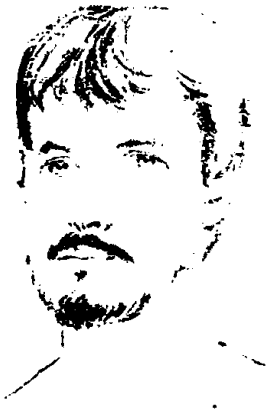
ΣΠΥΡΟΣ Ν. ΕΥΑΓΓΕΛΟΥ

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ 2001

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
026000089041



Ο Σπύρος Ν. Ευαγγέλου απέκτησε το διδακτορικό D. Phil. το 1980 από το Τμήμα Θεωρητικής Φυσικής του Πανεπιστημίου Οξφόρδης, Αγγλίας. Εργάσθηκε στο Imperial College του Λονδίνου, στην Οξφόρδη, το Institut Laue-Langevin στην Grenoble-Γαλλίας και στο Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας στην Ελλάδα. Έχει συνεισφέρει περίπου 80 επιστημονικές εργασίες σε διεθνή περιοδικά πρώτης κατηγορίας στον τομέα της κβαντικής μεσοσκοπικής φυσικής και του χάους και έχει συγγράψει δύο διδακτικά βιβλία στατιστικής φυσικής στα Ελληνικά.

28'2002 α.π.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝ
Βιβλιοθήκη
ΦΥΣΙΚΟ ΤΜ

530.12
ΕΥΑ
2001

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

21/4/03

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

Σπύρου Ν. Ευαγγέλου

Καθηγητή Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

Ιωάννινα-2001

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στην μικρή Ιφιγένεια

με την χαραυγή της χιλιετίας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Πρόλογος

Έναν αιώνα πριν ο Planck στην προσπάθειά του να ερμηνεύσει το φαινόμενο της ακτινοβολίας μέλανος σώματος εισήγαγε την έννοια των κβάντα. Η θεωρία του Planck αναγκαστικά έγινε με κάπως 'περίεργο τρόπο' αφού μέχρι τότε η επιρροή της κλασσικής φυσικής ήταν πολύ ισχυρή. Σήμερα, είναι δύσκολο να φαντασθούμε την εξέλιξη που θα είχε η φυσική αν ο Planck δεν είχε οδηγηθεί στον κβαντικό νόμο της ακτινοβολίας. Η ανακάλυψη της κβαντικής θα ήταν σίγουρα μια πολύ πιο δύσκολη υπόθεση. Ευτυχώς όμως, στην πορεία της επιστήμης σπουδαίοι άνθρωποι όπως οι Planck, Einstein, Bohr, Heisenberg, Dirac, ... μπόρεσαν να αγνοήσουν την 'πεπατημένη' χαράσσοντας πορεία σε εντελώς διαφορετική βάση, ακόμη και ασυνεπή σε ορισμένα σημεία με την μέχρι τότε κλασσική θεωρία, αφού μόνον αυτοί είχαν διαίσθηση του ορθού και του λανθασμένου.

Ένα πεδίο όπου τα κβαντικά φαινόμενα κυριαρχούν είναι οι ηλεκτρονικές διατάξεις που γίνονται όλο και πιό μικρές. Αναμένεται πως σε λιγότερο από μια εικοσαετία το μέγεθός τους θα φθάσει το ατομικό επίπεδο και η κβαντική σταθερά του Planck θα διαδραματίζει πλέον τον κύριο ρόλο. Το πεδίο αυτό, γνωστό και με το όνομα *μεσοσκοπική φυσική* (ανάμεσα από μακροσκοπική και μικροσκοπική), ανοίγει νέους ορίζοντες στην τεχνολογία του μέλλοντος. Οι νέες τεχνικές επεξεργασίας και η δυνατότητα επίτευξης πολύ χαμηλών θερμοκρασιών (mK) έδωσαν την δυνατότητα ανάπτυξης μιας νέας κατηγορίας ημιαγώγιμων υλικών στο εργαστήριο. Η τεχνολογία των 'νανοδομών' έχει φθάσει σήμερα σε πολύ υψηλό επίπεδο με τεχνητές διατάξεις ρουτίνας μεγέθους μικρότερου των 100 nm. Αν αφήσουμε στην άκρη τα προφανή πλεονεκτήματα της αγοράς από την σμίκρυνση των μεσοσκοπικών διατάξεων μας παρέχεται επιπλέον η δυνατότητα να μελετήσουμε σε αυτές τα κβαντικά φαινόμενα όπου φαίνεται ξεκάθαρα η αποτυχία της κλασσικής φυσικής. Η κβαντική όμως δεν είναι φυσική αποκλειστικά του μικρόκοσμου όπως συνήθως εικάζεται αλλά εφαρμόζεται σε όλες τις κλίμακες μεγέθους, από την πυρηνική και ατομική φυσική μέχρι τους κλάδους της βιολογίας και της πληροφορικής.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στο ερώτημα πως πρέπει να παρουσιάζεται η κβαντική φυσική υπάρχουν δύο βασικές απαντήσεις, με πλεονεκτήματα αλλά και μειονεκτήματα που αποδίδονται στην καθεμία. Η κυρίαρχη άποψη είναι πως κάποιος πρέπει να έλθει κατευθείαν σε επαφή με τις κβαντικές έννοιες και τα θεμελιώδη κβαντικά αξιώματα, όπως τον ορισμό της κυματοσυνάρτησης Ψ, της πυκνότητας πιθανότητας $|\Psi|^2$, τους γραμμικούς τελεστές που αντιστοιχούν στα παρατηρήσιμα μεγέθη, την αρχή αβεβαιότητας, την υπέρθεση, τον δυϊσμό σωματίου-κύματος, το σπιν, κλπ. Εναλλακτικά μπορεί να ακολουθηθεί ένας πιό επαγωγικός τρόπος βασιζόμενος στις γνώσεις που έχει ήδη ο αναγνώστης από την κλασσική μηχανική, την γραμμική άλγεβρα, κλπ. Ο πρώτος βασίζεται στο πλεονέκτημα να αποκλείει σε κάθε περίπτωση την δυνατότητα του κλασσικού τρόπου σκέψης, αλλά είναι μάλλον απωθητικός στον αναγνώστη αφού τον εισάγει κατευθείαν στα δύσκολα. Ο δεύτερος είναι πιο ομαλός και ελκυστικός, αφού βασίζεται σε γνώσεις που ήδη έχουμε, εγκυμονεί όμως τον σοβαρό κίνδυνο υιοθέτησης κλασσικής αντιμετώπισης των κβαντικών φαινομένων. Στο βιβλίο αυτό προσπάθησα να ακολουθήσω μια ενδιάμεση πορεία, του λεγόμενου 'χρυσού μέσου', εκμεταλευόμενος τα πλεονεκτήματα και αποφεύγοντας 'κατά το δυνατόν' τα μειονεκτήματα του κάθε ενός από τους παραπάνω τρόπους. Αφενός να κάνω τον αναγνώστη *τελικά να απαρνηθεί εντελώς τον κλασσικό τρόπο σκέψης* ακολουθώντας παράλληλα έναν επαγωγικό τρόπο (από τα εύκολα στα πιό δύσκολα), χωρίς να τον ρίξω από την αρχή σε 'βαθιά νερά'. Προσπάθησα να τον εισάγω όσο γίνεται πιο ομαλά στους 'παράλογους' κβαντικούς κανόνες και τις κβαντικές τεχνικές με το να παρουσιάσω πρώτα τις αποτυχίες της κλασσικής περιγραφής ώστε να κεντρίσω το ενδιαφέρον του για την νέα θεωρία.

Το βιβλίο αυτό απευθύνεται σε πανεπιστημιακό (κυρίως προπτυχιακό) επίπεδο αλλά πιστεύω πως θα φανεί χρήσιμο και σε όποιον επιθυμεί να μάθει κβαντική φυσική για να βρίσκεται στην αιχμή των εξελίξεων της επιστήμης. Γι αυτό προσπάθησα να περιορίσω στο ελάχιστο τις προαπαιτούμενες γνώσεις, αν και κάποια στοιχεία γραμμικής άλγεβρας, κλασσικής μηχανικής, θεωρίας πιθανοτήτων, κλπ ίσως αποβούν χρήσιμα. Επιπλέον, για την κατανόηση του κειμένου παραθέτω μια πληθώρα παραδειγμάτων και *λυμένων ασκήσεων* με τις οποίες ενθαρρύνω τον αναγνώστη να ασχοληθεί. Εκτός όμως από την εισαγωγή στην κβαντική μεθοδολογία δεν παραβλέπω πολλά *σύγχρονα θέματα* γενικότερου ενδιαφέροντος, όπως είναι οι κβαντικοί υπολογιστές, το κβαντικό χάος, κλπ. που είναι δύσκολο να τα βρει κανείς ακόμη και στην αγγλόφωνη βιβλιογραφία!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Λέκτορα Δ. Κατσάνο για βοήθεια στα σχήματα και την σελιδοποίηση του κειμένου. Το εξώφυλλο υλοποιήθηκε από τους φοιτητές Λ. Τσιουρή, Θ. Παπαδόπουλο ενώ οφείλω πολλές ευχαριστίες στον φοιτητή Π. Παπαδόπουλο για κριτική ανάγνωση ορισμένων κεφαλαίων, τον Δρ. Γ. Κατωμέρη για σχόλια στο αρχικό στάδιο της συγγραφής και τους Έ. Μαριάνι, Α. Στρούκ, Σ. Παπάζογλου, Α. Τζαβέλλα για πολλές ενδιαφέρουσες συζητήσεις σε συναφή θέματα. Το βιβλίο αυτό δεν θα γίνονταν πραγματικότητα αν δεν υπήρχε θετική 'ανάδραση' από την τάξη φοιτητών του τρίτου έτους σπουδών του τμήματος φυσικής στο ακαδημαϊκό έτος 2000-1 αλλά και προηγούμενα έτη.

Αποτελεί ίσως κοινοτοπία αλλά στην αρχή ενός βιβλίου σχεδόν πάντα υπογραμμίζεται πως η ενασχόληση με αυτό θα αποδώσει αναμφισβήτητο όφελος, όχι μόνο για να 'περάσει' κάποιος τις εξετάσεις σε σχετικά πανεπιστημιακά μαθήματα. Η πλοήγηση στα βαθιά νερά της κβαντικής μπορεί να αποβεί ένα υπέροχο ταξίδι στην σύγχρονη φυσική, 'γεμάτο περιπέτειες, γεμάτο γνώσεις ...', σε μια εποχή που τουλάχιστον *οι φυσικοί χωρίς ἢ είναι σπάνιο είδος.*

Σπύρος Ν. Ευαγγέλου
Άνοιξη 2001

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή 1

1.1. Το αντικείμενο της κβαντικής φυσικής 3

1.2. Τα όρια της κλασσικής φυσικής 5

1.3. Τα κβάντα του Planck 6

1.4. Η παλιά κβαντική θεωρία-το άτομο του Bohr 10

1.5. Θεμελιώδεις κβαντικές έννοιες 14

1.6. Δυϊσμός κύματος-σωματίου 15

1.6.1. Κυματική φύση του φωτός-κβαντική συμβολή 16

1.6.2. Σωματιακή φύση του φωτός-το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο 19

1.6.3. Σχέση σωματίου-κύματος de Broglie 21

1.7. Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg 22

1.8. Ο κβαντικός εναγκαλισμός 25

ΑΣΚΗΣΕΙΣ 29

2. Η εξίσωση Schrödinger 33

2.1. Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger 36

2.2. Ένθετο στοιχείων στατιστικής 39

2.2.1. Μέση τιμή και διασπορά 39

2.2.2. Η Γκαουσσιανή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\alpha)$ 42

2.3. Κβαντικές μέσες τιμές και διακυμάνσεις 44

2.4. Το ελεύθερο σωμάτιο 57

ΑΣΚΗΣΕΙΣ 63

3. Τα μαθηματικά της κβαντικής 75

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

3.1. Διανυσματικοί χώροι 80
3.1.1. Ευκλείδιος διανυσματικός χώρος 81
3.1.2. Διανυσματικός χώρος συναρτήσεων 83
3.1.3. Διανυσματικός χώρος Hilbert 86
3.2. Τελεστές 90
3.2.1. Ερμιτειανοί τελεστές 93
3.2.2. Αναπαράσταση τελεστών με μήτρες 94
3.3. Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών-συνάρτηση δέλτα 102
3.4. Ανακεφαλαίωση 109
ΑΣΚΗΣΕΙΣ 115

4. Επιλύσιμα συστήματα 129

4.1. Συμμετρίες-αρχές διατήρησης 132
4.1.1. Εικόνα Schrödinger - εικόνα Heisenberg 137
4.1.2. Κατοπτρική συμμετρία-διατήρηση ισοτιμίας 139
4.2. Το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού 155
4.3. Φράγμα δυναμικού 159
4.4. Αρμονικός ταλαντωτής 164
4.4.1. Κλασσική λύση 165
4.4.2. Κβαντική λύση 165
4.4.3. Αλγεβρική λύση 171
4.5. Χρονική εξέλιξη σε σύστημα δύο καταστάσεων-φαινόμενο Ζήνωνα 183

5. Το άτομο του Υδρογόνου 187

5.1. Η τρισδιάστατη εξίσωση Schrodinger 187
5.1.1. Μέθοδος χωρισμού μεταβλητών 189
5.1.2. Σωμάτιο σε 'κουτί' 190
5.2. Κεντρικό δυναμικό και η θεωρία της στροφορμής 193
5.2.1. Στροφορμή 194
5.2.2. Κεντρικό δυναμικό $V(r)$ 197
5.2.3. Λύση της γωνιακής εξίσωσης ως προς ϕ 200
5.2.4. Λύση της γωνιακής εξίσωσης ως προς θ 200
5.2.5. Σφαιρικές αρμονικές $|\ell, m\rangle = Y_\ell^m$ 204

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

5.3. Η ακτινική εξίσωση 214
5.3.1. Δύο ελεύθερα σωμάτια στο κέντρο μάζας 215
5.3.2. Δύο αλληλεπιδρώντα σωμάτια στο κέντρο μάζας 216
5.3.3. Λύση της ακτινικής εξίσωσης 217
ΑΣΚΗΣΕΙΣ 222

6. Μαγνητικό πεδίο και σπιν 241

6.1. Το φαινόμενο Zeeman 245
6.2. Στάθμες Landau 247
6.3. Το κβαντικό φαινόμενο Hall (κβάντωση αντίστασης) 248
6.3.1. Το κλασσικό φαινόμενο Hall 248
6.3.2. Το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall 250
6.3.3. Το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall 251
6.4. Το φαινόμενο Aharonov-Bohm (κβάντωση μαγνητικής ροής) 254
6.5. Αναπαράσταση με μήτρες-διαγωνοποίηση σε διακριτό χώρο 263
6.5.1. Διακριτή περιγραφή 269
6.6. Σπιν 275
6.6.1. Αλγεβρική θεωρία του σπιν 277
6.6.2. Προβολές του σπιν 280
6.6.3. Ηλεκτρόνιο σε σταθερό και ομογενές μαγνητικό πεδίο- (Larmor) 286
ΑΣΚΗΣΕΙΣ 289

7. Πολλά σωμάτια – προσεγγιστικές μέθοδοι 293

7.1. Σύνθεση στροφορμών 294
7.1.1. Ιδιοτιμές του $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ 294
7.1.2. Ιδιοσυναρτήσεις του $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ 301
7.2. Πολλά (N) σωμάτια και η αρχή του Pauli 303
7.2.1. Μποζόνια και φερμιόνια 304
7.2.2. Η απαγορευτική αρχή του Pauli 306
7.3. Θεωρία διαταραχών 313
7.3.1. Μη εκφυλισμένη 313
7.3.2. Εκφυλισμένη 327
7.3.3. Χρονικά εξαρτημένη 329

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

8. Κβαντικοί υπολογιστές 337

8.1. Ένα εκπληκτικό πείραμα κβαντικής συμβολής 342

8.2. Τα βασικά στοιχεία του κβαντικού υπολογιστή 344

8.2.1. Qubit ή κβαντικό bit 344

8.2.2. Κβαντικοί καταγραφείς 345

8.2.3. Κβαντικές πύλες 346

8.3. Ο κβαντικός εναγκαλισμός 349

8.3.1. Εναγκαλισμένες καταστάσεις Bell 350

8.3.2. Πυκνή κωδικοποίηση 352

8.3.3. Κβαντική τηλεμεταφορά 354

8.4. Κβαντικοί αλγόριθμοι 357

8.4.1. Αλγόριθμος παραγοντοποίησης του Shor 357

8.4.2. Αλγόριθμος έρευνας βάσης δεδομένων του Grover 360

8.5. Υλοποίηση κβαντικών υπολογιστών-Διατάξεις qubit 363

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α 367

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β 369

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ 371

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ 373

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ε (Κβαντικό χάος) 375

Ε.1. Εισαγωγή 375

Ε.2. Κβαντικό χάος 376

Ε.3. Αναγνώριση του χάους στην κατανομή των ενεργειακών σταθμών 380

Ε.4. Κβαντικό και κρίσιμο χάος 382

Ε.5. Συζήτηση-συμπεράσματα 386

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 389

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

'όποιος δεν έχει υποστεί σοκ από την κβαντική θεωρία σημαίνει πως δεν την καταλαβαίνει'
N. Bohr

Σήμερα όλοι προσφεύγουν στην κβαντική μηχανική που θεωρείται η μητέρα-επιστήμη. Ακόμη και για να γράψουν μυθιστορήματα, όπως το *Timeline* του Crichton που στα όρια μεταξύ πραγματικότητας και φαντασίας ασχολείται με την κβαντική τηλεμεταφορά. Η ιστορία της κβαντικής είναι συνυφασμένη με τον 20° αιώνα. Γεννήθηκε ακριβώς το 1900 όταν ο Planck στην ακαδημία επιστημών του Βερολίνου ανακοίνωσε την θεωρία των κβάντα για να ερμηνεύσει πολλές συσσωρευμένες δυσκολίες στα πειραματικά δεδομένα της ακτινοβολίας των ατόμων και μορίων. Η κβαντική θεωρία στην σημερινή της μορφή τελειοποιείται το 1925 και θεωρείται πλέον ως η φυσική του μικρόκοσμου (μόρια, άτομα, σωμάτια, κλπ) που μεταπίπτει στην κλασσική φυσική στο όριο του μακρόκοσμου (που αντιλαμβανόμαστε με τις αισθήσεις μας). Θα πρέπει να αναφερθεί πως για τον αδαή παρουσιάζει πολλές δυσκολίες: *δεν είναι εκλαϊκεύσιμη*, αφού στον κόσμο του πολύ μικρού ισχύει μια αφηρημένη μαθηματική γλώσσα, *είναι πιθανοκρατική* όπως και η θεωρία του χάους αν και συχνά η κβαντική προβλέπει με μεγάλη ακρίβεια συνήθως μιλάει για το πιθανό εκεί όπου το πείραμα δίνει συγκεκριμένες απαντήσεις και τέλος, *συγκρούεται με την κοινή λογική*. Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα στο πείραμα των EPR όπου δύο δίδυμα σωμάτια σε μια *εναγκαλισμένη κβαντική κατάσταση* αν απομακρυνθούν πολύ μακριά το ένα από το άλλο, το ένα αισθάνεται ό,τι ακριβώς συμβαίνει στο άλλο.

Έχουν ειπωθεί διάφορα για την κβαντική. Ο Einstein είχε πει πως 'αν αυτή η θεωρία ισχύει ο κόσμος είναι τρελός' και συμπλήρωσε το πασίγνωστο 'δεν είναι δυνατόν ο θεός να παίζει ζάρια', προφανώς μη αποδεχόμενος τον πιθανοκρατικό της χαρακτήρα. Αν μη τι άλλο η επιστήμη αυτή σύμφωνα με τα λεγόμενα του Bohr, ενός

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

από τους θεμελιωτές της κβαντικής, σοκάρει. Σήμερα η κβαντική έχει προχωρήσει στο σημείο ώστε μπορούμε πλέον να μιλάμε και για *κβαντική τεχνολογία*. Νέες πρωτοποριακές ιδέες όπως η κβαντική κρυπτογραφία, η τηλεμεταφορά, κλπ. αρχίζουν σιγά-σιγά να υλοποιούνται στο εργαστήριο ενώ δρόμοι ανοίγονται στην πληροφορική με κβαντικούς υπολογιστές, που αν γίνουν πραγματικότητα θα έχουν δυνατότητες που ούτε καν μπορεί να φαντασθούμε σήμερα.

Στην κλασσική φυσική *η θεωρία του χάους* μας υπενθυμίζει πως παρά την αιτιοκρατία των κλασσικών φυσικών νόμων η χρονική εξέλιξη μπορεί να είναι πιθανοκρατική (δεν είναι προβλέψιμη παρά μόνο με στατιστική έννοια), με βασική υποκείμενη αιτία την ύπαρξη μη γραμμικότητας στις κλασσικές εξισώσεις. Στην κβαντική φυσική λογικά θα περιμέναμε ακόμη περισσότερο χάος αφού αυτή είναι ήδη μια πιθανοκρατική θεωρία. Στην εμφάνιση ενδιαφέροντος για *κβαντικό χάος* προηγήθηκε η βαθιά κατανόηση του κλασσικού χάους. Στην κβαντική δεν υπάρχει 'ακραία ευαισθησία στις αρχικές συνθήκες' όπως στην περίπτωση του κλασσικού χάους. Δεν μπορεί να υπάρχει, αφενός επειδή όπως θα δούμε οι κβαντικές εξισώσεις είναι γραμμικές και αφετέρου λόγω της κβαντικής αρχής της απροσδιοριστίας, ή αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg, που εκφράζει την αδυναμία ταυτόχρονης μέτρησης με ακρίβεια της θέσης και της ταχύτητας ενός σωματίου. Ο φασικός χώρος μιας κβαντικής κατάστασης δεν είναι πλέον σημειακός όπως στην κλασσική φυσική αλλά καλύπτει διαστάσεις της *κβαντικής σταθεράς του Planck h*. Επομένως αποκλείεται η δυνατότητα αρχικών συνθηκών που να διαφέρουν λίγο μεταξύ τους για να οδηγηθούμε στο χάος όπως στην κλασσική φυσική. Το κβαντικό χάος είναι τελείως διαφορετικό από το κλασσικό χάος και εμφανίζεται στην στατιστική των διακριτών (*κβαντισμένων*) ενεργειών των στάσιμων καταστάσεων που εκδηλώνεται με ιδιότητες όπως η άπωση των γειτονικών ενεργειακών σταθμών και η φασματική ακαμψία. Το κβαντικό φάσμα ενός χαοτικού συστήματος είναι συσχετισμένο με συγκεκριμένες στατιστικές ιδιότητες και τις κβαντισμένες ενέργειες άρρηκτα αλληλένδετες μεταξύ τους.

