_2^2+k_1^2)^2(e^{k_2 a} + e^{k_2 a})^2 - 4(k_2^2-k_1^2)^2 \\
&= 4(k_2^2+k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - 4(k_2^2-k_1^2)^2
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήθηκε η ταυτότητα

$$(k_2+ik_1)^4 + (k_2-ik_1)^4 = 4(k_2^2-k_1^2)^2 - 2(k_2^2+k_1^2)^2$$

οπότε η σχέση (2.10) γίνεται:

$$A_1^* A_1 = \frac{A_3^* A_3}{4k_1^2k_2^2} \left\{ (k_2^2+k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - (k_2^2-k_1^2)^2 \right\}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{T = \frac{A_3^* A_3}{A_1^* A_1} = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_2^2+k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - (k_2^2-k_1^2)^2}}$$

$$T + R = 1 \Rightarrow R = 1 - T$$

Χρησιμοποιώντας: $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$,

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$\Rightarrow T = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

Εάν το $k_2 a$ είναι μεγάλο, τότε:

$$\sinh(k_2 a) = \frac{1}{2}\left(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}\right) \to \frac{e^{k_2 a}}{2}$$

$$\Rightarrow T = \left[1 + \frac{e^{2k_2 a}}{16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \simeq 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2k_2 a},$$

που είναι ίδιο με τη σχέση (2.9)

$$T = \frac{1}{1+\Sigma} \simeq \Sigma^{-1}, \qquad \text{για } \Sigma \gg 1,\ 1+\Sigma \simeq \Sigma$$

άρα όσο μικρότερη η μάζα του σωματιδίου ή όσο μικρότερο το a, ή όσο κοντύτερα το E στο V_0, τόσο μικρότερο το γινόμενο $k_2 a$ και άρα μεγαλύτερο το T, επομένως τόσο πιθανότερη η διέλευση του σωματιδίου από το φράγμα του δυναμικού.

Β. Ενέργεια σωματιδίου $E > V_0$

(i) : $\boxed{x < 0} \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\Psi_1'' = E\Psi_1$

$$\Rightarrow k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

(ii) : $\boxed{0 < x < a} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2'' + V_0\Psi_2 = E\Psi_2$

$$\Rightarrow \tilde{k}_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

$$\Rightarrow \Psi_2(x) = A_2 e^{i\tilde{k}_2 x} + B_2 e^{-i\tilde{k}_2 x}$$

(iii) : $\boxed{x > a} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_3'' = E\Psi_3$

$$\Rightarrow \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}$$

Τώρα δεν έχουμε εκθετική ελάττωση του πλάτους του κύματος. Υπολογίζουμε όμοια τα A_k, B_k.

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 &= i\tilde{k}_2 A_2 - i\tilde{k}_2 B_2 \\ A_2 e^{i\tilde{k}_2 a} + B_2 e^{-i\tilde{k}_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ i\tilde{k}_2 A_2 e^{i\tilde{k}_2 a} - i\tilde{k}_2 B_2 e^{-i\tilde{k}_2 a} &= ik_1 A_3 e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

Οι προηγούμενες σχέσεις είναι παρόμοιες με τις σχέσεις για την περίπτωση ($E < V_0$), αλλά με τη διαφορά ότι όπου $k_2 \to i\tilde{k}_2$ για την τελική σχέση που δίνει το A_3 συναρτήσει του A_1 π.χ.
Ο συντελεστής διέλευσης τώρα είναι:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(\tilde{k}_2 a)}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}\right]^{-1}$$

Παρατηρήσεις

(i) Ακόμη και για $E/V_0 > 1$ υπάρχει πιθανότητα να ανακλαστεί το σωματίδιο.
(ii) Όταν $E/V_0 \gg 1$, τότε $T \to 1$, $R \to 0$.

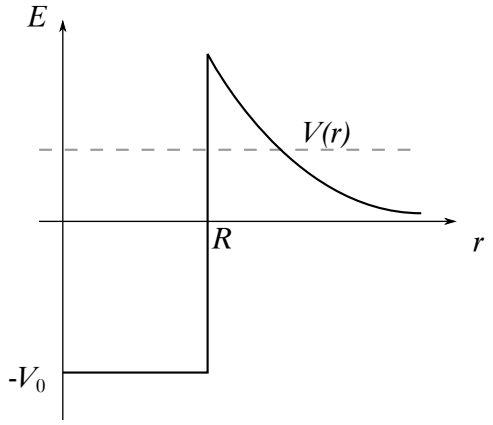
(iii) Για $E/V_0 > 1$, ο συντελεστής διέλευσης εξαρτάται ημιτονοειδώς από το $\tilde{k}_2 a$, άρα για

$$\tilde{k}_2 a = n\pi \Rightarrow T = 1 \text{ με } n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} = n\pi \Rightarrow a^2 \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = n^2\pi^2$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 + V_0$$

(iv) Το δυναμικό που παρουσιάζεται στον πυρήνα και εμποδίζει τα σωματίδια άλφα να βγουν είναι χονδρικά της μορφής του σχήματος 2.1.



Σχήμα 2.1

Η πιθανότητα διέλευσης έχει τη μορφή $T(E) = f(E)\mathrm{e}^{-2k_2 a}$.
Η συνάρτηση $f(E)$ μεταβάλλεται αργά με την ενέργεια E, ενώ το εκθετικό $e^{-2k_2 a}$ μεταβάλλεται πολύ γρήγορα με το E και το a, και επειδή το πλάτος a του φράγματος ελαττώνεται καθώς αυξάνεται η ενέργεια, ο συντελεστής διέλευσης μεταβάλλεται σημαντικά με μικρές μεταβολές της ενεργειας.
Άρα μεταβολή της ενεργειας κατά μερικά MeV προκαλεί μεταβολή στους χρόνους ημιζωης των ραδιενεργών πυρήνων από 10^{-7} s μέχρι 10^{10} χρόνια.
WKB approximation (Wentzel, Kramers, Brillouin)

(v) Πάμε πάλι στη μορφή του συντελεστή διέλευσης $T(E) \simeq e^{2k_2 a}$ με

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Έχουμε ότι

$$T(E) \simeq \frac{|\Psi(a)|^2}{|\Psi(0)|^2} \simeq e^{-2k_2 a}$$

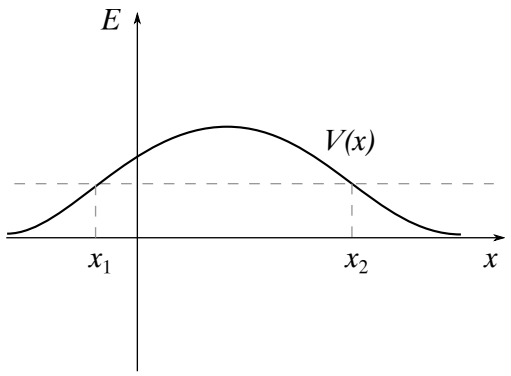
όπου k_2 είναι ο συντελεστής απόσβεσης.

Εάν τώρα το φράγμα δυναμικού δεν έχει την τετραγωνική μορφή όπως προηγουμένως αλλά είναι π.χ. αυτό του σχήματος 2.2.
τότε ο συντελεστής απόσβεσης για ένα τετραγωνικό φράγμα που προσεγγίζει αυτό το δυναμικό αλλάζει με το $x \to k_2(x)$, όπου

$$k_2(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}$$

Μπορούμε στο συντελεστή διέλευσης $T(E)$ να αντικαταστήσουμε τον k_2 με τη μέση τιμή του και έτσι να έχουμε μια πρώτη προσέγγιση για την πιθανότητα διέλευσης ενός σωματιδίου από αυτό το δυναμικό.

$$\Rightarrow \langle k_2 \rangle \equiv \frac{1}{a}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}\,\mathrm{d}x$$



Σχήμα 2.2

$$\Rightarrow \boxed{T(E) = e^{-2\langle k_2\rangle a} = \exp\left\{-2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}\,\mathrm{d}x\right\}}$$

που αποτελεί τον **τύπο του Gamow** στην Πυρηνική Φυσική.

$$a = x_2 - x_1$$

Ορίζουμε

$$A = \frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2(V(x)-E)}\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow T(E) \simeq e^{-\sqrt{m}A}$$

Άρα έχουμε διαφορετικό πλάτος διέλευσης για σωματίδια διαφορετικής μάζας:

$$\frac{T_1(E)}{T_2(E)} \simeq \frac{e^{-\sqrt{m_1}}}{e^{-\sqrt{m_2}}} \simeq e^{-(\sqrt{m_1}-\sqrt{m_2})}$$

2.2 Διακριτό Φάσμα

2.2.1 Δυναμικό Τετραγωνικού Πηγαδιού Απείρου Βάθους

Α. Μονοδιάστατη περίπτωση

Θα εξετάσουμε πρώτα τη μονοδιάστατη περίπτωση, όπου:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για} \quad 0 < x < a \\ \infty, & \text{για} \quad x < 0 \text{ και για } x > a \end{cases}$$

Το σωματίδιο είναι περιορισμένο στο διάστημα $0 \leq x \leq a$. Σύμφωνα με το παράδειγμα στην παράγραφο 2, όταν το $V_0 \to \infty$ η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$ του σωματιδίου μηδενίζεται, δηλαδή για $x > a$ και $x < 0$ στη δική μας περίπτωση.

Εξίσωση του Schrödinger για $0 < x < a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

Ορίζουμε $k_x^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow$ Λύση της διαφορικής εξίσωσης

$$\Psi(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x}$$

$$\Psi(x=0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow B = -A$$

$$\Psi(x) = 2Ai\sin(k_x x) = C\sin(k_x x)$$

$$\Psi(x=a) = 0 \Rightarrow \sin(k_x a) = 0 \Rightarrow k_x a = n\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{k_x = n\frac{\pi}{a},\ n = 1, 2, 3\ldots}$$

Για την ενέργεια έχουμε:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\quad n = 1, 2, 3, \ldots}$$

Η E_1 είναι η ελάχιστη δυνατή ενέργεια, ή αλλιώς ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης. Η ενέργεια είναι κβαντισμένη, παίρνει δηλαδή συγκεκριμένες διακριτές τιμές.

Κανονικοποιούμε την Κυματοσυνάρτηση:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow C^2\int_0^a \sin^2(kx)\,\mathrm{d}x = \frac{C^2}{k}\int_0^{ka=n\pi}\sin^2\omega\,d\omega = \frac{C^2}{n\pi/a}\frac{n\pi}{2} = C^2\frac{a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{C = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

$$\Rightarrow \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

με ενέργεια

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Παρατηρήσεις

(i) **Θεώρημα των κόμβων:**
Ο αριθμός των κόμβων (μηδενισμών) αυξάνεται κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από τη θεμελιώδη στάθμη (κατάσταση, με μηδέν κόμβους) στις ανώτερες

Εννοούμε εδώ μηδενισμός στο πεδίο ορισμού, δηλαδή $0 < x < a$, και όχι στα άκρα.

(ii) Το φάσμα δεν παρουσιάζει εκφυλισμό, δηλαδή υπάρχει μια μόνο κατάσταση για κάθε ενεργειακή στάθμη.

(iii) Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές ως προς το μέσο του πηγαδιού:

$$\begin{aligned} E_1 &\to \text{ άρτια} \\ E_2 &\to \text{ περιττή} \\ E_3 &\to \text{ άρτια} \end{aligned}$$

(iv) Κλασσικό όριο $\hbar \to 0$, $m \to \infty$ τότε η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης τείνει στο μηδέν, το φάσμα τείνει στο συνεχές.

(v) Στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών $n \to \infty$ έχουμε

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \to 0,$$

άρα πλησιάζουμε και πάλι το συνεχές φάσμα.

(vi) Σχέση Αβεβαιότητας - Ενέργεια θεμελιώδους στάθμης

$$\Delta x \cdot \Delta p \simeq \hbar$$

Η αβεβαιότητα στη θέση είναι της τάξης του εύρους του πηγαδιού $\Rightarrow \Delta x \simeq a$.
Ακόμη,

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \quad \text{και} \quad \langle p \rangle = 0$$

διότι $\langle [x, H] \rangle = \dfrac{i\hbar}{m} \langle p \rangle$ και $\langle [x, H] \rangle = 0$ για τις δέσμιες καταστάσεις για οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση της ενέργειας

$$\Rightarrow (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \simeq \left(\frac{\hbar}{\Delta x} \right)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{a^2}$$

Η μέση τιμή της ενέργειας θα είναι:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \simeq E_1$$

(vii) **Απόσταση μεταξύ ενεργειακών σταθμών** για μικρά n περίπου ίση με την

$$E_1 \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \simeq \Delta E$$

Άτομο: $m = m_e = 0.5\,\text{MeV}$, $a = R_{\text{τροχιάς}} \simeq 0.5 \times 10^{-8}\,\text{cm}$

$$\Rightarrow \Delta E \simeq \text{ eV}$$

Πυρήνας: $m = m_p \simeq 2000\, m_e$, $a = R_{\text{πυρήνα}} \simeq 10^{-13}\,\text{cm}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\Delta E_{\text{πυρ}}}{\Delta E_{\text{ατ}}} \simeq \frac{m_e R^2_{\text{τροχιάς}}}{m_p R^2_{\text{πυρ.}}} \simeq 10^6 \text{ εώς } 10^7}$$

Β. Τριδιάστατο κουτί με άπειρα τοιχώματα

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \text{όταν} \quad \begin{matrix} 0 < x < a \\ 0 < y < b \\ 0 < z < c \end{matrix} \\ \infty, & \text{όταν} \quad \begin{matrix} x < 0, & x > a \\ y < 0, & y > b \\ z < 0, & z > c \end{matrix} \end{cases}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E\Psi$$

(ελεύθερο σωμάτιο μέσα στο κουτί)

$\Rightarrow$ Λύση από την παρ. 2.1.1 με τη μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών

$$\Psi(x,y,z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$$

Τα Ψ_k είναι επίπεδα κύματα και από τις οριακές συνθήκες λόγω της μονοδιάστατης περίπτωσης (Α) έχουμε:

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

$$\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{m\pi y}{b}\right), \qquad m = 1,2,3,\ldots$$

$$\Psi_3(z) = \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{l\pi z}{c}\right), \qquad l = 1,2,3,\ldots$$

Για την ενέργεια έχουμε:

$$E = E_x + E_y + E_z = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\frac{\hbar^2}{2m}$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n^2}{a^2} + \frac{\pi^2 m^2}{b^2} + \frac{\pi^2 l^2}{c^2}\right),$$

δηλαδή η ενέργεια χαρακτηρίζεται από τρεις κβαντικούς αριθμούς.

$$E = E_{nlm}$$

Δίνοντας τα n, l, m ξέρουμε την ενέργεια.

Εκφυλισμός διότι μπορεί να έχουμε την ίδια ενέργεια για πολλές διαφορετικές τριάδες (n,l,m), όταν έχουμε ίδιο μήκος των πλευρών.

Παράδειγμα. Έστω $a = b = c$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n^2 + l^2 + m^2) = \xi(n^2 + l^2 + m^2)$$

$n = 1, l = 1, m = 1 \Rightarrow E_{111} = 3\xi$ μία στάθμη

$n = 2, l = 1, m = 1 \Rightarrow E = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\xi$ τρεις στάθμες

$\vdots$

2.2.2 Τετραγωνικό πηγάδι Δυναμικού πεπερασμένου βάθους

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για} \quad -a < x < a \\ V_0, & \text{για} \quad x < -a, x > a \end{cases}$$

Θα λύσουμε το πρόβλημα μόνο για $E < V_0$. Έχουμε τρεις περιοχές:

(i) **Περιοχή Ι,** $x < -a$**:** $\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi_1 = E\Psi_1$

(ii) **Περιοχή II,** $-a < x < a$**:** $\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi_2$

(iii) **Περιοχή III,** $x > a$**:** $\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi_3}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi_3 = E\Psi_3$

Λύση των τριών εξισώσεων Schrödinger:

(I), $x < -a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi_1$$

$$\boxed{k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x}$$

(II), $-a < x < a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_2$$

$$\boxed{k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E} \Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$$

(III), $x > a$

$$\Psi_3(x) = Fe^{k_1 x} + Ge^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες: Για $x \to \pm\infty$, η $\Psi(x)$ είναι πεπερασμένη γενικά, και ειδικά τώρα για $x \to \pm\infty$ η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται $\Psi_1(x \to -\infty) \to 0$ και $\Psi_3(x \to \infty) \to 0$

$$\Rightarrow B = 0,\ F = 0$$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \qquad \Psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$

Ακόμη,

$$\Psi_2(x) = \tilde{C}\sin k_2 x + \tilde{D}\cos k_2 x$$

Τα $\tilde{C}, \tilde{D}$ είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί.

Το δυναμικό $V(x)$ του προβλήματος είναι αναλλοίωτο σε έναν κατοπτρικό μετασχηματισμό. Άρα οι ιδιοσυναρτήσεις της Ενέργειας αναλύονται σε άρτιες και περιττές, και η parity διατηρείται.

Α. Άρτιες Κυματοσυναρτήσεις, $\Psi(x) = \Psi(-x)$

$$\Rightarrow A = G, \qquad \tilde{C} = 0$$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \quad \Psi_2(x) = \tilde{D}\cos(k_2 x), \quad \Psi_3(x) = Ae^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\left\{\begin{array}{rcl} \Psi_1(-a) & = & \Psi_2(-a) \\ \left.\dfrac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a} & = & \left.\dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a} \end{array}\right\} \quad \text{και} \quad \left\{\begin{array}{rcl} \Psi_2(a) & = & \Psi_3(a) \\ \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(a) & = & \dfrac{\mathrm{d}\Psi_3}{\mathrm{d}x}(a) \end{array}\right\}$$

που είναι ισοδύναμες από τη συμμετρία.

$$\left.\begin{array}{rcl} \tilde{D}\cos(k_2 a) & = & Ae^{-k_1 a} \\ -\tilde{D}k_2\sin(k_2 a) & = & -Ak_1 e^{-k_1 a} \end{array}\right\}$$

τις οποίες διαιρώντας παίρνουμε:

$$\boxed{\tan(k_2 a) = \frac{k_1}{k_2}}$$

Β. Περιττές Κυματοσυναρτήσεις, $\Psi(x) = -\Psi(-x)$

$$\Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \quad \Psi_2(x) = \tilde{C}\sin(k_2 x), \quad \Psi_3(x) = -Ae^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{C}\sin(k_2 a) &= -Ae^{-k_1 a} \\ \tilde{C}k_2\cos(k_2 a) &= Ak_1 e^{-k_1 a} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\boxed{\tan(k_2 a) = -\frac{k_2}{k_1}}$$

Λύση για τις άρτιες κυματοσυναρτήσεις:

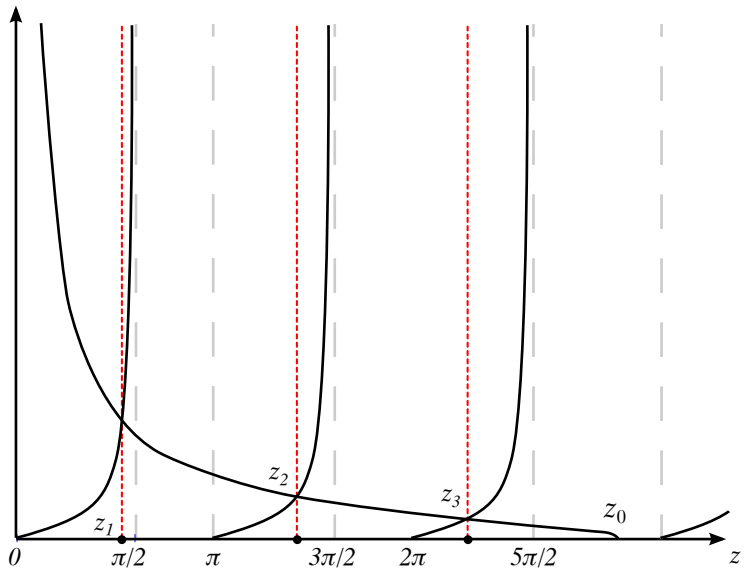
$$\tan(k_2 a) = \frac{k_1}{k_2} = \frac{k_1 a}{k_2 a} = \sqrt{\frac{k_1^2 a^2}{k_2^2 a^2}}$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E), \qquad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

$$z = k_2 a, \qquad z^2 = k_2^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}Ea^2$$

$$z_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2$$

$$\Rightarrow \tan(z) = \sqrt{\frac{z_0^2 - z^2}{z^2}} = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$



Σχήμα 2.3: *Γραφική παράσταση για $z_0 = 8$ π.χ.*

$$z_k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E_k a^2} \Rightarrow E_k = \frac{\hbar^2 z_k^2}{2ma^2}$$

Λύση για τις περιττές κυματοσυναρτήσεις:

$$\tan(k_2 a) = -\frac{k_2}{k_1} = -\frac{k_2 a}{k_1 a} = -\sqrt{\frac{k_2^2 a^2}{k_1^2 a^2}}$$

Θέτω $k_2 a = z$, οπότε

$$\tan z = -\frac{z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}}$$

Κάνουμε γραφική παράσταση των συναρτήσεων $\tan z$ και $z/\sqrt{z_0^2 - z^2}$ με δεδομένο το z_0. Τα σημεία τομής δίνουν τις λύσεις $z_k \Rightarrow E_k$.
Συνολικά λοιπόν για $z_0 = 8$ έχουμε 3 άρτιες και 3 περιττές λύσεις. Για $z_0 \leq \pi/2$ έχουμε μόνο μια λύση (άρτια).

2.2.3 Πηγάδι δυναμικού συνάρτησης δέλτα

$$V(x) = -a\delta(x),\ a > 0$$

A. $\boxed{E < 0}$ $\Rightarrow$ Στάσιμες καταστάσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} - a\delta(x)\Psi = E\Psi$$

για $x \neq 0$ έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(-E)\Psi = k^2\Psi$$

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \qquad \boxed{k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|}$$

$$\Rightarrow \Psi(x) = \begin{cases} Be^{kx}, & x < 0 \\ Fe^{-kx}, & x > 0 \end{cases}$$

Συνοριακές συνθήκες:

(i) Ψ συνεχής $\Rightarrow B = F \Rightarrow \Psi(x) = Be^{-k|x|}$

(ii) $\Psi'(x)$ συνεχής εκτός από τα σημεία όπου το $V(x)$ απειρίζεται, δηλαδή το $x = 0$.
$\Psi'(x)$ ασυνεχής στο $x = 0 \Rightarrow \Psi''(x = 0)$ απειρίζεται, έτσι ώστε να εξουδετερώνει τη $\delta(x)$ απειρία $\Rightarrow$ Ορίζουμε τα B, E.