Στην χαραυγή του νέου αιώνα το βασικό ερώτημα για την ουσία της ανθρώπινης δύναμης πρέπει αναγκαστικά να λάβει υπ' όψιν την φοβερή εξέλιξη στην τεχνολογία των υπολογιστών. Πριν μια εικοσαετία θα μπορούσε να ειπωθεί πως η ανθρώπινη δύναμη έγκειται στην συνήθως καταστροφική πυρηνική ενέργεια. Σήμερα, μπορεί να ταυτισθεί με την *δυνατότητα γρήγορης και αποδοτικής μέτρησης*. Το 1900 μετράγαμε με τα δάκτυλα ή τον άβακα ενώ σήμερα, το 2000, όπου τα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ηλεκτρονικά κυκλώματα στους υπολογιστές συνεχώς μικραίνουν γίνεται εμφανής ο κβαντικός χαρακτήρας των φυσικών νόμων και ο κλασικός υπολογιστής μπορεί να αντικατασταθεί από έναν κβαντικό υπολογιστή. Αυτός θα είναι νέου τύπου υπολογιστής που θα βασίζεται στους *μοναδιαίους μετασχηματισμούς* της κβαντικής και στην κβαντική λογική που θα δούμε στην συνέχεια. Ενώ στην συμβατική σημερινή τεχνολογία τα κυκλώματα συνεχώς πλησιάζουν τον κβαντικό μικρόκοσμο οι κβαντικοί υπολογιστές ξεκινούν ακριβώς από τα άτομα, μόρια, ιόντα του μικρόκοσμου. Αν και είμαστε ακόμη μακριά από την υλοποίησή του επειδή ο κβαντικός χαρακτήρας είναι ιδιαίτερα ευαίσθητος ως συστατικό κυρίως του μικρόκοσμου μπορεί να λεχθεί πως ο κβαντικός υπολογιστής φαίνεται πλέον στον ορίζοντα. Δεν αποτελεί ουτοπία πως μια μέρα στα ράφια των πωλητών θα εμφανισθούν και κβαντικοί υπολογιστές. Όπως στις αρχές του εικοστού αιώνα κανένας δεν ανέμενε η κβαντική να αλλάξει άρδην το σκηνικό της καθιερωμένης κλασσικής φυσικής σήμερα, στην αφετηρία του 21^{ου} αιώνα, από μια εξωτική επιστήμη η κβαντική γίνεται η ελπίδα για την τεχνολογία του μέλλοντος.

1.1. Το αντικείμενο της κβαντικής φυσικής

Η κλασσική φυσική με τις *εξισώσεις του Newton* ερμηνεύει τις κινήσεις των υλικών σωμάτων του μακρόκοσμου που τα χαρακτηριστικά τους μήκη είναι πολύ μεγαλύτερα του μεγέθους του ατόμου. Η κβαντική φυσική αφορά κυρίως μεγέθη του μικρόκοσμου, της τάξης του νανόμετρου[1] $1nm = 10^{-9}m$ δισεκατομμυριοστό του μέτρου ή ακόμη μικρότερα, όπου ερμηνεύεται με επιτυχία η δομή και η συμπεριφορά των ατόμων και μορίων με την *κβαντική εξίσωση του Schrödinger*. Επομένως, για την κατανόηση της φύσης των ατόμων, την δομή-ιδιότητες των μορίων, του φωτός (π.χ. των lasers) και των πυρηνικών ή σωματιακών φαινομένων απαιτείται η κβαντική θεωρία, που στο κλασσικό όριο του μακρόκοσμου δίνει αποτελέσματα παρόμοια με αυτά της κλασσικής φυσικής. Η κβαντική όμως είναι κάτι πολύ παραπάνω από μια απλή θεωρία της φυσικής αφού δεν περιορίζεται μόνο στην κατανόηση των ηλεκτρονίων, ατόμων και μορίων. Εκτός από τον μικρόκοσμο μπορεί ουσιαστικά να περιγράψει όλες τις κλίμακες μεγέθους, από την ερμηνεία του σύμπαντος ως συνόλου μέχρι και πειράματα για την ανθρώπινη συνείδηση. Είναι μια ευρύτατα

[1] $1\mathring{A} = 0.1nm = 10^{-10}m$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αποδεκτή θεωρία παρά τα εννοιολογικά προβλήματα που σχετίζονται με αυτήν και σήμερα δικαιολογημένα θεωρείται ως η σύγχρονη φυσική για το σύμπαν. Η δομή της ύλης στο ατομικό και μοριακό επίπεδο είναι αποκλειστικά κβαντική και αυτό χρησιμοποιείται για την επινόηση νέων υλικών με εφαρμογές στην μικροηλεκτρονική, τις οπτικές επικοινωνίες, κλπ[2]. Τα βασικότερα εργαλεία της σημερινής τεχνολογίας όπως το laser, το transistor, οι υπεραγώγιμες διατάξεις SQUID, κλπ παρά το γεγονός ότι δεν είναι μικροσκοπικά στην θεμελίωσή τους είναι κβαντικής φύσης. Οι εφαρμογές της κβαντικής επεκτείνονται και σε άλλες επιστήμες όπως η πληροφορική και η μοριακή βιολογία.

Η βάση όλων των επιστημών είναι η παρατήρηση και το πείραμα και μόνον έτσι μια θεωρία επιβεβαιώνεται ή διαψεύδεται ενώ δείχνεται η σωστή κατεύθυνση στην αναζήτηση μιας νέας θεωρίας όταν η παλιά παύει να ισχύει. Η κλασσική μηχανική του Newton θεμελιώνεται τον 17ο αιώνα με τον νόμο της κίνησης $\vec{F} = m\,\vec{a}$ για σωμάτιο μάζας m που κινείται λόγω δύναμης $\vec{F}$ με επιτάχυνση $\vec{a}$ και τον νόμο της βαρύτητας $F = G\, m_1 m_2 / r^2$ που δίνει το μέτρο F της δύναμης δύο σωματίων με μάζες m_1, m_2 σε απόσταση r μεταξύ τους όπου G η σταθερά της βαρύτητας. Τον 19ο αιώνα ο Maxwell ερμηνεύει την διάδοση των ηλεκτρομαγνητικών (ΗΜ) κυμάτων που κινούνται με την ταχύτητα του φωτός c. Το φως είναι ένα ΗΜ κύμα με την μόνη διαφορά πως το μήκος κύματός του λ είναι πολύ μικρότερο από άλλα κύματα, π.χ. τα ραδιοκύματα. Με τις κλασσικές θεωρίες της *μηχανικής* και του *ηλεκτρομαγνητισμού* διαμορφώνεται η άποψη πως το σύμπαν διέπεται από απολύτως αιτιοκρατικούς νόμους όπου από παρόμοιες αιτίες παράγονται τα ίδια ακριβώς αποτελέσματα. Αυτός είναι ο περίφημος *ντετερμινισμός του Laplace*. Στα πλαίσια αυτά η επίλυση των εξισώσεων για όλα τα άτομα που αποτελούν το σύμπαν θα αρκούσε για να γνωρίζουμε τα πάντα, με όση ακρίβεια το επιθυμούμε, για κάθε μελλοντική ή προγενέστερη χρονική στιγμή. Όμως σήμερα είναι γνωστό πως αυτό δεν ισχύει. Ακόμη και αν ήταν εφικτή η επίλυση της πληθώρας των κλασσικών εξισώσεων ο απολύτως ωρολογιακός κλασσικός κόσμος του Laplace δεν υπάρχει.

[2] Το βραβείο Nobel φυσικής το 2000 έχει απονεμηθεί για τέτοιες κβαντικές μικροκατασκευές (διατάξεις) στην περιοχή της *μεσοσκοπικής φυσικής* (ούτε μακροσκοπική ούτε μικροσκοπική).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ένας από τους λόγους είναι η πολύπλοκη, μη προβλέψιμη χρονική εξέλιξη κλασσικά χαοτικών συστημάτων, όπου συνήθως μικρά λάθη στις αρχικές συνθήκες οδηγούν σε υπερβολικές ανακρίβειες στους επόμενους χρόνους και ερμηνεύονται μόνο με πιθανότητες.

Η κβαντική περιγραφή εισάγει αδυναμία πρόβλεψης διαφορετικού τύπου από το χάος της κλασσικής φυσικής. Το όνομα της κβαντικής οφείλεται στην παρουσία ποσοτήτων που λαμβάνουν διακριτές τιμές, γνωστές ως *κβάντα*, π.χ. όπως οι ενέργειες ενός κβαντικού σωματίου. Επιπλέον, τα κβαντικά φαινόμενα δεν παρατηρούνται κατευθείαν με τις αισθήσεις μας αλλά συμπεραίνονται έμμεσα. Στην κβαντική τα σωμάτια *δεν έχουν καθορισμένες ιδιότητες* μέχρι να μετρηθούν με κάποιο τρόπο. *Πριν την μέτρηση* ένα κβαντικό σωμάτιο μπορεί να έχει παρουσία *ταυτοχρόνως* σε περισσότερα του ενός μέρη, γεγονός που αντιβαίνει την κοινή (κλασσική) λογική. *Μετά την μέτρηση* ξαφνικά αποκτά συγκεκριμένη παρουσία ενώ οι άλλες δυνατότητες που υπήρχαν πριν παύουν να υπάρχουν[3]. Η αξιωματική θεμελίωση της κβαντικής καθιερώνει την πιθανοκρατική περιγραφή του μικρόκοσμου (ατόμων, μορίων, κλπ.) που αποτελεί το βασικό αντικείμενο της κβαντικής.

1.2. Τα όρια της κλασσικής φυσικής

Στο τέλος του 19ου αιώνα πολλά πειραματικά αποτελέσματα, κυρίως σε μετρήσεις φωτός από υλικά, ήταν αδύνατον να κατανοηθούν με τις κλασσικές θεωρίες της μηχανικής του Newton και του ηλεκτρομαγνητισμού του Maxwell. Η κρίση της κλασσικής φυσικής διαπιστώθηκε κυρίως σε πειράματα: **(i)** των ιδιοτήτων της ακτινοβολίας φωτός από τα άτομα-μόρια, **(ii)** την θερμική ακτινοβολία μέλανος σώματος και **(iii)** το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Η αδήριτη ανάγκη να ερμηνευθούν αυτά τα πειράματα που φανέρωναν τις αδυναμίες της κλασσικής φυσικής οδήγησε στις αρχές του 20ου αιώνα στην κβαντική θεωρία. Το ενδιαφέρον επικεντρώθηκε αρχικά στο φως που αποτελεί μία από τις κυριότερες πηγές πληροφορίας για τον φυσικό κόσμο που μας περιβάλλει. Η απορρόφηση ή η εκπομπή φωτός από ένα υλικό (π.χ. το χρώμα του) εξαρτάται από την μοριακή και ατομική του δομή του χημικού αντίστοιχου στοιχείου από το οποίο αποτελείται και σχετίζεται με την αύξηση ή

---

[3]Θυμίζει το παράδειγμα της ρίψης ενός νομίσματος. Πριν, τα δύο ενδεχόμενα Κ ή Γ είναι εξίσου πιθανά (το καθένα με πιθανότητες ½) . Μετά την ρίψη έχουμε το ένα ή το άλλο αποτέλεσμα με βεβαιότητα (για αυτό που θα προκύψει πιθανότητα 1 και για το άλλο πιθανότητα 0).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μείωση της εσωτερικής του ενέργειας, αντίστοιχα. Ένα αέριο που αποτελείται από κάποιο στοιχείο εκπέμπει φως σε ορισμένες μόνο φασματικές γραμμές. Αυτές κωδικοποιούνται με χαρακτηριστικές διακριτές τιμές του μήκους κύματος λ, που διαφέρουν από στοιχείο σε στοιχείο ανάλογα με την ατομική και μοριακή δομή του. Αυτά είναι τα *γραμμικά φάσματα* των ατόμων. Ένα υλικό, αντίθετα, μπορεί να εκπέμπει φως σε μια συνεχή περιοχή μηκών κύματος λ ανεξαρτήτως από την χημική του σύσταση, που όμως μεταβάλλεται με την θερμοκρασία του υλικού T. Στην ιδανική περίπτωση το θερμικό φάσμα αυτού του τύπου είναι γνωστό ως *ακτινοβολία μέλανος σώματος*.

Η βασικότερη όμως αδυναμία της κλασσικής φυσικής ήταν να ερμηνεύσει την ίδια την *σταθερότητα της ύλης* αφού σύμφωνα με την θεωρία του Maxwell τα κινούμενα φορτία εκπέμπουν ενέργεια με την μορφή ΗΜ κυμάτων. Μια δραματική περίπτωση είναι αυτή του αρνητικά φορτισμένου ηλεκτρονίου στην ατομική δομή που λόγω της ελκτικής δύναμης του θετικά φορτισμένου πυρήνα επιταχύνεται, χάνει ενέργεια λόγω της εκπομπής φωτός με συχνότητα αυτήν της περιστροφής του και λόγω της απώλειας ενέργειας έπρεπε τελικά να καταρρέει με σπειροειδή κίνηση στον πυρήνα, σε χρόνους της τάξης των $10^{-10}\ s$. Επομένως, η παρουσία των ατόμων στην κλασσική φυσική είναι ανέφικτη για χρόνους μεγαλύτερους των $10^{-10} s$, γεγονός που βεβαίως δεν ισχύει. Τα ηλεκτρόνια παρά την πρόβλεψη της ηλεκτροδυναμικής θεωρίας διατηρούν την κινητική τους ενέργεια και δεν πέφτουν στον πυρήνα. Επιπλέον, επειδή η συχνότητα αυξάνει καθώς η ακτίνα μιας τροχιάς μειώνεται το ηλεκτρόνιο θα έπρεπε να εκπέμπει σε μια συνεχή περιοχή συχνοτήτων πάνω από την αρχική συχνότητα. Όμως, τα γραμμικά φάσματα του φωτός στα άτομα δίνουν συγκεκριμένες φασματικές γραμμές και είναι ανεξήγητα με την κλασσική θεωρία. Η ακτινοβολία του μέλανος σώματος εξηγήθηκε μόνο με την κβαντική από τον Planck.

1.3. Τα κβάντα του Planck

Στην χαραυγή του 20ου αιώνα η κβαντική μπόρεσε να αντεπεξέλθει με επιτυχία στην κρίση της κλασσικής φυσικής με την εισαγωγή των *κβάντα* από τον Planck το 1900. Ο Planck θεώρησε πως η εκπομπή και η απορρόφηση της ΗΜ ακτινοβολίας γίνεται με διακριτές μονάδες ενέργειας. Αυτά είναι τα εξαιρετικά μικρά κβάντα ενέργειας με μέγεθος που προσδιορίζεται από την *σταθερά του Planck* $h = 6.63 \times 10^{-34}\ Js$ που όταν πολλαπλασιασθεί με την συχνότητα ν σε μονάδες s^{-1}

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

δίνει ένα διακριτό ποσό ενέργειας (το κβάντο ενέργειας) $E = h\nu$ σε μονάδες J. Με την πιο συνηθισμένη μορφή της σταθεράς του Planck $\hbar = h/2\pi$ και την κυκλική συχνότητα $\omega = 2\pi\nu$ η κβαντισμένη ενέργεια παίρνει την μορφή $E = \hbar\omega$. Στον μακρόκοσμο η κβαντική σταθερά $\hbar$ μπορεί να θεωρηθεί ως αμελητέα και η κβαντική φυσική δεν χρειάζεται αφού αρκεί η κλασσική φυσική. Η μετάβαση από την κβαντική στην κλασσική είναι γνωστή ως *αρχή της αντιστοιχίας*. Επιπλέον, το οιονεί ή 'σχεδόν' κλασσικό όριο $\hbar \to 0$ είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον για την μελέτη χαοτικών φαινομένων στο όριο μεταξύ της κβαντικής και της κλασσικής φυσικής.

Η βασική ιδέα του Planck ήταν πως η εκπομπή και απορρόφηση φωτός κυκλικής συχνότητας ω γίνεται με ακέραια πολλαπλάσια του ενεργειακού κβάντου $E = \hbar\omega$. Η αφορμή ήταν το πρόβλημα της εποχής εκείνης για την θερμική ακτινοβολία που εκπέμπει υλικό σώμα σε θερμοκρασία T. Η ακτινοβολία αυτή σε αντίθεση με τα ατομικά φάσματα καλύπτει όλα τα μήκη κύματος λ που αντιστοιχούν σε όλες τις κυκλικές συχνότητες $\omega = 2\pi\nu = 2\pi c/\lambda$, με c την ταχύτητα του φωτός, ενώ η ακτινοβολούμενη ενέργεια περιγράφεται από την φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας $u(\omega)$ ανά μονάδα όγκου και ανά μονάδα συχνότητας, με $u(\omega)d\omega$ το ποσό ενέργειας της ακτινοβολίας στο στοιχειώδες διάστημα συχνοτήτων $(\omega, \omega + d\omega)$. Στην περίπτωση ολικής απορρόφησης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας η θερμική εκπομπή είναι η *ακτινοβολία μέλανος σώματος*, που δεν εξαρτάται πλέον από το υλικό αλλά μόνο από την θερμοκρασία T. Μέλαν σώμα μπορεί να θεωρηθεί μια μικρή τρύπα σε κοιλότητα που δρα ως τέλειος απορροφητής της εισερχόμενης ακτινοβολίας με σχεδόν μηδαμινή πιθανότητα διαφυγής της.

Το κλασσικό αποτέλεσμα για την μέση τιμή της ενέργειας φωτός συχνότητας ω από τον νόμο ισοκατανομής της ενέργειας της κλασσικής στατιστικής φυσικής είναι $\langle E(\omega)\rangle = k_B T$, όπου k_B η σταθερά του Boltzmann και T η θερμοκρασία του σώματος. Αν πολλαπλασιασθεί με την πυκνότητα καταστάσεων[4] $\rho(\omega) = \omega^2/\pi^2 c^3$, όπου η $\rho(\omega)d\omega$ δίνει το αριθμό των στάσιμων κυμάτων ανά μονάδα όγκου στο στοιχειώδες διάστημα συχνοτήτων $(\omega, \omega + d\omega)$ και c την ταχύτητα του φωτός, προκύπτει η κλασσική φασματική κατανομή $u_{\kappa\lambda}(\omega)$, γνωστή ως *κλασσικός νόμος ακτινοβολίας των Rayleigh-Jeans*

[4] Για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων $\rho(\omega)$ δείτε π.χ.: *'Στατιστική Φυσική'* F. Mandl (1971) ή *'Στατιστική Φυσική ΙΙ'* Σ.Ν. Ευαγγέλου (1994).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$u_{\kappa\lambda}(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}(k_B T) \ . \tag{1.1}$$

Από την κλασσική εξ. (1.1) ο νόμος των Rayleigh-Jeans που φαίνεται στο Σχ. 1.1 με την εκπεμπόμενη ακτινοβολία $\propto \omega^2$ να αυξάνει στις μεγάλες συχνότητες, σε αντίθεση με το πείραμα. Αυτή είναι η γνωστή *καταστροφή (αστοχία) στο υπεριώδες* αφού οδηγεί σε άπειρη εκπεμπόμενη ολική ενέργεια $E_{o\lambda} = \int_0^\infty d\omega\, u_{\kappa\lambda}(\omega) = \infty$.

Επομένως, η κλασσική θεωρία αδυνατεί να καθιερώσει θερμοδυναμική ισορροπία μεταξύ του θερμαινόμενου σώματος και της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.

Το κβαντικό αποτέλεσμα οφείλεται στον Planck[5] που θεώρησε φως με συχνότητες ω περιορισμένες σε αυτές των στάσιμων κυμάτων αλλά υπέθεσε ότι οι αλλαγές στην ενέργεια γίνονται με άπειρες διακριτές τιμές $E_n = n\hbar\omega$, $n = 0,1,2,\cdots$, για σταθερή τιμή της κυκλικής συχνότητας του φωτός ω. Οι αντίστοιχες πιθανότητες να ληφθεί η κατάσταση ενέργειας E_n δίνονται από τους στατιστικούς παράγοντες Boltzmann $p_n = e^{-E_n/k_B T}$. Ένας απλός υπολογισμός της μέσης ενέργειας[6] $\langle E(\omega)\rangle$ φωτός κυκλικής συχνότητας ω δίνει στην κβαντική

$$\langle E(\omega)\rangle = \frac{\sum_{n=0,1,2,\cdots} E_n p_n}{\sum_{n=0,1,2,\cdots} p_n} = \frac{\sum_{n=0,1,2,\cdots} n\hbar\omega\, e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}}{\sum_{n=0,1,2,\cdots} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}}$$

$$= \hbar\omega \frac{\sum_{n=0,1,2,\cdots} n a^n}{\sum_{n=0,1,2,\cdots} a^n} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \ . \tag{1.2}$$

---

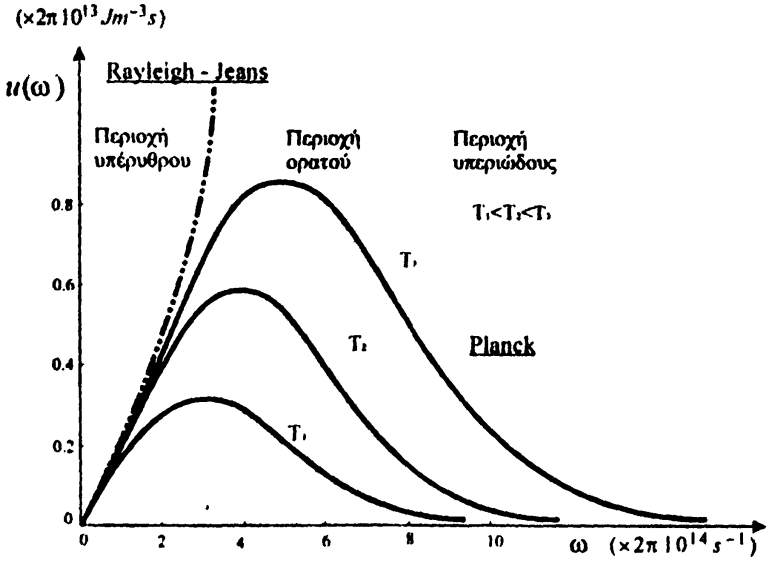
[5] Ο Planck οδηγήθηκε στην έννοια των κβάντα από την ανάγκη να ερμηνεύσει τα πειραματικά δεδομένα της ακτινοβολίας μέλανος σώματος. Αυτό πρέπει να αποτελέσει ένα μάθημα για τον αναγνώστη, πως από όχι τόσο ξεκάθαρες πράξεις σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα μπορεί να προκύψει μιά νέα *γενική ιδέα*. Οι υπολογισμοί του Planck επέτρεψαν τον πρώτο ικανοποιητικό υπολογισμό της κβαντικής σταθεράς h που σήμερα εκτιμάται ακριβέστερα, π.χ. με το κβαντικό φαινόμενο Hall (Κεφ. 6.3). Ο Einstein ήταν από τους πρώτους που εκτίμησε τα συμπεράσματα του Planck και διατύπωσε τις αρχές της νέας θεωρίας.

[6] Η μέση τιμή μιας διακριτής τυχαίας μεταβλητής x που λαμβάνει τιμές x_n με αντίστοιχες πιθανότητες p_n ορίζεται στο Κεφ. 2.2. ως $\langle x\rangle = \frac{\sum_n x_n p_n}{\sum_n p_n}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Για να ληφθεί αυτό το αποτέλεσμα έγινε η αντικατάσταση $a = e^{-\hbar\omega/k_B T}$ ενώ στον παρονομαστή χρησιμοποιήθηκε το πολύ γνωστό άθροισμα της γεωμετρικής σειράς $\sum_{n=0,1,2,\cdots} a^n = 1 + a + a^2 + a^3 + \ldots = 1/(1-a)$, $|a| < 1$, όπως και η σειρά που προκύπτει από την παραγώγιση και των δύο μελών αυτής ως προς a, ώστε $1 + 2a + 3a^2 + 4a^3 + \ldots = 1/(1-a)^2$. Αν την πολλαπλασιάσουμε επί a λαμβάνουμε το άθροισμα $\sum_{n=0,1,2,\cdots} na^n = a + 2a^2 + 3a^3 + 4a^4 + \ldots = a/(1-a)^2$, $|a| < 1$ που υπάρχει στον αριθμητή. Η φασματική πυκνότητα εξάγεται αν η μέση ενέργεια $\langle E(\omega) \rangle$ που μόλις υπολογίσαμε στην εξ. (1.2) πολλαπλασιασθεί πάλι με την κλασσική πυκνότητα στάσιμων κυμάτων $\rho(\omega)$. Αυτό δίνει τον *κβαντικό νόμο της ακτινοβολίας του Planck*

$$u_{\kappa\beta}(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}\right) \tag{1.3}$$



Σχ. 1.1. *Η κλασσική φασματική πυκνότητα ακτινοβολίας $u(\omega)$ (Rayleigh - Jeans) από την* (1.1) *και η κβαντική (Planck) από την* (1.3) *για την εκπομπή φωτός από μέλαν σώμα θερμοκρασίας T. Το κβαντικό αποτέλεσμα διορθώνει τις ατέλειες του κλασσικού στις μεγάλες συχνότητες ω σε συμφωνία με το πείραμα. Η μετατόπιση της καμπύλης δεξιά με αύξηση της θερμοκρασίας T είναι γνωστή και ως ο νόμος του Wien* ($\omega_{\max} \propto T$).

που αντικαθιστά την εξ. (1.1). Ο όρος στην παρένθεση περιέχει τώρα την κυκλική συχνότητα ω και είναι υπεύθυνος για τις κβαντικές καμπύλες του Σχ. 1.1 που είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Επιπλέον δεν αντιμετωπίζουμε την

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

καταστροφή στο υπεριώδες αφού ο τύπος (1.3) δίνει πεπερασμένη ολική ενέργεια $E_{o\lambda} = \int_0^\infty d\omega\, u_{\kappa\beta}(\omega) = \frac{\pi^2 k_B^4}{15c^3\hbar^3}T^4$, που είναι ο νόμος των Stefan-Boltzmann.

Στο Σχ. 1.1 φαίνονται ο κλασσικός τύπος (1.1) και ο κβαντικός τύπος (1.3) σε διαφορετικές θερμοκρασίες T για την θερμική ακτινοβολία μέλανος σώματος. Η κβαντική καμπύλη είναι ανεξάρτητη του είδους της κοιλότητας και εξαρτάται μόνο από την θερμοκρασία T ενώ για μικρές κυκλικές συχνότητες ω συμπίπτει με τον κλασσικό νόμο της (1.1). Το κλασσικό αποτέλεσμα μπορεί να ληφθεί από τον κβαντικό τύπο είτε στο όριο μικρής σταθεράς $\hbar \to 0$, είτε των πολύ υψηλών θερμοκρασιών $T \to \infty$. Και στις δύο περιπτώσεις η κλασσική περιγραφή είναι ικανοποιητική αφού $\hbar\omega/k_BT << 1$ και από το ανάπτυγμα του εκθετικού $e^{\hbar\omega/k_BT} \approx 1 + \hbar\omega/k_BT$ στον παρονομαστή της (1.3) είναι εύκολο να δειχθεί πως το κβαντικό αποτέλεσμα (1.3) μεταπίπτει στο κλασσικό (1.1). Στον κβαντικό νόμο παρατηρούμε πως για μεγάλες συχνότητες ω η καμπύλη τείνει στο μηδέν, αντί του άπειρου της κλασσικής περίπτωσης και το εμβαδόν που ορίζεται από την καμπύλη είναι πεπερασμένο. Το γεγονός αυτό διορθώνει την καταστροφή στο υπεριώδες, με το πρόβλημα της άπειρης ολικής ενέργειας στο κλασσικό αποτέλεσμα από την ολοκλήρωση της $u_{\kappa\lambda}(\omega)$. Με την κβαντική φασματική πυκνότητα $u_{\kappa\lambda}(\omega)$ για θερμοκρασία $T = 2.735\, Kelvin$ ερμηνεύεται η διάχυτη κοσμική ακτινοβολία υποβάθρου που παρατηρείται σήμερα και αποτελεί ανάμνηση της μεγάλης έκρηξης (big bang) με την οποία δημιουργήθηκε το σύμπαν, πριν δεκαπέντε περίπου δισεκατομμύρια χρόνια.

1.4. Η παλιά κβαντική θεωρία-το άτομο του Bohr

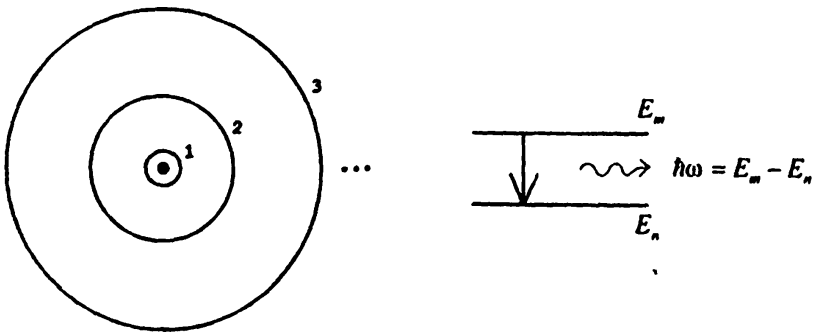
Η παλιά κβαντική θεωρία που άρχισε με την εισαγωγή των κβάντα από τον Planck κορυφώνεται με το άτομο του Bohr το 1913. Όπως είδαμε η υπόθεση του Planck ερμηνεύει την ακτινοβολία μέλανος σώματος αλλά σε συνδυασμό με το μοντέλο του ατόμου του Bohr, που είναι η πρώτη κβαντική λύση, εξηγεί και τα *γραμμικά φάσματα των ατόμων*. Ο Bohr διαπίστωσε πως η αστάθεια τῶν ατόμων στην κλασσική φυσική παύει να υπάρχει από την στιγμή που ένα ηλεκτρόνιο σε κυκλική τροχιά γύρω από τον πυρήνα μπορεί να εκπέμπει σε διακριτές μονάδες ενέργειας, αντί με τον συνεχή κλασσικό τρόπο. Ο Bohr απαίτησε το ηλεκτρόνιο να μην

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

καταρρέει εισάγοντας όμως μια λογική ασυνέπεια. Στην εμπειρική εικόνα του Bohr τα ηλεκτρόνια κινούνται γύρω από τον πυρήνα, όπως οι πλανήτες γύρω από τον ήλιο, σε επιτρεπτές τροχιές που καθορίζονται από συγκεκριμένους κανόνες. Το άτομο του Bohr μπορεί να ερμηνεύσει την απλούστερη περίπτωση του βασικού προβλήματος του ατόμου του υδρογόνου όπου ένα μόνο ηλεκτρόνιο κινείται γύρω από τον πυρήνα. Η αναμφίβολη πλήρης εύρεση των ενεργειακών σταθμών και των αντίστοιχων φασμάτων εκπομπής για τα άτομα έπρεπε να αναμένει την πλήρη κβαντική θεωρία που αναπτύχθηκε μετά το 1925.

Η θεωρία του ατόμου του Bohr (1913) βασίζεται στις εξής υποθέσεις:

- Το άτομο έχει ένα κβαντισμένο (διακριτό) σύνολο από *ενεργειακές καταστάσεις*. Οι στάσιμες καταστάσεις του ατόμου αντιστοιχούν σε ορισμένη ενέργεια η κάθε μία και όταν το άτομο βρίσκεται σε αυτήν δεν ακτινοβολεί κατά την επιταχυνόμενη κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα.
- Εκπομπή ακτινοβολίας γίνεται μόνο κατά την μετάβαση του ατόμου από μια ανώτερη (E_m) σε μια κατώτερη (E_n) ενεργειακή στάθμη. Η συχνότητα ω του εκπεμπόμενου κβάντου ενέργειας ορίζεται από την σχέση $\hbar\omega = E_m - E_n$. Επίσης, το άτομο μπορεί να απορροφήσει κατάλληλη ενέργεια μεταβαίνοντας σε μια ανώτερη τροχιά.
- Επιτρέπονται μόνο οι κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα για τις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου ℓ είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς του Planck, ώστε $\ell = n\hbar = 0, \hbar, 2\hbar, 3\hbar, \cdots$



Σχ. 1.2. *Το άτομο του Bohr με το ηλεκτρόνιο σε τροχιές 1, 2, 3, ··· γύρω από τον πυρήνα. Δεξιά φαίνεται η* ***εκπομπή φωτονίου*** *κυκλικής συχνότητας ω κατά την μετάβαση του ηλεκτρονίου $E_m \to E_n$. Η* ***απορρόφηση φωτονίου*** *ίδιας συχνότητας ω δίνει την μετάβαση του ηλεκτρονίου $E_n \to E_m$.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Από την συνθήκη για την στροφορμή υπολογίζεται η ταχύτητα

$$\ell = m\upsilon r = n\hbar$$
$$\Rightarrow \upsilon = \frac{n\hbar}{mr} \quad , \tag{1.4}$$

και από την κυκλική κίνηση λόγω της δύναμης Coulomb πυρήνα-ηλεκτρονίου το τετράγωνο της ταχύτητας είναι

$$m\frac{\upsilon^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$
$$\Rightarrow \upsilon^2 = \frac{e^2}{mr} \quad , \tag{1.5}$$

ώστε από τον συνδυασμό των αποτελεσμάτων της εξ. (1.4), (1.5) ή ταχύτητα του ηλεκτρονίου στην n-οστή τροχιά του Bohr έχει την κβαντισμένη μορφή

$$\upsilon_n = \frac{e^2}{\hbar}\frac{1}{n}, \quad n = 1, 2, \cdots. \tag{1.6}$$

με αντίστοιχη ακτίνα

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2, \quad n = 1, 2, \cdots \tag{1.7}$$

και ενέργεια (κινητική και δυναμική)

$$E = \frac{m\upsilon^2}{2} - \frac{e^2}{r}$$
$$= \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} \, . \tag{1.8}$$

Αν η ακτίνα αντικατασταθεί από την εξ. (1.7) προκύπτει το θεμελιώδες αποτέλεσμα για τις *κβαντισμένες τιμές ενέργειας* του ατόμου του Bohr

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \quad , \tag{1.9}$$

περιέργως όπως θα δούμε σε συμφωνία με την πλήρη κβαντική λύση του Κεφ. 5 για τις ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου. Οι φασματικές γραμμές στα γραμμικά φάσματα εκπομπής των ατόμων προέρχονται από μεταβάσεις στις διακριτές (κβαντισμένες) στάθμες E_n.

Αριθμητικές τιμές: Τα παραπάνω αποτελέσματα μπορεί να γραφούν συναρτήσει της κβαντικής *σταθεράς λεπτής υφής* $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, που δεν έχει διαστάσεις, στην πιο εύχρηστη μορφή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\upsilon_n = \alpha\, c \frac{1}{n}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

$$r_n = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} n^2, \quad n = 1, 2, \cdots$$

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2} mc^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Από πίνακες των κβαντικών σταθερών οι χαρακτηριστικές βασικές τιμές είναι $\frac{\hbar}{mc} \approx 3.9 \times 10^{-13} m$, $\frac{\hbar}{mc^2} \approx 1.3 \times 0^{-21} s$, $mc^2 \approx 0.51 MeV = 0.51 \times 10^6 eV$ και μπορεί εύκολα να υπολογισθούν οι αριθμητικές τιμές, π.χ. για την πρώτη τροχιά $n = 1$ έχουμε:

$$\upsilon_1 = \alpha c = \frac{1}{137} c,$$

$$r_1 = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} \approx 0.53 \times 10^{-10} m \approx 0.53 \dot{A} \approx 0.053 nm,$$

$$E_1 = -\frac{1}{2} \frac{1}{137^2} mc^2 \approx -13.6 eV.$$

Η ακτίνα της πρώτης κβαντισμένης τροχιάς $a = r_1 = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.53 \dot{A}$ είναι γνωστή ως *ακτίνα του Bohr* $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ και θα την χρησιμοποιούμε στην συνέχεια αφού θέτει την μονάδα μήκους στον ατομικό κόσμο. Η αντίστοιχη χαρακτηριστική ατομική μονάδα ενέργειας δίνεται από την ενέργεια της βασικής στάθμης στο άτομο του υδρογόνου $-E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ με τιμή $13.6 eV$ [7]. Όπως φαίνεται και στο σχήμα της Α3 (σελ. 31) *ενέργεια δέσμευσης ή ιονισμού* $E_{ιον} = -E_1 \approx 13.6 eV$ του ατόμου είναι η ενέργεια που απαιτείται ένα ηλεκτρόνιο από την βασική στάθμη $E_1 \approx -13.6 eV$ να φθάσει στην τιμή 0 και να καταστεί ελεύθερο.

Παράδειγμα: Ένας απλός υπολογισμός της ενεργειακής διαφοράς των δύο πρώτων ενεργειακών σταθμών (E_1, $E_2 = \frac{E_1}{4}$) δίνει

$$\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1 \approx -\frac{13.6 eV}{4} + 13.6 eV \approx 10.2 eV$$

και επιτρέπει την εύρεση της αντίστοιχης κυκλικής συχνότητα μετάβασης $E_2 \leftrightarrow E_1$

$$\omega_{12} = \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar} = \frac{3\alpha^2}{8} \frac{mc^2}{\hbar}.$$

Το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας λόγω της μετάβασης είναι

[7] Δείτε τις κβαντισμένες (διακριτές) ενέργειες του ατόμου του υδρογόνου στην άσκηση Α3 στο τέλος του Κεφ. 1.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\lambda_{12} = 2\pi \frac{c}{\omega_{12}} = \frac{16\pi}{3\alpha^2} \frac{\hbar}{mc} \approx 1226\dot{A}$$

που ανήκει στο υπεριώδες. Ο υπολογισμός αυτός μας δίνει μια αίσθηση του μεγέθους των συχνοτήτων και μηκών κύματος που περιμένουμε για τις διακριτές φασματικές γραμμές κατά την εκπομπή φωτός από άτομα (γραμμικά φάσματα).

1.5. Θεμελιώδεις κβαντικές έννοιες

Το 1925 είναι χρονολογία κλειδί για την ανάπτυξη της νέας κβαντικής από τους Schrödinger, Heisenberg, Dirac, Born και άλλους[8] στην αποδεκτή μέχρι σήμερα μορφή της. Με τη σταθερά του Planck $\hbar$, το $\pi = 3.14\cdots$, το φορτίο του ηλεκτρονίου e, κλπ μπορούμε να περιγράψουμε τον φυσικό μικρόκοσμο. Η κβαντική φυσική αποτελεί τον ακρογωνιαίο λίθο της σημερινής φυσικής για την κατανόηση του μικρόκοσμου όπου εισάγει νέες λεπτές έννοιες που θέτουν σε δοκιμασία την διαίσθησή μας που είναι βεβαίως κτισμένη στα κλασσικά πρότυπα. Ο κβαντικός κόσμος είναι αντίθετος με τον συμβατικό τρόπο σκέψης και για να τον αντιληφθούμε σε όλο του το μεγαλείο απαιτεί κατάλληλη διαπαιδαγώγηση. Περιγράφεται, δυστυχώς για ορισμένους, μόνο με μαθηματικό τρόπο όπως όλες σχεδόν οι φυσικές επιστήμες, αλλά ίσως αυτό να μην είναι το πιο δύσκολο σημείο της κβαντικής θεωρίας. Οι πρωτοποριακές ιδέες είναι αυτές που εκπλήσσουν. Η θεαματική επιτυχία της κβαντικής συνοδεύεται από επαναστατικές ιδέες όπως:

- Ο *δυϊσμός κύματος-σωματίου* όπου τα σωμάτια εμφανίζουν πλην της σωματιακής και κυματική μορφή ανάλογα με το τρόπο που τα παρατηρούμε.
- Η *αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας) του Heisenberg* που θέτει όρια ακρίβειας στην κβαντική διαδικασία της μέτρησης με αποφασιστικό τον ρόλο του παρατηρητή, όπου τίποτα δεν μετρείται χωρίς να διαταραχτεί, π.χ. δεν μπορούμε να μετρήσουμε ταυτόχρονα με ακρίβεια θέση και ορμή.
- Η ιδέα του *κβαντικού εναγκαλισμού* και της *μη τοπικότητας των αλληλεπιδράσεων* με τα σωμάτια να αλληλοεπηρεάζονται ακόμη και όταν

[8] Η κλασσική φυσική έχει θεμελιωτή τον Newton και η θεωρία της σχετικότητας τον Einstein ενώ η κβαντική δημιουργήθηκε όχι από έναν αλλά πολλούς ερευνητές (σε μια μεγάλη χρονική περίοδο) μεταξύ των οποίων και ο Einstein, ασχέτως αν αυτός αργότερα την αμφισβήτησε.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

απέχουν μακροσκοπική απόσταση το ένα από το άλλο, χωρίς να υπάρχει καμία γνωστή αλληλεπίδραση μεταξύ τους.

1.6. Δυϊσμός κύματος-σωματίου

Η κλασσική θεωρία του Maxwell έδειξε πως το φως είναι ΗΜ κύμα κυκλικής συχνότητας ω που διαδίδεται καθέτως στην ηλεκτρική και μαγνητική του συνιστώσα με ταχύτητα $c = 2.998 \times 10^8 ms^{-1}$. Το μήκος κύματος λ και η κυκλική συχνότητα $\omega = 2\pi\nu$ συνδέονται με την σχέση

$$\omega = 2\pi c/\lambda. \tag{1.10}$$

Οι άνθρωποι αντιλαμβανόμαστε το φως διαμέσου της κόρης του οφθαλμού μόνο για μήκη κύματος που κυμαίνονται από το ερυθρό χρώμα μεγάλου μήκους κύματος ή μικρής συχνότητας μέχρι το ιώδες που έχει μικρό μήκος κύματος ή μεγάλη συχνότητα. Αυτό είναι το *ορατό φως* που καθορίζεται στα μήκη κύματος από $\lambda \approx 7.5 \times 10^{-7} m \approx 7500\dot{A} = 750nm$ μέχρι $\lambda \approx 4.0 \times 10^{-7} m \approx 4000\dot{A} = 400nm$. Οι αντίστοιχες κυκλικές συχνότητες $\omega = 2\pi\nu = 2\pi c/\lambda$ κυμαίνονται από $\omega \approx 3.9 \times 2\pi \times 10^{14} s^{-1}$ μέχρι $\omega \approx 8.0 \times 2\pi \times 10^{14} s^{-1}$ και οι συχνότητες ν αν διαιρέσουμε τις ω με 2π. Εκτός αυτών των ορίων, στα μεγαλύτερα των $750nm$ μήκη κύματος αντιστοιχεί η υπέρυθρη ακτινοβολία (μικρών συχνοτήτων) ενώ για μικρότερα των $400nm$ αντιστοιχεί η υπεριώδης ακτινοβολία (μεγάλων συχνοτήτων), που αδυνατεί να αντιληφθεί ο άνθρωπος. Η ανθρώπινη όραση ερμηνεύεται από την κβαντική θεωρία λόγω της μοριακής σύνθεσης της κόρης του ματιού. Αυτό συμβαίνει επειδή στην κόρη του ματιού υπάρχει το μόριο ροδοψίνη που επιτρέπει συγκεκριμένες μεταβάσεις μόνο στην ορατή περιοχή.

Το 1905 ο Einstein πέρα από την υπόθεση του Planck θεώρησε πως το φως συχνότητας ω μπορεί να συμπεριφερθεί ως ένα σύνολο[9] που αποτελείται από διακριτές μονάδες ενέργειας $\hbar\omega$, τα κβάντα φωτός ή *φωτόνια*. Είδαμε πως για την εκπομπή φωτός απαιτείται μια μετάβαση από μια ψηλότερη σε μια χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη και η εκπεμπόμενη ακτινοβολία είναι συγκεκριμένης συχνότητας, ή μήκους κύματος, που καθορίζεται από την ενεργειακή διαφορά των δύο σταθμών. Η κβάντωση της ΗΜ ενέργειας επιτρέπει την απορρόφηση φωτός συχνότητας ω από

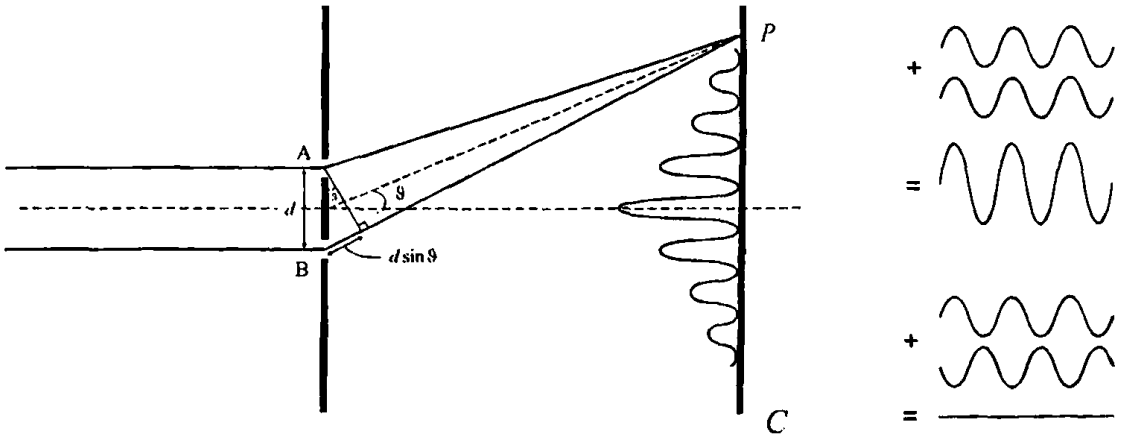
[9] Θα διατηρήσουμε την ξενική λέξη 'ensemble', γνωστή από την στατιστική.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ένα άλλο σύστημα σε διακριτές ποσότητες $\hbar\omega$, αφού το φως υπάρχει μόνο σε διακριτά κβάντα αυτής της ενέργειας. Επομένως η απορρόφηση ή μη φωτός από ένα υλικό εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των διακριτών ενεργειακών σταθμών των ατόμων του υλικού και την συγκεκριμένη συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός. Η κβαντισμένη φύση του φωτός αποδεικνύεται περίτρανα με το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Πριν όμως το περιγράψουμε θα εξηγήσουμε το βασικό πείραμα περίθλασης, γνωστό εδώ και δύο αιώνες, όπου φαίνεται η κυματική φύση του φωτός.