Ολοκληρώνουμε την εξίσωση του Schrödinger από το $-\epsilon$ έως το $+\epsilon$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x - a\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\Psi(x) = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}(x = +\epsilon) - \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}(x = -\epsilon)\right) - a\Psi(0) = 0,$$

στο όριο $\epsilon \to 0$.

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right|_{\epsilon} = -Bk, \quad \left.\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right|_{-\epsilon} = Bk, \quad \Psi(0) = B\ (\epsilon \to 0)$$

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}(-2k) = a \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m}k = a \Rightarrow k = \frac{ma}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow k^2 = \frac{(ma)^2}{\hbar^4} = \frac{2m}{\hbar^2}|E| \Rightarrow \boxed{|E| = \frac{ma^2}{2\hbar^2}}$$

Κανονικοποίηση: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\Psi(x) = 1$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} B^2 e^{-2k|x|}\,\mathrm{d}x = 1 \Rightarrow 2B^2\int_0^{+\infty} e^{-2kx}\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow B^2 = k \Rightarrow B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}e^{\frac{-ma}{\hbar^2}|x|}}$$

(Εδώ έχουμε μόνο μια ιδιοτιμή της ενέργειας με $E < 0$).

Β. $\boxed{E > 0}$ Συνεχές φάσμα

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' - a\delta(x)\Psi = E\Psi$$

$$x \neq 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' = E\Psi \Rightarrow \Psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

$$\Psi'' = -k^2\Psi \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},\ x < 0$$

$$\boxed{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \Psi_2(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx},\ x > 0$$

$G = 0$: Δεν υπάρχει κύμα προσπίπτον από τα δεξιά, εάν έχουμε δέσμη που έρχεται από τα αριστερά.

Συνοριακές συνθήκες: $\Psi_1(0^-) = \Psi_2(0^+) \Rightarrow A + B = F$

$$\frac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=0^-} = ik(A - B) \qquad \frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=0^+} = ikF$$

Ολοκλήρωμα της Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[ikF - ik(A - B)] = a(A + B)$$

$$\Rightarrow ik(A + B) - ik(A - B) = -\frac{2ma}{\hbar^2}(A + B)$$

$$\Rightarrow 2ikB = -\frac{2ma}{\hbar^2}(A + B) \Rightarrow B = i\frac{ma}{k\hbar^2}(A + B)$$

Ορίζουμε $\beta = \dfrac{ma}{k\hbar^2}$

$$\Rightarrow \boxed{B = i\frac{\beta}{1 - i\beta}A}$$

Συντελεστής ανάκλασης $\Rightarrow$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2},$$

$$T = 1 - R = \frac{1}{1 + \beta^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

2.3 Μονοδιάστατος Αρμονικός Ταλαντωτής

Κάθε φυσικό σύστημα για μικρές μετατοπισεις από τη θέση ευσταθούς ισορροπίας υπακούει σε μια εξίσωση που δίνει σαν λύση την απλή αρμονική ταλάντωση.
Η δυναμική ενέργεια είναι:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

Κλασσικά έχουμε την εξίσωση κίνησης

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx \Rightarrow x'' = -\omega^2 x$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \quad \text{και} \quad x(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t$$

$$\Rightarrow x(t) = x_0\sin(\omega t + \phi)$$

$$E = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$$

2.3.1 Αναλυτική λύση, πολυώνυμα Hermite

Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi=E\Psi$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\Psi=0$$

Ορίζουμε την αδιάστατη μεταβλητή

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x=\sqrt{\alpha}x,\qquad \alpha=\frac{m\omega}{\hbar}\simeq\frac{1}{(\text{μήκος})^2}$$

$$\hbar\omega=\frac{\text{Joule}\cdot\text{ sec}}{\text{sec}}\simeq\text{Joule}$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}=\frac{\text{Joule}\cdot\text{ sec}}{\text{Kgr (sec)}^{-1}}\simeq\frac{\text{Nt}\cdot\text{ m sec}^2}{\text{Kgr}}$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\simeq\text{Kgr}\frac{\text{m}}{\text{sec}^2}\frac{\text{m}\cdot\text{ sec}^2}{\text{Kgr}}\simeq(\text{m})^2$$

$$\xi^2=\frac{m\omega}{\hbar}x^2\qquad\text{αδιάστατο}$$

$$\Rightarrow\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\sqrt{\alpha}$$

$$\Rightarrow\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}=\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}\alpha}$$

$$\Rightarrow\alpha\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\alpha\xi^2\right)\Psi=0$$

$$\Rightarrow\quad\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\frac{2E}{\omega\hbar}-\xi^2\right)\Psi=0$$

όπου $\Psi(\xi)$ συνεχής, μονότιμη, πεπερασμένη για $-\infty<\xi<+\infty$.

Επίλυση με τη μέθοδο των δυναμοσειρών

Η $\Psi(\xi)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και $\Psi(\xi)\to 0$ για $\xi\to\pm\infty$.
Προσδιορίζουμε πρώτα την $\Psi(\xi)$ για τα μεγάλα ξ, δηλαδή πρώτα την ασυμπτωτική της συμπεριφορά. Σε αυτή την περίπτωση το $\frac{2E}{\omega\hbar}$ είναι αμελητέο σε σχέση με το ξ^2. Επομένως η εξίσωση προς επίλυση είναι:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}-\xi^2\Psi=0$$

Προσεγγιστικά πάλι αυτή η εξίσωση ικανοποιείται από την $\Psi(\xi)=e^{-\xi^2/2}$.

Απόδειξη:

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}=-\xi e^{-\xi^2/2}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}=\xi^2e^{-\xi^2/2}-e^{-\xi^2/2}$$

άρα ο δεύτερος όρος παραλείπεται,

$$\Rightarrow\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}=\xi^2e^{-\xi^2/2}=\xi^2\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = 0 \qquad \text{ο.ε.δ}$$

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης για όλο το διάστημα ορισμού του ξ ισχυριζόμαστε ότι θα είναι της μορφής:

$$\Psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}y(\xi)$$

με $y(\xi)$ πολυώνυμο και όχι άπειρη σειρά, διότι θέλουμε $\Psi(\xi) \to 0$ για $\xi \to \pm\infty$.
Αντικαθιστούμε την $\Psi(\xi)$ στη διαφορική εξίσωση και επιλύουμε τη νέα διαφορική εξίσωση που προκύπτει:

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi} = -\xi e^{-\xi^2/2}y(\xi) + e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} = \xi^2 e^{-\xi^2/2}y(\xi) - e^{-\xi^2/2}y(\xi) - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} = e^{-\xi^2/2}\left[\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + (\xi^2-1)y(\xi)\right]$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση του Schrödinger έχουμε:

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)y = 0$$

Θέτουμε: $\dfrac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2\beta$

$$\Rightarrow \quad E = \left(\beta + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

και

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + 2\beta y = 0$$

που λέγεται **Διαφορική Εξίσωση του Hermite** με λύση τα πολυώνυμα Hermite.

Η Χαμιλτονιανή είναι αναλλοίωτη στην Parity $\Rightarrow$ χωρίζουμε τις λύσεις σε άρτιες και περιττές.

Λύση:

$$y(\xi) = \sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k\xi^k$$

Αντικαθιστούμε και βρίσκουμε μια αναδρομική σχέση για το α_k.

$$y''(\xi) = \sum_k \alpha_k k(k-1)\xi^{k-2}$$

$$y'(\xi) = \sum_k \alpha_k k\xi^{k-1}$$

$$\xRightarrow[\substack{k=\nu+2\\ k-1=\nu+1}]{\nu=k-2} \underbrace{\overbrace{\sum_{k=0}^{+\infty} a_k k(k-1)\xi^{k-2}}^{\sum_{\nu=0}^{\infty}\alpha_{\nu+2}(\nu+2)(\nu+1)\xi^{\nu}}}_{\text{αρχίζει από τον όρο } k=2} - 2\sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k k\xi^k + 2\beta\sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k\xi^k = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty}\big[\alpha_{k+2}(k+2)(k+1) + \alpha_k(2\beta - 2k)\big]\xi^k = 0,\ \forall\xi \ \Rightarrow \ \text{μηδενίζονται οι συντελεστές του } \xi$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha_{k+2} = \frac{2(k-\beta)\alpha_k}{(k+2)(k+1)}}$$

(α) δίνοντας το συνδυασμό

$$\alpha_0 \neq 0,\ \alpha_1 = 0 \Rightarrow \text{ άρτιες λύσεις}$$

$$\Rightarrow y(\xi) = \alpha_0 \left[1 - \frac{2\beta}{2!}\xi^2 + \frac{2^2}{4!}\beta(\beta-2)\xi^4 + \ldots\right]$$

$$\alpha_0,\ \alpha_2 = -\frac{2\beta}{2}\alpha_0,\ \ \alpha_4 = \frac{2(2-\beta)}{3\cdot 4}\alpha_2 = -\frac{4\beta(2-\beta)\alpha_0}{2\cdot 3\cdot 4}$$

$$\text{άρτια λύση},\ \alpha_0 \neq 0.$$

(β) δίνοντας το συνδυασμό

$$\alpha_0 = 0,\ \alpha_1 \neq 0 \Rightarrow \text{ περιττές λύσεις}$$

Το πολυώνυμο αρχίζει με $\xi \to \xi^3 \to \xi^5 \to \ldots$ άρα περιττή λύση, $\alpha_1 \neq 0$.

$$y(\xi) = \alpha_1 \left[\xi - \frac{2(\beta-1)}{3!}\xi^3 + \frac{2^2}{5!}(\beta-1)(\beta-3)\xi^5 + \ldots\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\text{Η parity διατηρείται}}$$

Για μια αυθαίρετη τιμή του β οι δύο συντελεστές έχουν άπειρους όρους. Η $\Psi(\xi)$ δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

Εάν $\beta =$ ακέραιος $= n$ με $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$, οι σειρές τερματίζονται και βρίσκουμε σαν $y(\xi)$ πολυώνυμα.

Επομένως έχουμε:

(i) $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ Διακριτές στάθμες ενέργειας

(ii) $y_0(\xi) = \alpha_0, \quad n = 0,$ $\alpha_0 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_1(\xi) = \alpha_1\xi, \quad n = 1,$ $\alpha_1 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_2(\xi) = \alpha_0(1 - 2\xi^2), \quad n = 2,$ $\alpha_0 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_3(\xi) = \alpha_1\left(\xi - \frac{2}{3}\xi^3\right), \quad n = 3,$ $\alpha_1 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$$\Psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2}y_n(\xi) = \tilde{c}_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$$

$H_n(\xi)$ είναι τα πολυώνυμα του Hermite με κατάλληλη κανονικοποίηση.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(\xi)\Psi_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi$$

Πολυώνυμα του Hermite:

$$\begin{aligned}
H_0(\xi) &= 1, & \alpha_0 &= 1\\
H_1(\xi) &= 2\xi, & \alpha_1 &= 2\\
H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & \alpha_0 &= -2\\
H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, & \alpha_1 &= -12\\
&\vdots
\end{aligned}$$

Τα πολυώνυμα του Hermite έχουν την ιδιότητα

$$H_n(\xi) = (-1)^n H_n(-\xi)$$

και ορίζονται από τη σχέση:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n\left(e^{-\xi^2}\right)}{d\xi^n}$$

Τα πολυώνυμα του Hermite από την προηγούμενη σχέση δεν είναι κανονικοποιημένα.
Σχέση ορθογωνιότητας:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}\,d\xi = 0, \qquad \text{για } m \neq n$$

Κανονικοποιώντας έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(\xi)\Psi_m(\xi)\,\mathrm{d}\xi = \delta_{nm}$$

όπου

$$\Psi_n(\xi) = \tilde{c}_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

και

$$\tilde{c}_n = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}$$

Ιδιοενέργειες του Αρμονικού ταλαντωτή

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

Ιδιοσυναρτήσεις του Αρμονικού Ταλαντωτή

$$\Psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}e^{-\alpha x^2/2}H_n(\sqrt{\alpha}x)$$

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$n = 0 \Rightarrow \Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\alpha x^2/2}$$

$$n = 1 \Rightarrow \Psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{2\alpha}xe^{-\alpha x^2/2}$$

$$n = 2 \Rightarrow \Psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^3}}(4\alpha x^2 - 2)e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\vdots$$

Παρατηρήσεις

(i) Οι $\Psi_n(x)$ απλώνονται και στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή, δηλαδή εκεί όπου $E_n < V(x)$, αλλά φθίνουν εκθετικά.

(ii) Αριθμός κόμβων αυξάνει κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από τη θεμελιώδη $n = 0$ στην $n = 1$ και μετά στη $n = 2, \ldots$.

(iii) $\Delta x \simeq$ άπλωμα $\Psi_0(x) \simeq \dfrac{1}{\sqrt{2\alpha}}$

$$\Rightarrow (\Delta x)^2 \simeq \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}$$

(iv) Ενέργεια θεμελιώδους στάθμης

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Ελάχιστη ενέργεια λόγω της Αρχής της Αβεβαιότητας

$$(\Delta x)\cdot(\Delta p) \simeq \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \Rightarrow [x,H] = \frac{2i\hbar}{2m}p$$

και

$$[p,H] = -i\hbar m\omega^2 x, \qquad \langle\Psi_n|[x,H]|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \langle p\rangle = 0$$

$$\langle\Psi_n|[p,H]|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \langle x\rangle = 0$$

$\langle x\rangle = 0,\ \langle p\rangle = 0$ για τον ταλαντωτή σε μια ιδιοκατάσταση της Ενέργειας

$$\Rightarrow \langle p^2\rangle = (\Delta p)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$\langle x^2\rangle = (\Delta x)^2$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle \simeq \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

$$\Rightarrow \text{ ελάχιστο της } \langle E\rangle, \quad \frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{d(\Delta x)} = 0$$

$$\Rightarrow (\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{προσεγγιστικά.}$$

2.3.2 Τελεστές Δημιουργίας και Καταστροφής

Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ορίζουμε όπως πριν μία νέα μεταβλητή

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

ως προς τη νέα μεταβλητή ξ έχουμε

$$\hat{H} = \hbar\omega\left[\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right]$$

με ιδιοσυναρτήσεις να είναι συναρτήσεις του ξ.
Ορίζουμε τους τελεστές $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ συζυγή του $\hat{a}$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{ip_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\xi + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{ip_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\xi - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

οι τελεστές αυτοί δεν είναι ερμιτιανοί αν και χωριστά οι δύο όροι x, p_x είναι ερμιτιανοί στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.
Για τους δύο τελεστές $a, a^\dagger$ έχουμε τις σχέσεις μετάθεσης (για συντομία δε βάζουμε το «ˆ»)

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left\{\xi^2 - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi + \xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right) + \frac{1}{2}\left[\xi, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] \end{aligned}$$

Ισχύει:

$$\left[\xi, \frac{d}{d\xi}\right] = -1$$

$$\Rightarrow \quad a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2}\right) - \frac{1}{2}$$

Ορίζοντας τον τελεστή $\hat{N} = a^\dagger a$ έχουμε

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned}
[a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}\left[\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] \\
&= \frac{1}{2}[\xi, \xi] + \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \xi\right] - \frac{1}{2}[\xi, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}] - \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] \\
&= \frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right) = 1
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow [a, a^\dagger] = 1$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger$$

$$\Rightarrow aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \Rightarrow aa^\dagger - 1 = a^\dagger a \Rightarrow \hat{N} = aa^\dagger - 1$$

Αν λοιπόν έχουμε μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή N, τότε

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{N}\Psi_\lambda &= \lambda\Psi_\lambda \\ \hat{H}\Psi_\lambda &= \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\Psi_\lambda \end{cases}$$

Βρίσκουμε λοιπόν τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{N}$.
Για τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ του $\hat{N}$ ισχύει:

$$\int \Psi^*(x)\hat{N}\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int \Psi^* a^\dagger a\Psi\,\mathrm{d}x = \int (a\Psi)^*(a\Psi)\,\mathrm{d}x \geq 0$$

άρα έχει θετικές ιδιοτιμές (ή μηδέν).
Αν Ψ_λ ιδιοσυνάρτηση του $\hat{N}$ με ιδιοτιμή λ,

$$\hat{N}\Psi_\lambda = \lambda\Psi_\lambda \Rightarrow N(a\Psi_\lambda) = (\lambda - 1)a\Psi_\lambda$$

Απόδειξη:

Σχέση μετάθεσης $[\hat{N}, a] = -a$

$$\hat{N}a - a\hat{N} = -a \Rightarrow \hat{N}a = a\hat{N} - a \quad \text{και} \quad \hat{N}\Psi_\lambda = \lambda\Psi_\lambda$$

$$\Rightarrow \hat{N}(a\Psi_\lambda) = a\hat{N}\Psi_\lambda - a\Psi_\lambda = (\lambda - 1)a\Psi_\lambda$$

και

$$\hat{N}(a^2\Psi_\lambda) = \hat{N}a(a\Psi_\lambda) = (aN - a)a\Psi_\lambda = aN(a\Psi_\lambda) - a^2\Psi_\lambda = (\lambda - 2)a^2\Psi_\lambda$$

$$\hat{N}(a^3\Psi_\lambda) = \hat{N}a(a^2\Psi_\lambda) = (a\hat{N} - a)a^2\Psi_\lambda = a\hat{N}(a^2\Psi_\lambda) - a^3\Psi_\lambda = a(\lambda - 2)a^2\Psi_\lambda - a^3\Psi_\lambda = (\lambda - 3)a^3\Psi_\lambda$$

$$\Rightarrow \hat{N}(a^\rho\Psi_\lambda) = (\lambda - \rho)a^\rho\Psi_\lambda$$

με $\lambda - \rho \geq 0$. Για αρκετά μεγάλο ρ όμως ($\rho > \lambda$) εμφανίζεται μια ιδιοσυνάρτηση με αρνητική ιδιοτιμή, αδύνατον.
Η λύση στο πρόβλημα αυτό είναι ότι υπάρχει αριθμός $k : a^k\Psi_\lambda = 0$. Όμοια $\forall l > k$, $a^l\Psi_\lambda = a^{l-k}a^k\Psi_\lambda = 0$

$$\Rightarrow \hat{N}a^{k-1}\Psi_\lambda = (\lambda-(k-1))a^{k-1}\Psi_\lambda$$

βάζουμε $\hat{N} = a^\dagger a$ οπότε θα έχουμε

$$\Rightarrow a^\dagger a^k \Psi_\lambda = (\lambda-(k-1))\, a^{k-1}\Psi_\lambda$$

Επειδή $a^k\Psi_\lambda = 0 \Rightarrow \lambda = k-1 =$ ακέραιος

$$\Rightarrow \lambda = n, \quad \text{ακέραιος αριθμός}$$

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

με $n = 0, 1, 2, \ldots, \infty$.

$$k = n+1 = \lambda+1$$
$$\lambda = 0 \Rightarrow k = 1 \Rightarrow \Psi_0, a\Psi_0 = 0$$
$$\lambda = 1 \Rightarrow k = 2 \Rightarrow \Psi_1, a^2\Psi_1 = 0$$

Ορισμός της θεμελιώδους στάθμης Ψ_0:

$$\hat{N}\Psi_0 = 0 \Rightarrow a^\dagger(a\Psi_0) = 0$$
$$a\Psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\Psi_0 = 0$$
$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\Psi_0}{\mathrm{d}\xi} = -\xi\Psi_0 \Rightarrow \Psi_0(\xi) = \tilde{c}e^{-\xi^2/2}$$

και

$$\Psi_0(x) = c\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}$$

Κανονικοποιώντας έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(x)\Psi_0(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(\xi)\Psi_0(\xi)\mathrm{d}\xi = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi} \Rightarrow \tilde{c} = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$

$$\boxed{\Rightarrow c = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}$$

Θεώρημα 2.1. *Οι διακριτές τιμές της Ενέργειας E_n ενός μονοδιάστατου προβλήματος είναι μη εκφυλισμένες.*

Απόδειξη. Έστω δύο λύσεις Ψ_1, Ψ_2 για την ίδια ιδιοτιμή:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x)-E\big)\Psi_1 \Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\Psi_1'' = \frac{2m}{\hbar}\left(V(x)-E\right)$$
$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x)-E\big)\Psi_2 \Rightarrow \frac{1}{\Psi_2}\Psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x)-E\right)$$
$$\Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\Psi_1'' = \frac{1}{\Psi_2}\Psi_2'' \Rightarrow \Psi_2\Psi_1'' = \Psi_1\Psi_2''$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2'\right) = 0$$
$$\Rightarrow \Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = \text{ σταθερό } = \text{ μηδέν}$$

διότι $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_1'\Psi_2' \to 0$ για $x \to \pm\infty$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2'}{\Psi_2} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\ln\Psi_1) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\ln\Psi_2)$$
$$\Rightarrow \Psi_1 = c\Psi_2$$

□

Στον ταλαντωτή όπου $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$, μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{H} \Rightarrow$ μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{N}$.

Αναδρομικός υπολογισμός των $\Psi_n(\xi)$: Έχουμε $Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger$

$$\Rightarrow N(a^\dagger\Psi_0) = a^\dagger N\Psi_0 + a^\dagger\Psi_0 = 0 + a^\dagger\Psi_0 = a^\dagger\Psi_0$$

άρα η συνάρτηση $a^\dagger\Psi_0$ είναι ιδιοσυνάρτηση του N με ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1 \Rightarrow \Psi_1 \simeq a^\dagger\Psi_0$

$$N(a^\dagger\Psi_1) = a^\dagger N\Psi_1 + a^\dagger\Psi_1 = 2(a^\dagger\Psi_1)$$

άρα η συνάρτηση $a^\dagger\Psi_1 = (a^\dagger)^2\Psi_0$ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{N}$ με ιδιοτιμή $\lambda_2 = 2$

$$\Rightarrow \Psi_2 \simeq (a^\dagger)^2\Psi_0$$

Η σταθερή αναλογίας βρίσκεται από την κανονικοποίηση.

Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε

$$\Psi_n \simeq (a^\dagger)^n\Psi_0$$

και με κανονικοποίηση

$$\boxed{\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\Psi_0}$$

Υπολογίζουμε τώρα το συντελεστή κανονικοποίησης:
Θα δείξουμε ότι:

$$\begin{cases} a^\dagger\Psi_n &= \sqrt{n+1}\Psi_{n+1} \\ a\Psi_n &= \sqrt{n}\Psi_{n-1} \end{cases}$$

Γενικά όπως είδαμε ισχύει:

$$\begin{cases} a^\dagger\Psi_n &= \beta_n\Psi_{n+1} \\ a\Psi_n &= \gamma_n\Psi_{n-1} \end{cases}$$

$$N\Psi_n = n\Psi_n$$

$$\Rightarrow a^\dagger a\Psi_n = n\Psi_n$$

$$(aa^\dagger - 1)\Psi_n = n\Psi_n$$

$$\Rightarrow aa^\dagger\Psi_n = (n+1)\Psi_n$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(aa^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = (n+1)\underbrace{\int\Psi_n^*\Psi_n\mathrm{d}x}_{=1} = (n+1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(aa^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = \int(a^\dagger\Psi_n)^*(a^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = \beta_n^*\beta_n\underbrace{\int\Psi_{n+1}^*\Psi_{n+1}\mathrm{d}x}_{=1} = \beta_n^*\beta_n$$

$$\Rightarrow \beta_n^*\beta_n = n+1 \Rightarrow \beta_n = \sqrt{n+1}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(a^\dagger a\Psi_n)\mathrm{d}x = n\int\Psi_n^*\Psi_n\mathrm{d}x = n$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(a^\dagger a\Psi_n)\mathrm{d}x = \int(a\Psi_n)^*(a\Psi_n)\mathrm{d}x = \gamma_n^*\gamma_n\int\Psi_{n-1}^*\Psi_{n-1}\mathrm{d}x = \gamma_n^*\gamma_n$$

$$\Rightarrow \gamma_n^*\gamma_n = n \Rightarrow \gamma_n = \sqrt{n}$$

$$\Psi_n = c_n(a^\dagger)^n\Psi_0$$

Ξέρουμε ότι $\Psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \Psi_n$

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= a^\dagger \Psi_0 \\
\Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 \Psi_0 \\
\Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^3 \Psi_0 \\
&\vdots \\
\Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \Psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (a^\dagger)^2 \Psi_{n-2} = \ldots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \Psi_0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

$$\Psi_1 = a^\dagger \Psi_0 = \frac{c}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = \frac{c}{\sqrt{2}} (2\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

$$\Psi_1 = \frac{c}{\sqrt{2}} H_1(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

Γενικά,

$$\boxed{\Psi_n = c \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad c = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}$$

όπου $H_n(\xi)$ είναι πολυώνυμα του Hermite τάξης n.
$\hat{a}^\dagger$ ο **τελεστής δημιουργίας** και $\hat{a}$ ο **τελεστής καταστροφής** (οι δύο αυτοί τελεστές ονομάζονται **τελεστές κλίμακας**) και $\hat{N} = \hat{a}^+ a$ ο **τελεστής αριθμού κβάντων**.

$$\begin{aligned}
(\Psi_m, \hat{N} \Psi_n) &= n \delta_{mn} \\
(\Psi_m, a^\dagger \Psi_n) &= \sqrt{n+1} (\Psi_m, \Psi_{n+1}) = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \\
(\Psi_m, a \Psi_n) &= \sqrt{n} (\Psi_m, \Psi_{n-1}) = \sqrt{n} \delta_{m,n-1}
\end{aligned}$$

$$a^\dagger \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \tag{2.11}$$

$$a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1} \tag{2.12}$$

Προσθέτοντας τις (2.11) και (2.12) κατά μέλη:

$$\frac{2}{\sqrt{2}} \xi \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \Psi_{n-1}$$

Αφαιρώντας κατά μέλη:

$$\frac{2}{\sqrt{2}} \frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}\xi} = \sqrt{n} \Psi_{n-1} - \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}$$

Άσκηση: Υπολογισμός του $\langle V \rangle_n = \langle n | V | n \rangle$

$$\langle V \rangle_n = \langle \Psi_n, \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi_n \rangle$$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \Psi_n = \xi \Psi_n = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\sqrt{n+1} \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \Psi_{n-1} \right)$$

$$\frac{m\omega}{\hbar} x^2 \Psi_n = \xi (\xi \Psi_n) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\sqrt{n+1} \xi \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \xi \Psi_{n-1} \right)$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n = \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\Psi_{n+2} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\Psi_n + \sqrt{n}\sqrt{n}\Psi_n + \sqrt{n}\sqrt{n-1}\Psi_{n-2}\right]$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n = \frac{1}{2}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\Psi_{n+2} + (n+1)\Psi_n + n\Psi_n + \sqrt{n(n-1)}\Psi_{n-2}\right]$$

$$\langle V\rangle_n = \frac{1}{2}m\omega^2\langle\Psi_n, x^2\Psi_n\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\langle\Psi_n, \frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n\rangle$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left[\langle\Psi_n|(n+1)\Psi_n\rangle + \langle\Psi_n|n\Psi_n\rangle\right]$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}(n+1+n) = \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)$$

$$\Rightarrow \langle V\rangle_n = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\langle T\rangle_n = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle_n = \frac{1}{2m}\langle\Psi_n, P^2\Psi_n\rangle = \dots$$

$$p\Psi_n = -i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}x} = -i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}\xi}$$

$$= -i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n}\Psi_{n-1} - \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}\right]$$

$$p^2\Psi_n = -\hbar^2\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n-1}}{\mathrm{d}\xi} - \sqrt{n+1}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n+1}}{\mathrm{d}\xi}\right] = \dots$$

$$\frac{1}{2m}p^2\Psi_n = -\frac{\hbar\omega}{4}\sqrt{2}\left[\sqrt{n}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n-1}}{\mathrm{d}\xi} - \sqrt{n+1}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n+1}}{\mathrm{d}\xi}\right] = \dots$$

$$\langle n|H|n\rangle = E_n = \langle T\rangle_n + \langle V\rangle_n$$

3

Θεωρία διαταραχών

3.1 Διαταραχή μη εκφυλισμένων καταστάσεων

3.1.1 Τοποθέτηση του προβλήματος

Θέλουμε να λύσουμε με τη θεωρία των διαταραχών το πρόβλημα των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων ενός συστήματος το οποίο μπορούμε να χωρίσουμε σε δύο επιμέρους προβλήματα, ανάλογα με το μέγεθος συνεισφοράς στην ενέργεια. Έχουμε ότι η *συνολική* χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$H = H_0 + V$$

Υποθέτουμε **πρώτον** ότι μπορούμε να λύσουμε ακριβώς το πρόβλημα με μόνο τον H_0 και **δεύτερον** ότι η μεταβολή στις στάθμες ενέργειας $E_n^{(0)}$ του H_0 λόγω του V είναι μικρότερη από τη διαφορά ενέργειας για οποιεσδήποτε δύο διαδοχικές στάθμες $E_k^{(0)}$ και $E_{k\pm1}^{(0)}$.
Σημείωση: Τα προβλήματα που λύνονται ακριβώς είναι ελάχιστα.
Λύνουμε πρώτα το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του H_0.

$$\hat{H}_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

η χαμιλτονιανή H_0 έχουμε υποθέσει ότι έχει ένα διακριτό μη εκφυλισμένο φάσμα ιδιοτιμών. Το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων είναι **πλήρες** και **ορθοκανονικό**.

$$\langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)} \rangle = \delta_{nm}$$

Η χαμιλτονιανή του πραγματικού προβλήματος είναι:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Ο τελεστής $\hat{V}$ της πρόσθετης δυναμικής ενέργειας ονομάζεται τελεστής διαταραχής. Η ιδιοσυνάρτηση της πλήρους χαμιλτονιανής είναι:

$$(H_0 + V)\Phi_n = E_n \Phi_n$$

Λύνουμε αυτήν την εξίσωση με διαδοχικές προσεγγίσεις φθίνουσας σημασίας:

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots$$

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$

όπου $E_n^{(1)} > E_n^{(2)} > E_n^{(3)} > \dots$. Σε πρώτη προσέγγιση μπορούμε να δεχτούμε ότι

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} \quad \text{και} \quad E_n \simeq E_n^{(0)}$$

διαταραχή μηδενικής τάξης. Για καλύτερη προσέγγιση μπορούμε να πάρουμε έναν ακόμη όρο στο ανάπτυγμα

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)}$$

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$$

διαταραχή πρώτης τάξης
ή

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)}$$
$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

διαταραχή δεύτερης τάξης
και συνεχίζουμε έτσι! Στην πράξη σταματάμε όταν η μεταβολή δεν είναι πλέον αισθητή. Συνήθως έχουμε διαταραχή πρώτης τάξης μόνο. Εάν το $E_n^{(1)} = 0$ τότε παίρνουμε οπωσδήποτε το $E_n^{(2)}$. Το μαθηματικό πρόβλημα γίνεται πολύ δύσκολο καθώς αυξάνουμε την τάξη προσέγγισης, και επειδή οι $\Psi_n^{(0)}$ του αδιατάραχτου συστήματος φτιάχνουν ένα πλήρες σύνολο συναρτήσεων, οι προσεγγιστικές λύσεις λόγω της διαταραχής θα είναι γραμμικοί συνδυασμοί των $\Psi_k^{(0)}$.

Για να γίνει ποσοτική η προσεγγιστική αυτή μέθοδος εισάγουμε μια παράμετρο λ έτσι ώστε να παραμετροποιήσουμε την ένταση της πρόσθετης αλληλεπίδρασης.

Η λύση λοιπόν του φυσικού προβλήματος δίνεται από τις λύσεις της χαμιλτονιανής

$$(H_0 + \lambda V)\Phi_n = E_n \Phi_n, \text{ για } \lambda = 1,$$

ενώ για $\lambda = 0$ έχουμε

$$H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

και άρα οι Φ_n, E_n είναι συναρτήσεις του λ.

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} C_{nk}(\lambda) \Psi_k^{(0)}$$

Αναπτύσουμε τους συντελεστές $C_{nk}(\lambda)$ σε σειρά ως προς λ και έχουμε

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \alpha_{nk} \Psi_k^{(0)} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} b_{nk} \Psi_k^{(0)} + \dots$$

δηλαδή

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots$$

Αναπτύσουμε και την ενέργεια σε σειρά ως προς λ:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

Υποθέτουμε ότι οι σειρές συγκλίνουν για κάθε $0 \leq \lambda \leq 1$. Άρα οι συντελεστές πρέπει να ελαττώνονται από τάξη σε τάξη.

Υπολογισμός των διαδοχικών όρων στην προσέγγιση: Αντικαθιστούμε στην εξίσωση $(H_0 + \lambda V)\Phi_n = E_n \Phi_n$ τις εκφράσεις των Φ_n και E_n και εξισώνουμε τους συντελεστές των ίδιων δυνάμεων του λ, διότι οι ισότητες ισχύουν για κάθε λ.

$$\Rightarrow (H_0 + \lambda V) \left\{ \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots \right\} =$$
$$\left\{ E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right\} \cdot \left\{ \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots \right\}$$
$$\Rightarrow H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης } \lambda^0 = 1$$
$$\Rightarrow V \Psi_n^{(0)} + H_0 \Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης } \lambda$$
$$V \Psi_n^{(1)} + H_0 \Psi_n^{(2)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης} \lambda^2$$
$$\vdots$$

Σε πολλά φυσικά προβλήματα έχουμε περισσότερες της μίας αλληλεπιδράσεις με διαφορετική ισχύ π.χ. $V = V_1 + V_2$ με $V_1 > V_2$. Μπορούμε να συμπεριλάβουμε την V_1 στην διαταραχή πρώτης τάξης, ενώ η V_2 μπορεί να εμφανιστεί σαν διαταραχή δεύτερης τάξης για το V_1. Πρακτικά μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα ως εξής:

$$V = \lambda V_1 + \lambda^2 V_2$$

3.1.2 Διαταραχή πρώτης τάξης

Έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$V\Psi_n^{(0)} + H_0\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)}$$

όπου σύμφωνα με όσα έχουμε πει για την πληρότητα του συστήματος των αδιατάρακτων κυματοσυναρτήσεων έχουμε:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_k a_{nk}\Psi_k^{(0)}, \quad \text{με } k \neq n$$

$$\Rightarrow V\Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} a_{nk}E_k^{(0)}\Psi_k^{(0)} = E_n^{(0)}\sum_{l\neq n} a_{nl}\Psi_l^{(0)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} \tag{3.1}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.1) με $\Psi_n^{*(0)}$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle + 0 = 0 + E_n^{(1)}\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

αλλά $\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle = 1$ και $\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_k^{(0)}\rangle = 0$ για $k \neq n$

$$E_n^{(1)} = \langle\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle \tag{3.2}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.1) με $\Psi_m^{*(0)}$ με $m \neq n$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle + a_{nm}E_m^{(0)} = E_n^{(0)}a_{nm}$$

$$\Rightarrow a_{nm} = \frac{\langle\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{3.3}$$

Εάν υπολογίσουμε τον πίνακα που προκύπτει από τη διαταραχή V και τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_n^{(0)}$ έχουμε

$$V_{kn} = \langle\Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1N} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V2N \\ \vdots & \vdots & & \\ V_{N1} & V_{N2} & \cdots & V_{NN} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\Psi_k^{(0)} \tag{3.4}$$

και

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} \tag{3.5}$$

Η προσέγγιση έχει νόημα όταν

$$\begin{cases} |V_{nn}| & \ll & |E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}| \\ \\ |V_{nn}| & \ll & |E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}| \end{cases}$$

Ο παρονομαστής στα a_{kn} δεν γίνεται ποτέ μηδέν διότι έχουμε πάντοτε $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ για $k \neq n$, μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές.

3.1.3 Διαταραχή δεύτερης τάξης

Για την επόμενης τάξης προσέγγιση της ενέργειας και της κυματοσυνάρτησης του συστήματος έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$V\Psi_n^{(1)} + H_0\Psi_n^{(2)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)} \tag{3.6}$$

με

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n} a_{nk}\Psi_k^{(0)}, \quad a_{nk} = \text{ γνωστό}$$

και

$$\Psi_n^{(2)} = \sum_{l\neq n} b_{nl}\Psi_l^{(0)}, \quad E_n^{(1)} = \text{ γνωστό}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.6) με $\Psi_n^{(0)}$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle + 0 = 0 + 0 + E_n^{(2)}\langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} a_{nk}\langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_k^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle \Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle\langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_k^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn}V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Υπολογισμός της κυματοσυνάρτησης

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.6) με $\Psi_k^{(0)}$ για $k \neq n$ και ολοκληρώνουμε:

$$\langle \Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle + \langle \Psi_k^{(0)}, H_0\Psi_n^{(2)}\rangle =$$

$$= E_n^{(0)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{l\neq n} a_{nl}V_{kl} + E_k^{(0)}b_{nk} = E_n^{(0)}b_{nk} + E_n^{(1)}a_{nk} + 0$$

$$b_{nk}(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) = \sum_{l\neq n} a_{nl}V_{kl} - E_n^{(1)}a_{nk} + 0$$

με

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle = V_{nn}$$

και

$$a_{nl} = \frac{\langle \Psi_l^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\rangle} = \frac{V_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$\Rightarrow b_{nk} = \sum_{l\neq n} \frac{V_{kl}V_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}$$

Συνθήκη εφαρμογής της θεωρίας διαταραχών

$$|V_{kn}| \ll |E_k^{(0)} - E_n^{(0)}| \qquad \text{για κάθε } k, n$$

Άρα η σειρά συγκλίνει, διότι οι όροι ελαττώνονται καθώς αυξάνουμε την τάξη προσέγγισης.

Εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού της $\Psi_n^{(1)}$

$$V\Psi_n^{(0)} + H_0\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)}$$

$$\Rightarrow (H_0 - E_n^{(0)})\Psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - V)\Psi_n^{(0)}$$

όπου $H_0, E_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}, V, E_n^{(1)}$ γνωστά. Άρα λύνουμε αυτή τη διαφορική εξίσωση ως προς $\Psi_n^{(1)}$, και μετά υπολογίζουμε την $E_n^{(2)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle$.

3.1.4 Εφαρμογές

1. *Η δυναμική ενέργεια ενός σωματιδίου δίνεται από τις σχέσεις:*

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \quad \text{και} \quad x > 2a \\ bx, & \text{για } 0 \leq x \leq 2a \end{cases}$$

Να υπολογιστεί η ενέργεια E_n του σωματιδίου σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών.

Για $b = 0$ έχουμε το άπειρο πηγάδι δυναμικού με

$$E_n^{(0)} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \qquad \text{και} \qquad \Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)} \rangle = b\frac{1}{a}\int_0^{2a} x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \mathrm{d}x$$

$$= \frac{b}{a}\frac{4a^2}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi} y \sin^2 y \mathrm{d}y = ba$$

$$\int y \sin^2 y \mathrm{d}y = \frac{1}{4}\left(\sin^2 y - 2y \sin y \cos y\right) + \frac{y^2}{4}$$

2. *Αναρμονικός Ταλαντωτής*

Η δυναμική ενέργεια ενός σωματιδίου μάζας m δίνεται από τις σχέσεις:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \\ \frac{1}{2}kx^2 + bx^3, & \text{για } x > 0 \end{cases}$$

Να υπολογίσετε διαταρακτικά την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών.

Θεωρούμε τον όρο $U(x) = bx^3$ σαν διαταραχή στον αρμονικό ταλαντωτή

$$V_0(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή και οι ιδιοενέργειες είναι

$$\Psi_n(x) = C\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

όπου

$$C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \qquad \text{και} \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \sqrt{a}x$$

με ενέργειες $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$. Επειδή η δυναμική ενέργεια απειρίζεται για $x = 0$ εκεί η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται.

Τα πολυώνυμα του Hermite είναι άρτια για άρτιο n και περιττά για περιττό n και μηδενίζονται στο μηδέν. Οι λύσεις λοιπόν στο αδιατάρακτο πρόβλημα είναι οι λύσεις του αρμονικού ταλαντωτή για περιττό $n = 2k + 1$ με $k = 0, 1, 2, \ldots$

Η θεμελιώδης στάθμη είναι για $k = 0$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}(2\sqrt{a}x)\mathrm{e}^{-ax^2/2}$$

με ενέργεια $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

Σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών η διόρθωση της ενέργειας είναι:

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= \int_0^\infty \Psi_1(x)U(x)\Psi_1(x)\mathrm{d}x = U_{11}\\ &= \frac{4}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}b\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty x^k\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{2a^{(k+1)/2}}$$

όπου η συνάρτηση $\Gamma(z)$ ορίζεται από τις σχέσεις:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \qquad \text{και} \qquad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2/2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma(6/2)}{2a^{6/2}} = \frac{\Gamma(3)}{2a^3} = \frac{2!}{2a^3} = \frac{1}{a^3}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \Delta E_1 &= 2b\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\\ &= \frac{b}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\end{aligned}$$

Για να ισχύει η προσέγγιση θα πρέπει:

$$|\Delta E_1| \ll 2\hbar\omega$$

$$\Rightarrow \frac{3b}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \ll \hbar\omega$$

3.2 Διαταραχή εκφυλισμένων καταστάσεων

Μέχρι τώρα υποθέσαμε ότι οι καταστάσεις του αρχικού (βασικού) αδιατάραχτου συστήματος είναι μη εκφυλισμένες. Αλλά στη φύση συνήθως συναντάμε σε όλα τα κβαντικά συστήματα εκφυλισμό. Τα πραγματικά συστήματα δεν είναι μονοδιάστατα. Όταν υπαρχει εκφυλισμός τότε σε διαταραχή ήδη πρώτης τάξης συναντάμε στον παρονομαστή την ενεργειακή διαφορά $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ όταν υπολογίζουμε τη διόρθωση στη στάθμη E_n. Εάν λοιπόν συμβαίνει η στάθμη n να είναι εκφυλισμένη τότε κάποια στιγμή στο άθροισμα, έχουμε και τη συνεισφορά από την εκφυλισμένη κατάσταση $E_k^{(0)}$, οπότε $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = 0$ και ο όρος αυτός απειρίζεται. Αλλά το πρόβλημα αυτό είναι τεχνικό - οφείλεται δηλαδή σε παθογένεια της μεθόδου.
Θα αναπτύξουμε λοιπόν μία μέθοδο για την άρση του εκφυλισμού. Θα υποθέσουμε ότι έχουμε στο αδιατάραχτο σύστημα δύο μόνο εκφυλισμένες καταστάσεις, την $\Psi_n^{(0)} = |n\rangle$ και την $\Psi_l^{(0)} = |l\rangle$, για ευκολία. Η μέθοδος γενικεύεται κατ' ευθείαν για εκφυλισμό N. Η χαμιλτονιανή είναι $H = H_0 + V$ και

$$H_0|k\rangle = E_k^{(0)}|k\rangle, \quad k = 1, 2, \ldots, \underbrace{n, l}_{E_n^{(0)}=E_l^{(0)}}, \ldots$$

σε πρώτης τάξης προσέγγιση για αυτές τις δύο στάθμες έχουμε:

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} a_{nk}\Psi_k^{(0)} = \underbrace{\Psi_n^{(0)} + a_{nl}\Psi_l^{(0)}} + \Psi_n^{(1)}$$

$$\Phi_l = \Psi_l^{(0)} + \sum_{k\neq l} a_{lk}\Psi_l^{(0)} = \underbrace{\Psi_l^{(0)} + a_{ln}\Psi_n^{(0)}} + \Psi_l^{(1)}$$

$$\begin{cases} \Psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n,l} a_{nk}\Psi_k^{(0)}, & \Psi_l^{(1)} = \sum_{k\neq l,n} a_{lk}\Psi_k^{(0)} \\ a_{mk} = \dfrac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}, & V_{km} = \langle\Psi_k^{(0)}|V|\Psi_m^{(0)}\rangle \end{cases}$$