1.6.1. Κυματική φύση του φωτός-κβαντική συμβολή

Ένα από τα βασικά πειράματα που δείχνουν την αναμφισβήτητη κυματική φύση του φωτός είναι το πείραμα της *κυματικής συμβολής*, γνωστό ως περίθλαση του φωτός. Αν φως μήκους κύματος λ διέλθει από μια σχισμή A προσπέσει σε οθόνη απέναντί του η εικόνα που παρατηρούμε αποτελείται από μια φωτεινή γραμμή σε σκοτεινό υπόβαθρο. Αν το φως μήκους κύματος λ διέλθει από *δύο σχισμές A, B*, όπως στο Σχ. 1.3, στην οθόνη C παρατηρούμε την εμφάνιση μιας σειράς από φωτεινές και σκοτεινές γραμμές που είναι γνωστές με το όνομα *κροσσοί συμβολής*. Ο λόγος που συμβαίνει αυτό είναι η παρουσία δύο διαφορετικών διαδρομών AP, BP για να φθάσει το φως σε ένα σημείο P της οθόνης C. Όταν το διάστημα μεταξύ των δύο οθονών είναι αρκετά μεγάλο και οι σχισμές A, B σε κοντινή απόσταση d η διαφορά των διαδρομών είναι $BP - AP = d \sin\vartheta$, όπου ϑ είναι η γωνιακή θέση του P.



Σχ. 1.3. *Αριστερά: συμβολή του φωτός στο πείραμα δύο σχισμών όπου στην οθόνη C εμφανίζεται η στατιστική κατανομή της έντασης του προσπίπτοντος φωτός. Δεξιά: φαίνεται η δημιουργική συμβολή (διαφορά μηδέν ή άρτιο πολλαπλάσιο του ημικύματος $\lambda/2$) και η καταστροφική συμβολή (διαφορά περιττό πολλαπλάσιο του ημικύματος $\lambda/2$) των δύο κυμάτων ενώ το μήκος κύματος λ μπορεί να μετρηθεί από μέγιστο σε μέγιστο* (1.11).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Όταν η διαφορά $d \sin \vartheta$ είναι *μηδέν ή άρτιο πολλαπλάσιο του μισού μήκους κύματος* $\lambda/2$ (επομένως ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος) τα κύματα είναι στην ίδια φάση μεταξύ τους και έχουμε άθροισή τους που οδηγεί σε ενίσχυση των δύο κυμάτων και μέγιστο στην εικόνα της περίθλασης. Στην αντίθετη ακριβώς περίπτωση, όταν η διαφορά των διαδρομών $d \sin \vartheta$ είναι *περιττό πολλαπλάσιο του μισού μήκους κύματος* $\lambda/2$, έχουμε διαφορά φάσης και επομένως απόσβεση των κυμάτων με ελάχιστο στην εικόνα της περίθλασης. Στις άλλες περιπτώσεις τα αποτελέσματα είναι ενδιάμεσα. Από τα ελάχιστα της εικόνας περίθλασης (περιττό αριθμό ημικυμάτων στο Σχ. 1.3) προκύπτει η συνθήκη μέτρησης του λ

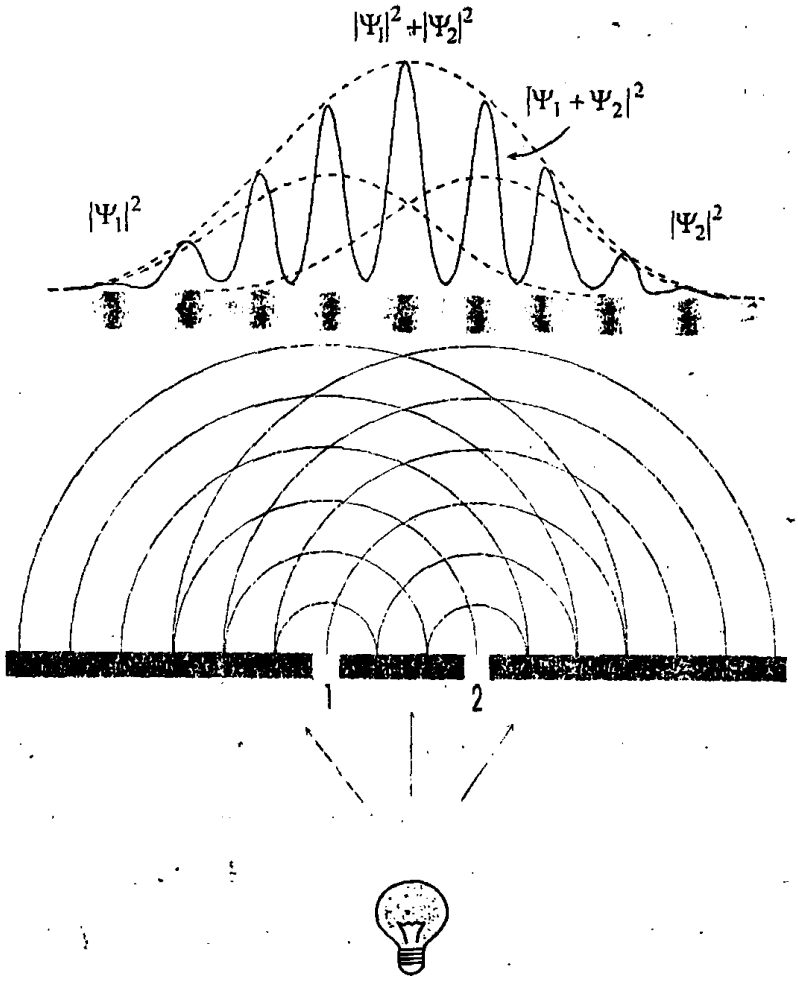
$$d \sin \vartheta = (2n+1)\frac{\lambda}{2} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\lambda, \quad n = 0,1,2,3,\cdots. \tag{1.11}$$

Το πείραμα της κυματικής συμβολής αποτελεί μια αδιάψευστη μαρτυρία της κυματικής φύσης του φωτός. Μπορεί να επαναληφθεί όπως στο Σχ. 1.4 όπου αντί για φως από μια πηγή εκπέμπονται ηλεκτρόνια που περνάνε από τις σχισμές 1 και 2 ενώ ο αριθμός τους μετρείται με έναν ανιχνευτή που κινείται κατακόρυφα στην οθόνη C. Αναλόγως με την σχισμή που διαπερνούν τα ηλεκτρόνια στην κβαντική περιγράφονται από τις *μιγαδικές κυματοσυναρτήσεις* Ψ_1, Ψ_2 των οποίων το τετραγωνισμένο μέτρο $|\Psi_1|^2 = \Psi_1^* \Psi_1$ και $|\Psi_2|^2 = \Psi_2^* \Psi_2$ εξαρτάται από την θέση και την ορμή ενώ επιτρέπει την εκτίμηση κατανομών πιθανοτήτων[10] παρατήρησης των αντίστοιχων σωματίων σε συγκεκριμένες θέσεις. Όταν η σχισμή 2 καλυφθεί η κατανομή πιθανότητας $|\Psi_1|^2$ που φαίνεται στο σχήμα έχει μέγιστο ακριβώς στην ευθεία απέναντι από την σχισμή 1. Όταν η σχισμή 1 καλυφθεί η $|\Psi_2|^2$ έχει μέγιστο ακριβώς στην ευθεία απέναντι από την σχισμή 2. Όταν και οι δύο σχισμές είναι ανοικτές θα ανέμενε κανείς πως θα προκύψει η κατανομή $|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$, το άθροισμα των κατανομών από τις δύο σχισμές. Όμως αυτό δεν συμβαίνει επειδή και τα ηλεκτρόνια δίνουν *κβαντική συμβολή* με αποτέλεσμα τον σχηματισμό ταλαντώσεων από την μηδενική τιμή μέχρι την κλασσικά αναμενόμενη τιμή του αθροίσματος.

---

[10]Το τετράγωνο του μέτρου μιας κυματοσυνάρτησης $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = (\Psi_r - i\Psi_i)(\Psi_r + i\Psi_i) = \Psi_r^2 + \Psi_i^2$ είναι θετικός αριθμός.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 1.4. *Πείραμα με ηλεκτρόνια που διέρχονται από τις σχισμές 1 και 2 και προσπίπτουν στην οθόνη C. Η κατανομή πιθανότητας αντί της* $|\Psi_1|^2+|\Psi_2|^2$ *είναι* $|\Psi_1|^2+|\Psi_2|^2+2\Re e(\Psi_1^*\Psi_2)$ *που περιέχει τον επιπλέον όρο* $2\Re e(\Psi_1^*\Psi_2)$ *στον οποίο οφείλονται οι ταλαντώσεις (κροσσοί) της κβαντικής συμβολής.*

Ποια είναι λοιπόν η σωστή περιγραφή της κατάστασης του συστήματος; Στο πείραμα δύο σχισμών η κατανομή που προκύπτει περιγράφεται από το τετραγωνισμένο μέτρο του αθροίσματος (αντί για το άθροισμα των τετραγωνισμένων μέτρων)

$$
\begin{aligned}
|\Psi_1+\Psi_2|^2 &= (\Psi_1+\Psi_2)^*(\Psi_1+\Psi_2) \\
&= \Psi_1^*\Psi_1+\Psi_2^*\Psi_2+\Psi_1^*\Psi_2+(\Psi_1^*\Psi_2)^* \qquad (1.12)\\
&= |\Psi_1|^2+|\Psi_2|^2+2\Re e(\Psi_1^*\Psi_2)
\end{aligned}
$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΚΡΗΤΗΣ

που δίνει τον επιπλέον όρο συμβολής $2\Re e(\Psi_1^*\Psi_2) = \Psi_1^*\Psi_2 + (\Psi_1^*\Psi_2)^*$ στον οποίο οφείλονται οι ταλαντώσεις[11]. Επομένως, στην κβαντική οι κυματοσυναρτήσεις συνδέονται με κατανομές πιθανοτήτων και τα ηλεκτρόνια εκτός από την σωματιακή έχουν και κυματική φύση.

1.6.2. Σωματιακή φύση του φωτός-το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Ένα από τα πρώτα πειράματα όπου το φως εμφανίζει την σωματιακή του φύση με την μορφή των κβάντων φωτός ή φωτόνια είναι το *φωτοηλεκτρικό φαινόμενο*. Θα περιγράψουμε το πείραμα όπου φως προσπίπτει σε μια μεταλλική επιφάνεια με συνέπεια να εκπέμπονται ηλεκτρόνια (φωτοηλεκτρόνια) τα οποία συλλέγει μια θετικά φορτισμένη άνοδος λόγω του αρνητικού τους φορτίου. Η εκπομπή των φωτοηλεκτρονίων παρατηρείται μόνο όταν η συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός $\nu = c/\lambda$ $(\omega = 2\pi\nu)$ υπερβεί μια τιμή κατωφλίου ν_0. Η ενέργεια των εκπεμπόμενων φωτοηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από την ένταση (λαμπρότητα) της ροής του προσπίπτοντος φωτός όπως θα ανέμενε κανείς κλασσικά αλλά μόνο από την συχνότητά του ν. Το φαινόμενο παρατηρείται ακόμη και για πολύ ασθενικό φως και ο αριθμός των φωτοηλεκτρονίων αυξάνει γραμμικά με την ένταση του προσπίπτοντος φωτός. Η αδυναμία της κλασσικής φυσικής εδώ εντοπίζεται στο γεγονός ότι θεωρεί το φως αποκλειστικά ως κύμα και προβλέπει ενέργεια ανάλογη της έντασης της πηγής I και όχι της συχνότητας ν. Στην κλασσική εικόνα αναμένεται, επίσης, καθυστέρηση στην εκπομπή της ακτινοβολίας με χρόνους Δt αντιστρόφως ανάλογους της έντασης της πηγής I, επειδή πρέπει να συγκεντρωθεί αρκετή ενέργεια $E = I\,\Delta t$.

Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο ερμηνεύτηκε το 1905 από τον Einstein με την παραδοχή ότι η φωτεινή δέσμη του φωτός συχνότητας ω αποτελείται από κβάντα ενέργειας $\hbar\omega$ ή *φωτόνια*. Κατά την πρόσπτωση του φωτός στην μεταλλική επιφάνεια ένα κβάντο φωτός απορροφάται από ένα ηλεκτρόνιο σε πολύ μικρό χρόνο. Η ενέργεια του εκπεμπόμενου ηλεκτρονίου αυξάνεται κατά $\hbar\omega$ ενώ απαιτείται και ένα επιπλέον ποσό ενέργειας W για να απελευθερώσει το ηλεκτρόνιο από την μεταλλική

---

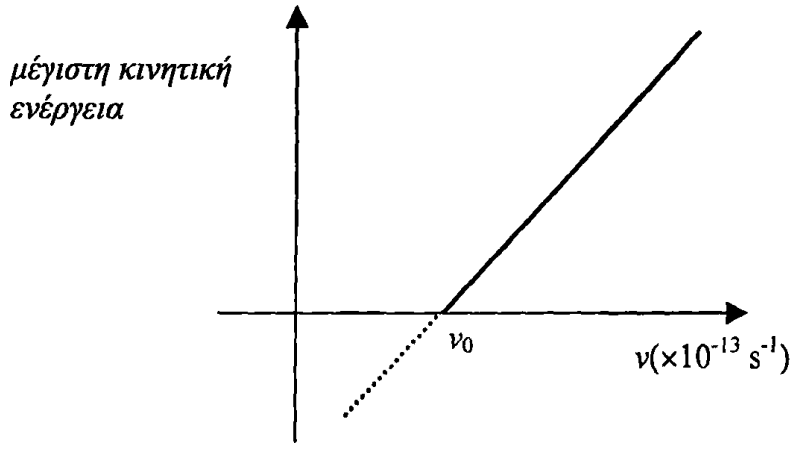
[11] Όταν οι $\Psi_1 = |\Psi_1|e^{i\varphi_1}$ και $\Psi_2 = |\Psi_2|e^{i\varphi_2}$ είναι μιγαδικές συναρτήσεις με μέτρα $|\Psi_{1,2}|$ και φάσεις $\varphi_{1,2}$ ο όρος της κβαντικής συμβολής γίνεται $2|\Psi_1||\Psi_2|\cos(\varphi_1 - \varphi_2)$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

επιφάνεια. Το W που είναι γνωστό ως έργο εξόδου, ποικίλει από υλικό σε υλικό και είναι προφανώς ανεξάρτητο της συχνότητας του προσπίπτοντος φωτός. Επομένως στο πείραμα αυτό τα εξερχόμενα ηλεκτρόνια, ή φωτοηλεκτρόνια, συμπεριφέρονται ως σωμάτια με κινητική ενέργεια

$$E_{kin} = \hbar\omega - W = h\nu - W. \tag{1.13}$$

Η ελάχιστη συχνότητα του φωτός που επιτρέπει την φωτοεκπομπή είναι $\nu_0 = W/h$. Τα πειράματα του Millikan έδειξαν την γραμμική σχέση του Einstein (Σχ. 1.5). Η ένταση της φωτεινής δέσμης καθορίζει τον ρυθμό άφιξης των κβάντων και ασφαλώς επηρεάζει τον αριθμό των παραγόμενων φωτοηλεκτρονίων όχι όμως και την κινητική τους ενέργεια που δίνεται από την εξ. (1.13).



Σχ.1.5. *Η μέγιστη κινητική ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων $E_{kin} = h\nu - W$, για $\nu > \nu_0$, συναρτήσει της συχνότητας $\nu = \omega/2\pi$ του προσπίπτοντος φωτός σε μεταλλική επιφάνεια. Από την κλίση της καμπύλης προκύπτει η σταθερά του Planck h και από το σημείο τομής στον x – άξονα η τιμή της ελάχιστης συχνότητας ν_0.*

Το φως είναι κύμα όταν προσπίπτει ταυτοχρόνως σε δύο σχισμές ενώ είναι ρεύμα φωτονίων όταν προσπίπτει σε μια μεταλλική πλάκα ή ανιχνευτή. Ανάλογα με τον τρόπο παρατήρησης, που υλοποιείται με την συσκευή που αλληλεπιδρά με το σύστημα κατά την μέτρηση, το φως στην κβαντική είναι είτε κύμα (πείραμα συμβολής) είτε ρεύμα σωματίων (φωτοηλεκτρικό φαινόμενο). Παρομοίως συμβαίνει και με ηλεκτρόνια, νετρόνια, κλπ. που είναι σωμάτια αλλά και κύματα αναλόγως με τον τρόπο μέτρησης.

Αφού το φως συμπεριφέρεται εκτός από κύμα και ως σωμάτιο είναι λογικό και τα σωμάτια να έχουν κυματική φύση ανάλογα με τον τρόπο που τα παρατηρούμε.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αυτό ήδη φαίνεται στο πείραμα που είδαμε παραπάνω όπου το ηλεκτρόνιο μπορεί να δώσει κυματικά φαινόμενα συμβολής. Τα πειράματα των Davinson και Germer το 1927 έδειξαν πως φαινόμενα συμβολής πράγματι δεν παρατηρούνται μόνο στο φως ή στις ακτίνες X αλλά και στα ηλεκτρόνια. Βεβαίως, η κυματική υφή των ηλεκτρονίων έρχεται σε προφανή αντίθεση με την αναμφισβήτητη σωματιακή τους φύση. Αυτό θα ήταν σαφώς απροσδόκητο για ακόμη μεγαλύτερα σωμάτια μακροσκοπικού μεγέθους. Η κβαντική θεωρία όμως προβλέπει έκδηλη την κυματική φύση των σωματίων μόνον όταν αυτά είναι πολύ μικρά, όπως το ηλεκτρόνιο.

1.6.3. Σχέση σωματίου-κύματος de Broglie

Γενικά για σωμάτια μάζας m και ενέργειας $E = \hbar\omega$ που κινούνται με ταχύτητα υ (ορμής $p = m\upsilon$), από την αναλογία με τα φωτόνια όπου $E = h\nu = pc$, υπολογίζεται το μήκος κύματος λ από την *σχέση de Broglie*

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{1.14}$$

ενώ η ορμή του σωματίου από την σχέση για το κυματάνυσμα $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ γράφεται

$$p = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k \ . \tag{1.15}$$

- ✓ Στην περίπτωση του *ηλεκτρονίου* μάζας $m_e = 9.11 \times 10^{-28} g$ και ταχύτητας $\upsilon = 3 \times 10^6 ms^{-1}$ (1% της ταχύτητας του φωτός c), από την σχέση de Broglie της εξ. (1.14) το μήκος κύματος του ηλεκτρονίου θα είναι $\lambda \approx 2.4 \times 10^{-10} m \approx 2.4 \dot{A}$.

- ✓ Στην περίπτωση μακροσκοπικού σωματίου (π.χ. *μπάλας του τένις*) με μάζα $m = 142\ g$ και ταχύτητα $\upsilon = 160 Km/h \approx 44.8 ms^{-1}$ από την σχέση de Broglie της εξ. (1.14) το μήκος κύματος της μπάλας είναι $\lambda \approx 1.04 \times 10^{-34} m \approx 10^{-24} \dot{A}$.

Από τα δύο παραδείγματα συμπεραίνουμε πως ένα κλασσικό (μακροσκοπικό) σωμάτιο αντιστοιχεί σε μήκη κύματος πολλές τάξεις μεγέθους μικρότερο από το μήκος κύματος του κβαντικού (μικροσκοπικού) ηλεκτρονίου. Σύμφωνα με την κβαντική θεωρία τα κλασσικά (μακροσκοπικά) σωμάτια έχουν και αυτά κυματική φύση που όμως δεν είναι εμφανής αφού το μήκος κύματος που αντιστοιχεί είναι αμελητέο. Ο de Broglie προχώρησε πιο πέρα και δικαιολόγησε το άτομο του Bohr με

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

επιτρεπτές τροχιές, αυτές που τα κύματα έχουν μήκος κύματος λ ακέραιο πολλαπλάσιο της περιφέρειας, 'σαν ένα φίδι που τρώγει την ουρά του...'

1.7. Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Ο δυϊσμός κύματος-σωματίου περιορίζει σημαντικά την διαθέσιμη πληροφορία για ένα σύστημα μια δεδομένη στιγμή. Στην περίπτωση του πειράματος των δύο σχισμών μπορούμε επιλεκτικά να μετρήσουμε *είτε* την κυματική συμβολή του φωτός επιτρέποντάς του να διέλθει ταυτόχρονα και από τις δύο σχισμές, χωρίς να γνωρίζουμε από πια σχισμή περνάει το κάθε φωτόνιο, *είτε* να μετρήσουμε (π.χ. με έναν ανιχνευτή) ένα-ένα τα φωτόνια καθώς περνούν από μια συγκεκριμένη σχισμή θυσιάζοντας όμως τις εικόνες συμβολής. Το βασικό συμπέρασμα είναι η διαπίστωση αδυναμίας να γίνουν ταυτόχρονα και τα δύο είδη μετρήσεων. Η εξακρίβωση της σχισμής από την οποία διέρχεται το φωτόνιο ισοδυναμεί στην ουσία με προσδιορισμό της *θέσης* του, ενώ η παρατήρηση της συμβολής όταν τα κύματα διέρχονται ταυτόχρονα και από τις δύο σχισμές επιτρέπει την εύρεση του μήκους κύματος λ και επομένως ισοδυναμεί με προσδιορισμό της *ορμής* των φωτονίων από την σχέση de Broglie $p = h/\lambda = \hbar k$. Συμπεραίνουμε λοιπόν την παρουσία θεμελιώδους περιορισμού αφού δεν είναι δυνατόν να μετρήσουμε ταυτόχρονα με αυθαίρετη ακρίβεια την θέση και την ορμή ενός σωματίου[12].

Το λάθος ή η αβεβαιότητα στην θέση στον προσδιορισμό της θέσης Δx και το λάθος ή η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ορμή Δp ενός κβαντικού σωματίου δεν μπορεί να γίνουν ταυτοχρόνως απείρως μικρά και συνδέονται με την ανισότητα που περιλαμβάνει την κβαντική σταθερά $\hbar$

$$\Delta x \, \Delta p \geq \hbar/2 \ . \tag{1.16}$$

Αυτή είναι η *αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg* που δηλώνει την αδυναμία ταυτόχρονης μέτρησης της θέση και της ορμής ενός σωματίου. Αν η μέτρηση της

[12] Ένα διαδιδόμενο κύμα με συγκεκριμένο μήκος κύματος δεν έχει σαφώς καθορισμένη θέση αλλά συγκεκριμένη ορμή από την (1.14). Το αντίθετο ακριβώς συμβαίνει όταν ένα 'κύμα' είναι εντοπισμένο σε μια περιοχή χώρου. Η θέση του είναι καθορισμένη όχι όμως το μήκος κύματος (δεν έχει καν κυματική μορφή) και επομένως ούτε η ορμή του.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

θέσης x έχει αβεβαιότητα Δx αυτό σημαίνει πως το αποτέλεσμα κυμαίνεται περίπου στο διάστημα $(x - \Delta x/2,\ x - \Delta x/2)$. Η μέτρηση της ορμής θα κυμαίνεται περίπου στο διάστημα $(p - \Delta p/2,\ p - \Delta p/2)$ με αντίστοιχη αβεβαιότητα $\Delta p \geq \hbar/(2\Delta x)$. Άρα, αν η θέση είναι επακριβώς γνωστή ($\Delta x = 0$) από την εξ. (1.16) ισχύει $\Delta p = \infty$ και η ορμή είναι πλήρως απροσδιόριστη και αντιστρόφως. Η κβαντική αρχή της αβεβαιότητας είναι μια θεμελιώδης ιδιότητα της φύσης και κάθε προσπάθεια να γίνει ταυτόχρονη μέτρηση της θέσης και της ορμής υπόκειται πάντα στον περιορισμό της εξ. (1.16).