Έχουμε ξεχωρίσει λοιπόν τις εκφυλισμένες στάθμες $\Psi_n^{(0)}, \Psi_l^{(0)}$ και ορίζουμε τώρα δύο νέες κανονικοποιημένες καταστάσεις Ψ_n, Ψ_l σαν ιδιοσυναρτήσεις της συνολικής χαμιλτονιανής $\hat{H}$ σε προσέγγιση μέχρι πρώτης τάξης για την ενέργεια. Διαγωνιοποιούμε δηλαδή την $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ στον 2 διαστάσεων υποχώρο των κυματοσυναρτήσεων της $\hat{H}_0$. Εάν μπορούσαμε να το κάνουμε συνολικά θα λύναμε πλήρως το πρόβλημα. Ουσιαστικά αντί για $\Psi_n^{(0)}$ και $\Psi_l^{(0)}$ θα μπορούσαμε να πάρουμε οποιονδήποτε γραμμικό συνδυασμό:

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi_n = c_{nn}\Psi_n^{(0)} + c_{nl}\Psi_l^{(0)} \\ \\ \Psi_l = c_{ll}\Psi_l^{(0)} + c_{ln}\Psi_n^{(0)} \end{cases}$$

και

$$(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (H_0 + V)\Psi_l = E_l\Psi_l$$

εάν ο εκφυλισμός θεωρηθεί μεγαλύτερος τότε:

$$\Psi_n = \sum_{i=1}^{N} c_{ni}\Psi_i^{(0)}, \quad n = 1, 2, \ldots, N$$

Όλες οι καταστάσεις $\Psi_i^{(0)}$ έχουν την ίδια ενέργεια.
Αντικαθιστώντας στην εξίσωση ιδιοτιμών $(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n$ έχουμε, αφού πολλαπλασιάσουμε από αριστερά με την $\Psi_k^{(0)}$ και ολοκληρώσουμε:

$$\langle k|H_0|\Psi_n\rangle + \langle k|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle k|\Psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_i E_n^{(0)} c_{ni}\langle k|i\rangle + \sum_i c_{ni}\langle k|V|i\rangle = E_n \sum_i c_{ni}\langle k|i\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(0)} c_{nk} - E_n c_{nk} = -\sum_i c_{ni}V_{ki}$$

$$\Rightarrow c_{nk}(E_n - E_n^{(0)}) = \sum_i c_{ni}V_{ki} = c_{nk}V_{kk} + \sum_{i\neq k} c_{ni}V_{ki}$$

$$\Rightarrow \boxed{c_{nk}\left[V_{kk} + E_n^{(0)} - E_n\right] + \sum_{i\neq k} c_{ni}V_{ki} = 0}$$

όπου $n = 1, 2, \ldots, N$ και $k = 1, 2, \ldots, N$.
Κρατώντας σταθερό το n για $k = 1$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}\left[V_{11} + E_n^{(0)} - E_n\right] + c_{n2}V_{12} + c_{n3}V_{13} + \ldots + C_{nN}V_{1N} = 0$$

Για $k = 2$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{21} + c_{n2}\left[V_{22}E_n^{(0)} - E_n\right] + c_{n3}V_{23} + \ldots + c_{nN}V_{2n} = 0$$

Για $k = 3$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{31} + c_{n2}V_{32} + c_{n3}\left[V_{33}E_n^{(0)} - E_n\right] + \ldots + c_{nN}V_{3N} = 0$$

$$\vdots$$

Για $k = N$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{N1} + c_{n2}V_{N2} + c_{n3}V_{N3} + \ldots + C_{nN}\left[V_{NN} + E_n^{(0)} - E_n\right] = 0$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \left[V_{11} + E_n^{(0)} - E_n\right] & V_{12} & V_{13} & \ldots V_{1N} \\ V_{21} & \left[V_{22} + E_n^{(0)} - E_n\right] & V_{23} & \ldots V_{2N} \\ V_{31} & V_{32} & \left[V_{33} + E_n^{(0)} - E_n\right] & \ldots V_{3N} \\ & \vdots & & \\ V_{N1} & V_{N2} & V_{N3} & \cdots \left[V_{NN} + E_n^{(0)} - E_n\right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n1} \\ c_{n2} \\ c_{n3} \\ \vdots \\ c_{nN} \end{pmatrix} = 0$$

Έχουμε λοιπόν ένα σύστημα $N \times N$ ομογενές, με $N+1$ αγνώστους τους E_n, c_{n1}, ..., c_{nN}. Για να έχει μια μη-τετριμμένη λύση το σύστημα, θα πρέπει η ορίζουσά του να είναι μηδέν:

$$\det\left|V + (E_n^{(0)} - E_n)\mathbb{1}\right| = 0 \Rightarrow N \text{ ιδιοτιμές για την ενέργεια } E_n \Rightarrow N \text{ ιδιοδιανύσματα.}$$

Τα c_n είναι ορθογώνια μεταξύ τους, με μία απροσδιόριστη σταθερά, τη βρίσκουμε κανονικοποιώντας.

Επιστρέφουμε τώρα στο διδιάστατο αρχικό πρόβλημα.

$$\begin{gathered}
\langle n|H_0|\Psi_n\rangle + \langle n|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle n|\Psi_n\rangle \\
c_{nn}E_n^{(0)} + c_{nn}V_{nn} + c_{nl}V_{nl} = c_{nn}E_n \\
\langle l|H_0|\Psi_n\rangle + \langle l|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle l|\Psi_n\rangle \\
c_{nl}E_n^{(0)} + c_{nn}V_{ln} + c_{nl}V_{ll} = E_n c_{nl} \\
\Rightarrow \begin{cases} c_{nn}V_{nn} + c_{nl}V_{nl} = c_{nn}(E_n - E_n^{(0)}) \\ c_{nn}V_{ln} + c_{nl}V_{ll} = c_{nl}(E_n - E_n^{(0)}) \end{cases} \\
\Rightarrow \left\{ \begin{pmatrix} V_{nn} & V_{nl} \\ V_{ln} & V_{ll} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{nn} \\ c_{nl} \end{pmatrix} = W_n \begin{pmatrix} c_{nn} \\ c_{nl} \end{pmatrix} \right.
\end{gathered}$$

όπου

$$W_n = E_n - E_n^{(0)}$$

Εξίσωση ιδιοτιμών W_n και ιδιοσυναρτήσεων (ιδιοδιανυσμάτων) για τον 2×2 πίνακα V του διαταρακτικού δυναμικού. Το σύστημα έχει μη μηδενική λύση εάν η ορίζουσα είναι μηδέν:

$$\det\begin{vmatrix} V_{nn} - W_n & V_{nl} \\ V_{ln} & V_{ll} - W_n \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{array}{l} \text{δύο ιδιοτιμές} \\ \text{δύο ιδιοδιανύσματα} \end{array}$$

$$\Rightarrow (V_{nn} + E_n^{(0)} - E_n)(V_{ll} + E_n^{(0)} - E_n) - V_{nl}V_{ln} = 0$$

Έχουμε ένα τριώνυμο δευτέρου βαθμού, άρα έχουμε δύο λύσεις.

$$E_{n(\pm)} = E_n^{(0)} + \frac{1}{2}(V_{nn} + V_{ll}) \pm \frac{1}{2}\Big[(V_{nn} - V_{ll})^2 + 4V_{nl}V_{ln}\Big]^{1/2}$$

Η ενεργειακή ιδιοτιμή $E_{n(+)}$ αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi_n\rangle = c_{nn}|\Psi_n^{(0)}\rangle + c_{nl}|\Psi_l^{(0)}\rangle$$

και η ενεργειακή ιδιοτιμή $E_{n(-)}$ αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi_l\rangle = c_{ll}|\Psi_l^{(0)}\rangle + c_{ln}|\Psi_n^{(0)}\rangle$$

Τα διανύσματα (c_{nn}, c_{nl}) και (c_{ll}, c_{ln}) είναι ιδιοδιανύσματα του πίνακα V με τιμές του E_n ίσον με $E_{n(+)}$ και $E_{n(-)}$ αντίστοιχα. Επειδή το σύστημα είναι ομογενές, προσδιορίζουμε το c_{nl} μέσω του c_{nn} κάθε φορά. Κανονικοποιώντας στη μονάδα, βρίσκουμε και το c_{nn}. Θέτουμε

$$E_n = E_{n(+)} \quad \text{και} \quad E_l = E_{n(-)}$$

Οι δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ_n, Ψ_l που προκύπτουν είναι μεταξύ τους ορθογώνιες.

$$(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n \Rightarrow V\Psi_n = E_n\Psi_n - H_0\Psi_n = E_n\Psi_n - E_n^{(0)}\Psi_n = W_n\Psi_n$$

και $V\Psi_l = W_l\Psi_l$ αντίστοιχα, όπου $W_n = E_n - E_n^{(0)}$, $W_l = E_l - E_n^{(0)}$.
Έχουμε λοιπόν:

$$\begin{gathered}
V|\Psi_n\rangle = W_n|\Psi_n\rangle, \qquad V|\Psi_l\rangle = W_l|\Psi_l\rangle \\
\text{και} \qquad \langle\Psi_l|V = W_l\langle\Psi_l|, \quad V \text{ ερμιτιανός} \\
\Rightarrow \langle\Psi_l|V|\Psi_n\rangle = \begin{cases} W_n\langle\Psi_l|\Psi_n\rangle \\ W_l\langle\Psi_l|\Psi_n\rangle \end{cases} \\
W_l \neq W_n \Rightarrow \langle\Psi_l|\Psi_n\rangle = 0
\end{gathered}$$

Άρα η διαταραχή V είναι διάγωνια σε αυτή τη βάση. Και

$$\begin{gathered}
E_n^{(1)} = W_n = \langle\Psi_n|V|\Psi_n\rangle = V_{nn} \\
E_l^{(1)} = W_l = \langle\Psi_l|V|\Psi_l\rangle = V_{ll}
\end{gathered}$$

Εφαρμογή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) + cxy, \qquad c \ll m\omega^2$$

(α) Να υπολογιστούν οι ενέργειες E_n και οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_n του σωματιδίου για $c = 0$.
(β) Αν $c \neq 0$, να υπολογιστούν σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών οι ενέργειες και σε μηδενική τάξη οι κυματοσυναρτήσεις για τη μικρότερη ενέργεια με εκφυλισμό.

Λύση:

(α) $\Psi_n(x,y) = \Psi_{n1}(x)\Psi_{n2}(y)$

$$E_n = E_{n1} + E_{n2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{n1}}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi_{n1} = E_{n1}\Psi_{n1} \quad \text{και} \quad \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{n2}}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2}{2}y^2\Psi_{n2} = E_{n2}\Psi_{n2}$$

όπου

$$E_{n1} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right), \quad E_{n2} = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

και $E_n = \hbar\omega(n+1)$

$$n = n_1 + n_2, \quad \begin{cases} n_1 = 0, 1, 2\ldots \\ n_2 = 0, 1, 2, \ldots \end{cases}$$

$$\Rightarrow n = 0, 1, 2, \ldots$$

Για την ενέργεια $E_0 = \hbar\omega$, έχουμε μόνο μία ιδιοσυνάρτηση, την $\Psi_0(x,y) = \Psi_0(x)\Psi_0(y)$.
Για την ενέργεια $E_1 = 2\hbar\omega$ έχουμε δύο ιδιοσυναρτήσεις

$$\begin{cases} \Psi_{10}(x,y) = \Psi_1(x)\Psi_0(y) = \Phi_1 \\ \Psi_{01}(x,y) = \Psi_0(x)\Psi_1(y) = \Phi_2 \end{cases} \Rightarrow \text{εκφυλισμός}$$

Για ορισμένο n με ενέργεια $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+1)$, το n_1 μπορεί να πάρει τις τιμές $n_1 = 0, 1, 2, \ldots, n$, δηλαδή έχουμε $n+1$ διαφορετικές καταστάσεις με την ίδια ενέργεια.

(β) Ιδιοτιμές της ενέργειας και ιδιοσυναρτήσεις

$$V_{11} = \langle\Phi_1|V|\Phi_1\rangle = \int \Psi_1^*(x)\Psi_0^*(y)cxy\Psi_1(x)\Psi_0(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$V_{11} = 0, \quad V_{22} = 0$$

$$\begin{aligned} V_{12} &= \langle\Phi_1|V|\Phi_2\rangle = c\int \Psi_1^*(x)\Psi_0^*(y)xy\Psi_0(x)\Psi_1(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ &= c\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_1(x)x\Psi_0(x)\mathrm{d}x\right)^2 = c\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_1(x)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Psi_1(x)\mathrm{d}x\right)^2 \\ &= c\frac{\hbar}{2m\omega} = V_{21} \end{aligned}$$

διότι

$$x\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Psi_1(x)$$

$$\Rightarrow \det\begin{vmatrix} 2\hbar\omega - E_1 & \frac{c\hbar}{2m\omega} \\ \frac{c\hbar}{2m\omega} & 2\hbar\omega - E_1 \end{vmatrix} = 0$$

$$(2\hbar\omega - E_1)^2 - \frac{c^2\hbar^2}{4m^2\omega^2} = 0 \Rightarrow \left[2\hbar\omega - E_1 - \frac{c\hbar}{2m\omega}\right]\left[2\hbar\omega - E_1 + \frac{c\hbar}{2m\omega}\right] = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} E_1^{(+)} = 2\hbar\omega + \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ E_1^{(-)} = 2\hbar\omega - \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \end{cases}$$

$$\Phi^{(+)} = c_1^{(+)}\Phi_1 + c_2^{(+)}\Phi_2, \qquad E_1^{(+)} = E_1^{(0)} + W$$

$$\Phi^{(-)} = c_1^{(-)}\Phi_1 + c_2^{(-)}\Phi_2, \qquad E_1^{(-)} = E_1^{(0)} - W$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{c\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(+)} \\ c_2^{(+)} \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} c_1^{(+)} \\ c_2^{(+)} \end{pmatrix}, \qquad W = \frac{c\hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow \frac{c\hbar}{2m\omega} c_2^{(+)} = \frac{c\hbar}{2m\omega} c_1^{(+)} \Rightarrow c_1^{(+)} = c_2^{(+)}$$

Ομοίως για την αρνητική ιδιοτιμή έχουμε:

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{c\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(-)} \\ c_2^{(-)} \end{pmatrix} = -W \begin{pmatrix} c_1^{(-)} \\ c_2^{(-)} \end{pmatrix} \Rightarrow c_2^{(-)} = -c_1^{(-)}$$

Κανονικοποιώντας $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ παίρνουμε $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$.

3.3 Θεωρία διαταραχών εξαρτώμενη από το χρόνο

Η διαταραχή στο σύστημα γίνεται από ένα πεδίο που εξαρτάται από το χρόνο.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0 + V(t)$$

Υποθέτουμε ότι η εξωτερική διαταραχή $V(t)$ είναι περαστική στο χρόνο, δηλαδή έχει ένα πεπερασμένο χρονικά διάστημα εφαρμογής.
Πριν και μετά από τη διαταραχή το σύστημα θα περιγράφεται από την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή H_0, την οποία μπορούμε να λύσουμε ακριβώς με ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_k^{(0)}$, ιδιοτιμές $E_k^{(0)}$.
Υποθέτουμε για απλότητα ότι η διαταραχή αρχίζει να δρα για $t = 0$, οπότε το σύστημα ήταν στην κατάσταση $\Psi_n^{(0)} = \Psi(0)$ και ζητάμε την $\Psi(t)$ για $t > 0$, δηλαδή το πλάτος μετάβασης του συστήματος από την $|n\rangle \to |m\rangle$.
Έχουμε γενικά, εφόσον τα $\Psi_n^{(0)}$ φτιάχνουν ένα πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων, ότι:

$$\Psi(t) = \sum_m c_m(t)\Psi_m^{(0)}$$

Εάν δεν είχαμε τη διαταραχή θα βρίσκουμε $c_m(t) = \mathrm{e}^{-iE_m^{(0)}t/\hbar}\delta_{mn}$.
Με τη διαταραχή στη χαμιλτονιανή, τα $c_m(t)$ θα έχουν μια άλλη χρονική εξάρτηση, την οποία γράφουμε ως εξής:

$$\Psi(t) = \sum_m a_m(t)\mathrm{e}^{-iE_m^{(0)}t/\hbar}\Psi_m^{(0)}$$

και

$$\Big(H_0 + V(t)\Big)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

με αρχική συνθήκη: $a_n(0) = 1, a_k(0) = 0$ για $k \neq n$.
Πλάτος μετάβασης: $c_m(t) = \langle\Psi_m^{(0)}|\Psi(t)\rangle$
Πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση $|m\rangle$, αρχίζοντας από τη $|n\rangle$, σε χρόνο t:

$$P_{n\to m}(t) = \Big|\langle\Psi_m^{(0)}|\Psi(t)\rangle\Big|^2$$

3.3.1 Προσεγγιστικός υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης διαταρακτικά σε πρώτης τάξης προσέγγιση, διακριτό φάσμα

$$c_m(t) = \langle \Psi_m^{(0)}, \Psi(t) \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} = \langle \Psi_m^{(0)}, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_m^{(0)}, H\Psi \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} = \sum_k c_k(t) \langle \Psi_m^{(0)} | H \Psi_k^{(0)} \rangle$$

$$= \sum_k c_k(t) E_k^{(0)} \langle \Psi_m^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle + \sum_k c_k(t) \langle \Psi_m^{(0)} | V(t) \Psi_k^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_k V_{mk} c_k(t)}$$

$$c_k(t) = a_k(t) \mathrm{e}^{-iE_k^{(0)} t/\hbar}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m}{\mathrm{d}t} \mathrm{e}^{-iE_m^{(0)} t/\hbar} + (i\hbar) \left(-i \frac{E_m^{(0)}}{\hbar} \right) \cancelto{0}{c_m(t)} = E_m^{(0)} \cancelto{0}{c_m(t)} + \sum_k V_{mk} c_k(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_k V_{mk} a_k(t) \mathrm{e}^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar}}$$

Αναπτύσουμε διαταρακτικά:

$$a_m(t) = a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)}(t) + a_m^{(2)}(t) + \dots$$

Αρχικές συνθήκες:

$$a_n^{(0)}(t) = 1, \; a_k^{(0)}(t) = 0 \text{ για } k \neq n$$

και

$$a_m^{(1)}(t=0) = 0, \quad a_m^{(2)}(t=0) = 0 \quad \forall m$$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar \dfrac{\mathrm{d}a_m^{(0)}}{\mathrm{d}t} = 0 \Rightarrow a_m^{(0)} = \text{ σταθερά } = 0, \; m \neq n \\ \\ i\hbar \dfrac{\mathrm{d}a_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \displaystyle\sum_k V_{mk} \mathrm{e}^{iw_{mk}t} a_k^{(0)}, \quad w_{mk} = \dfrac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} \end{cases}$$

Από την εξίσωση για τους συντελεστές σε πρώτης τάξης διαταραχή έχουμε:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = V_{mn}(t) \mathrm{e}^{iw_{mn}t}$$

$$\Rightarrow \boxed{a_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') \mathrm{e}^{iw_{mn}t'} \mathrm{d}t'}$$

$$\boxed{V_{mn}(t) = \int \Psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, t) \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3x = \langle \Psi_m^{(0)} | V(t) | \Psi_n^{(0)} \rangle}$$

Πιθανότητα μετάβασης:

$$P_{nm} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{mn}(t') \mathrm{e}^{iw_{mn}t'} \mathrm{d}t' \right|^2$$

Παράδειγμα: Η διαταραχή διαρκεί χρονικό διάστημα T και είναι σταθερή για $0 < t' < T$.

$$\Rightarrow V_{mn}(t) = V_{mn} = \langle \Psi_m^{(0)} | V(\mathbf{r}) | \Psi_n^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow a_m^{(1)}(t) = \frac{V_{mn}}{\hbar w_{mn}} \left(1 - \mathrm{e}^{iw_{mn}t} \right)$$

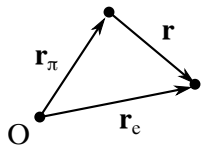
$$\Rightarrow P_{nm} = |a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{mn}|^2}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \sin^2 \left[\frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{2\hbar} t \right]$$

4

Δυναμικό Coulomb - Λύση της εξίσωσης του Schrödinger

4.1 Κλασσική μηχανική - το πρόβλημα των δύο σωμάτων

Θεωρούμε την αλληλεπίδραση ενός ηλεκτρονίου με μάζα m_e και φορτίο $q_e = -e$ με έναν πυρήνα με φορτίο $q_\pi = e$ και μάζα $m_\pi =$ μάζα πρωτονίου. Η ολική ενέργεια του συστήματος δίνεται από τη σχέση:



$$E = \frac{P_\pi^2}{2m_\pi} + \frac{P_e^2}{2m_e} + V(\mathbf{r})$$

όπου $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_\pi$

$$V(\mathbf{r}) = +\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_\pi q_e}{|\mathbf{r}|} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Αναλύω την κίνηση του συστήματος σε δύο μέρη:

1. Κίνηση του κέντρου μάζας:

$$\mathbf{R}_{\text{ΚΜ}} = \frac{m_e\mathbf{r}_e + m_\pi\mathbf{r}_\pi}{m_e + m_\pi}, \quad M = m_e + m_\pi$$

$$\mathbf{P}_{\text{ολ}} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_\pi = \mathbf{P}_{\text{ΚΜ}}$$

2. Σχετική κίνηση του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα:

$$\mathbf{P}_{\text{σχ}} = \frac{m_\pi m_e}{m_\pi + m_e}(\mathbf{V}_e - \mathbf{V}_\pi) = \mu\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{m_\pi\mathbf{P}_e - m_e\mathbf{P}_\pi}{m_\pi + m_e}$$

όπου $\mu = \dfrac{m_\pi m_e}{m_\pi + m_e}$ είναι η ανηγμένη μάζα. Ακόμη, η στροφορμή γύρω από το κέντρο μάζας είναι:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}'_\pi \times \mathbf{P}'_\pi + \mathbf{r}'_e \times \mathbf{P}'_e = \mu\mathbf{r} \times \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t}$$

Η ολική κινητική ενέργεια γίνεται:

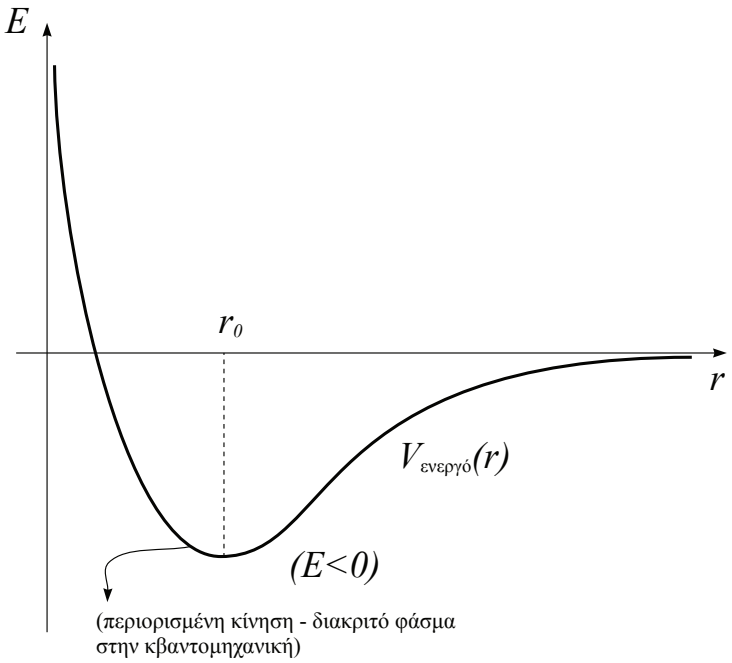
$$\frac{P_\pi^2}{2m_\pi} + \frac{P_e^2}{2m_e} = \frac{P_{\text{ΚΜ}}^2}{2M} + \frac{P_{\text{σχ}}^2}{2\mu}$$

$$\Rightarrow E_{\text{ολ}} = E_{\text{ΚΜ}} + \left\{\underbrace{\frac{P_{\text{σχ}}^2}{2\mu} + V(r)}_{E_{\text{σχ}}}\right\}$$

$$(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \to (\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_\pi)$$

$$\mathbf{r}_\pi = \frac{M}{M}\mathbf{R} - \frac{m_e}{M}\mathbf{r} = \mathbf{R} - \frac{m_e}{M}\mathbf{r}$$

$$\mathbf{r}_e = \frac{M}{M}\mathbf{R} + \frac{m_\pi}{M}\mathbf{r} = \mathbf{R} + \frac{m_\pi}{M}\mathbf{r}$$



Σχήμα 4.1

$$\boxed{\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_\pi \Rightarrow \mathbf{V} = \mathbf{V}_e - \mathbf{V}_\pi}$$

$$\mathbf{P}_\pi = m_\pi \dot{\mathbf{r}}_\pi = m_\pi \dot{\mathbf{R}} - \dot{\mathbf{r}} \frac{m_\pi m_e}{M}$$

$$\mathbf{P}_e = m_e \dot{\mathbf{r}}_e = m_e \dot{\mathbf{R}} + \dot{\mathbf{r}} \frac{m_\pi m_e}{M}$$

$$\mathbf{P}_\pi = \frac{m_\pi}{M} \mathbf{P}_{\text{ΚΜ}} - \mathbf{P}$$

$$\mathbf{P}_e = \frac{m_e}{M} \mathbf{P}_{\text{ΚΜ}} + \mathbf{P}$$

$$\frac{P_e^2}{m_e} + \frac{P_\pi^2}{m_\pi} - \frac{P_{\text{ΚΜ}}^2}{M} = \frac{P^2}{\mu}$$

με $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{\sigma\chi} = \mu \mathrm{d}\mathbf{r}/\mathrm{d}t$. Έχουμε λοιπόν δύο ανεξάρτητες κινήσεις, την κίνηση του κέντρου μάζας και την κίνηση ενός σώματος μάζας μ εντός πεδίου με $V(r)$. Για το δεύτερο σώμα έχουμε ότι η ταχύτητά του αναλύεται σε δύο συνιστώσες: (υπενθυμίζουμε ότι $\hat{r} \cdot \hat{\theta} = 0$)

$$\mathbf{V} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\hat{r} + r\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\hat{\theta} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\hat{r} + V_\theta \hat{\theta}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dfrac{P_{\sigma\chi}^2}{2\mu} & = \dfrac{1}{2\mu}(\mu^2 V_r^2 + \mu^2 V_\theta^2) = \dfrac{\mu}{2}\left(\dfrac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \dfrac{\mu}{2}V_\theta^2 \\ \mathbf{L} & = \mu r V_\theta \hat{z}, \qquad L^2 = \mu^2 r^2 V_\theta^2 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_{\sigma\chi} &= \frac{1}{2}\mu\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{\mu}{2}V_\theta^2 + V(r) \\ &= \frac{1}{2}\mu\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \\ &= \frac{1}{2}\mu\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + V_{\text{ενεργό}}(r) \end{aligned}$$

Επειδή η δύναμη είναι κεντρική, $\mathbf{F} = F(r)\hat{r}$, η στροφορμή διατηρείται. Άρα έχουμε τελικά ένα μονοδιάστατο πρόβλημα με δυναμική μεταβλητή το r.

4.2 Κβαντική μηχανική - το πρόβλημα των δύο σωμάτων

Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = \frac{P_\pi^2}{2m_\pi} + \frac{P_e^2}{2m_e} + V(r)$$

$$\mathbf{P}_\pi \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\pi, \qquad \mathbf{P}_e \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}_e$$

όπου εννοούμε παραγώγιση ως προς τις συντεταγμένες (x_π, y_π, z_π) και (x_e, y_e, z_e) αντίστοιχα. Ακόμη έχουμε, όπως δείξαμε προηγούμενα

$$H = \frac{P_{\text{ΚΜ}}^2}{2M} + \frac{P_{\sigma\chi}^2}{2\mu} + V(r)$$

$$\mathbf{P}_{\text{ΚΜ}} \to -i\hbar\nabla_R, \qquad \mathbf{P}_{\sigma\chi} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}_r$$

όπου εννοείται παραγώγιση ως προς τις συντεταγμένες (X, Y, Z) του κέντρου μάζας και τις (x, y, z) του $\mathbf{r}$ (σχετική κίνηση).

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_\pi, t) \to \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$$

$$M = m_e + m_\pi, \quad \mu = \frac{m_e m_\pi}{m_e + m_\pi}$$

$$M_\pi \simeq 1836 m_e \Rightarrow \mu \simeq 0,995 m_e$$

οπότε η εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Γράφουμε

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = U(\mathbf{R}, \mathbf{r})\mathrm{e}^{-iE't/\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]U(\mathbf{R}, r) = E'U(\mathbf{R}, \mathbf{r})}$$

και βρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές της ενέργειας του συστήματος E'.

Μπορούμε να περάσουμε κατευθείαν

$$\left(\frac{1}{M_\pi}\nabla_\pi^2 + \frac{1}{M_e}\nabla_e^2\right) \to \left(\frac{1}{M}\nabla_R^2 + \frac{1}{\mu}\nabla_r^2\right)$$

με αλλαγή μεταβλητής και μετασχηματισμό στις παραγωγίσεις.

4.3 Χωρισμός μεταβλητών

Από τη μορφή της χαμιλτονιανής, όπου ο κινητικός όρος είναι χωρισμένος σε δύο όρους, μπορούμε να γράψουμε τη λύση στη μορφή:

$$U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = u_{\text{ΚΜ}}(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 u_{\text{ΚΜ}}\right)\Psi + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi\right]u_{\text{ΚΜ}} = E' u_{\text{ΚΜ}}\Psi$$

Διαιρώντας με το γινόμενο $u_{\text{ΚΜ}}(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r})$ έχουμε δύο ανεξάρτητους όρους από αριστερά

$$\frac{1}{u_{\text{ΚΜ}}}\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 u_{\text{ΚΜ}}\right) + \frac{1}{\Psi}\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + V\Psi\right\} = E'$$

για να έχουμε ισότητα για κάθε $\mathbf{R}, \mathbf{r}$, πρέπει οι δύο αυτοί όροι να είναι ίσοι με σταθερές

$$\Rightarrow \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 u_{\text{ΚΜ}}(R) = E_R u_{\text{ΚΜ}}(R) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \\ E_R + E = E' \end{cases}$$

Η πρώτη εξίσωση περιγράφει την κίνηση ενός ελεύθερου σώματος M με ενέργεια E_R, κίνηση του κέντρου μάζας:

$$\Rightarrow u_{\text{KM}} = A\mathrm{e}^{\pm i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{R}}, \quad k_0^2 = \frac{2M}{\hbar^2}E_R$$

$$\text{συνεχές φάσμα} \qquad \mathbf{P}_{\text{KM}} = \hbar\mathbf{k}_0$$

Θα ασχοληθούμε περαιτέρω μόνο με τη δεύτερη εξίσωση, η οποία περιγράφει τη μη τετριμμένη, σχετική κίνηση των δύο σωμάτων, σαν να ήταν το ένα (ο πυρήνας) ακίνητο.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + V(|\mathbf{r}|)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

Επειδή η δυναμική ενέργεια έχει σφαιρική συμμετρία, θα χρησιμοποιήσουμε σφαιρικές συντεταγμένες (r,θ,ϕ) για τη λύση. Αναπτύσσουμε πρώτα τη λαπλασιανή σε (r,θ,ϕ):

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}$$

Η εξίσωση του Schrödinger γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \sin^2\theta\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right]$$

$$+V(r)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(r,\theta,\phi)$$

Μια τυπική μέθοδος λύσης μιας διαφορικής εξίσωσης με μερικές παραγώγους είναι η μέθοδος του χωρισμού των μεταβλητών όταν αυτό είναι δυνατόν. Στην προκειμένη περίπτωση μπορούμε να αναζητήσουμε μια λύση τέτοιας μορφής γράφοντας:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$$

Οι συναρτήσεις $Y(\theta,\phi)$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές. Ορίζουμε τους τελεστές $\hat{A},\hat{B},\hat{\Lambda}$:

$$\hat{A}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)$$

$$\hat{B}(r) = \frac{1}{2\mu r^2}$$

$$\hat{\Lambda}(\theta,\phi) = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{A}(r) + \hat{B}(r)\hat{\Lambda}(\theta,\phi)$$

$$\Rightarrow \hat{H}\Psi = (\hat{A}R)Y + \hat{B}(\hat{\Lambda}Y)R = ERY$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{A}R}{R} + \frac{\hat{B}R}{R}\frac{\hat{\Lambda}Y}{Y} = E$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{\Lambda}Y(\theta,\phi)}{Y} = \frac{R}{\hat{B}R}\left(E - \frac{\hat{A}R}{R}\right)(r)$$

δηλαδή μια συνάρτηση του (θ,ϕ) είναι ίση με μια συνάρτηση του (r)

$$\Rightarrow \frac{\hat{\Lambda}Y}{Y} = \lambda \Rightarrow \hat{\Lambda}Y = \lambda Y(\theta,\phi)$$

όπου λ σταθερός αριθμός, πραγματικός

$$\text{και} \quad \frac{R}{\hat{B}R}\left(E - \frac{\hat{A}R}{R}\right) = \lambda \Rightarrow ER - \hat{A}R = \lambda\hat{B}R$$

$$\Rightarrow \hat{A}R + \lambda\hat{B}R = ER$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \left[\frac{\lambda}{2\mu r^2} + V(r)\right]R = ER \quad \text{(ακτινική εξίσωση)}$$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] = \lambda\hat{Y} \quad \text{(γωνιακή εξίσωση)}$$

Έχουμε ξανά τη δυνατότητα του χωρισμού των μεταβλητών, $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$.
Στην ακτινική εξίσωση βλέπουμε την εμφάνιση ενός ακόμη όρου δυναμικής ενέργειας που αντιστοιχεί κλασσικά στο *φυγοκεντρικό δυναμικό*. Άρα η σταθερά διαχωρισμού λ αντιπροσωπεύει το τετράγωνο της στροφορμής κλασικά,

$$\lambda = \hbar^2\tilde{\lambda} = \hbar^2 l(l+1)$$

όπως θα δείξουμε παρακάτω.

4.4 Σφαιρικές αρμονικές

Λύνουμε τη γωνιακή εξίσωση με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών.

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi), \qquad \lambda = \hbar^2\tilde{\lambda}$$

Αντικαθιστώντας έχουμε, αφού διαιρέσουμε με Y:

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \tilde{\lambda}\sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} = -m^2\Phi \Rightarrow \begin{cases}\Phi = \mathrm{e}^{\pm im\phi}, & m \neq 0\\ \Phi = c + D\phi, & m = 0\end{cases}$$

Η εξίσωση $\Phi(\phi)$ πρέπει να είναι μονότιμη ως προς ϕ, αλλιώς θα είχαμε δύο (πολλές) τιμές για την κυματοσυνάρτηση στο ίδιο σημείο του χώρου $(r,\theta,\phi) \equiv (r,\theta,\phi+2\pi)$

$$\Rightarrow m = \text{ ακέραιος και } D \equiv 0$$

$$\Rightarrow \Phi(\phi) = \mathrm{e}^{im\phi} \quad \text{για } m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

Η εξίσωση για τη γωνία θ γράφεται:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left(\tilde{\lambda} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

Κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής

$$\xi = \cos\theta \Rightarrow \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}\theta} = -\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi} \Rightarrow \frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta = 1 - \xi^2$$

Η γωνιακή εξίσωση γράφεται:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\xi}\right] + \left(\tilde{\lambda} - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0$$

$$\Theta = \Theta(\theta) = \Theta(\xi)$$

Λύνουμε την τελευταία εξίσωση για $m = 0$:

$$(1-\xi^2)\frac{\mathrm{d}^2\Theta}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\xi} + \tilde{\lambda}\Theta = 0$$

Υποθέτουμε ότι η λύση είναι μια σειρά ως προς ξ.

$$\Theta(\xi) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \xi^k$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} \left\{ k(k-1)a_k\xi^{k-2} - \underbrace{k(k-1)a_k\xi^k - 2ka_k\xi^k} + \tilde{\lambda} a_k \xi^k \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{\sigma=0}^{+\infty} \left\{ (\sigma+2)(\sigma+1)a_{\sigma+2} - \sigma(\sigma+1)a_\sigma + \tilde{\lambda} a_\sigma \right\} \xi^\sigma = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{a_{\sigma+2} = \frac{\sigma(\sigma+1) - \tilde{\lambda}}{(\sigma+2)(\sigma+1)} a_\sigma}$$

Προσοχή: Στο άθροισμα $\sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2}$, για $k=0$ και $k=1$ έχουμε μηδέν

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2} = \sum_{k=2}^{+\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2} = \sum_{\sigma=0}^{\infty} (\sigma+2)(\sigma+1)a_{\sigma+2}\xi^\sigma, \qquad \text{θέτοντας } k = \sigma+2$$

Δύο ανεξάρτητες σειρές λύσεων:

1. $a_0 \neq 0$, $a_1 = 0$
$$\Rightarrow \text{ άρτιες δυνάμεις του } \xi: \ \xi^0, \xi^2, \xi^4, \xi^6, \ldots$$
2. $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$
$$\Rightarrow \text{ περιττές δυνάμεις του } \xi: \ \xi^1, \xi^3, \xi^5, \xi^7, \ldots$$

Οι σειρές αποκλίνουν στο όριο $\xi = \pm 1$ εάν έχουν άπειρους όρους. Άρα τέτοιες λύσεις είναι μη αποδεκτές. Παραδεκτές λύσεις είναι τα πολυώνυμα.
Για να έχουμε πολυωνυμική λύση, το $\tilde{\lambda}$ παίρνει μόνο ακέραιες τιμές:

$$\tilde{\lambda} = l(l+1), \qquad l = \text{ θετικός ακέραιος ή μηδέν}$$

για να τερματίζεται η σειρά. Άρα η στροφορμή εμφανίζεται κβαντισμένη.
Για άρτιο l παίρνουμε την άρτια λύση με $a_1 = 0$, $a_0 \neq 0$, ενώ για περιττό l παίρνουμε την περιττή λύση με $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$.
Οι λύσεις για συγκεκριμένο l είναι τα πολυώνυμα του Legendre $P_l(\xi) = P_l(\cos\theta)$.

$$l = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} a_2 = 0 \\ a_4 = 0, \ldots \end{pmatrix} \Rightarrow P_0 = a_0$$

$$l = 1 \Rightarrow \begin{pmatrix} a_3 = 0 \\ a_5 = 0, \ldots \end{pmatrix} \Rightarrow P_1 = a_1\xi$$

$$l = 2 \Rightarrow a_2 = -\frac{6}{2}a_0 = -3a_0 \Rightarrow P_2 = a_0 - 3a_0\xi^2, \quad \text{και} \quad a_4,\ a_6, \ldots \text{ μηδέν.}$$

$$\vdots$$

Κανονικοποιούμε ορίζοντας τα a_0, a_1 ανάλογα:

$$\Rightarrow P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\xi^l} \left[(1-\xi^2)^l \right], \quad \text{τύπος του Rodrigues}$$

(πολυώνυμο βαθμού l, άρτιο για $l =$ άρτιο, περιττό για $l =$ περιττό)

Λύση για $m \neq 0$:

Η γωνιακή εξίσωση ικανοποιείται από τη συνάρτηση:

$$\Theta_{\mathrm{lm}}(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2} \frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}\xi^{|m|}} P_l(\xi)$$

$$P_l(\xi) = \text{ πολυώνυμο βαθμού } l \Rightarrow |m| \leq l \quad \textbf{Προσοχή !!}$$
$$\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$$

Ορθογωνιότητα:

$$\int_{-1}^{1} P_l(\xi) P_{l'}(\xi) \mathrm{d}\xi = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$
$$\mathrm{d}\xi = -\sin\theta \mathrm{d}\theta$$
$$\Rightarrow \int_0^{\pi} \sin\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Τα πολυώνυμα του Legendre φτιάχνουν ένα πλήρες σύστημα συναρτήσεων στο διάστημα $(-1, 1)$.

$$\Rightarrow f(x) = \sum_l a_l P_l(x), \; a_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{1} f(x) P_l(x) \mathrm{d}x$$

Αναγωγική σχέση:

$$\frac{\mathrm{d}P_{l+1}}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}P_{l-1}}{\mathrm{d}x} = (2l+1) P_l$$

$$\begin{aligned}
P_0(\xi) &= 1 \\
P_1(\xi) &= \xi \\
P_2(\xi) &= \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1) \\
P_3(\xi) &= \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Οι λύσεις για (θ, ϕ) και συγκεκριμένα l, m λέγονται *σφαιρικές αρμονικές*:

$$Y_{\mathrm{lm}}(\theta, \phi) = A_{\mathrm{lm}} \mathrm{e}^{im\phi} (1 - \cos^2\theta)^{|m|/2} \frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}\cos\theta^{l+|m|}} (1 - \cos^2\theta)^l$$

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

- $m = |m| > 0$, $A_{lm} = \dfrac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\dfrac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}$
- $m = -|m| < 0$, $A_{lm} = \dfrac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\dfrac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}$ και $l \geq |m| \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$

Ορθογώνιο, πλήρες σύστημα συναρτήσεων για $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$

$$\Rightarrow g(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{l} B_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$B_{lm} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{lm}^*(\theta, \phi) g(\theta, \phi) \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi$$

$$Y_{l,-|m|} = (-1)^m Y_{l,|m|}^*$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\pm i\phi}\sin\theta$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\mathrm{e}^{\pm i\phi}\cos\theta\sin\theta$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\mathrm{e}^{\pm 2i\phi}\sin^2\theta$$

$$\vdots$$

όπου l είναι ο κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής και m ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός.

4.5 Λύση της ακτινικής εξίσωσης – Ενεργειακές ιδιοτιμές

Έχουμε $\lambda = l(l+1)\hbar^2$ από τη λύση της γωνιακής εξίσωσης. Ορίζουμε στην ακτινική εξίσωση την αδιάστατη μεταβλητή $\rho = \beta r$, πολλαπλασιάζουμε με $-2\mu/\hbar^2$ και διαιρούμε με το β^2:

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{E}{\beta^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\beta\rho}\right)R - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R = 0$$

Θέτουμε: $\beta^2 = -8\mu E/\hbar^2 > 0$ για $E < 0$

$$\Rightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{E}{\beta^2} = -\frac{1}{4}$$

Ορίζουμε την αδιάστατη μεταβλητή:

$$n = \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\beta} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{-\mu}{2E}}$$

και λύνουμε ως προς την ενέργεια E:

$$E = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Η ακτινική εξίσωση γράφεται:

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \left\{\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}R = 0$$

Λύση με ανάπτυξη σε σειρά αφού υπολογίσουμε πρώτα τον ασυμπτωτικό όρο για $\rho \to +\infty$, με R πεπερασμένο παντού. Για $\rho \to \infty$ η ακτινική εξίσωση δίνει:

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{R}{4} = 0 \Rightarrow R(\rho) = A\mathrm{e}^{\rho/2} + B\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

Για $\rho \to \infty$ η κυματοσυνάρτηση πρέπει να τείνει στο μηδέν.

$$\Rightarrow A = 0$$

Η λύση της ακτινικής εξίσωσης θα έχει τη μορφή:

$$\boxed{R(\rho) = \mathrm{e}^{-\rho/2}F(\rho)}$$

με $F(\rho)$ πολυώνυμο του ρ, διότι η $R(\rho) \to 0$ για $\rho \to \infty$. Έστω ότι

$$F(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \rho^k, \quad a_0 \neq 0$$

Αντικαθιστούμε την $R(\rho)$ στην ακτινική εξίσωση και βρίσκουμε την εξίσωση που ικανοποιεί η $F(\rho)$:

$$\frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\rho} + \left[\frac{n-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] F(\rho) = 0$$

Αντικαθιστούμε την παράσταση της F με σειρά, βρίσκουμε τα a_k.

Το $F(\rho)$ είναι πεπερασμένο για $\rho \to 0$.

$$F(\rho) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \rho^{k+s}$$

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\rho} = \sum_k (s+k) a_k \rho^{k+s-1}, \quad \frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\rho^2} = \sum_k (s+k)(s+k-1) \rho^{k+s-2}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\rho^2} = \sum_k \left\{ s(s-1) + 2sk + k(k-1) \right\} a_k \rho^{k+s-2}$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση της F έχουμε:

$$\sum_k \left\{ \underbrace{s(s-1) + 2sk + k(k-1)}_{(s+k)(s+k-1)} \right\} a_k \rho^{k+s-2} + 2 \sum_k (s+k) a_k \rho^{k+s-2} -$$
$$- \sum_k (s+k) a_k \rho^{k+s-1} + (n-1) \sum_k a_k \rho^{k+s-1} - l(l+1) \sum_k a_k \rho^{k+s-2} = 0$$

Ταυτότητες που προκύπτουν για τους ομοβάθμιους όρους του ρ

Για $k = 0$:

$$\rho^{s-2} \Big\{ s(s-1) + 2s - l(l+1) \Big\} a_0 = 0$$

$$\Rightarrow s(s+1) = l(l+1) \Rightarrow \begin{cases} s = l \\ s = -(l+1) \end{cases}$$

Η λύση με $s = -(l+1)$ δίνει $F(\rho) \simeq 1/\rho^{l+1}$, η οποία απειρίζεται πολύ άσχημα για $\rho \to 0$.
Για $l = 0$ π.χ.:

$$F(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \Rightarrow \nabla^2 F \simeq \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho}\right) = -\delta(\rho) 4\pi$$

η οποία αποκλείεται. Δεν υπάρχει δέλτα όρος δυναμικού στη χαμιλτονιανή. Επομένως δεκτή είναι μόνο η λύση με $s = l$.

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{+\infty} \left\{ \overbrace{s(s-1) + 2sk + k(k-1) + 2s + 2k}^{(s+k)(s+k+1)} - l(l+1) \right\} a_k \rho^{k+s-2}$$
$$+ \sum_{k=0}^{+\infty} \{n - s - k - 1\} a_k \rho^{k+s-1} = 0$$

Κάνουμε την αλλαγή στον πρώτο όρο $k = \nu + 1$ και έτσι έχουμε άθροιση τώρα ως προς ν από το $0 \to \infty$.

$$\Rightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} \{(s+\nu+1)(s+\nu+2) - l(l+1)\} a_{\nu+1} \rho^{\nu+s-1}$$
$$+ \sum_{k=0}^{+\infty} \{n - s - k - 1\} a_k \rho^{k+s-1} = 0$$

$$\sum_{k=0}^{+\infty}\left\{\Big[(s+k+1)(s+k+2)-l(l+1)\Big]a_{k+1}+\Big[n-s-k-1\Big]a_k\right\}\rho^{k+s-1}=0$$

$$a_{k+1}=-\frac{n-s-k-1}{(s+k+1)(s+k+2)-l(l+1)}a_k$$

όπου $s=l$.
Η άπειρη σειρά σταματάει και γίνεται πολυώνυμο, εάν το n είναι ακέραιος και

$$n-l-k-1=0 \qquad (\text{διότι } s=l)$$

$$\Rightarrow n=(l+1)+k$$

Για δοσμένο n το l παίρνει μέγιστη τιμή την $n-1$, τότε $k=0$. Άρα για n,l γνωστά, έχουμε

$$n-(l+1)\geq k$$

Όταν το k πάρει τη μέγιστη δυνατή τιμή, $k_{\max}=n-(l+1)$, τότε $n-(l+1)-k_{\max}=0$ και το $a_{k_{\max}+1}=0$, όπως και όλα τα $a_{k_{\max}+2},a_{k_{\max}+3},\ldots$ είναι μηδέν, άρα το πολυώνυμο είναι το πολύ βαθμού $n-(l+1)$.

$$\Rightarrow R_{nl}(\rho)=\left[\rho^l\sum_{k=0}^{k_{\max}}a_k\rho^k\right]\mathrm{e}^{-\rho/2},\quad k_{\max}=n-(l+1)$$

Για δοσμένο n, δηλαδή ενέργεια $\simeq -1/n^2$ έχουμε δυνατές τιμές για τον κβαντικό αριθμό της στροφορμής $l=0,1,2,\ldots,n-1$.
Οι λύσεις της αρχικής εξίσωσης του Schrödinger με την ίδια ενέργεια (δηλαδή ίδιο n) είναι:

$$\Psi_{nlm}(\theta,\phi,r)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου με ένα ηλεκτρόνιο:

$$\boxed{E_n=-\frac{13,6}{n^2}\,\mathrm{eV}}$$

όπου 1 eV είναι $1,6\times10^{-19}$ joule. Η σταθερά β γίνεται:

$$\boxed{\beta=\frac{\mu e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n}}$$

Η ενέργεια καθορίζεται μόνο από τον ακέραιο αριθμό n. Για κάθε l το m παίρνει τις τιμές $m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$, σύνολο $(2l+1)$ τον αριθμό.
Άρα, για την ίδια ενέργεια (δοσμένο n) έχουμε έναν εκφυλισμό που δίνεται από τα (l,m). Ο αριθμός των εκφυλισμένων ιδιοσυναρτήσεων είναι

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$

Η κανονικοποίηση είναι:

$$\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^\pi(R_{nl})^2Y^*_{lm}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2\mathrm{d}r=1$$

Η πιθανότητα να απέχει το ηλεκτρόνιο από τον πυρήνα απόσταση μεταξύ r και $r+\mathrm{d}r$ είναι:

$$\Big[R_{nl}(r)\Big]^2r^2\mathrm{d}r$$

Η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στον όγκο $\mathrm{d}V$ είναι:

$$\Psi^*_{nlm}\Psi_{nlm}\mathrm{d}V$$

Υπάρχουν στο χώρο επιφάνειες με $\Psi^*_{nlm}\Psi_{nlm}=0$, άρα το ηλεκτρόνιο δε μπορεί να βρεθεί πειραματικά ποτέ σε μία τέτοια επιφάνεια.

Έχουμε ορίσει $\rho = \beta r$

$$\beta = \frac{\mu e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n}, \qquad \mu = \frac{m_e m_\pi}{m_\pi + m_e}$$

$$\Rightarrow \beta = \frac{1}{n}\frac{1}{1+\dfrac{m_e}{m_\pi}}\frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} = \frac{1}{n}\frac{2}{1+\dfrac{m_e}{m_\pi}}\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$$

Ορίζουμε την ποσότητα

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,292\times 10^{-11}\,\mathrm{m}$$

η οποία λέγεται ακτίνα της πρώτης τροχιάς του Bohr.

$$\Rightarrow \beta = \frac{1}{n}\frac{2}{\left(1+\dfrac{m_e}{m_\pi}\right)a_0} = \frac{2}{n}\frac{1}{a_0'}$$

όπου $a_0' = \left(1+\dfrac{m_e}{m_\pi}\right)a_0$, $1+\dfrac{m_e}{m_\pi} = 1,00054$.

$$\Rightarrow \boxed{\rho = \frac{2}{n}\frac{r}{a_0'}}$$

Ακτινικές κυματοσυναρτήσεις[1]

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

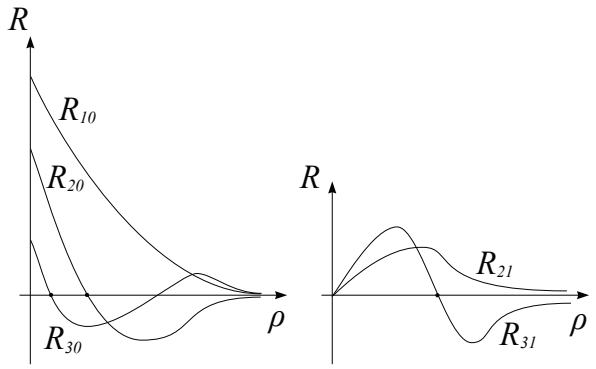
$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}(2-\rho)\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}\rho\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

$$R_{30}(r) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}(6-6\rho+\rho^2)\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

$$R_{31}(r) = \frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}\rho(4-\rho)\mathrm{e}^{-\rho/2}$$

$$R_{32}(r) = \frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2}\rho^2\mathrm{e}^{-\rho/2}$$



[1] ολοκλήρωμα χρήσιμο για την κανονικοποίηση: $\displaystyle\int_0^{+\infty} r^k \mathrm{e}^{-r/\lambda}\mathrm{d}r = k!\lambda^{k+1}$

5

Τροχιακή Στροφορμή - spin - Πρόσθεση στροφορμών

5.1 Οι συνιστώσες του Τελεστή της Τροχιακής Στροφορμής σε Σφαιρικές Συντεταγμένες

Η τροχιακή στροφορμή για ένα σωματίδιο δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

όπου $\mathbf{p}$ η ορμή του σωματιδίου, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$

$$\Rightarrow \mathbf{L} = (-i\hbar)\mathbf{r} \times \nabla = (-i\hbar) \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \end{vmatrix}$$

σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Οι συνιστώσες της στροφορμής είναι:

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y = (-i\hbar)[y\partial_z - z\partial_y] \\ L_y = zp_x - xp_z = (-i\hbar)[z\partial_x - x\partial_z] \\ L_z = xp_y - yp_x = (-i\hbar)[x\partial_y - y\partial_x] \end{cases}$$

χρησιμοποιώντας τους μεταθέτες των $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ βρίσκουμε τους μεταθέτες των L_x, L_y, L_z.

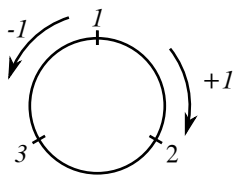
$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

Συνοπτικά παίρνοντας το διάνυσμα $\mathbf{L}$ της στροφορμής και τον αντισυμμετρικό τανυστή ε_{jkl} έχουμε:

$$[L_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}L_l$$

$$j, k, l = 1, 2, 3 \qquad \text{και} \qquad \varepsilon_{123} = 1$$

Με μονάδα ισούνται όλες οι δεξιόστροφες μεταθέσεις των 1,2,3.
Με (-1) ισούνται οι αριστερόστροφες μεταθέσεις.



$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$$

$$\varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1$$

$$\varepsilon_{kk\ell} = 0 \quad \forall k, \ell = 1, 2, 3$$

Ο τελεστής της *Ολικής Στροφορμής* ορίζεται μέσω του τετραγώνου του διανύσματος της στροφορμής

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον διότι μετατίθεται με το L_x, L_y, L_z και με τη Χαμιλτονιανή εάν $V(\mathbf{r}) = V(r)$, και εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή του ατόμου του Υδρογόνου.

$$\begin{cases} [L^2, L_x] = 0 \\ [L^2, L_y] = 0 \\ [L^2, L_z] = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + [L_z, L_x]L_z + L_z[L_z, L_x] \\ &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z + i\hbar L_z L_y = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [L_k, H] = i\hbar(\mathbf{r} \times \mathbf{F})_k$$

εάν

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \Rightarrow \mathbf{F} = F(r)\hat{r} \Rightarrow \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$$

και η στροφορμή διατηρείται, διότι ο μεταθέτης με τη Χαμιλτονιανή μηδενίζεται. Ακόμη έχουμε:

$$\Rightarrow [L_k, r_j] = i\hbar\varepsilon_{kjl} r_l \qquad (r_1 = x, r_2 = y, r_3 = z)$$

και

$$[L_k, p_j] = i\hbar\epsilon_{jkl} p_l$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} [L_x, y] &= [yp_z - zp_y, y] = [yp_z, y] - [zp_y, y] \\ &= 0 - z[p_y, y] = -z(-i\hbar) = i\hbar z \end{aligned}$$

□

Για τη στροφορμή μπορούμε να γράψουμε γενικά:

$$L_k = \epsilon_{kjl} r_j p_l$$

Εάν

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \Rightarrow \text{ σφαιρική συμμετρία στο πρόβλημα}$$

Εκφράζουμε τη στροφορμή σε σφαιρικές συντεταγμένες.

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \hat{r} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta \\ \hat{\theta} = \hat{x}\cos\theta\cos\phi + \hat{y}\cos\theta\sin\phi - \hat{z}\sin\theta \\ \hat{\phi} = -\hat{x}\sin\phi + \hat{y}\cos\phi \end{cases}$$

Παρατήρηση: τα $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα στους τρεις άξονες x, y, z.
Επίσης ισχύουν

$$\begin{cases} \hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\phi} \\ \hat{r} \times \hat{\phi} = -\hat{\theta} \end{cases}$$

$$\boldsymbol{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\Rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (-i\hbar)\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla} = (-i\hbar)\left[\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

Συγχρόνως ισχύει

$$\mathbf{L} = \hat{x}L_x + \hat{y}L_y + \hat{z}L_z$$

άρα εκφράζουμε τα $\hat{\phi}, \hat{\theta}$ ως προς $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ και βρίσκουμε τις καρτεσιανές συνιστώσες της στροφορμής συναρτήσει των θ, ϕ:

$$\Rightarrow \begin{cases} L_z = (-i\hbar)\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ L_y = (-i\hbar)\left[\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ L_x = (-i\hbar)\left[-\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \end{cases}$$

Υπολογίζουμε τώρα το L^2

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$L_z^2 = (-i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

Υπολογίζω το L_x^2:

$$\begin{aligned} L_x^2\Psi &= L_x(L_x\Psi) \\ &= (-i\hbar)^2\left\{\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}\cdot\left\{\sin\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right\} \\ &= (-\hbar^2)\left\{\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\cancelto{0}{\frac{\cos\theta}{\sin\theta}}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right. \\ &+ \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \cancelto{0}{\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\sin\phi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi\partial\theta} \\ &+ \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cancelto{0}{\cos\phi(-\sin\phi)}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \end{aligned}$$

και το L_y^2:

$$\begin{aligned} L_y^2\Psi &= (-i\hbar)^2\left\{\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}\cdot\left\{\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right\} \\ &= (-\hbar^2)\left\{\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} - \cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\cancelto{0}{\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right. \\ &\left. - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\cos\phi\cancelto{0}{\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi\partial\theta}} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cancelto{0}{\sin\phi\cos\phi}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\} \end{aligned}$$

Προσθέτοντας έχουμε:

$$
\begin{aligned}
(L_x^2+L_y^2+L_z^2)\Psi = (-\hbar^2)\Bigg\{&\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}+\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\\
&+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\\
&+\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\Bigg\}\\
=(-\hbar^2)&\left\{\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\}\\
=(-\hbar^2)&\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\}
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \boxed{L^2\Psi=(-\hbar^2)\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right]}
$$

και όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, ο διαφορικός τελεστής δεξιά έχει ιδιοσυναρτήσεις τις σφαιρικές αρμονικές $Y_{lm}(\theta,\phi)$ με ιδιοτιμή $\hbar^2 l(l+1)$.

$$
L^2Y_{lm}=\hbar^2 l(l+1)Y_{lm}
$$

και

$$
L_zY_{lm}=m\hbar Y_{lm}
$$

με $m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$.

Υπενθύμιση: $Y_{lm}(\theta,\phi)=A_{lm}\mathrm{e}^{im\phi}(1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\dfrac{\mathrm{d}^{l+|m|}(1-\cos^2\theta)^l}{\mathrm{d}\cos\theta^{l+|m|}}$

5.2 Αλγεβρικός υπολογισμός των ιδιοτιμών του τελεστή της στροφορμής

Θα ονομάσουμε τους ερμιτιανούς τελεστές J_x, J_y, J_z *τελεστές της στροφορμής*, εάν ικανοποιούν τις εξής σχέσεις μετάθεσης:

$$
\begin{cases}
[J_x,J_y]=i\hbar J_z\\
[J_y,J_z]=i\hbar J_x\\
[J_z,J_x]=i\hbar J_y
\end{cases}
$$

Ορίζουμε την ολική στροφορμή J^2 ως εξής:

$$
J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2
$$

και αποδεικνύεται ότι $[J^2,\mathbf{J}]=0$, όπου

$$
\mathbf{J}=\hat{x}J_x+\hat{y}J_y+\hat{z}J_z
$$

Εάν ορίσουμε τους τελεστές

$$
\begin{cases}
J_+=J_x+iJ_y\\
J_-=J_x-iJ_y=J_+^\dagger
\end{cases}
$$

αυτοί ικανοποιούν τις εξής μεταθετικές σχέσεις:

$$
\begin{aligned}
[J_z,J_+]=[J_z,J_x+iJ_y]&=[J_z,J_x]+i[J_z,J_y]\\
&=i\hbar J_y+i(-i\hbar)J_x=\hbar(J_x+iJ_y)=\hbar J_+
\end{aligned}
$$

Αντίστοιχα

$$
[J_z,J_-]=-\hbar J_-
$$

Απόδειξη.

$$([J_z, J_+])^\dagger = (\hbar J_+)^\dagger = \hbar J_+^\dagger = \hbar J_-$$

$$([J_z, J_+])^\dagger = (J_z J_+)^\dagger - (J_+ J_z)^\dagger = J_- J_z - J_z J_- = -[J_z, J_-]$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_z J_+ = J_+ J_z + \hbar J_+ = J_+(J_z + \hbar) \\ J_z J_- = J_- J_z - \hbar J_- = J_-(J_z - \hbar) \end{cases}$$

και

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_x] + i[J^2, J_y] = 0 + 0 = 0$$

ομοίως

$$[J^2, J_-] = 0$$

Ακόμη

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] \\ &= (-i)(i\hbar)J_z + i(-i\hbar)J_z = 2\hbar J_z \end{aligned}$$

□

Θέλουμε να βρούμε τις συναρτήσεις Ψ που είναι ιδιοσυναρτήσεις του J^2 και ενός εκ των J_k, έστω του J_z.

$$\Rightarrow \begin{cases} J^2\Psi = a\Psi \\ J_z\Psi = b\Psi \end{cases}$$

Ορίζουμε $\Psi_+ = J_+\Psi$, $\Psi_- = J_-\Psi$. Έχουμε

$$\begin{cases} J_z\Psi_+ = J_z J_+\Psi = J_+(J_z + \hbar)\Psi = (b + \hbar)\Psi_+ \\ J_z\Psi_- = J_z J_-\Psi = J_-(J_z - \hbar)\Psi = (b - \hbar)\Psi_- \end{cases}$$

Ο J_+ ονομάζεται *αυξητικός τελεστής* (raising operator), ανεβάζει την ιδιοτιμή του J_z κατά 1.
Ο J_- ονομάζεται *μειωτικός τελεστής* (lowering operator), κατεβάζει την ιδιοτιμή του J_z κατά 1.
Ακόμη,

$$\begin{cases} J^2\Psi_+ = J^2 J_+\Psi = J_+ J^2\Psi = aJ_+\Psi = a\Psi_+ \\ J^2\Psi_- = J^2 J_-\Psi = J_- J^2\Psi = a\Psi_- \end{cases}$$

Ιδιοσυναρτήσεις του J^2.

Θα δείξουμε ότι $a \geq b^2$:

$$\langle J^2 \rangle = \langle \Psi | J^2 | \Psi \rangle = a\langle \Psi | \Psi \rangle = a$$

και

$$\begin{aligned} \langle J^2 \rangle &= \langle \Psi | J^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | J_x^2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | J_y^2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | J_z^2 | \Psi \rangle \\ &\geq \langle \Psi | J_z^2 | \Psi \rangle = b^2 \end{aligned}$$

διότι

$$\langle J_x^2 \rangle = \int \Psi^* J_x^2 \Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_x\Psi)^*(J_x\Psi) \geq 0$$

$$\langle J_y^2 \rangle = \int \Psi^* J_y^2 \Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_y\Psi)^*(J_y\Psi) \geq 0$$

Οι τελεστές J_x, J_y, J_z είναι ερμιτιανοί.

$$\begin{aligned} \langle J_z^2 \rangle &= \int \Psi^* J_z^2 \Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_z\Psi)^*(J_z\Psi)\mathrm{d}^3x \\ &= b^* b \int \Psi^*\Psi \mathrm{d}^3x = b^* b = b^2 \end{aligned}$$

και $b^* = b \in \mathbb{R}$, ερμιτιανότητα του τελεστή.

Παρατηρήσεις

1.
$$J_z(J_+^2\Psi) = (b+2\hbar)(J_+^2\Psi)$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} J_z(J_+^2\Psi) &= J_zJ_+(J_+\Psi) = J_+(J_z+\hbar)\Psi_+ \\ &= J_+J_z\Psi_+ + \hbar J_+\Psi_+ = J_+(b+\hbar)\Psi_+ + \hbar J_+\Psi \\ &= (b+2\hbar)J_+\Psi_+ = (b+2\hbar)J_+^2\Psi \end{aligned}$$ □

2. Γενικά έχουμε
$$J_z(J_+^n\Psi) = (b+n\hbar)(J_+^n\Psi)$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} J_zJ_+^n\Psi &= J_zJ_+(J_+^{n-1}\Psi) \\ &= J_+(J_z+\hbar)J_+^{n-1}\Psi = J_+^2(J_z+\hbar+\hbar)J_+^{n-2}\Psi \\ &= J_+^3(J_z+\hbar+\hbar+\hbar)J_+^{n-3}\Psi = \dots \\ &= J_+^n(J_z+n\hbar)\Psi = J_+^n(b+n\hbar)\Psi \\ &= (b+n\hbar)J_+^n\Psi \end{aligned}$$ □

3.
$$J^2(J_+^n\Psi) = J_+^n(J^2\Psi) = a(J_+^n\Psi)$$

όπου λαμβάνουμε υπόψιν ότι J_+, J^2 μετατίθενται.