- Το πείραμα των δύο σχισμών για τον δυϊσμό κύματος-σωματίου συνδέεται με την αρχή της αβεβαιότητας και ισχύει για κάθε είδους κβαντικά σωμάτια, όπως κύματα φωτός-φωτόνια, κύματα νετρονίων-νετρόνια, κλπ. Όταν ένα ρεύμα από π.χ. νετρόνια περάσει και από τις δύο σχισμές του πειράματος τότε συμπεριφέρεται ως κύμα και δημιουργούνται οι γνωστές εικόνες περίθλασης (Σχ. 1.5). Αν όμως τα νετρόνια ανιχνεύονται ένα-ένα τότε συμπεριφέρονται ως σωμάτια με την γνωστή τους μάζα. Η διέλευσή τους από μια συγκεκριμένη σχισμή (όπως συμβαίνει αν κλείσουμε μία από τις δύο σχισμές) καταστρέφει τα φαινόμενα περίθλασης. Επομένως συμπεραίνουμε πως τα νετρόνια όταν περνάνε από τις δύο σχισμές είναι κύματα αλλά όταν ανιχνεύεται η σχισμή από την οποία διέρχονται είναι σωμάτια. Η μία ή η άλλη ιδιότητα τους εξαρτάται από τον τρόπο μέτρησης αφού οποιοδήποτε πείραμα που ανιχνεύει την σχισμή διέλευσής τους καταστρέφει αυτομάτως τα κυματικά φαινόμενα της συμβολής. Παρατηρούμε, λοιπόν, πως η κυματική και σωματιακή φύση είναι δύο *συμπληρωματικές ιδιότητες* που η παρουσία τους εξαρτάται από τον τρόπο μέτρησης. Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg εκφράζει άμεσα την ιδέα της συμπληρωματικότητας του Bohr όπου η μέτρηση μιας μεταβλητής καθιστά αυτομάτως μη μετρήσιμη κάποια άλλη.

- Στην θεωρία των μετασχηματισμών Fourier η συνάρτηση κυματανύσματος $g(k)$ (το τετράγωνο του μέτρου $|g(k)|^2 = g(k)^* g(k)$ εκτιμά την πιθανότητα ένα κβαντικό σωμάτιο να έχει ορμή $\hbar k$) μεταβαίνει στην συνάρτηση θέσης $f(x)$ (το τετράγωνο του μέτρου $|f(x)|^2 = f(x)^* f(x)$ εκτιμά την πιθανότητα ένα κβαντικό σωμάτιο να έχει θέση x), με το ολοκλήρωμα

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\ g(k)\, e^{ikx} .$$

Οι συναρτήσεις $|f(x)|^2$ και $|g(k)|^2$ εκτείνονται σε ένα εύρος τιμών των x και k που εκτιμάται από τις αβεβαιότητες Δx και Δk, αντιστοίχως. Ένας υπολογισμός όπως στα παραδείγματα που ακολουθούν δείχνει πως το γινόμενο των αβεβαιοτήτων έχει σταθερή τιμή $\Delta x\, \Delta k \propto O(1)$, όπου $O(1)$ σημαίνει μέγεθος τάξης μονάδα. Αφού ένα σωμάτιο στον

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

χώρο περιγράφεται από την $|f(x)|^2$ ενώ η $|g(k)|^2$ αναπαριστά το αντίστοιχο κυματοπακέτο με πολλά διαφορετικά κυματανύσματα k παρατηρούμε πως είναι αδύνατον να προσδιορισθεί ταυτόχρονα η θέση x των σωματίων στο χώρο και το κυματάνυσμα k του αντίστοιχου κύματος. Με άλλα λόγια, από την σχέση de Broglie $p = \hbar k$ το μαθηματικό αποτέλεσμα για το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x\, \Delta k \propto O(1)$ γίνεται $\Delta x\, \Delta p \propto O(\hbar)$ σε συμφωνία με την εξ. (1.16). Επομένως η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg είναι το αποτέλεσμα βασικής ιδιότητας συναρτήσεων που συνδέονται με μετασχηματισμούς Fourier[13].

Παράδειγμα 1: Έστω το κυματοπακέτο τύπου Gauss $g(k) = \exp(-a(k-k_0)^2)$. Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier της $g(k)$ είναι

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\; g(k)\, e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\; e^{i(k-k_0)x}\, e^{ik_0 x}\, e^{-a(k-k_0)^2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{+\infty} dk'\; e^{ik'x}\, e^{-ak'^2}, \quad \text{όπου } k' = k - k_0 .$$

Το ολοκλήρωμα Gauss $\int_{-\infty}^{+\infty} dy\; e^{-\alpha y^2 \pm \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{\beta^2/4\alpha}$ με $\beta = ix$ δίνει

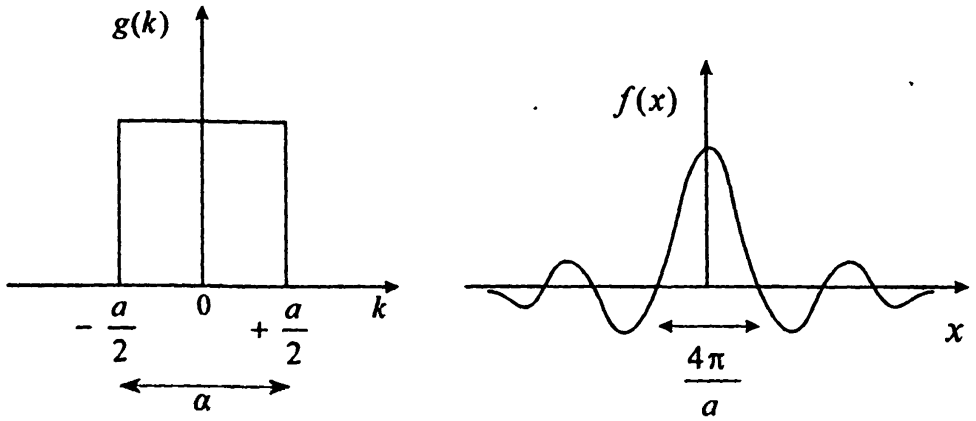
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{-x^2/4a} \text{ και } |f(x)|^2 = f^*(x)\cdot f(x) = \frac{1}{2a}\, e^{-x^2/2a} .$$

Άρα $|g(k)|^2 \sim \exp(-2a(k-k_0)^2)$ και $|f(x)|^2 \sim e^{-x^2/2a}$ είναι Γκαουσσιανές συναρτήσεις της μορφής $\sim e^{-(y-y_0)^2/2\sigma^2}$ με αβεβαιότητα ίση με $\Delta y = \sigma$. Επομένως, από την μορφή της $|g(k)|^2$ η αβεβαιότητα είναι $\Delta k = \sqrt{1/4a}$ ενώ για την $|f(x)|^2$ είναι $\Delta x = \sqrt{a}$. Το γινόμενό τους $\Delta x \cdot \Delta k = 1/2$ είναι τάξης μονάδα ώστε $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$ μόλις σε

[13] Ο μετασχηματισμός Fourier ενός στενού παλμού δίνει μια ευρεία συνάρτηση και αντιστρόφως. Π.χ. ο μυς του ανθρώπου αντιδρά στο μασάζ με το μετασχηματισμό Fourier του παλμού που δέχεται. Ένα απότομο (στενό) χτύπημα δημιουργεί ένα χαοτικό (ευρύ) φάσμα αντίδρασης. Η ανθρώπινη καρδιά αντιδρά παρομοίως και γι αυτό ένα άσχημο νέο αν θέλουμε η καρδιά να μην αντιδράσει με όλο το φάσμα, που πιθανόν να αποβεί καταστρεπτικό, πρέπει να λέγεται '...με τρόπο'. Με άλλα λόγια, το ερέθισμα (η ανακοίνωση του άσχημου νέου) πρέπει είναι ευρύ με πολλές λεπτομέρειες για να έχουμε απόκριση με στενό φάσμα αντίδρασης.

συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg[14]. Είναι γενικό συμπέρασμα πως στην Γκαουσσιανή περίπτωση η αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg ικανοποιείται με την ισότητα.

Παράδειγμα 2: Το τετραγωνικό κυματοπακέτο στο Σχ. 1.6 περιγράφεται από την $g(k)$ με μετασχηματισμό Fourier την συνάρτηση $f(x)$. Παρατηρούμε πως το εύρος του $|g(k)|^2$ είναι ανάλογο του a ενώ του $|f(x)|^2$ είναι περίπου $4\pi/a$ με το γινόμενό τους πάλι τάξης μονάδα. Επομένως, $\Delta x \cdot \Delta p = O(\hbar)$ σε συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.



Σχ. 1.6. *Το τετραγωνικό κυματοπακέτο $|g(k)|^2$ εύρους $\sim a$ έχει $|f(x)|^2$ εύρους $\sim 1/a$ και γινόμενο αβεβαιοτήτων $\Delta x \cdot \Delta k \propto O(1)$. Επομένως, αν το κυματοπακέτο είναι πολύ εντοπισμένο στον χώρο (μικρή αβεβαιότητα θέσης Δx) είναι αδύνατον να θεωρήσουμε πως έχει συγκεκριμένη ορμή (θα έχει μεγάλη αβεβαιότητα ορμής $\Delta p = \hbar \Delta k$) και αντιστρόφως.*

1.8. Ο κβαντικός εναγκαλισμός

Η κβαντική θεωρία επικεντρώνεται σε ένα κβαντικό *στατιστικό 'ensemble'* από παρόμοια συστήματα[15], όπως είναι π.χ. τα ηλεκτρόνια ή νετρόνια μιας δέσμης ακτινοβολίας. Το στατιστικό 'ensemble' περιγράφεται από την *κυματοσυνάρτηση* Ψ (*χώρος, χρόνος*), μια μιγαδική συνάρτηση που περιέχει όλη την πληροφορία για τα

[14] Από τον μετασχηματισμό Fourier $\omega \leftrightarrow t$ η αρχή αβεβαιότητας γράφεται και $\Delta E\, \Delta t \geq \hbar/2$, με ΔE την αβεβαιότητα στην ενέργεια και Δt τον χρόνο εξέλιξης ενός κβαντικού συστήματος.

[15] Δείτε την περιγραφή του στατιστικού 'ensemble' στο βιβλίο Στατιστική Φυσική Ι, Σ.Ν. Ευαγγέλου (1993). Στην ρίψη ενός νομίσματος με δυνατά αποτελέσματα Κ ή Γ πιθανότητας ½ (50%) το καθένα *πολλά παρόμοια νομίσματα* αποτελούν ένα στατιστικό 'ensemble'.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

σωμάτια του 'ensemble'. Τα σωμάτια δεν έχουν συγκεκριμένη θέση σε μια περιοχή του χώρου μια ορισμένη χρονική στιγμή, προσδιορίζεται[16] μόνο η πιθανότητα οποιοδήποτε από αυτά να βρεθεί στην θέση $\vec{r}$ την ορισμένη χρονική στιγμή t από το τετραγωνισμένο μέτρο της κυματοσυνάρτησης $|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t)$ ενώ οι φυσικές ποσότητες στην κβαντική αναπαρίστανται από *τελεστές*, π.χ. θέσης $\hat{x}$, ορμής $\hat{p}$, κλπ. Όταν η Ψ είναι γνωστή μπορούν να υπολογισθούν οι στατιστικές κατανομές πιθανότητας φυσικών μεγεθών[17]. Η αβεβαιότητα του Heisenberg που είδαμε μπορεί να εκτιμηθεί από το εύρος αυτών των κατανομών γύρω από την μέση τιμή που συνεπάγεται την αδυναμία μέτρησης του ζεύγους μεταβλητών θέσης-ορμής με αυθαίρετη ακρίβεια.

Ένα σωμάτιο που περιγράφεται από την Ψ είναι δυνατόν να βρίσκεται ταυτοχρόνως σε περισσότερες της μιας κβαντικές καταστάσεις (ή *ιδιοσυναρτήσεις*)[18] που αντιστοιχούν στις συγκεκριμένες τιμές (ή *ιδιοτιμές*) μιας ποσότητας, π.χ. της ορμής. Αυτή είναι η *υπέρθεση ή επαλληλία καταστάσεων*. Αν γίνει μέτρηση μιας ποσότητας τότε το πείραμα θα δώσει μια συγκεκριμένη τιμή και αυτό στην αποκαλούμενη *ορθόδοξη ερμηνεία* της κβαντικής ονομάζεται *κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης*. Το σύστημα εφεξής χαρακτηρίζεται μόνο από την συγκεκριμένη ιδιοσυνάρτηση και την αντίστοιχη ιδιοτιμή του φυσικού μεγέθους ενώ αποτελεί ένα

---

[16] Θα θεωρήσουμε πολλά σωμάτια (*στατιστικό 'ensemble'*) στην ίδια κατάσταση Ψ. Η Ψ είναι μια μιγαδική συνάρτηση αλλά το μέτρο στο τετράγωνο $|\Psi|^2$ είναι πραγματικό και περιγράφει μια κατανομή ή *πυκνότητα πιθανότητας*. Το γινόμενο $|\Psi|^2\, d^3\vec{r}$ δίνει την πιθανότητα το σωμάτιο να βρεθεί στον απειροστό όγκο $d^3\vec{r}$ γύρω από το σημείο $\vec{r}$ ενώ το ολοκλήρωμα $\int_V |\Psi|^2\, d^3\vec{r} = P_V$ δίνει την πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο στον όγκο V. Η πιθανότητα $\int |\Psi|^2\, d^3\vec{r} = 1$ για το ολοκλήρωμα σε όλον τον χώρο είναι μονάδα (κανονικοποίηση της Ψ).

[17] Η *πυκνότητα πιθανότητας* $P(x)$ μιας *συνεχούς τυχαίας μεταβλητής* x δίνει την *πιθανότητα* $P(x)\,dx$ η x να βρεθεί στο στοιχειώδες διάστημα $(x, x+dx)$. Την $P(x)$ χαρακτηρίζουν οι αριθμητικές ποσότητες όπως η μέση ή αναμενόμενη τιμή $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, P(x)$ *και* η αβεβαιότητα $\Delta x = +\sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ με $\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2\, P(x)$. *Οι* $\langle x\rangle$, Δx εκφράζουν την αναμενόμενη (μέση) τιμή και την τυπική απόκλιση γύρω από αυτήν με εκτίμηση του εύρους της κατανομής.

[18] Η κυματοσυνάρτηση $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των *ιδιοσυναρτήσεων* Ψ_n με συγκεκριμένα πλάτης πιθανότητας c_n και πιθανότητες $P_n = |c_n|^2$ για την λήψη της κάθε μίας.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

νέο στατιστικό 'ensemble' για επόμενες μετρήσεις. Επισημαίνεται στην αποκαλούμενη ορθόδοξη ερμηνεία ο προνομιακός ρόλος του παρατηρητή όπου η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει το σωμάτιο παρά μόνο την γνώση μας για αυτό.

Ο Scrhödinger εναντιώθηκε στην ορθόδοξη ερμηνεία της κβαντικής προτάσσοντας το παράδειγμα της *'γάτας του Schrödinger'*, ένα *πείραμα σκέψης*[19] με μια γάτα σε κουτί μαζί με άτομο που έχει την δυνατότητα εκπομπής ακτινοβολίας. Όταν το άτομο εκπέμπει τότε λόγω κάποιας σύνδεσης σπάει ένα φιαλίδιο που περιέχει δηλητήριο και η γάτα αυτομάτως πεθαίνει. Το άτομο όμως είναι ένα κβαντικό σύστημα που βρίσκεται ταυτοχρόνως στην *υπέρθεση* της κατάστασης εκπομπής και μη εκπομπής[20]. Επομένως, η γάτα *την ίδια στιγμή* είναι ζωντανή και νεκρή, πράγμα που είναι αδύνατον βεβαίως να συμβεί από την κλασσική εμπειρία. Όταν ανοίξουμε το κουτί και κοιτάξουμε- με άλλα λόγια αν κάνουμε μια μέτρηση- η γάτα θα είναι μόνο ζωντανή ή μόνο νεκρή, όχι και τα δύο μαζί. Το γεγονός αυτό από την πλευρά της κβαντικής δεν είναι καθόλου περίεργο, αφού το σύστημα πριν την μέτρηση μπορεί να βρίσκεται στην υπέρθεση δύο μικροκαταστάσεων Ψ_1 και Ψ_2. Μόνο *μετά την μέτρηση* περιγράφεται αποκλειστικά από την μία ή την άλλη. Αν ο κβαντικός τρόπος σκέψης *επεκταθεί και στον μακρόκοσμο,* όπως στην περίπτωση της 'γάτας', τότε μια συγκεκριμένη μακροσκοπική κατάσταση δεν πρέπει να υλοποιείται μέχρις ότου γίνει μια μέτρηση[21]. Με άλλα λόγια, αν δεν ανοίξουμε το κουτί να ελέγξουμε η γάτα θα είναι *ταυτοχρόνως* ζωντανή και νεκρή.

Για το παράδοξο της 'γάτας' μια από τις λύσεις που έχουν προταθεί είναι αυτή της αποσυνέπειας (decoherence) του συστήματος λόγω δράσης του εξωτερικού περιβάλλοντος κατά την μέτρηση. Άλλες απόψεις ενστερνίζονται την συμπαντική ισχύ της κβαντικής σε όλα τα επίπεδα, ακόμη για συστήματα με μακροσκοπικές ή κοσμολογικές διαστάσεις. Οι ερμηνείες που αποφεύγουν αυτό το πρόβλημα είναι, π.χ. οι ιδέες των 'κρυμμένων μεταβλητών' του D. Bohm όπου η Ψ δεν αρκεί από μόνη της για να περιγράψει το σύστημα. Εναλλακτικές σύγχρονες θεωρίες επιχειρούν να διατηρήσουν την διαπιστωμένη ισχύ της κβαντικής στο ατομικό επίπεδο και να

[19] Ένα πείραμα σκέψης είναι γνωστό ως 'gedanken' experiment.
[20] Το άτομο έχει απλώς μια πιθανότητα να εκπέμψει όπως και μια πιθανότητα να μην εκπέμψει.
[21] Αυτό φαίνεται πολύ περίεργο στον μακρόκοσμο: π.χ. το φεγγάρι δεν υπάρχει όταν δεν το κοιτάζουμε!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

δώσουν συγχρόνως μηχανισμούς που επιτρέπουν συγκεκριμένα αποτελέσματα και στον μακρόκοσμο χωρίς το παράδοξο της 'γάτας'.

Εναγκαλισμός στην κβαντική σημαίνει πως σε ένα σύστημα που αποτελείται από ένα ή περισσότερα υποσυστήματα (π.χ. ένα ζεύγος ηλεκτρονίων) δεν επιτρέπεται η απόδοση μια συγκεκριμένης κβαντικής κατάστασης στο κάθε υποσύστημα. Έτσι τα εναγκαλισμένα σωμάτια δεν έχουν ιδιότητες από μόνα τους και η μέτρηση του ενός επιφέρει αυτομάτως την αλλαγή των ιδιοτήτων του άλλου, ανεξαρτήτως του πόσο απέχουν μεταξύ τους. Φαντασθείτε πως είναι σαν να ρίχνουμε δύο νομίσματα ξανά και ξανά σε δύο αντίθετες πλευρές του πλανήτη με αποτέλεσμα πάντα το ίδιο (ή ακριβώς το αντίθετο) στα δύο μέρη, αν και η ακολουθία των τιμών στις διαδοχικές ρίψεις είναι τυχαία. Ο εναγκαλισμός οδηγεί στην παράλογη *δράση από απόσταση* που διατυπώθηκε αρχικά το 1935 στο πείραμα σκέψης των Einstein, Podolsky και Rozen (EPR). Το 1964 ο Bell έδειξε πως αποκλείεται μια πλήρης αιτιοκρατική ερμηνεία της κβαντικής αφού δημιουργεί ποσοτικές διαφορές αν η θέση του σωματίου είναι πράγματι γνωστή και συγκεκριμένη πριν μια μέτρηση. Την δεκαετία του 80 εξετάσθηκε η κατάσταση του σωματίου και τα πειράματα έδειξαν πως το EPR δεν σημαίνει πως η κβαντική θεωρία δεν είναι πλήρης, όπως πίστευε ο Einstein, αλλά είναι επακόλουθο της κβαντικής θεωρίας.

Οι εξαιρετικά περίεργες συνέπειες του εναγκαλισμού μπορεί να χρησιμοποιηθούν, π.χ. για την ασφαλή μετάδοση μηνυμάτων στην κβαντική κρυπτογραφία. Ο εναγκαλισμός έχει επιτρέψει να σταλεί μιά κβαντική κατάσταση αυτομάτως από ένα μέρος στο άλλο ενώ δίνει την δυνατότητα *ασφαλούς μεταφοράς* ενός μηνύματος, αφού οποιαδήποτε μέτρηση του σωματίου κατά την μεταφορά θα ανιχνευθεί αμέσως. Αυτό συμβαίνει αναγκαστικά αφού μια τυχόν επέμβαση από τρίτον θα προκαλέσει την κατάρρευση της εναγκαλισμένης κυματοσυνάρτησης. Ο εναγκαλισμός επιτρέπει σε δύο ανθρώπους με απομεμακρυσμένες θέσεις να μοιρασθούν μυστικά χωρίς τον κίνδυνο κάποιος να 'σπάσει' τον κώδικα, όπως μπορεί να συμβεί στην συνηθισμένη κρυπτογραφία. Στα πλαίσια όμως της κβαντικής θεωρίας δεν χρειάζεται καθόλου να ανησυχούμε για κάτι τέτοιο[22].

---

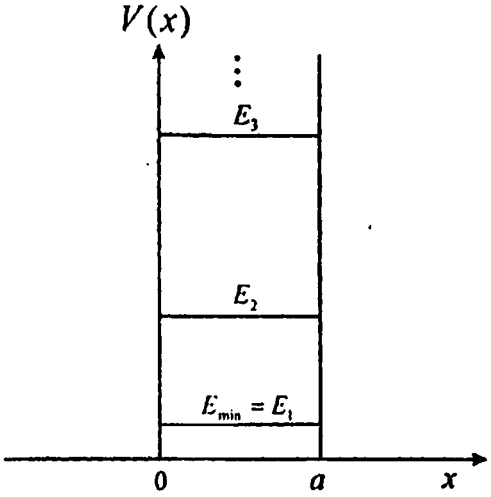
[22] Το πρόβλημα είναι όντως να δεχθούμε πως η κβαντική δουλεύει με τον τρόπο που το κάνει. Αν αυτό συμβαίνει, τότε οι παράξενοι κανόνες της επιτρέπουν φυσιολογικά την εμφάνιση της κβαντικής κρυπτογραφίας, των κβαντικών υπολογιστών, κλπ. Περισσότερα για το θέμα αυτό στο Κεφ. 8.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

A1. Γιατί η ενέργεια σωματίου μάζας m που κινείται σε δυναμικό μηδέν εντός διαστήματος $[0,a]$ και άπειρου εκτός αυτού (γνωστό ως *απειρόβαθο πηγάδι* δυναμικού) δεν μπορεί στην κβαντική να λάβει την κλασσική τιμή μηδέν (να βρεθεί στον πυθμένα του πηγαδιού);

Λύση:



Αν $E_{min} = 0$ τότε η ολική ενέργεια θα είναι μηδέν εντός του πηγαδιού όπου η κινητική είναι $p^2/2m$ και η δυναμική μηδέν. Άρα,

$$p^2/2m + 0 = 0$$
$$\Rightarrow p = 0.$$

Επομένως η ορμή του σωματίου θα είναι απολύτως καθορισμένη με αβεβαιότητα $\Delta p = 0$ και από την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg έπρεπε να ισχύει

$$\Delta x \geq \hbar/2\Delta p = \infty$$
$$\Rightarrow \Delta x = \infty.$$

Το αποτέλεσμα αυτό όμως δεν μπορεί να γίνει δεκτό αφού η αβεβαιότητα στην θέση του σωματίου περιορισμένου στο πηγάδι εύρους a είναι το πολύ $\Delta x = a$. Άρα με την υπόθεση $E_{min} = 0$ καταλήγουμε σε άτοπο που δεν μπορεί να ισχύει στην κβαντική λόγω της αρχής της αβεβαιότητας.

Η αβεβαιότητα Δp πρέπει να είναι μικρότερη από την τιμή p, ώστε να έχει νόημα η τελευταία, και από την αρχή της αβεβαιότητας $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$

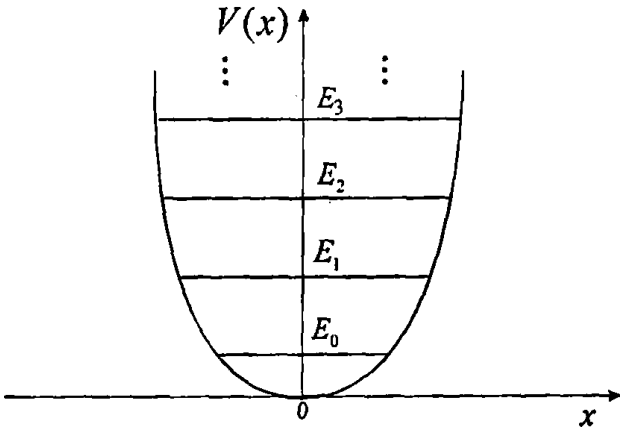
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$p \geq \Delta p \geq \hbar/2\Delta x = \hbar/2a$$
$$\Leftrightarrow E = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2} = E_{\min}.$$

Επομένως, η μικρότερη δυνατή ενέργεια $E_{\min}$ δεν είναι μηδέν όπως στην κλασσική φυσική και οι δυνατές ενέργειες είναι $E \geq E_{\min}$. Στο σχήμα φαίνεται και η πλήρης κβαντική λύση αυτού του προβλήματος $E_n = \left(\hbar^2\pi^2/2ma^2\right)n^2$, $n = 1, 2, 3, \cdots$ που θα δοθεί σε παρακάτω κεφάλαια. Η χαμηλότερη ενέργεια λέγεται *ενέργεια μηδενικού σημείου* που στην περίπτωση αυτή είναι για $n = 1$: $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ και ικανοποιεί την παραπάνω ανισότητα.

➤ **A2.** Από την αρχή της αβεβαιότητας να εκτιμηθεί η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη σωματίου μάζας m στο *παραβολικό δυναμικό* $V(x) = m\omega^2x^2/2$ αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω.

<u>Λύση:</u>



Η ενέργεια μπορεί να γραφεί ως

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2}$$

και αν υποθέσουμε ότι τα λάθη στον προσδιορισμό της θέσης και της ορμής Δx και Δp είναι αμελητέα με αβεβαιότητες μικρότερες των αντίστοιχων τιμών x και p πρέπει να ισχύει $p \geq \Delta p$ και $x \geq \Delta x$, αντιστοίχως. Επομένως από την αρχή της αβεβαιότητας $\Delta x\,\Delta p \geq \hbar/2$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

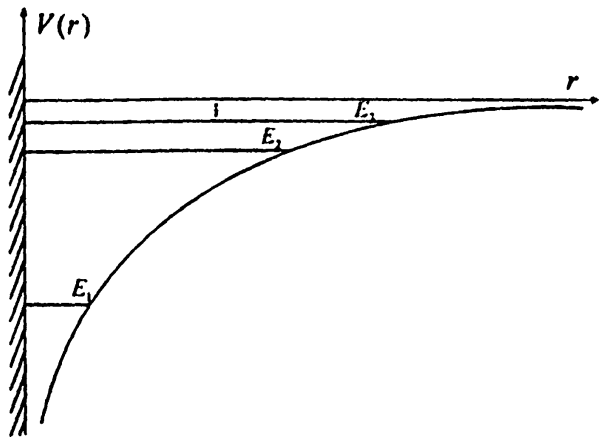
$$E \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2} \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2}$$

$$\geq 2\,\frac{\hbar}{\sqrt{8m}(\Delta x)}\,\frac{\sqrt{m}\omega}{\sqrt{2}}(\Delta x) = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Στον υπολογισμό έγινε χρήση της αλγεβρικής σχέσης $(a-b)^2 \geq 0 \Rightarrow a^2 + b^2 \geq 2ab$. Θα μπορούσε όμως αντί αυτής να ελαχιστοποιηθεί το δεξί μέλος της ανισότητας βρίσκοντας για πιό Δx μηδενίζεται η παράγωγος και αντικαθιστώντας προκύπτει το ίδιο αποτέλεσμα. Η ελάχιστη δυνατή τιμή της ενέργειας $E_{\min} = \hbar\omega/2$ είναι στην περίπτωση αυτή συμπτωματικά ακριβώς η κβαντική ενέργεια μηδενικού σημείου $E_0 = \hbar\omega/2$ του αρμονικού ταλαντωτή. Η πλήρης κβαντική λύση[23] $E_n = \hbar\omega\,(n+1/2)$, $n = 0,1,2,\cdots$ φαίνεται επίσης στο σχήμα.

➤ **A3.** Από την αρχή της αβεβαιότητας στην μορφή $\Delta r\,\Delta p \geq \hbar$ να εκτιμηθεί η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη σωματίου μάζας m και φορτίου e στο ακτινικό δυναμικό $V(r) = -e^2/r$ του ατόμου του υδρογόνου που εξαρτάται μόνο από την ακτινική απόσταση r.

Λύση:



Από την αρχή της αβεβαιότητας με $\Delta r = a$ και $p \geq \Delta p \geq \hbar/\Delta r = \hbar/a$ η ολική ενέργεια E ικανοποιεί την ανισότητα

[23] Προσέξτε πως οι ενέργειες στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή ξεκινάνε από την τιμή $n = 0$ ενώ στο απειρόβαθο πηγάδι της A1 και στο ακτινικό δυναμικό του ατόμου της A3 από την τιμή $n = 1$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \\
&\geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{e^2}{(\Delta r)} \\
&\geq \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a}.
\end{aligned}
$$

Από την ελαχιστοποίηση ως προς a

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a}\right) &= 0 \\
\Rightarrow a &= \frac{\hbar^2}{me^2}
\end{aligned}
$$

προκύπτει η ακτίνα του Bohr $r_1 = a$. Με αντικατάσταση στην ανισότητα

$$
\begin{aligned}
E &\geq \frac{\hbar^2 m^2 e^4}{2m\hbar^4} - \frac{e^2 m e^2}{\hbar^2} \\
&= \frac{me^4}{2\hbar^2} - \frac{2me^4}{2\hbar^2} \\
&= -\frac{me^4}{2\hbar^2}
\end{aligned}
$$

η ενέργεια δεν μπορεί να είναι μικρότερη από την ελάχιστη τιμή $E_{\min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$ που συμπτωματικά είναι πάλι ακριβώς η ενέργεια μηδενικού σημείου E_1 στην ακριβή λύση στο δυναμικό $V(r)$. Η αρχή αβεβαιότητας στην μορφή $\Delta r \Delta p \geq \hbar/2$ δίνει την πιο χαλαρή απαίτηση $E \geq -4\frac{me^4}{2\hbar^2}$. Η πλήρης κβαντική λύση του προβλήματος που ήδη συναντήσαμε στο άτομο του Bohr είναι $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$, φαίνεται στο σχήμα και θα δοθεί στα παρακάτω κεφάλαια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Η ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER

'ακόμη κι αν κάτι είναι παράλογο
υπάρχει μέθοδος να περιγραφεί'
W. Shakespeare

Ο Schrödinger με μια εμπνευσμένη πρόβλεψη βασισμένη στην υπόθεση de Broglie 'έφτιαξε' την περίφημη κυματική εξίσωση που φέρει το όνομά του. Η *εξίσωση Schrödinger* δεν έχει αυστηρή μαθηματική απόδειξη αλλά αποδείχθηκε αφάνταστα επιτυχής. Όπως θα δούμε λύση αυτής της κυματικής εξίσωσης, που αποτελεί την βάση της κβαντικής θεωρίας, είναι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ και στην κβαντική καθορίζει την πιθανότητα παρατήρησης, π.χ. ενός ηλεκτρονίου. Η στατιστική ερμηνεία της κβαντικής αποκλείει, έστω και κατ' αρχήν, την πλήρη πληροφορία για τα κβαντικά σωμάτια.

Το αρχικό ερώτημα στο οποίο απάντησε ο Schrödinger είναι: *ποιά είναι η κυματική εξίσωση που υπακούουν τα κύματα de Broglie;* Ένα στοιχειώδες επίπεδο κύμα κυματανύσματος $k = 2\pi/\lambda$ και κυκλικής συχνότητας $\omega = 2\pi\nu$ που κινείται κατά μήκος του $x-$άξονα, την χρονική στιγμή t έχει μετατόπιση το πραγματικό μέρος της μιγαδικής συνάρτησης

$$\Psi(x,t) = \exp[i(kx - \omega t)] \quad . \tag{2.1}$$

Από τις σχέσεις de Broglie για το αντίστοιχο σωμάτιο ενέργειας $E = \hbar\omega$ και ορμής $p = \hbar k$ με παραγωγίσεις της $\Psi(x,t)$ ως προς t

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= i\hbar\,(-i\omega)\Psi \\ &= \hbar\omega\Psi \\ &= E\Psi \end{aligned} \tag{2.2}$$

και ως προς x

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$
\begin{aligned}
-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} &= -i\hbar\,(ik)\Psi \\
&= \hbar k\,\Psi \\
&= p\,\Psi
\end{aligned}
\tag{2.3}
$$

οδηγούμεθα κατευθείαν στην εισαγωγή *γραμμικών τελεστών*. Παρατηρούμε πως η δράση των $i\hbar\,\partial/\partial t$ και $-i\hbar\,\partial/\partial x$ στην $\Psi(x,t)$ την πολλαπλασιάζουν απλώς με τις σταθερές E και p, αντιστοίχως, χωρίς να την αλλάζουν. Επομένως, μπορεί να ορισθεί[1] ο τελεστής *ενέργειας*

$$
E \rightarrow \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad , \tag{2.4}
$$

ορμής

$$
p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{2.5}
$$

και ο *τελεστής θέσης* $\hat{x} = x$ που στην περιγραφή αυτή πολλαπλασιάζει την Ψ επί x. Αν ορισθεί μια δεύτερη αναπαράσταση της ολικής ενέργειας παρουσία δυναμικού $V(x,t)$ από τον *Χαμιλτονιανό τελεστή*

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x},t) = \frac{\hat{p}\,\hat{p}}{2m} + V(x,t) \\
&= \frac{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)}{2m} + V(x,t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.6}
$$

προκύπτει *η χρονικά εξαρτημένη μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger*

$$
i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(x,t) \quad . \tag{2.7}
$$

Αν αντικατασταθεί η Χαμιλτονιανή από την (2.6) γράφεται στην μορφή

[1] Θα δούμε παρακάτω πως οι τελεστές $\hat{E}, \hat{p}, \hat{x}, \hat{H}$, επειδή αντιστοιχούν σε μετρήσιμες δυναμικές μεταβλητές λέγονται Ερμιτειανοί.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi \quad . \tag{2.8}$$

Η εξίσωση Schrödinger (2.8) ουσιαστικά κατασκευάσθηκε από την απαίτηση[2] να έχει λύση την κυματοσυνάρτηση επίπεδου κύματος (2.1) για ελεύθερο σωμάτιο ($V=0$) γενικεύοντας το αποτέλεσμα σε αυθαίρετο δυναμικό V[3]. Οι δυναμικές μεταβλητές x, p των κλασσικών εξισώσεων αντικαθίστανται από τους *κβαντικούς τελεστές* $\hat{x}$, $\hat{p}$, σύμφωνα με την γνωστή αρχή της αντιστοιχίας με ολική ενέργεια το άθροισμα της κινητικής ενέργειας και της δυναμικής ενέργειας. Η κινητική ενέργεια $p^2/2m$ αντικαταστάθηκε από τον τελεστή $-\left(\hbar^2/2m\right)\left(\partial^2/\partial x^2\right)$ ενώ η δυναμική ενέργεια παρέμεινε $V(x,t)$, αφού $\hat{x}=x$.

Στην τρισδιάστατη μορφή όπου ο τελεστής του διανύσματος θέσης $\vec{r}$ είναι $\hat{\vec{r}}=x\vec{e}_x+y\vec{e}_y+z\vec{e}_z$, ο τελεστής του διανύσματος $\vec{p}$ της ορμής $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x+\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x+\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x\right)$ και η εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) \tag{2.9}$$

περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z,t), \tag{2.10}$$

με Λαπλασιανή την $\vec{\nabla}^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

---

[2] Για *ελεύθερο σωμάτιο* μάζας m η δυναμική ενέργεια είναι μηδέν και η διαφορική εξίσωση που ικανοποιείται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ της εξ. (2.1) που απαραιτήτως θα πρέπει να αναπαράγει την σχέση ενέργειας-ορμής $E=\frac{1}{2}m\upsilon^2=\frac{p^2}{2m}$. Από την αναλογία της ενέργειας E με το τετράγωνο της ορμής p παρατηρούμε πως η κατάλληλη εξίσωση πρέπει να περιλαμβάνει απλή παράγωγο ως προς t (για να δώσει την E) και διπλή παράγωγο ως προς x (για να δώσει την p^2).

[3] Συνηθίζουμε να το αποκαλούμε δυναμικό ενώ η πιο σωστή ονομασία θα ήταν *συνάρτηση δυναμικής ενέργειας*.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

2.1. Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

Θα μελετήσουμε την χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο μάζας m που κινείται στο δυναμικό $V(x)$[4] *όταν δεν εξαρτάται από τον χρόνο* t, όπου σύμφωνα με την κλασσική φυσική η ενέργεια διατηρείται. Τέτοια κλειστά συστήματα αφορούν το σημαντικότερο μέρος των προβλημάτων της κβαντικής. Η εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\Psi(x,t) \tag{2.11}$$

είναι μια μερική διαφορική εξίσωση ως προς x, t και θα εφαρμόσουμε την *μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών.* Με την μέθοδο αυτή επιλύεται χωριζόμενη σε δύο εξισώσεις, μία για την x και μία για την t, αρκεί η μιγαδική κυματοσυνάρτηση Ψ να γραφεί ως το γινόμενο

$$\Psi(x,t)=\chi(t)\,\psi(x)\ . \tag{2.12}$$

Η αντικατάσταση της Ψ στην εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\chi(t)}{\partial t}\psi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\chi(t)\,\psi(x) \tag{2.13}$$

και η διαίρεσή της με το γινόμενο $\chi(t)\,\psi(x)$ δίνει

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x). \tag{2.14}$$

Παρατηρούμε πως το πρώτο μέλος της (2.14) δεν εξαρτάται από την θέση x ενώ το δεύτερο μέλος δεν εξαρτάται από τον χρόνο t. Επομένως, για να ισχύει η ισότητα πρέπει το καθένα από τα δύο ανεξάρτητα μέλη να είναι ίσο με μία σταθερά (την ίδια), έστω την E, της οποίας το νόημα θα το δούμε σε λίγο.

Οι δύο εξισώσεις είναι τώρα κανονικές και όχι μερικές διαφορικές, μια γραμμική ομογενής για το *χρονικό μέρος*

---

[4] Με τα λιγότερο συνηθισμένα χρονικά εξαρτημένα δυναμικά $V(x,t)$ που επιβάλλουν μεταβάσεις μεταξύ των διακριτών ενεργειακών σταθμών θα ασχοληθούμε αργότερα (Κεφ. 7.3).

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = E\,, \tag{2.15}$$

και μία για το *χωρικό μέρος*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)\ . \tag{2.16}$$

Η επίλυση της εξίσωσης ως προς t γίνεται εύκολα

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt} = E\chi(t) \\ & \Rightarrow \frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = -\frac{iE}{\hbar} dt \end{aligned} \tag{2.17}$$

που ολοκληρώνεται αμέσως

$$\ln \chi(t) = -\frac{iE}{\hbar} t + const\,, \tag{2.18}$$

και αν αγνοήσουμε την αυθαίρετη σταθερά θέτοντας $const = 1$, αφού μπορεί να απορροφηθεί στην $\psi(x)$, έχουμε

$$\chi(t) = \exp(-iEt/\hbar). \tag{2.19}$$

Για την χωρική εξίσωση (2.16) που εξαρτάται από την θέση x οι λύσεις προφανώς θα εξαρτώνται από την μορφή του δυναμικού $V(x)$. Ο κύριος στόχος της κβαντικής είναι να ευρεθούν οι λύσεις $\psi(x)$ της *χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger* (2.16). Η σταθερά E που εισάγαμε παραπάνω φαίνεται αμέσως πως πρέπει να έχει διαστάσεις ίδιες με την $V(x)$, συνεπώς ενέργειας. Επειδή η ολική ενέργεια διατηρείται λόγω του χρονικά ανεξάρτητου δυναμικού $V(x)$ η E διατηρείται και είναι η ολική ενέργεια του σωματίου.

Η λύση της χρονικά ~~ανεξάρτητης~~ εξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger σε δυναμικό $V(x)$ που δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο έχει την μορφή

$$\Psi(x,t) = \exp(-iEt/\hbar)\,\psi(x), \tag{2.20}$$

όπου E είναι ολική ενέργεια του σωματίου ενώ η $\psi(x)$ υπολογίζεται από την *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\,\psi(x)=E\,\psi(x) \qquad (2.21)$$

Συνηθίζεται να αποκαλούμε την $\psi(x)$ χρονικά ανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση αλλά δεν πρέπει να αγνοούμε ότι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ έχει πάντα την χρονική εξάρτηση της εξ. (2.20) όταν το δυναμικό είναι χρονικά ανεξάρτητο.

- Η *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger* είναι μια διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης και οι λύσεις της $\psi(x)$ πρέπει να είναι συνεχείς και να έχουν συνεχή πρώτη τουλάχιστον παράγωγο. Επιπλέον, κάθε $\psi(x)$ πρέπει να είναι μονοσήμαντη και πεπερασμένη στον διαθέσιμο χώρο ικανοποιώντας συγκεκριμένες οριακές συνθήκες[5]. Οι δυνατές τιμές E είναι οι *ιδιοτιμές της ενέργειας* που ορίζουν τις ενεργειακές στάθμες του συστήματος

$$E_1,\ E_2,\ E_3,\ \cdots, E_n,\ \cdots$$

ενώ οι αντίστοιχες λύσεις είναι οι *ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας*

$$\psi_1(x),\ \psi_2(x),\ \psi_3(x),\ \cdots, \psi_n(x), \cdots\ .$$

Ο δείκτης n στις ψ είναι γνωστός ως ένας *κβαντικός αριθμός*. Οι λύσεις της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger είναι

$$e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x),\ e^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x),\ e^{-iE_3t/\hbar}\psi_3(x), \cdots,\ e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x),\ \cdots\ .$$

- Οι ιδιοτιμές ενέργειας E_n και οι *ιδιοσυναρτήσεις* $\psi_n(x)$ προκύπτουν από την λύση της *εξίσωσης ιδιοτιμών*

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad (2.22)$$

του Χαμιλτονιανού τελεστή $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$. Το σύνολο των ιδιοτιμών E_n αποτελεί το ενεργειακό φάσμα του τελεστή $\hat{H}$ που αντιστοιχεί στις δυνατές τιμές του φυσικού μεγέθους της ενέργειας. Ένας τελεστής $\hat{A}$ έχει εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\,\psi_n=\alpha_n\,\psi_n$ με ιδιοτιμές α_n και ιδιοσυναρτήσεις ψ_n

[5] Οι οριακές συνθήκες είναι υπεύθυνες για την κβάντωση των ιδιοτιμών.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Παρατηρούμε πως οι λύσεις της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger σε κλειστό σύστημα δεδομένης ενέργειας E προκύπτουν από τις λύσεις της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης και πολλαπλασιασμό τους με τον χρονικά εξαρτημένο παράγοντα φάσης $\exp(-iEt/\hbar)$. Ο φασικός παράγοντας $Et/\hbar$ για γνωστή σταθερή ενέργεια δεν έχει ιδιαίτερη φυσική σημασία αφού η κανονικοποίηση της $|\Psi|^2$ είναι παρόμοια με αυτήν της $|\psi|^2$ επειδή η πυκνότητα πιθανότητας $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^* e^{+iEt/\hbar}\, \psi\, e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου.

- Η *γενική λύση* της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger πάντα μπορεί να γραφεί με την *υπέρθεση ή επαλληλία* των παραπάνω λύσεων με τον γραμμικό συνδυασμό

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\, e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(x) \quad . \tag{2.23}$$

Οι μιγαδικοί συντελεστές c_n στο ανάπτυγμα θα υπολογισθούν σε άλλα κεφάλαια.

2.2. Ένθετο στοιχείων στατιστικής

Η κβαντική είναι μια πιθανοκρατική θεωρία ώστε είναι απαραίτητη μια εισαγωγή σε βασικές έννοιες θεωρίας πιθανοτήτων και στατιστικής. Αν τα παρακάτω σας είναι γνωστά μπορείτε να υπερπηδήσετε το κεφάλαιο 2.2.

2.2.1. Μέση τιμή και διασπορά

Η θεωρία πιθανοτήτων και στατιστικής διαπραγματεύεται τους νόμους στους οποίους υπακούουν τα τυχαία γεγονότα. Σε αυτά αγνοούμε το αποτέλεσμα όπως, π.χ. στην ρίψη ενός νομίσματος που τα δυνατά αποτελέσματα είναι δύο: Κ ή Γ. Μπορούμε όμως να υπολογίσουμε την *πιθανότητα* λήψης ενός συγκεκριμένου αποτελέσματος με έναν αριθμό P, $0 \le P \le 1$. Η *πιθανότητα* εκφράζεται και με ποσοστό επί τοις %. Στον κλασσικό τρόπο υπολογισμού η πιθανότητα μπορεί να εκτιμηθεί από το πηλίκο

$$P_a = \frac{N_a}{N} \quad ,$$

του αριθμού των ευνοϊκών αποτελεσμάτων N_a δια του συνολικού αριθμού των αποτελεσμάτων N. Στην περίπτωση ρίψης ενός (τίμιου) νομίσματος για τα δύο δυνατά αποτελέσματα (Κ ή Γ) οι πιθανότητες είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$P_K = P_\Gamma = \frac{1}{2},$$

με άθροισμα μονάδα ενώ στην ρίψη δύο νομισμάτων τα δυνατά αποτελέσματα είναι τέσσερα με

$$P_{KK} = P_{K\Gamma} = P_{\Gamma K} = P_{\Gamma\Gamma} = \frac{1}{4}$$

αθροίσματος πάλι μονάδα.