Επειδή η $J_+^n\Psi = \Psi'$ είναι συγχρόνως ιδιοσυνάρτηση του J_z με ιδιοτιμή $(b+n\hbar)$ και ιδιοσυνάρτηση του J^2 με ιδιοτιμή a, έχουμε
$$a \geq (b+n\hbar)^2$$
Αλλά το $b+n\hbar$ αυξάνεται απεριόριστα. Θα πρέπει κάπου να τερματίζει αυτή η ακολουθία ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων. Επομένως υπάρχει n_1 τέτοιο ώστε:
$$J_+^{n1}\Psi = 0$$
Άρα η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του J_z είναι $b+(n_1-1)\hbar$. **Δηλαδή το J_z έχει μέγιστη ιδιοτιμή για δεδομένο a.**
Έστω λοιπόν τώρα ότι b είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του J_z με Ψ την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση, τότε
$$J_z\Psi = b\Psi \qquad \text{και} \qquad J_+\Psi = 0.$$
Ακόμη έχουμε:
$$J_z(J_-^k\Psi) = (b-k\hbar)J_-^k\Psi$$
και $a \geq (b-k\hbar)^2 \ \ \forall k$, άρα το k δεν μπορεί να γίνει άπειρο· κάπου λοιπόν αυτή η άπειρη ακολουθία ιδιοτιμών σταματάει, έστω για κάποιο $k=n$, επομένως
$$J_-^{n+1}\Psi = 0$$
Άρα η $\Psi'' = J_-^n\Psi$ είναι η κυματοσυνάρτηση με τη μικρότερη ιδιοτιμή του J_z με ιδιοτιμή $(b-n\hbar)$,
$$\Rightarrow J_z\Psi'' = (b-n\hbar)\Psi'' \quad \text{και} \quad J_-\Psi'' = 0.$$

Έχουμε τις σχέσεις:
$$\begin{aligned} J_-J_+ &= (J_x-iJ_y)(J_x+iJ_y) = J_x^2+J_y^2+i[J_x,J_y] \\ &= J_x^2+J_y^2+J_z^2-J_z^2-\hbar J_z = J^2-J_z^2-\hbar J_z \\ J_+J_- &= (J_x+iJ_y)(J_x-iJ_y) = J_x^2+J_y^2-i[J_x,J_y] \\ &= J_x^2+J_y^2+J_z^2-J_z^2+\hbar J_z = J^2-J_z^2+\hbar J_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_- J_+ \Psi = 0 \\ J_- J_+ \Psi = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\Psi = (a - b^2 - \hbar b)\Psi \end{cases}$$

$$\Rightarrow a - b^2 - \hbar b = 0 \Rightarrow a = b(b+\hbar)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_+ J_- \Psi'' = 0 \\ J_+ J_- \Psi'' = (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)\Psi'' = \Big(a - (b - n\hbar)^2 + \hbar(b - n\hbar)\Big)\Psi'' \end{cases}$$

$$\Rightarrow a - (b - n\hbar)^2 + \hbar(b - n\hbar) = 0$$

Βάζοντας $a = b(b+\hbar)$ βρίσκουμε

$$b = \hbar\frac{n}{2}, \quad \text{με } n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\Rightarrow b = 0, \frac{\hbar}{2}, \hbar, \frac{3\hbar}{2}, 2\hbar, \frac{5\hbar}{2}, \ldots$$

$$a = \hbar^2 \frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} + 1\right)$$

Για $n =$ άρτιος ακέραιος $= 2l$, έχουμε

$$b = \hbar l, \qquad a = l(l+1)\hbar^2$$

Αλλιώς το b είναι ημιακέραιος.

$$b = \text{ μεγαλύτερη ιδιοτιμή } = \hbar\frac{n}{2}$$

$$\frac{n}{2}\hbar - n\hbar = \text{ μικρότερη ιδιοτιμή } = -\hbar\frac{n}{2}$$

$$\Rightarrow b = -\hbar\frac{n}{2}, \ -\hbar\left(\frac{n}{2} - 1\right), \ldots, \hbar\frac{n}{2}$$

συνολικά $n+1$ τιμές.
Για $n = 1 \Rightarrow b = \pm\hbar/2$ (spin$= 1/2$)

5.3 Αναπαράσταση των τελεστών της στροφορμής με πίνακες

Είδαμε λοιπόν ότι μια ιδιοσυνάρτηση των J^2 και J_z χαρακτηρίζεται από δύο αριθμούς ακέραιους ή ημιακέραιους, τους j και m, όπου $m = j, j-1, \ldots, -j$, άρα και η κυματοσυνάρτηση χαρακτηρίζεται ως εξής $\Psi \to \Psi_{jm}$. Οι τελεστές J_z, J^2 είναι ερμιτιανοί, άρα έχουν ένα πλήρες, ορθογώνιο σύστημα κυματοσυναρτήσεων.

$$\boxed{\langle \Psi_{jm} | \Psi_{j'm'} \rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}}$$

$$\begin{aligned} J^2 \Psi_{jm} &= \hbar^2 J(J+1)\Psi_{jm} \\ J_z \Psi_{jm} &= \hbar m \Psi_{jm} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle \Psi_{j'm'} | J^2 | \Psi_{jm} \rangle = \hbar^2 J(J+1)\delta_{jj'}\delta_{mm'} \\ \langle \Psi_{j'm'} | J_z | \Psi_{jm} \rangle = \hbar m \delta_{jj'}\delta_{mm'} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{ διαγώνιοι πίνακες διάστασης } (2j+1) \times (2j+1) \text{ για δεδομένο } J$$

Ζητάμε τώρα τους πίνακες που παριστάνουν τα J_x και J_y για σταθερό δεδομένο J. Άρα κινούμαστε σε έναν διανυσματικό χώρο διάστασης $2j+1$. Έχουμε:

$$\begin{aligned} J_+ \Psi_{jm} &= C_+ \Psi_{j,m+1} \\ J_- \Psi_{jm} &= C_- \Psi_{j,m-1} \end{aligned}$$

διότι ο J_+ αυξάνει την ιδιοτιμή του J_z κατά ένα και ο J_- ελαττώνει την ιδιοτιμή του J_z κατά ένα.

Θέλουμε να βρούμε τα C_+, C_-.

$$\langle C_+\Psi_{j,m+1}|C_+\Psi_{j,m+1}\rangle = C_+^2\langle\Psi|\Psi\rangle = C_+^2$$
$$\langle J_+\Psi_{jm}|J_+\Psi_{jm}\rangle = \langle\Psi_{jm}|J_-J_+\Psi_{jm}\rangle =$$
$$= \langle\Psi_{jm}|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\Psi_{jm}\rangle = \hbar^2\Big[j(j+1) - m^2 - m\Big]$$
$$= \hbar^2\Big[j(j+1) - m(m+1)\Big]$$
$$\Rightarrow C_+ = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

Όμοια,

$$C_- = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

$$\begin{cases} J_+ = J_x + iJ_y \\ J_- = J_x - iJ_y \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\ J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow J_x\Psi_{jm} &= \frac{1}{2}\left(J_+\Psi_{jm} + J_-\Psi_{jm}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\Psi_{j,m+1} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\Psi_{j,m-1} \\ J_y\Psi_{jm} &= \frac{1}{2i}\left(J_+\Psi_{jm} - J_-\Psi_{jm}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2i}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\Psi_{j,m+1} - \frac{\hbar}{2i}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\Psi_{j,m-1} \end{aligned}$$

- $j = 0, m = 0 \to \Psi_{00}$
- $j = \frac{1}{2}, m = \pm\frac{1}{2} \quad J^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

- $j = 1,\ m = -1, 0, 1$

$$J^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

5.3.1 Υπολογισμός των ιδιοσυναρτήσεων για ακέραια τιμή $j = l$ της στροφορμής

$$L_+ = L_x + iL_y$$
$$\begin{cases} L_x = (-i\hbar)\left[-\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ L_y = (-i\hbar)\left[\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \end{cases}$$
$$\Rightarrow L_+ = \hbar e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$
$$\text{και } L_- = L_+^\dagger = -\hbar e^{-i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} - i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$
$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$L_z\Psi_{ll} = -i\hbar\frac{\partial\Psi_{ll}}{\partial\phi} = \hbar l\Psi_{ll}$$

$$L_+\Psi_{ll} = 0 \Rightarrow \frac{\partial\Psi_{ll}}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\Psi_{ll}}{\partial\phi} = 0$$

Εξίσωση χωριζόμενων μεταβλητών

$$\Rightarrow \Psi_{ll} = Q(\theta)\Phi(\phi)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -i\hbar\dfrac{\partial\Psi_{ll}}{\partial\phi} = -i\hbar Q\dfrac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\phi} = \hbar l Q\Phi \\ \Rightarrow \Phi(\phi) = \mathrm{e}^{il\phi} \end{cases}$$

περιοδική με περίοδο 2π !!!!

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}(il)Q = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}\theta} = l\frac{\cos\theta}{\sin\theta}Q$$

Αλλαγή μεταβλητής $u = \sin\theta \Rightarrow \mathrm{d}u = \cos\theta\mathrm{d}\theta$

$$\Rightarrow \frac{dQ}{\cos\theta\mathrm{d}\theta} = l\frac{Q}{\sin\theta}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}u} = l\frac{Q}{u}}$$

η οποία έχει λύση $Q = Au^l$

$$\Rightarrow \Psi_{ll}(\theta,\phi) = A_{ll}(\sin\theta)^l\mathrm{e}^{il\phi}$$

Κανονικοποίηση:

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\Psi_{ll}^*\Psi_{ll}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = 2\pi A_{ll}^*A_{ll}\int_0^\pi(\sin\theta)^{2l}\sin\theta\mathrm{d}\theta = 2\pi A_{ll}^*A_{ll}\int_{-1}^1(1-\xi^2)^l\mathrm{d}\xi = 1$$

όπου

$$\xi = \cos\theta, \mathrm{d}\xi = -\sin\theta\mathrm{d}\theta,\ \sin^2\theta = 1-\xi^2 \quad \text{και} \quad \int_{-1}^1(1-\xi^2)^l\mathrm{d}\xi = 2^{2l+1}\frac{\Gamma^2(l+1)}{\Gamma(2l+2)}$$

$$\Rightarrow 2\pi A_{ll}^*A_{ll}2^{2l+1}\frac{\Gamma^2(l+1)}{\Gamma(2l+2)} = 1 \Rightarrow A^*A = \frac{\Gamma(2l+2)}{2\pi 2^{2l+1}\Gamma^2(l+1)} = \frac{(2l+1)!}{2\pi 2^{2l+1}(l!)^2}$$

διότι

$$\Gamma(l+1) = l!$$

$$\Rightarrow A_{ll} = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi 2^{2l}(l!)^2}}$$

Υπολογίζουμε τις άλλες Ψ_{lm} δρώντας με τον τελεστή L_-.

5.4 Spin

Εάν μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B}$ βάλουμε ένα μαγνητικό δίπολο, με μαγνητική διπολική ροπή μ, η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι:

$$U = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$$

Εάν

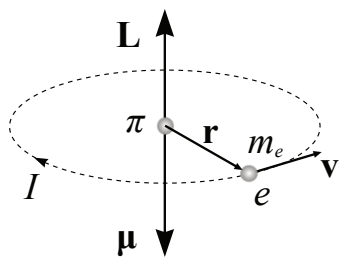
$$\mathbf{B} = B\hat{z} \Rightarrow U = -\mu_z B$$

Η δύναμη που ασκείται στο μαγνητικό δίπολο είναι

$$\mathbf{F} = -\boldsymbol{\nabla}U \Rightarrow F_z = \mu_z\frac{\partial B}{\partial z}$$

εάν το μαγνητικό πεδίο εξαρτάται μόνο από το z.

Τα ουδέτερα άτομα έχουν μαγνητική διπολική ροπή λόγω των περιστρεφόμενων ηλεκτρονίων.



Ηλεκτρόνιο με φορτίο $q_e = -e$ κινούμενο προς τα δεξιά με ταχύτητα $\mathbf{v}$ αντιστοιχεί σε ρεύμα I προς τα αριστερά. Επομένως η μαγνητική διπολική ροπή του βρόχου είναι $\mu = I\pi r^2$ με διεύθυνση προς τα κάτω.
Γενικά

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\int \mathbf{r} \times \mathbf{J} \mathrm{d}^3x$$

$$I = \frac{e}{T}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}, \quad v = \omega r$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{e}{T}\pi r^2 = \frac{e}{2}\frac{2\pi}{T}r^2 = \frac{e}{2}\omega r^2$$

Η στροφορμή του σωματιδίου είναι $L = mvr$

$$L = mvr = m\omega r^2$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{e}{2m_e}m_e\omega r^2 = \frac{e}{2m_e}L$$

Διανυσματικά λοιπόν έχουμε:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}$$

για το ηλεκτρόνιο.
Για ηλεκτρόνιο με στροφορμή l η διπολική ροπή που οφείλεται στην τροχιακή στροφορμή είναι:

$$\mu_{\tau\rho,z} = -\frac{e\hbar}{2m_e}m, \quad -l \leq m \leq l$$

1922, Stern και Gerlach

Δέσμη από άτομα Αργύρου (Ag) περνά κάθετα μέσα από μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα των z και προσπίπτει σε φωτογραφική πλάκα, όπου αφήνει το ίχνος τους.
Το διάνυσμα $\boldsymbol{\mu}$ της μαγνητικής διπολικής ροπής των ατόμων της δέσμης έχει τυχαίο προσανατολισμό στο χώρο. $Ag \to 47e \to 46e + 1e$, ένα ηλεκτρόνιο μόνο του στην εξώτατη στοιβάδα. Το ίχνος της δέσμης στην πλάκα θα έπρεπε να καλύπτει πλήρως μία περιοχή γύρω από το κέντρο ($z \simeq 0$). Οι Stern και Gerlach παρατήρησαν ότι η δέσμη χωρίστηκε σε δύο συνιστώσες, μία κατά το θετικό άξονα των z και η άλλη κατά τον αρνητικό άξονα των z, ισαπέχοντας από το μηδέν.

1927, Phipps και Taylor

Σε όμοιο πείραμα, χρησιμοποίησαν δέσμη από άτομα υδρογόνου στη θεμελιώδη στάθμη: $l = 0 \Rightarrow \mu_{\text{τροχ}} = 0$. Περιμένουμε η δέσμη να περάσει χωρίς καμία απόκλιση. Η δέσμη και πάλι χωρίζεται στα δύο.
Πιθανή λύση: ο πυρήνας περιστρέφεται γύρω από κάποιο άξονα.

$$\Rightarrow \mu_{\pi} \simeq \frac{e\hbar}{2m_{\pi}}$$

Βρέθηκε ότι η δέσμη χωρίζεται σε δύο μέρη, έχοντας κατά 1000 φορές μεγαλύτερη απόσταση μεταξύ τους, δηλαδή η μαγνητική διπολική ροπή που παίρνει μέρος είναι εξαρτώμενη από τη μάζα του ηλεκτρονίου.

$$m_{\pi} = 1836 m_e$$

Ένα άλλο σοβαρό πρόβλημα

Στα άτομα η πρώτη στοιβάδα με $l = 0$ παίρνει το πολύ 2 ηλεκτρόνια.
Η δεύτερη στοιβάδα με $l = 1$ και εκφυλισμό $2l + 1 = 3$ παίρνει το πολύ 6 ηλεκτρόνια.
Άτομα με 9 η περισσότερα ηλεκτρόνια κατανέμουν το ένατο ηλεκτρόνιο στην τρίτη στοιβάδα.
Ερώτημα: Γιατί δεν πάνε όλα τα ηλεκτρόνια στη θεμελιώδη στάθμη;
Πιθανή απάντηση: Διότι σε κάθε κατάσταση αντιστοιχεί ένα σωματίδιο.
Γιατί τότε για $l = 0$ έχουμε δύο και όχι ένα σωματίδιο;
Απάντηση: Διότι..;;
Ο Pauli εισήγαγε έτσι αυθαίρετα έναν ακόμη (τέταρτο) κβαντικό αριθμό που παίρνει δύο τιμές. Το 1925 και 1926 οι Uhlenbeck και Goudsmit εισήγαγαν το spin και έτσι όλα τα παραπάνω βρήκαν μια φυσιολογική αυτοσυνεπή εξήγηση.

Πληρέστερη και πιο θεμελιώδη εξήγηση έδωσε αργότερα ο Dirac, γράφοντας τη σχετικιστική εξίσωση για το ηλεκτρόνιο.

Το ηλεκτρόνιο λοιπόν έκτος από τροχιακή στροφορμή έχει και "ιδιοστροφορμή" ή "ενδογενή στροφορμή", που την ονομάζουμε *στροφορμή του spin*.

Το spin είναι ένα κβαντομηχανικό μέγεθος και δε μπορεί να περιγραφεί κλασσικά. Είναι μια χαρακτηριστική σταθερά του σωματιδίου, όπως η μάζα και το φορτίο. Το spin δεν οφείλεται σε κάποια περιστροφή του ηλεκτρονίου γύρω από κάποιο άξονα και δε μεταβάλλεται σαν μέγεθος, δε διεγείρεται όπως θα είχαμε σε μια κλασσική περιγραφή (π.χ. περιστροφή).

Το ηλεκτρόνιο έχει μια μαγνητική διπολική ροπή που σχετίζεται με το spin.

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g\frac{e}{2m_e}\mathbf{S}$$

όπου g σταθερά, γυρομαγνητικός λόγος του ηλεκτρονίου, και $\mathbf{S}$ είναι το spin του ηλεκτρονίου (ιδιοστροφορμή). Οι συνιστώσες του spin s_x, s_y, s_z ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης της στροφορμής. Άρα οι ιδιοτιμές του $\mathbf{S}^2$ και S_z είναι αντίστοιχα:

$$\hbar^2 s(s+1) \quad \text{και} \quad m_s\hbar, \quad -s \leq m_s \leq s$$

οπότε η μαγνητική διπολική ροπή κατά τον άξονα z είναι:

$$\boldsymbol{\mu}_{sz} = -g\frac{e\hbar}{2m_e}m_s$$

και επειδή η δέσμη χωρίζεται σε δύο συνιστώσες, το m_s παίρνει δύο μόνο τιμές: $2s+1=2$

$$\Rightarrow \boxed{s=\frac{1}{2}} \Rightarrow \boxed{m_s = \pm\frac{1}{2}}$$

Ο γυρομαγνητικός λόγος g προσδιορίζεται πειραματικά:

$$\boxed{g=2} \qquad \text{«παράγοντας Landé»}$$

Η τιμή αυτή προβλέπεται από την εξίσωση του Dirac για το ηλεκτρόνιο.
Ακριβέστερες μετρήσεις έδωσαν για το γυρομαγνητικό λόγο του ηλεκτρονίου την τιμή $g = 2,00232$ (Lamb, 1947). Η τιμή αυτή υπολογίστηκε ακριβώς από την κβαντική θεωρία πεδίου. Η απόκλιση από την τιμή 2, λέγεται ανώμαλη μαγνητική διπολική ροπή.

Οι τελεστές του spin του ηλεκτρονίου $s = 1/2$ παριστάνονται με διδιάστατους πίνακες:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις του S_z προκύπτουν από την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$S_z X_+ = \frac{\hbar}{2}X_+ \Rightarrow X_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$S_z X_- = -\frac{\hbar}{2}X_- \Rightarrow X_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Οι κυματοσυναρτήσεις X του ηλεκτρονίου στο χώρο του spin είναι διανύσματα ή αλλιώς πίνακες με μία μόνο στήλη.

$$X = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \alpha X_+ + \beta X_-$$

$$\langle X|X\rangle = X^\dagger X = (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \alpha\alpha^* + \beta\beta^*$$

ή

$$|X\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$
$$\Rightarrow \langle X|X\rangle = \alpha\alpha^*\langle +|+\rangle + \beta\beta^*\langle -|-\rangle + \alpha^*\beta\langle +|-\rangle + \alpha\beta^*\langle -|+\rangle$$
$$\langle +|-\rangle = 0,\ \langle -|+\rangle = 0,\ \langle +|+\rangle = 1,\ \langle -|-\rangle = 1$$

εάν η κυματοσυνάρτηση X είναι κανονικοποιημένη,

$$\Rightarrow \langle X|X\rangle = \alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$$

Η μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ που δίνεται ως πίνακας A είναι

$$X^\dagger A X = \langle \hat{A}\rangle$$

> **Παράδειγμα**
>
> $$\langle S_x\rangle = X^\dagger S_x X = (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}$$
> $$= (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix}\beta\hbar/2 \\ \alpha\hbar/2\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\alpha^*\beta + \beta^*\alpha)$$
>
> πραγματικός αριθμός.

Ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις των S_x, S_y

Οι τελεστές S_x, S_y, S_z έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές $\pm\hbar/2$.
Ιδιοσυναρτήσεις του $S_x \Rightarrow S_x X_+^{(x)} = \frac{\hbar}{2} X_+^{(x)}$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} \Rightarrow \beta = \alpha$$

Παίρνουμε $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ για κανονικοποίηση.

$$S_x \Rightarrow X_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ 1\end{pmatrix}, \quad X_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -1\end{pmatrix}$$
$$S_y \Rightarrow X_+^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ i\end{pmatrix}, \quad X_-^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -i\end{pmatrix}$$

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές ονομάζεται spinors (σπίνορες).

Φυσική ερμηνεία του $X = \begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}$

$$|X\rangle = \alpha|X_+\rangle + \beta|X_-\rangle$$

$\Rightarrow$ Πιθανότητα $P_\pm$ σε μία μέτρηση του spin κατά τον άξονα z να βρούμε spin $= \pm\hbar/2$.

$$\begin{cases} P_+ = \alpha^*\alpha & \to \text{spin}(z) = \hbar/2 \\ P_- = \beta^*\beta & \to \text{spin}(z) = -\hbar/2 \end{cases}$$

Η κυματοσυνάρτηση λοιπόν του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου είναι:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R_{nl} Y_{lm} X_{m_s}$$

όπου $X_{m_s} = X_+$ ή X_-.