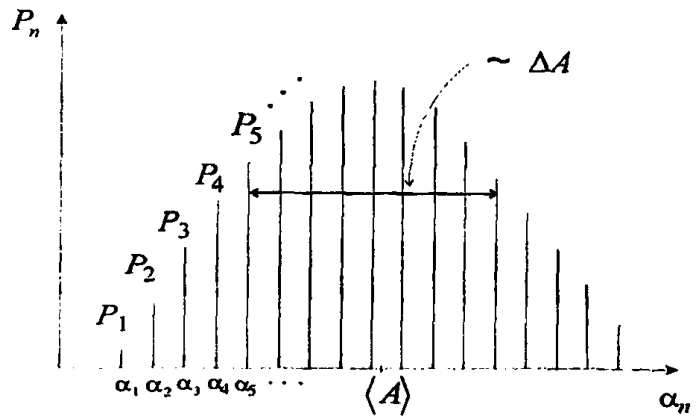
Ο κλασσικός τρόπος υπολογισμού της πιθανότητας δεν είναι πάντα εφικτός και η πιθανότητα συνηθέστερα υπολογίζεται από την συχνότητα εμφάνισης του αποτελέσματος σε ένα *στατιστικό 'πείραμα'*. Αν σε N επαναλήψεις μέτρησης ενός φυσικού μεγέθους A εμφανίζεται N_1 φορές το αποτέλεσμα α_1, N_2 φορές το αποτέλεσμα α_2, κλπ. τότε η *συχνότητα εμφάνισης* του αποτελέσματος α_n είναι

$$f_n = \frac{N_n}{N_1 + N_2 + N_3 + \cdots} = \frac{N_n}{N}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots.$$

Σε πολλές $(N \to \infty)$ επαναλήψεις του πειράματος η πιθανότητα υπολογίζεται από την συχνότητα εμφάνισης στο όριο

$$P_n = \lim_{N \to \infty} f_n$$

και είναι ένας *πραγματικός αριθμός μεταξύ μηδέν και ένα*. Προφανώς για το άθροισμα των πιθανοτήτων ισχύει $\sum_n P_n = 1$.



Σχ. 2.1. *Μια διακριτή κατανομή πιθανότητας με P_n τις πιθανότητες να συμβούν τα αποτελέσματα α_n. Στο σχήμα φαίνονται η μέση τιμή $\langle A \rangle$ και η αβεβαιότητα ΔA γύρω από την μέση τιμή.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η *μέση (ή αναμενόμενη) τιμή* του μεγέθους A με δυνατές τιμές $\alpha_1, \alpha_2, \cdots$ και αντίστοιχες πιθανότητες $P_1, P_2, \cdots$ ορίζεται ως

$$\langle A \rangle = \sum_n \alpha_n P_n \,, \quad \sum_n P_n = 1 \,.$$

Η διασπορά $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ των τιμών του μεγέθους γύρω από την μέση τιμή μπορεί να εκτιμηθεί από την μέση τιμή της απόστασης του A γύρω από την μέση τιμή

$$\begin{aligned}
\langle (\Delta A)^2 \rangle &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \\
&= \langle A^2 + \langle A \rangle^2 - 2A\langle A \rangle \rangle \\
&= \langle A^2 \rangle + \langle A \rangle^2 - 2\langle A \rangle \langle A \rangle \\
&= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2
\end{aligned}$$

και η *αβεβαιότητα* ορίζεται

$$\Delta A = +\sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \,.$$

Παρατηρούμε πως για τον υπολογισμό της αβεβαιότητας απαιτείται και η μέση τιμή του τετραγώνου

$$\langle A^2 \rangle = \sum_n \alpha_n^2 P_n$$

$$\Rightarrow \langle (\Delta A)^2 \rangle = \sum_n \alpha_n^2 P_n - \left(\sum_n \alpha_n P_n \right)^2 \,, \quad \sum_n P_n = 1 \quad .$$

Ό,τι ειπώθηκε αφορά φυσικά μεγέθη A που λαμβάνουν διακριτές τιμές $\alpha_1, \alpha_2, \cdots$ με πιθανότητες $P_1, P_2, \cdots$ λήψης της κάθε μιας, όπως φαίνεται στο Σχ. 2.1. Επιπλέον, στο σχήμα φαίνονται η μέση τιμή και η αβεβαιότητα. Στην στατιστική η αβεβαιότητα είναι γνωστή και ως τυπική απόκλιση.

Τα παραπάνω γενικεύονται *για συνεχείς τιμές του* A όπου αντί της πιθανότητας P_n να ληφθεί το αποτέλεσμα α_n ορίζεται η *συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας* $P(\alpha)$. Όταν η $P(\alpha)$ πολλαπλασιασθεί επί το στοιχειώδες διάστημα τιμών $d\alpha$ δίνει την πιθανότητα οι τιμές να είναι στο διάστημα $(\alpha, \alpha + d\alpha)$[6]. Τα αθροίσματα για την μέση τιμή και το

[6] Αν βάλλουμε τις τιμές του A σε κουτιά μήκους $\delta\alpha$ παίρνουμε ένα ιστόγραμμα. Ο αριθμός των τιμών σε κάθε κουτί αν διαιρεθεί με τον ολικό αριθμό στο όριο $\delta\alpha \to 0$ προσδιορίζει την αντίστοιχη πιθανότητα $P(\alpha)\, d\alpha$ και το ιστόγραμμα γίνεται η συνεχής καμπύλη $P(\alpha)$.

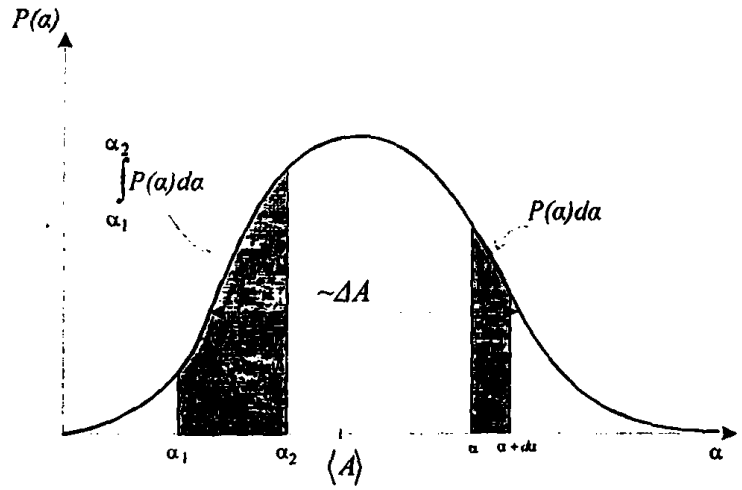
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τετράγωνο της αβεβαιότητας (διασπορά) μετατρέπονται σε ολοκληρώματα

$$\langle A\rangle = \int d\alpha\, \alpha\, P(a)\,, \quad \langle A^2\rangle = \int d\alpha\, \alpha^2\, P(a)\,, \quad \int d\alpha\, P(a) = 1$$

πάλι με την αβεβαιότητα

$$(\Delta A) = +\sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}\ .$$



Σχ. 2.2. *Η συνεχής κατανομή πυκνότητας πιθανότητας $P(\alpha)$ με $P(\alpha)\, d\alpha$ την πιθανότητα η A να έχει τιμές στο διάστημα $\alpha, \alpha + d\alpha$. Η μέση τιμή $\langle A\rangle$ και η αβεβαιότητα ΔA φαίνονται στο σχήμα.*

Η πιθανότητα οι τιμές της A να είναι στο διάστημα (a,b) είναι $P(a,b) = \int_a^b d\alpha\, P(\alpha)$ ενώ η συνολική πιθανότητα είναι προφανώς μονάδα $\int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\, P(\alpha) = 1$. Μπορείτε να φαντασθείτε πως η συνεχής καμπύλη προκύπτει από ένα ιστόγραμμα στο όριο του κουτιού μικρού εύρους.

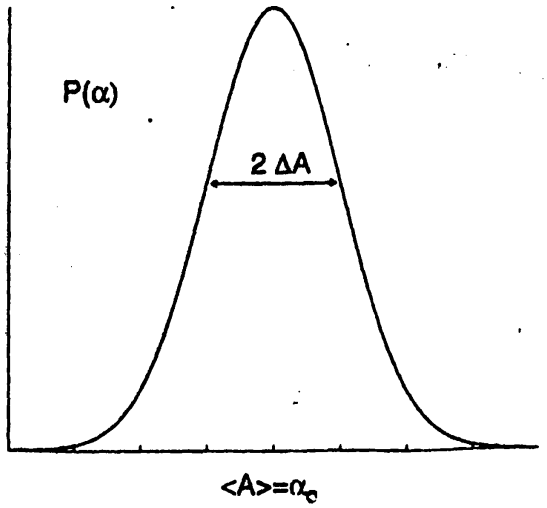
2.2.2. Η Γκαουσσιανή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(\alpha)$

Η συνάρτηση Gauss είναι πολύ συνηθισμένη[7] πυκνότητα πιθανότητας στην στατιστική. Έχει την μορφή

[7] Η Gauss εμφανίζεται πολύ συχνά λόγω γενικότερης ισχύος του κεντρικού οριακού θεωρήματος (νόμου των μεγάλων αριθμών).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$P(\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(\alpha-\alpha_0)^2}{2\sigma^2}}\ ,\quad \alpha\in(-\infty,+\infty),$$



Σχ. 2.3. *Η συνεχής κατανομή πυκνότητας πιθανότητας Gauss μέσης τιμής α_0 και διασποράς σ^2.*

είναι κανονικοποιημένη

$$\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ P(\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ e^{-\frac{(\alpha-\alpha_0)^2}{2\sigma^2}}=1,$$

δίνει μέση τιμή

$$\langle A\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ \alpha\ P(\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ \alpha\ e^{-\frac{(\alpha-\alpha_0)^2}{2\sigma^2}}=\alpha_0$$

και μέση τιμή του τετραγώνου

$$\langle A^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ \alpha^2\ P(\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\alpha\ \alpha^2\ e^{-\frac{(\alpha-\alpha_0)^2}{2\sigma^2}}=\sigma^2+\alpha_0^2\ .$$

Επομένως, η διασπορά των τιμών γύρω από την μέση τιμή είναι

$$\langle(\Delta A)^2\rangle=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2=\sigma^2+\alpha_0^2-\alpha_0^2=\sigma^2.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η αβεβαιότητα $\Delta A = \sigma$ στην συνάρτηση Gauss διαβάζεται κατευθείαν από την μορφή της. Τα παραπάνω ολοκληρώματα είναι γνωστά ως ολοκληρώματα Gauss[8].

2.3. Κβαντικές μέσες τιμές και διακυμάνσεις

Η $\Psi(x,t)$ θα προκύψει από την λύση της διαφορικής *εξίσωσης Schrodinger* όταν είναι γνωστή η αρχική συνθήκη $\Psi(x,0)$. Περιγράφει ένα *κύμα πιθανότητας*, με $|\Psi(x,t)|^2$ μια κατανομή ή *πυκνότητα πιθανότητας* εύρεσης του κβαντικού σωματίου στην θέση x την χρονική στιγμή t. Η κλασσική φυσική περιγράφεται, επίσης, από διαφορικές εξισώσεις, π.χ. στην μορφή Hamilton $dx(t)/dt = \partial H/\partial p$, $dp(t)/dt = -\partial H/\partial x$ με $H = p^2/2m + V(x)$ (την κλασσική Χαμιλτονιανή.) Η λύση των κλασσικών εξισώσεων δίνει την θέση $x(t)$ και την ορμή $p(t)$ κάθε χρονική στιγμή t, όταν οι αρχικές συνθήκες $x(0), p(0)$ είναι γνωστές. Η διαφορά της κβαντικής λύσης $\Psi(x,t)$ είναι πως το σωμάτιο αντί να έχει καθορισμένη θέση και ορμή έχει την δυνατότητα να βρεθεί σε οποιοδήποτε σημείο του διαθέσιμου χώρου με μια πιθανότητα την χρονική στιγμή t. Η πιθανότητα να βρεθεί στην απειροστή περιοχή $(x, x+dx)$ είναι $|\Psi(x,t)|^2\, dx$ ενώ η πιθανότητα να βρεθεί στην πεπερασμένη περιοχή (a,b) είναι $P(a,b) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\, dx$. Στις κβαντικές μετρήσεις[9] κάποια από τις δυνατότητες που *πριν* εκφράζονται μόνο με πιθανότητες *μετά* την μέτρηση υλοποιείται με την κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης σε μια συγκεκριμένη θέση x.

Αν η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi\,, \tag{2.24}$$

πολλαπλασιασθεί επί Ψ^* και η μιγαδική συζυγής της

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V^*\Psi^* \tag{2.25}$$

---

[8] Προκύπτουν από την διαδοχική παραγώγιση ως προς a των δύο μελών του ολοκληρώματος $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-ax^2 \pm bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{b^2/4a}$ στο παράρτημα Α.

[9] Η μέτρηση είναι η 'Αχίλλειος πτέρνα' της κβαντικής θεωρίας.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

πολλαπλασιασθεί επί Ψ, ενώ στην συνέχεια οι δύο αφαιρεθούν κατά μέλη, έχουμε

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)+\left(V-V^*\right)\Psi^*\Psi\ . \quad (2.26)$$

Η (2.26) παίρνει την μορφή

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}+\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}=\frac{1}{i\hbar}P(x,t)\left(V-V^*\right) \quad (2.27)$$

αρκεί να ορισθεί η πυκνότητα πιθανότητας $P=\Psi^*\Psi$ της οποίας η παράγωγος ως προς t δίνει $\frac{\partial P}{\partial t}=\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ και το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας $J=\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)$ του οποίου η παράγωγος ως προς x δίνει

$$\frac{\partial J}{\partial x}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) \quad . \quad (2.28)$$

Στην περίπτωση που το δυναμικό είναι πραγματικό $(V=V^*)$ το δεύτερο μέλος γίνεται μηδέν και η (2.27) είναι παρόμοια με την *κλασσική εξίσωση συνέχειας*

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}+\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}=0 \quad , \quad (2.29)$$

γεγονός που δικαιολογεί τις ονομασίες για την πυκνότητα και το ρεύμα πιθανότητας που δόθηκαν παραπάνω.

Παρατηρούμε πως:

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ επιτρέπει τον ορισμό της *πυκνότητας πιθανότητας* $P(x,t)$ ή πιθανότητα ανά μονάδα απόστασης

$$P(x,t)=|\Psi(x,t)|^2=\Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) \quad , \quad (2.30)$$

με $P(x,t)\,dx$ την πιθανότητα εύρεσης του σωματίου στην θέση $(x,x+dx)$ την χρονική στιγμή t. Η πιθανότητα εκφράζεται ισοδύναμα στο στατιστικό 'ensemble'

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

πολλών σωματίων (π.χ. μιας δέσμης) που περιγράφονται από την ίδια $\Psi(x,t)$. Το *ρεύμα (ροή) πυκνότητας πιθανότητας* ή απλώς *ρεύμα πιθανότητας*

$$J(x,t)=\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}-\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right) \tag{2.31}$$

δίνει την πιθανότητα διέλευσης του σωματίου ανά μονάδα χρόνου από την θέση x.

Από την ολοκλήρωση της εξίσωσης συνέχειας στο χωρικό διάστημα (a,b) ο ρυθμός μεταβολής της πιθανότητας[10] $\frac{d}{dt}\left(\int_a^b dx\,P(x,t)\right)=\frac{dP(a,b,t)}{dt}$

$$\frac{dP(a,b,t)}{dt}=\frac{d}{dt}\int_a^b dx\,P(x,t)=-\int_a^b dx\,\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}=J(a,t)-J(b,t) \tag{2.32}$$

αντισταθμίζεται από το ρεύμα πιθανότητας $J(a,t)-J(b,t)$ στην ίδια περιοχή. Αν το παραπάνω ολοκλήρωμα επεκταθεί σε όλο τον διαθέσιμο χώρο $(-\infty,+\infty)$ τότε

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,P(x,t)\right)=J(-\infty,t)-J(+\infty,t)=0 \tag{2.33}$$

λόγω απαίτησης μηδενισμού της Ψ και του ρεύματος J από την (2.31) στα όρια $x=\pm\infty$[11]. Από τον μηδενισμό της παραγώγου στην (2.33) το ολοκλήρωμα της ολικής πιθανότητας παραμένει ανεξάρτητο του χρόνου

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,P(x,t)=const. \tag{2.34}$$

---

[10] Η *πιθανότητα* να βρεθεί ένα σωμάτιο με x στο διάστημα (a,b) την χρονική στιγμή t δίνεται από το *ολοκλήρωμα της πυκνότητας πιθανότητας* $P(a,b,t)=\int_a^b dx\,P(x,t)$ ενώ από την διατήρηση της ολικής πιθανότητας $P(-\infty,+\infty)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,P(x,t)=1$.

[11] Μία κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ πρέπει στα όρια $x\to\pm\infty$ να μηδενίζεται γρηγορότερα από $1/\sqrt{|x|}$, $|x|\to\infty$ για να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη με $\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,|\Psi(x,t)|^2<\infty$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ η σταθερά μπορεί να επιλεγεί $const = 1$ επειδή η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ υπολογίζεται μόνο με ακρίβεια ενός σταθερού αριθμητικού συντελεστή[12]. Το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = 1 \tag{2.35}$$

σημαίνει πως το σωμάτιο θα βρεθεί κάπου με βεβαιότητα στον διαθέσιμο χώρο. Αυτό οδηγεί στην βασική σχέση *κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης*[13]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x,t)|^2 = 1 \tag{2.36}$$

για κάθε χρονική στιγμή t.

- Στην κλασσική φυσική $P(x,t)$ είναι η πυκνότητα του αριθμού των σωματίων και $J(x,t)$ είναι το ρεύμα πυκνότητας αφού μπορούμε να δούμε τις κλασσικές τροχιές των σωματίων. Όταν οι P και J πολλαπλασιασθούν επί την μάζα m η κλασσική εξίσωση συνέχειας δίνει την αρχή διατήρησης της μάζας ενώ αν πολλαπλασιασθούν επί το φορτίο e δίνει την αρχή διατήρησης του φορτίου. Στην κβαντική φυσική από την αρχή της αβεβαιότητας είναι αδύνατη η ακριβής γνώση της ορμής και της θέσης κάθε χρονική στιγμή αφού το γινόμενο των αντίστοιχων αβεβαιοτήτων (λαθών) τους Δx και Δp δεν γίνεται αυθαίρετα μικρό και ικανοποιεί την ανισότητα του Heisenberg (1.16). Η μιγαδική κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ περιγράφει την κατάσταση του σωματίου ή του κβαντικού συστήματος με *πυκνότητα πιθανότητας* το τετραγωνισμένο πλάτος $P(x,t)$ και ρεύμα πιθανότητας $J(x,t)$ που είναι διαφορετικές έννοιες από την κλασσική πυκνότητα και το ρεύμα πυκνότητας.

- Στην περίπτωση δυναμικού $V(x)$ που δεν εξαρτάται από τον χρόνο (Κεφ. 2.1.) οι λύσεις είναι της μορφής $\Psi(x,t) = \exp(-iEt/\hbar)\psi(x)$ με $\psi(x)$ τις στάσιμες καταστάσεις του συστήματος. Η χρονική εξάρτηση απουσιάζει από την πυκνότητα πιθανότητας

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

[12] Αν η $\Psi(x,t)$ είναι λύση μιας γραμμικής εξίσωσης, όπως η Schrödinger, τότε όπως μπορείτε εύκολα να διαπιστώσετε και η $c\,\Psi(x,t)$ είναι επίσης λύση, για οποιαδήποτε σταθερά c που μπορεί να είναι και μιγαδική.

[13] Οι μη κανονικοποιημένες $\Psi(x,t)$ δεν μπορεί να περιγράφουν κβαντικά σωμάτια αφού οι φυσικά πραγματοποιήσιμες καταστάσεις πρέπει να αντιστοιχούν σε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις που μηδενίζονται στα όρια, τουλάχιστον για διακριτά φάσματα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και το ρεύμα πιθανότητας γίνεται

$$J(x) = (\hbar/2im)\left[\psi^*(x)\,\partial\psi(x)/\partial x - \psi(x)\,\partial\psi^*(x)/\partial x\right] .$$

Όταν επιπλέον $V = V^*$ από την εξίσωση συνέχειας η απουσία χρονικής εξάρτησης στην P οδηγεί σε σταθερό J ανεξάρτητο του x.

➢ Η *μέση τιμή της θέσης* με αντίστοιχο τελεστή $\hat{x} = x$ υπολογίζεται από την $P(x,t)$ σύμφωνα με την στατιστική

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\,|\Psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\,\hat{x}\,\Psi(x,t) \quad , \qquad (2.37)$$

και δεν εκτιμάται βεβαίως από διαδοχικές μετρήσεις στο ίδιο σωμάτιο. Αν αυτό συνέβαινε μετά την πρώτη μέτρηση η κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης θα έδινε παρόμοιο αποτέλεσμα και στις επόμενες μετρήσεις. Η μέση τιμή λαμβάνεται από μετρήσεις της θέσης *πολλών σωματίων* σε ένα στατιστικό ensemble όπου όλα τα σωμάτια, π.χ. μιας δέσμης, περιγράφονται από την ίδια Ψ.

➢ Ο *ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής θέσης* $\langle x\rangle$ είναι η παράγωγος ως προς τον χρόνο και από την εξίσωση συνέχειας (2.31) δίνει[14]

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\,\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\,\frac{\partial}{\partial x} J$$

$$= -\frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)$$

---

[14] Στην ολοκλήρωση κατά παράγοντες $\int_a^b dx\, f\frac{\partial g}{\partial x} = f\,g\Big|_a^b - \int_a^b dx\, g\frac{\partial f}{\partial x}$ για $f = x,\ g = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}$ ο πρώτος όρος μηδενίζεται αφού στα όρια $\Psi(\pm\infty) = 0,\ \Psi^*(\pm\infty) = 0$. Έχουμε, επίσης, $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} = \Psi\Psi^*\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}$. Γενικότερα ισχύει ο τύπος μεταφοράς της παραγώγου από το ένα ολοκληρωμα στο άλλο $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)\,g^{(n)}(x) = (-1)^n\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f^{(n)}(x)\,g(x)$, μετά από n παραγοντικές ολοκληρώσεις με $f^{(n)}$ την n-οστή παράγωγο, αφού οι κυματοσυναρτήσεις και οι παράγωγοί τους στα όρια μηδενίζονται $f(x)\,g^{(n-1)}(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} = \cdots = f^{(n-1)}(x)\,g(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}$. Ο τύπος είναι ιδιαίτερα χρήσιμος στις ολοκληρώσεις που αφορούν την Ψ και τις παραγώγους της.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{im} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$= \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi = \frac{\langle p \rangle}{m}.$$

Επομένως, η *μέση τιμή της ορμής* μπορεί να ορισθεί από το ολοκλήρωμα

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, \hat{p}\, \Psi(x,t) \qquad (2.38)$$

με τον τελεστή $\hat{p}$ ανάμεσα από τις Ψ^* και Ψ ώστε να ικανοποιεί την κλασσική εξίσωση $d\langle x \rangle / dt = \langle p \rangle / m$ για τις μέσες τιμές. Από τα παραπάνω επιβεβαιώνεται και η παραδοχή του τελεστή της ορμής ως $\hat{p} = -i\hbar\, \partial / \partial x$.