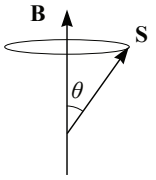
Πίνακες του Pauli:

$$S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$$
$$\Rightarrow \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Ιδιότητες:

- $\sigma_k^2 = 1$
- $\text{trace}\sigma_k = 0$
- $\det \sigma_k = -1$
- $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i$

Ηλεκτρόνιο μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο



Θεωρούμε την κίνηση ενός φορτισμένου σωματιδίου (ηλεκτρόνιο) μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Επειδή η αλληλεπίδραση του spin με το $\mathbf{B}$ δεν εξαρτάται από τη θέση του σωματιδίου στο χώρο, τότε η χαμιλτονιανή χωρίζεται σε δύο ανεξάρτητα μέρη και η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφτεί σαν το γινόμενο δύο συναρτήσεων μια που εξαρτάται από το $\mathbf{r}$ και της κυματοσυνάρτησης του spin.

$$\Rightarrow H = H_0 + H_B, \quad H_B = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A},\ H_0 = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{r}),\ \mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

$$H\Psi = E_{\text{ολ}}\Psi \Rightarrow (H_0 + H_B)\Psi = E_{\text{ολ}}\Psi$$

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r})X$$

$$\Rightarrow [H_0\Psi(\mathbf{r})]\, X + \Psi(\mathbf{r})(H_B X) = E_0\Psi X + EX\Psi$$

$$\Rightarrow \begin{cases} H_0\Psi = E_0\Psi \\ H_B X = EX \end{cases}$$

και λύνουμε εδώ τη δεύτερη εξίσωση:

$$\boldsymbol{\mu} = -g\frac{e}{2m_e}\mathbf{S} = -\frac{ge\hbar}{4m_e}\boldsymbol{\sigma}$$

$$H_B = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\left(\frac{-e\hbar Bg}{4m_e}\right)\sigma_z$$

Εξίσωση του Schrödinger χρονικά ανεξάρτητη

$$\Rightarrow H_B X_n = E_n X_n$$

$$\frac{ge\hbar B}{4m_e}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} X_n = E_n X_n, \quad \text{με } n = 1, 2$$

και

$$X_n = \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} \qquad \text{με } |\alpha_n|^2 + |\beta_n|^2 = 1$$

ορίζουμε

$$\boxed{\omega = \frac{egB}{4m_e}}$$

Η γενική **χρονικά εξαρτημένη λύση** του κβαντικού συστήματος θα είναι:

$$X(t) = \sum_n C_n X_n \mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar}$$

με $n = 1, 2$. Τα c_n ορίζονται από τις αρχικές συνθήκες.

$$\Rightarrow \omega\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} X_n = E_n X_n, \quad X_n = \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \omega\hbar\alpha_n = E_n\alpha_n \\ -\omega\hbar\beta_n = E_n\beta_n \end{cases}$$

Μηδενίζουμε την ορίζουσα:

$$\begin{vmatrix} \omega\hbar - E & 0 \\ 0 & -\omega\hbar - E \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} E_1 = \omega\hbar, & X_1 = \binom{1}{0} = X_+ \\ \alpha_1 = 1, \beta_1 = 0 & \\ E_2 = -\omega\hbar, & X_2 = \binom{0}{1} = X_- \\ \alpha_2 = 0, \beta_2 = 1 & \end{cases}$$

$$X(t) = C_1 \mathrm{e}^{-iE_1 t/\hbar} X_+ + C_2 \mathrm{e}^{-iE_2 t/\hbar} X_-$$

$$X(t) = \begin{pmatrix} C_1 \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ C_2 \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix} \qquad |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

Εφαρμογή

Η κυματοσυνάρτηση του spin τη χρονική στιγμή $t = 0$ είναι

$$X(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

δηλαδή το σωματίδιο είχε spin $+\hbar/2$ κατά το θετικό άξονα του x

$$\Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}},\ C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{X(t) = \frac{\cos\omega t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i \frac{\sin\omega t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}$$

$$t = 0 \Rightarrow X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = X_+(x)$$

$$\omega t = \frac{\pi}{4} \Rightarrow X(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i \\ 1 + i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 - i) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{-i\pi/4} X_+(y)$$

$$\omega t = \frac{\pi}{2} \Rightarrow X(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -iX_-(x) = \mathrm{e}^{-i\pi/2} X_-(x)$$

$$\omega t = \frac{3\pi}{4} \Rightarrow X(t) = \mathrm{e}^{-i3\pi/4} X_-(y),\ X_-(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\omega t = \frac{4\pi}{4} = \pi \Rightarrow X(t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{-i\pi} X_+(x) = \mathrm{e}^{-i\pi} X(0)$$

Δύο συναρτήσεις Ψ_1 και $\mathrm{e}^{i\phi}\Psi_1 = \Psi_2$ που διαφέρουν κατά μία φάση έχουν τις ίδιες πιθανότητες και δίνουν τις ίδιες μετρήσεις. Άρα το $\mathbf{s}$ περιστρέφεται γύρω από το $\mathbf{B}$ με γωνιακή ταχύτητα 2ω (*μετάπτωση του spin, συχνότητα Larmor*).

Μπορούμε να λύσουμε τη χρονικά εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = H_B X, \quad H_B = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$$

$$\mathbf{B} = B\hat{z} \Rightarrow H_B = \frac{ge\hbar}{4m} B\sigma_z$$

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = \frac{geB}{4m} \hbar\sigma_z X \Rightarrow \boxed{i\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = \frac{geB}{4m} \sigma_z X}$$

$$X(t) = \begin{pmatrix} C_+(t) \\ C_-(t) \end{pmatrix} \Rightarrow i \begin{pmatrix} \dfrac{\mathrm{d}C_+}{\mathrm{d}t} \\ \dfrac{\mathrm{d}C_-}{\mathrm{d}t} \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\dfrac{\mathrm{d}C_+}{\mathrm{d}t} = \omega C_+ \Rightarrow C_+(t) = C_+(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \\ i\dfrac{\mathrm{d}C_-}{\mathrm{d}t} = -\omega C_- \Rightarrow C_-(t) = C_-(0)\mathrm{e}^{i\omega t} \end{cases}$$

$$\Rightarrow X = \begin{pmatrix} C_+(t) \\ C_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_+(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \\ C_-(0)\mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

Οριακή συνθήκη $X(0) = X_+(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \boxed{X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}}$$

$$\omega = \frac{geB}{4m_e} \Rightarrow 2\omega = \frac{eB}{m_e}$$

$$X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\omega t - i\sin\omega t \\ \cos\omega t + i\sin\omega t \end{pmatrix}$$

$$X(t) = \frac{\cos\omega t}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i\frac{\sin\omega t}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$X(t) = \cos\omega t X_+(x) - i\sin\omega t X_-(x)$$

5.5 Πρόσθεση στροφορμών

(α) Υποθέστε ότι έχουμε ένα σύστημα δύο σωματιδίων που οι στροφορμές τους $\mathbf{J}_1$ και $\mathbf{J}_2$ έχουν καθορισμένο μέγεθος, αλλά που ο προσανατολισμός τους μπορεί να παίρνει όλες τις επιτρεπόμενες τιμές.

(β) Υποθέστε (εναλλακτικά) ότι έχουμε ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο εκτός από τροχιακή στροφορμή $\mathbf{J}_1$ έχει και στροφορμή του spin $\mathbf{J}_2$ και χρειάζεται να υπολογίσουμε την ολική στροφορμή του.

Και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις έχουμε δύο τελεστές στροφορμής, τους $\mathbf{J}_1$, $\mathbf{J}_2$, που μετατίθενται μεταξύ τους:

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0 \ \forall k, l = 1, 2, 3$$

και ισχύει:

$$[J_{1k}, J_{1l}] = i\hbar\epsilon_{kl\rho}J_{1\rho}$$

$$[J_{2k}, J_{2l}] = i\hbar\epsilon_{kl\rho}J_{2\rho}$$

Το άθροισμα αυτών των δύο τελεστών είναι ένας τελεστής στροφορμής, η ολική στροφορμή του συστήματος. Πράγματι, ορίζουμε

$$J_k = J_{1k} + J_{2k}$$

με ιδιότητες μετάθεσης:

$$[J_k, J_l] = i\hbar J_\rho \epsilon_{kl\rho}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2} \quad \text{Ολική στροφορμή του συστήματος}$$

Έστω ότι $J_1(J_1+1)\hbar^2$, $J_2(J_2+1)\hbar^2$ και $J(J+1)\hbar^2$ είναι οι ιδιοτιμές των τελεστών $\mathbf{J}_1^2$, $\mathbf{J}_2^2$ και $\mathbf{J}^2$ αντίστοιχα. Το πρόβλημά μας είναι να υπολογίσουμε τις δυνατές τιμές του J, με γνωστά τα J_1, J_2.

Οι τελεστές $\mathbf{J}_1^2$ και $\mathbf{J}_2^2$ μετατίθενται μεταξύ τους. Ο τελεστής

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = (J_{1x} + J_{2x})^2 + (J_{1y} + J_{2y})^2 + (J_{1z} + J_{2z})^2$$

μετατίθεται με τους $\mathbf{J}_1^2$ και $\mathbf{J}_2^2$.
Έχουμε την ταυτότητα:

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)\cdot(\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2) = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2, \quad \text{όπου } \mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 = J_{1x}J_{1y} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z}$$

διότι τα $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ μετατίθενται μεταξύ τους.

Σημειώνουμε πρώτα ότι:

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_y] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_z] = 0$$
$$[J^2, J_{1x}] = 2i\hbar J_{1y}J_{2z} - 2i\hbar J_{1z}J_{2y}$$
$$[J^2, J_{2x}] = -2i\hbar J_{1y}J_{2z} + 2i\hbar J_{1z}J_{2y}$$
$$\Rightarrow [J^2, J_{1x} + J_{2x}] = 0$$

Προσοχή:

$$[\mathbf{J}^2, J_{1x}] \neq 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_{2x}] \neq 0$$

Κατά δεύτερον:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{J}^2, J_{1x}^2] &= [\mathbf{J}_1^2, J_{1x}^2] + [\mathbf{J}_2^2, J_{1x}^2] + 2[\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2, J_{1x}^2] \\
&= 0 + 0 + 2[\mathbf{J}_2\cdot\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_{1x}^2] \\
\Rightarrow [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] &= 2[\mathbf{J}_2\cdot\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_1^2] \\
&= 2[J_{2x}J_{1x}, \mathbf{J}_1^2] + 2[J_{2y}J_{1y}, \mathbf{J}_1^2] + 2[J_{2z}J_{1z}, \mathbf{J}_1^2] = 0
\end{aligned}$$

διότι $[J_{1k}, \mathbf{J}_1^2] = 0, \forall k$. Όμοια, $[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$.
Άρα έχουμε ένα σύνολο 4 μετατιθέμενων τελεστών, $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$, με κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.
Επίσης αποδεικνύεται εύκολα ότι:

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$$

Οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_{jj_1j_2m} = \Phi_{jm}$ είναι γραμμικός συνδυασμός των γινομένων $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ με $m_1 + m_2 = m$, π.χ.

$$\begin{aligned}
J_z\Phi_{jm} &= (J_{1z} + J_{2z})\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2} = (J_{1z}\Psi_{j_1m_1})\Psi_{j_2m_2} + \Psi_{j_1m_1}(J_{2z}\Psi_{j_2m_2}) = (m_1 + m_2)\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2} \\
&= m\Phi_{jm}
\end{aligned}$$

Το σύνολο των συναρτήσεων $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ είναι $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, όσα είναι τα δυνατά ζεύγη (m_1, m_2). Ενώ σε μία ιδιοτιμή του J_z την m αντιστοιχούν πολλοί συνδυασμοί (m_1, m_2) με $m_1 + m_2 = m$. Στόχος είναι να βρούμε τους σωστούς γραμμικούς συνδυασμούς των $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ ώστε να αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή j του τελεστή $\mathbf{J}^2$.
Για μια δυνατή τιμή J της ολικής στροφορμής το m παίρνει τις τιμές

$$-j, \ldots, j, \quad \text{σύνολο } 2j + 1$$

Γνωρίζοντας λοιπόν το σύνολο των δυνατών τιμών του m, μπορούμε να βρούμε τις τιμές του j που χρειάζονται για να το καλύψουν. Η μέγιστη τιμή του j αντιστοιχεί στη μέγιστη τιμή του $m = j_1 + j_2 = j_{\max}$, με ιδιοσυνάρτηση μόνο την

$$\Phi_{j\max, j\max} = \Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2j_2} \equiv \tilde{\Phi}_{j_{\max}}$$

Την κυματοσυνάρτηση με $m = j_1 + j_2 - 1 = j_{\max} - 1$, αλλά με την ίδια ιδιοτιμή του $\mathbf{J}^2$ την βρίσκουμε δρώντας με τον τελεστή

$$J_- = J_{1-} + J_{2-}, \qquad [J^2, J_-] = 0$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hbar\sqrt{2J_{\max}}\,\tilde{\Phi}_{J\max-1} &= J_-\tilde{\Phi}_{J\max} = (J_{1-} + J_{2-})\Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2j_2} \\
&= (J_{1-}\Psi_{j_1j_1})\Psi_{j_2j_2} + \Psi_{j_1j_1}(J_{2-}\Psi_{j_2j_2}) \\
&= C_{1-}\Psi_{j_1,j_1-1}\Psi_{j_2j_2} + C_{2-}\Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2,j_2-1}
\end{aligned}$$

$$C_{1-} = \hbar\sqrt{j_1(j_1+1) - j_1(j_1-1)} = \hbar\sqrt{2j_1}$$

$$C_{2-} = \hbar\sqrt{2j_2}$$

με ιδιοτιμή του J_z ίση με $(j_1 + j_2 - 1)\hbar$ και ιδιοτιμή του $\mathbf{J}^2$ ίση με $\hbar^2(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)$.

Εφαρμόζοντας την προηγούμενη διαδικασία $2J_{\max}$ φορές, βρίσκουμε όλες τις ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_{J\max,\,\mathrm{m}}$. Υπάρχει ένας ακόμα γραμμικά ανεξάρτητος συνδυασμός των

$$\Psi_{j_1,j_1-1}, \Psi_{j_2,j_2} \qquad \text{και} \qquad \Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2,j_2-1}$$

$$\Phi = \alpha\Psi_{j_1,j_2-1}\Psi_{j_2,j_2} + \beta\Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2j_2-1}$$

με ιδιοτιμή του $m = j_1 + j_2 - 1$, αλλά ιδιοτιμή $j = j_1 + j_2 - 1$ για το $\mathbf{J}^2$.

Μπορούμε τώρα να δούμε έναν σχηματικό τρόπο για να βρούμε τις δυνατές τιμές της ολικής στροφορμής. Φτιάχνουμε έναν πίνακα τιμών του $m = m_1 + m_2$ για $j_1 = 1$ και $j_2 = 2$, για παράδειγμα.

m_1/m_2	2	1	0	-1	-2
1	3	2	1	0	-1
0	2	1	0	-1	-2
-1	1	0	-1	-2	-3

Αν ξεκινήσουμε στον πίνακα από την πρώτη του γραμμή, προχωρήσουμε οριζόντια μέχρι το τέλος και κατεβούμε προς τα κάτω, θα συναντήσουμε τις τιμές του m που αντιστοιχούν σε $j = j_1 + j_2 = 3$.
Μετά παίρνουμε τη δεύτερη γραμμή και κάνουμε το ίδιο· οι τιμές του m που συναντούμε αντιστοιχούν σε $j = j_1 + j_2 - 1 = 2$.
Η τρίτη γραμμή θα δώσει τιμές του m για τον κβαντικό αριθμό $j = j_1 + j_2 - 2 = 1 = j_2 - j_1$ σε αυτήν την περίπτωση.
Πράγματι όλες οι δυνατές τιμές που μπορεί να πάρει το j δίνονται από τη σχέση:

$$j_1 + j_2 \geq j \geq j_1 + j_2 - 2j_1 = j_2 - j_1$$

υποθέτοντας ότι $j_2 \geq j_1$.

Απόδειξη. Θα αποδείξουμε ότι

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|$$

με βήμα ένα.
Ο αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων των τελεστών $(\mathbf{J}^2, J_z)$ είναι $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Έστω λοιπόν ότι το j παίρνει τις τιμές

$$j_1 + j_2, j_1 + j_{2-1}, \ldots, j_1 + j_2 - n$$

Έχουμε

$$\Big[2(j_1 + j_2) + 1\Big] + \Big[2(j_1 + j_2 - 1) + 1\Big] + \ldots + \Big[2(j_1 + j_2 - n) + 1\Big]$$

$$\begin{aligned}
&= 2(j_1 + j_2)(n + 1) + (n + 1) - 2(1 + 2 + \ldots + n) \\
&= 2(j_1 + j_2)(n + 1) + n + 1 - 2\frac{(n + 1)n}{2} \\
&= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow 2(j_1 + j_2)n + \cancel{2(j_1 + j_2)} + \cancel{n} + \cancel{1} - n^2 - \cancel{n} = 4j_1j_2 + \cancel{2j_1} + \cancel{2j_2} + \cancel{1}$$

$$\Rightarrow n^2 - n(2j_1 + 2j_2) + 4j_1j_2 = 0$$

$$n = \frac{2}{2}(j_1 + j_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{4(j_1 + j_2)^2 - 16j_1j_2}$$

$$n = (j_1 + j_2) \pm \sqrt{(j_1 - j_2)^2} = (j_1 + j_2) \pm |j_1 - j_2|$$

Δεκτή μόνο η λύση

$$n = (j_1 + j_2) - |j_1 - j_2|\,,$$

$$\text{εάν } j_2 > j_1 \;\Rightarrow n = (j_1 + j_2) - (j_2 - j_1) = 2j_1$$

$$\Rightarrow J_{\max} = j_1 + j_2, \quad J_{\min} = j_1 + j_2 - n = j_1 + j_2 - 2j_1 = j_2 - j_1$$
$$J_{\min} = |j_1 - j_2|$$

Εάν

$$j_1 = j_2 = j \Rightarrow \begin{cases} J_{\max} = 2j \\ J_{\min} = 0 \end{cases}$$

Οι καταστάσεις με μέγιστο $j = j_{\max} = 2j$ είναι συμμετρικές στην εναλλαγή των μεταβλητών των δύο σωματιδίων. Το επόμενο σύνολο ιδιοσυναρτήσεων με $j = 2j - 1$ είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή. Και πάει εναλλάξ καθώς ελαττώνεται το j.

□

Πρόσθεση τροχιακής στροφορμής l και spin $s = 1/2$

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{L}, \qquad \mathbf{J}_2 = \mathbf{S}$$
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \Rightarrow J_z = L_z + S_z$$
$$\Rightarrow J_{\max} = l + \frac{1}{2}, \quad J_{\min} = l - \frac{1}{2}$$

5.5.1 Πρόσθεση δύο spin $1/2$

Από την πρόσθεση προκύπτουν δύο τιμές της ολικής στροφορμής $s = 1$ και $s = 0$. Έστω $\mathbf{S}^{(1)}$ και $\mathbf{S}^{(2)}$ αντίστοιχα οι δύο τελεστές του spin για τα δύο σωματίδια.

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$$

και οι ιδιοσυναρτήσεις του spin είναι αντίστοιχα

$$X_{\pm}^{(1)},\ X_{\pm}^{(2)}.$$

Οι καταστάσεις με συνολικό spin $s = 1$ είναι

$$\begin{cases} \Psi_{11} = X_+^{(1)} X_+^{(2)} & \mathbf{S}^2 \Psi_{11} = 2\hbar^2 \Psi_{11} \\ \Psi_{1,-1} = X_-^{(1)} X_-^{(2)} & \mathbf{S}^2 \Psi_{1,-1} = 2\hbar^2 \Psi_{1,-1} \end{cases}$$

Για να πάρουμε την Ψ_{10} δρούμε με τον τελεστή $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ στην Ψ_{11}.

$$\begin{aligned} S_- \Psi_{11} = \hbar\sqrt{2}\Psi_{10} &= (S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) X_+^{(1)} X_+^{(2)} \\ &= (S_-^{(1)} X_+^{(1)}) X_+^{(2)} + X_+^{(1)} (S_-^{(2)} X_+^{(2)}) \\ &= \hbar X_-^{(1)} X_+^{(2)} + \hbar X_+^{(1)} X_-^{(2)} = \hbar \left(X_-^{(1)} X_+^{(2)} + X_+^{(1)} X_-^{(2)} \right) \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}^2 \Psi_{10} = 2\hbar^2 \Psi_{10}$$

Κανονικοποιώντας την Ψ_{10} έχουμε:

$$\Psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_-^{(1)} X_+^{(2)} + X_+^{(1)} X_-^{(2)} \right)$$

συμμετρικός συνδυασμός των $X_-^{(1)} X_+^{(2)}$ και $X_+^{(1)} X_-^{(2)}$.

$$S_z X_-^{(1)} X_+^{(2)} = 0$$

$$S_z X_+^{(1)} X_-^{(2)} = 0$$

$$\Rightarrow S_z \Psi_{10} = 0$$

Εάν $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, τότε

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)\cdot(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)\\ &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2\end{aligned}$$

($\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$).

Θα δείξουμε ότι:

$$\begin{aligned}2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 &= 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}\\ S_{1+} &= S_{1x} + iS_{1y}, \quad S_{2+} = S_{2x} + iS_{2y}\\ S_{1-} &= S_{1x} - iS_{1y}, \quad S_{2-} = S_{2x} - iS_{2y}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} &= (S_{1x} + iS_{1y})(S_{2x} - iS_{2y}) + (S_{1x} - iS_{1y})(S_{2x} - iS_{2y})\\ &= 2S_{1x}S_{2x} + 2S_{1y}S_{2y}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2\Psi_{11} &= S_1^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)} + \mathbf{S}_2^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)} + 2S_{1z}S_{2z}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + S_{1+}S_{2-}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + S_{1-}S_{2+}X_+^{(1)}X_+^{(2)}\\ &= \hbar^2\frac{3}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + \hbar^2\frac{3}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + 2\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + (S_{1+}\cancelto{0}{X_+^{(1)}})(S_{2-}X_+^{(2)}) + (S_{1-}X_+^{(2)})(\cancelto{0}{S_{2+}X_+^{(2)}})\\ &= \hbar^2\frac{8}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} = 2\hbar^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)}\end{aligned}$$

Όμοια δουλεύουμε και για τις άλλες καταστάσεις Ψ_{10} και $\Psi_{1,-1}$.
Η ιδιοσυνάρτηση με spin $s = 0$ είναι γραμμικός συνδυασμός των $X_-^{(1)}X_+^{(2)}$, $X_+^{(1)}X_-^{(2)}$ αντισυμμετρική και ορθογώνια στην Ψ_{10}:

$$\Psi_{00} = aX_-^{(1)}X_+^{(2)} + bX_+^{(1)}X_-^{(2)}$$

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{10}|\Psi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{&a\langle X_-^{(1)}X_+^{(2)}|X_-^{(1)}X_+^{(2)}\rangle\\ &+ a\langle X_+^{(1)}X_-^{(2)}|X_-^{(1)}X_+^{(2)}\rangle + b\langle X_-^{(1)}X_+^{(2)}|X_+^{(1)}X_-^{(2)}\rangle\\ &+b\langle X_+^{(1)}X_-^{(2)}|X_+^{(1)}X_-^{(2)}\rangle\Big\} = 0\end{aligned}$$

$$\Rightarrow a + 0 + 0 + b = 0 \Rightarrow a = -b$$

και

$$\begin{aligned}|a|^2 + |b|^2 = 1 &\Rightarrow 2|a|^2 = 1\\ \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}, &\quad b = -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

$$\Psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X_-^{(1)}X_+^{(2)} - X_+^{(1)}X_-^{(2)}\right) \quad S_z\Psi_{00} = 0 \quad \text{και} \quad \mathbf{S}^2\Psi_{00} = 0$$