➢ Γενικότερα, για οποιονδήποτε τελεστή $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ το αντίστοιχο φυσικό μέγεθος A έχει μέση τιμή

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, \hat{A}\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t). \qquad (2.39)$$

Οι μέσες τιμές του τετραγώνου θέσης είναι

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, x^2\, \Psi(x,t) \qquad (2.40)$$

και του τετραγώνου της ορμής

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(x,t)$$

$$= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

$$= +\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Rightarrow \langle p^2 \rangle = +\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left| \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right|^2 . \tag{2.41}$$

Οι αβεβαιότητες θέσης και ορμής $(\Delta x) = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, $(\Delta p) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ πρέπει προφανώς να ικανοποιούν την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg $\Delta x \, \Delta p \geq \hbar/2$. Όταν $V = V(x)$ ο τύπος της μέσης τιμής (2.39) στην χρονικά ανεξάρτητη μορφή γράφεται $\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \psi^*(x) \, \hat{A} \, \psi(x)$ με την $\psi(x)$ αντί της $\Psi(x,t)$ από την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger (2.21).

Στον τρισδιάστατο χώρο η πυκνότητα πιθανότητας $P(\vec{r},t)$ και η ροή πυκνότητας πιθανότητας $\vec{J}(\vec{r},t)$ είναι

$$P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 \tag{2.42}$$

και

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^*(\vec{r},t) \, \vec{\nabla} \Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t) \, \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r},t) \right]. \tag{2.43}$$

Όταν το δυναμικό είναι πραγματικό ικανοποιείται η τρισδιάστατη εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial P(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r},t) = 0 \tag{2.44}$$

και το ολοκλήρωμα του διανύσματος $\vec{J}$ σε μια επιφάνεια είναι ίσο με την πιθανότητα το σωμάτιο να διέλθει από την επιφάνεια ανά μονάδα χρόνου. Η ολική πιθανότητα παραμένει σταθερή όπως το ολικό φορτίο στον ηλεκτρομαγνητισμό αφού από τον νόμο του Gauss $\frac{d}{dt} \int d^3\vec{r} \; P(\vec{r},t) = -\int d^3\vec{r} \; \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r},t) = -\oint d\vec{S} \; \vec{J} = 0$.

Άσκηση 1. Δίνεται η φθίνουσα με εκθετικό τρόπο κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t) = A \, e^{-iEt/\hbar} \, e^{-\alpha|x|}$, $x \in (-\infty, +\infty)$, με τις A, E, α, πραγματικές σταθερές:

(i) Να κανονικοποιηθεί η Ψ για να υπολογισθεί η σταθερά A.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

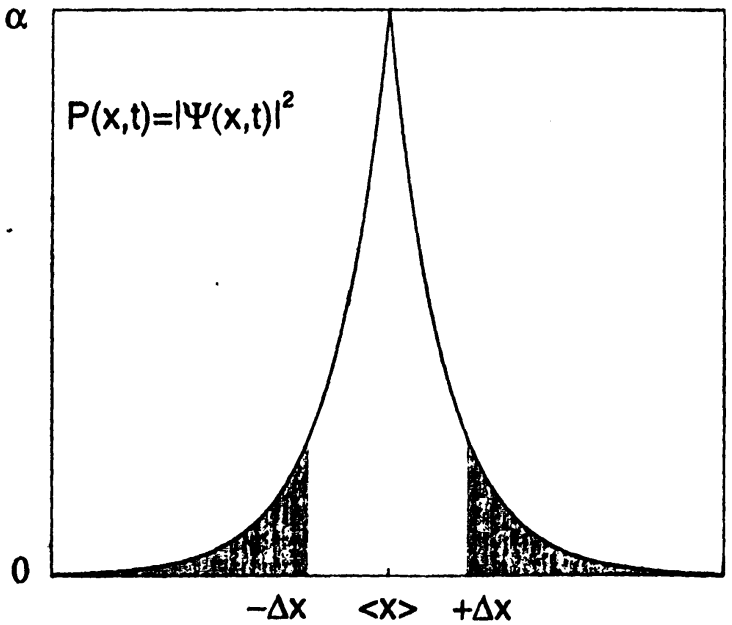
(ii) Να υπολογισθούν οι μέσες ή αναμενόμενες τιμές $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle$ και η αβεβαιότητα (ή τυπική απόκλιση) Δx.

(iii) Να υπολογισθούν οι μέσες ή αναμενόμενες τιμές $\langle p\rangle, \langle p^2\rangle$ και η αβεβαιότητα (ή τυπική απόκλιση) Δp. Να υπολογισθεί το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x\,\Delta p$ και να ελεγχθεί αν ικανοποιεί την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.

(iv) Να σχεδιασθεί η κατανομή (ή πυκνότητα) πιθανότητας $P(x,t)=|\Psi(x,t)|^2$ και να υπολογισθεί η πιθανότητα το σωμάτιο να είναι έξω από την περιοχή $[\langle x\rangle-\Delta x, \langle x\rangle+\Delta x]$.

(v) Αν $P(a,b)$ είναι η πιθανότητα το σωμάτιο να βρεθεί στο διάστημα (a,b) την χρονική στιγμή t να δειχθεί ότι $\dfrac{dP(a,b)}{dt}=J(a,t)-J(b,t)$ όπου $J(x,t)=\dfrac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\dfrac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)$ είναι το ρεύμα πιθανότητας. Να ερμηνευθεί το αποτέλεσμα.

Λύση:



Σχ.2.4. *Η χρονικά ανεξάρτητη πυκνότητα πιθανότητας* ($A=\sqrt{a}$) *γίνεται* $P(x,t)=|\Psi(x,t)|^2=\alpha\, e^{-iEt/\hbar}\, e^{+iEt/\hbar}\, e^{-2\alpha|x|}=\alpha\, e^{-2\alpha|x|}=|\psi(x)|^2$ *με* $|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2=\alpha\, e^{-2\alpha x}$, *για* $x>0$ *και* $|\psi(x)|^2=\alpha\, e^{+2\alpha x}$, *για* $x<0$, *με* $\langle x\rangle=0$ *και* $\Delta x=\dfrac{\sqrt{2}}{2\alpha}$. *Η πιθανότητα που ζητείται στο ερώτημα* (iv) *δίνεται από το γραμμοσκιασμένο εμβαδόν.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(i) Η κανονικοποίηση της Ψ γίνεται με το ολοκλήρωμα[15]:

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

$$\Rightarrow A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(e^{-iEt/\hbar}\, e^{-\alpha|x|}\right)^* e^{-iEt/\hbar}\, e^{-\alpha|x|} = 1$$

$$\Rightarrow A^2 e^{+iEt/\hbar} e^{-iEt/\hbar} \left(\int_{-\infty}^{0} dx\, e^{-2\alpha(-x)} + \int_{0}^{+\infty} dx\, e^{-2\alpha x} \right) = 1$$

$$\Rightarrow A^2 \left(\left.\frac{e^{2\alpha x}}{2\alpha}\right|_{-\infty}^{0} - \left.\frac{e^{-2\alpha x}}{2\alpha}\right|_{0}^{\infty} \right) = 1$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\alpha}\,,$$

που επιτρέπει τον υπολογισμό της σταθεράς A. Από την μορφή της $\Psi(x,t) = \exp(-i\,Et/\hbar)\,\psi(x)$ με την επιπλέον φάση λόγω της χρονικής εξάρτησης θα αρκούσε όλοι οι υπολογισμοί να γίνουν με την $\psi(x) = \sqrt{\alpha}\,\exp(-\alpha\,|x|)$.

(ii) Η μέση τιμή θέσης $\langle x \rangle$ υπολογίζεται από την κανονικοποιημένη $\Psi(x,t) = \sqrt{\alpha}\; e^{-iEt/\hbar}\; e^{-\alpha|x|}$ με το περιττό ολοκλήρωμα

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, e^{-2\alpha|x|} = 0\,.$$

---

[15] Τα εκθετικά ολοκληρώματα υπολογίζονται στο Παράρτημα Α με διαδοχικές παραγωγίσεις του $\int_0^{+\infty} dx\, e^{-\alpha x} = (1/\alpha)$ ως προς α.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και του τετραγώνου $\langle x^2 \rangle$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2\, P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, x^2\, \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2\, e^{-2\alpha|x|} = 2\alpha \int_{0}^{+\infty} dx\, x^2\, e^{-2\alpha x} = 2\alpha \frac{2!}{(2\alpha)^3} = \frac{1}{2\alpha^2}.$$

Η αβεβαιότητα θέσης είναι $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \dfrac{\sqrt{2}}{2\alpha}$.

(iii) Ο υπολογισμός των μέσων τιμών ορμής αφού $\partial\Psi/\partial x = -\alpha\Psi$, $x > 0$ και $\partial\Psi/\partial x = \alpha\Psi$, $x < 0$, είναι

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$= -i\hbar\alpha \left(\int_{-\infty}^{0} dx\, \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t) - \int_{0}^{\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t) \right) = 0$$

και

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left| \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right|^2$$

$$= \hbar^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t) = \hbar^2 \alpha^2 .$$

Η αβεβαιότητα της ορμής είναι $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \hbar\alpha$. Το γινόμενο αβεβαιοτήτων $\Delta x\, \Delta p = \dfrac{\sqrt{2}}{2\alpha}\hbar\alpha = \dfrac{\sqrt{2}\hbar}{2} \geq \dfrac{\hbar}{2}$ είναι σε συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας.

(iv) Η πιθανότητα που μας ενδιαφέρει είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$P(-\infty,\langle x\rangle-\Delta x)+P(\langle x\rangle+\Delta x,+\infty)=\int_{-\infty}^{\langle x\rangle-\Delta x}dx\ P(x,t)+\int_{\langle x\rangle+\Delta x}^{+\infty}dx\ P(x,t)=$$

$$2\int_{\langle x\rangle+\Delta x}^{+\infty}dx\ |\Psi(x,t)|^2=2\int_{\sqrt{2}/2\alpha}^{+\infty}dx\ a\,e^{-2\alpha x}=2\alpha\left(-\frac{1}{2\alpha}\right)e^{-2\alpha x}\Big|_{\sqrt{2}/2\alpha}^{+\infty}=e^{-\sqrt{2}}.$$

Άρα το σωμάτιο με πιθανότητα ίση με $e^{-\sqrt{2}}\approx 0.24$ ή 24% μπορεί να βρεθεί έξω από την περιοχή με όρια $\langle x\rangle-\Delta x,\langle x\rangle+\Delta x$. Η πιθανότητα να βρεθεί εντός αυτής της περιοχής είναι $1-e^{-\sqrt{2}}\approx 0.76$.

(v) Από την εξίσωση συνέχειας για ορισμένη χρονική στιγμή t

$$\frac{dP(a,b)}{dt}=\int_a^b dx\,\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=-\int_a^b dx\,\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}=J(a,t)-J(b,t)\,.$$

Άσκηση 2. Δίνεται η κανονικοποιημένη χρονικά ανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση

σωματίου

$$\psi(x)=2\alpha\sqrt{\alpha}xe^{-\alpha x},\quad x>0$$
$$=0,\quad x<0$$

με την α πραγματική σταθερά.

(i) Για ποια τιμή του x η $P(x)=|\psi(x)|^2$ έχει μέγιστο;

(ii) Ποιες είναι οι τιμές των $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, Δx;

(iii) Ποια είναι η πιθανότητα σωμάτιο να βρεθεί στο διάστημα $\left[0,\frac{1}{\alpha}\right]$;

(iv) Να υπολογίσετε τις $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, Δp και το γινόμενο $\Delta x\,\Delta p$.

Απάντηση:

(i) $x=\frac{1}{\alpha}$, **(ii)** $\langle x\rangle=\frac{3}{2\alpha}$, $\langle x^2\rangle=\frac{3}{\alpha^2}$, $\Delta x=\sqrt{3}/2\alpha$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(iii) $P\left[0 < x < \frac{1}{\alpha}\right] = \frac{1}{2}\int_0^2 dy\, y^2 e^{-y} = 1 - 5e^{-2} \approx 0.32$ με την αντικατάσταση $y = 2\alpha x$ και διαδοχικές εφαρμογές της ολοκλήρωσης κατά παράγοντες.

(iv) $\langle p\rangle = 0$, $\langle p^2\rangle = \hbar^2\alpha^2$, $\Delta p = \hbar\alpha$, $\Delta x\, \Delta p = \frac{\sqrt{3}}{2\alpha}\hbar\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$.

Άσκηση 3. Δίνεται η χρονικά ανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση σωματίου τύπου Gauss[16]

$$\psi(x) = A\, e^{-\alpha x^2/2}.$$

Να υπολογισθεί η σταθερά A από την κανονικοποίηση και να δειχθεί ότι η αβεβαιότητα θέσης Δx και ορμής Δp έχουν γινόμενο ακριβώς $\hbar/2$. Η κυματοσυνάρτηση αυτή περιγράφει την *χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη του απλού αρμονικού ταλαντωτή n=0. Να* βρεθεί η μέση ενέργεια $\langle E\rangle$ στην $\psi(x)$. Από την απαίτηση η $\psi(x)$ να είναι λύση της εξίσωσης Schrödinger στο δυναμικό $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ να υπολογισθεί η τιμή της παραμέτρου α και να βρεθεί η ενεργειακή στάθμη που αντιστοιχεί.

Λύση:

$$A^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}, \quad \langle x\rangle = 0, \quad \langle p\rangle = 0, \quad \left\langle(\Delta x)^2\right\rangle = \frac{1}{2\alpha}, \quad \left\langle(\Delta p)^2\right\rangle = \frac{\alpha\hbar^2}{2},$$

$$\Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}, \qquad \langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2} = \frac{\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{2}$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\alpha} = \frac{\hbar^2}{4m\hbar}\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{4}\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση είναι

---

[16] Τα ολοκληρώματα Gauss υπολογίζονται με διαδοχικές παραγωγίσεις του $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$ ως προς α στο Παράρτημα Α.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

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

και οι παράγωγοι της ως προς x

$$\psi'(x) = -\alpha x \ \psi(x)$$
$$\psi''(x) = \left(\alpha^2 x^2 - \alpha\right)\psi(x) .$$

Με αντικατάσταση στην εξίσωση Schrodinger στο δυναμικό $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$
$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha^2 x^2 - \alpha\right)\psi(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\,\psi(x) = E\psi(x)$$
$$\Rightarrow E = \left(\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\right)x^2 + \frac{\hbar^2\alpha}{2m}$$

και την λογική *απαίτηση η ιδιοτιμή E να είναι ανεξάρτητη της x* δίνει για την α[17]

$$\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = 0$$
$$\Rightarrow \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} .$$

Επομένως, η ενέργεια

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

[17] Παρατηρείστε πως η σταθερά α έχει διαστάσεις μήκους^{-2} ώστε ο εκθέτης να είναι αδιάστατος ενώ η $|\psi(x)|^2$ έχει διαστάσεις μήκους^{-1} για να δίνει αριθμό που εκφράζει πιθανότητα αν πολλαπλασιασθεί επί το μήκος dx. Οι **κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ στην μία διάσταση έχουν πάντα διαστάσεις μήκους$^{-1/2}$**, όπως φαίνεται π.χ. στον παράγοντα κανονικοποίησης του απειρόβαθου πηγαδιού (Κεφ.1, Α1).

είναι ίση με την χαμηλότερη κβαντική ενέργεια $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ του *απλού αρμονικού ταλαντωτή* μάζας m και κυκλικής συχνότητας ω με αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$.

Άσκηση 4. Να υπολογισθούν οι $< x >$, $< x^2 >$, Δx, $< p >$, $< p^2 >$, Δp και το γινόμενο $\Delta x\ \Delta p$ για σωμάτιο στην n–οστή στάθμη απειρόβαθου πηγαδιού στο $(0, a)$ που περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a}, \quad x \in (0, a) \ .$$

Απάντηση:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2},\ \langle p \rangle = 0,\ \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{12}\left(4 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right),\ \langle p^2 \rangle = \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2 n^2,$$

και $\Delta x\ \Delta p = \left(\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n^2}}\right) n\hbar$.

2.4 Το ελεύθερο σωμάτιο

Στη απλή περίπτωση του *ελεύθερου σωματίου* όπου το δυναμικό είναι ακριβώς $V(x) = 0$ η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \tag{2.45}$$

επιλύεται ακριβώς[18]. Αν γραφεί στην μορφή

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = 2mE/\hbar^2, \tag{2.46}$$

επιδέχεται λύσεις του τύπου *τρεχόντων κυμάτων* $\psi(x) = A\exp(\pm ikx)$, με $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2} > 0$, A μια σταθερά και *συνεχές ενεργειακό φάσμα* $E = \hbar^2 k^2/2m$. Η λύση $\exp(+ikx)$ μπορεί να ερμηνευθεί ως τρέχον κύμα προς τα δεξιά στον x – άξονα

[18] Μην ξεχνάτε πως η εξίσωση Schrödinger κατασκευάσθηκε να έχει γνωστή λύση σε αυτήν την περίπτωση.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και η $\exp(-ikx)$ ως τρέχον κύμα προς τα αριστερά στον $x-$άξονα. Η γενική λύση της εξίσωσης Schrödinger για το ελεύθερο σωμάτιο αφού είναι δεύτερης τάξης εκφράζεται και με τον γραμμικό συνδυασμό των δύο ανεξάρτητων λύσεων, την υπέρθεση των δύο κυμάτων

$$\psi(x) = A\exp(+ikx) + B\exp(-ikx), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \tag{2.47}$$

με A, B δύο αυθαίρετες σταθερές. Για $A = B$ ή $A = -B$ μπορεί να πάρει την μορφή[19] *στάσιμων κυμάτων* $\psi(x) = A\cos kx$, $\psi(x) = B\sin kx$ με νέες σταθερές A, B και ισοδύναμη γενική λύση

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \tag{2.48}$$

που συνήθως χρησιμοποιείται όταν το δυναμικό είναι περιορισμένο. Η χρονικά εξαρτημένη κυματοσυνάρτηση είναι γινόμενο της $\psi(x)$ με τον χρονικό παράγοντα φάσης $\exp(-iEt/\hbar)$ και γράφεται στην γνωστή μορφή μονοδιάστατου επίπεδου κύματος

$$\Psi(x,t) = A\exp[i(+kx - \omega t)] + B\exp[i(-kx - \omega t)] \tag{2.49}$$

με $\omega = E/\hbar$, $k = p/\hbar$ με E, p την ενέργεια και ορμή του συστήματος.

✓ Η πυκνότητα πιθανότητας $P(x,t)$ και το ρεύμα πιθανότητας $J(x,t)$ για τρέχοντα κύματα $\Psi(x,t) = A\exp(-iEt/\hbar)\exp(\pm ikx)$, $k > 0$, υπολογίζονται με αντικατάσταση στους ορισμούς (2.30), (2.31)

$$P(x,t) = |A|^2 \tag{2.50}$$

και

$$J(x,t) = \pm|A|^2 \frac{\hbar k}{m}. \tag{2.51}$$

Το πρόσημο $\pm$ αφορά την διεύθυνση του ρεύματος στον άξονα x που μπορεί να είναι θετικής $(+)$ ή αρνητικής $(-)$ φοράς. Η πυκνότητα πιθανότητας σωματίων είναι $|A|^2$, π.χ. ανά nm, που όταν πολλαπλασιασθεί με dx σε nm δίνει έναν αριθμό (που εκφράζει πιθανότητα)[20] ενώ όταν πολλαπλασιασθεί με την ταχύτητα p/m δίνει το ρεύμα J. Οι κυματοσυναρτήσεις στάσιμων κυμάτων $\Psi(x,t) = A\exp(-iEt/\hbar)\cos kx$ ή $\Psi(x,t) = A\exp(-iEt/\hbar)\sin kx$ δίνουν πυκνότητες πιθανότητας $P(x,t) = |A|^2\cos^2 kx$, $|B|^2\sin^2 kx$ με μηδενικό ρεύμα πιθανότητα $J(x,t) = 0$ όπως αναμένεται για στάσιμα κύματα.

---

[19] $e^{\pm i\varphi} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi$

[20] Η σταθερά κανονικοποίησης έχει διαστάσεις μήκους$^{-1/2}$ (π.χ. nm$^{-1/2}$).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το ρεύμα J στο δυναμικό $V(x)$ είναι πάντα μηδέν για πραγματικές $\psi(x)$ από την (2.31).

Σχόλια:

1. Παρατηρούμε πως η κανονικοποίηση της Ψ στην περίπτωση του ελεύθερου σωματίου (2.49) αποτυγχάνει σύμφωνα με την (2.36) αφού το ολοκλήρωμα απειρίζεται

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x,t)|^2 \to \infty \qquad (2.52)$$

αντί να είναι μονάδα. Αυτό είναι αναμενόμενο αφού το ελεύθερο σωμάτιο όπως και το επίπεδο κύμα μιας συχνότητας είναι εξιδανικευμένες περιπτώσεις. Το ελεύθερο σωμάτιο δεν είναι περιορισμένο σε κάποιο σημείο του χώρου και παρά το γεγονός ότι η Ψ είναι συνεχής και πεπερασμένη παντού η πιθανότητα να το βρούμε σε μια περιοχή στο διάστημα $(-\infty,+\infty)$ μηδενίζεται.

2. Η ταχύτητα υ του αντίστοιχου κλασσικού σωματίου δεν συμπίπτει με την φασική ταχύτητα του κύματος $\upsilon_{\phi\alpha\sigma} = \omega/k$. Από τις σχέσεις σωματίου-κύματος de Broglie $E = \hbar\omega$ και $p = \hbar k$ αφού $V = 0$ η φασική ταχύτητα του κύματος

$$\upsilon_{\phi\alpha\sigma} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{m\upsilon^2}{2m\upsilon} = \frac{\upsilon}{2}$$

είναι ακριβώς η μισή της ταχύτητας του σωματίου. Πως όμως συμβιβάζεται αυτό ποσοτικά με τον δυϊσμό σωματίου-κύματος;

Διέξοδοι:

1. Ένας τρόπος να αποφευχθεί το πρόβλημα της κανονικοποίησης για την $\Psi(x,t)$ του ελεύθερου σωματίου είναι να θεωρηθεί το σωμάτιο περιορισμένο σε μια περιοχή του χώρου μήκους L (τελικά θα ληφθεί $L \to \infty$). Αν αντί $\pm ikx$ γράψουμε ikx με το k θετικό και αρνητικό το πρόβλημα παύει να υπάρχει με την κανονικοποίηση που δίνει

$$\int_0^L dx\, |\Psi(x,t)|^2 = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_0^L dx\, \left|e^{i(kx - Et/\hbar)}\right|^2 = 1 \Rightarrow A = \sqrt{1/L} \quad . (2.53)$$

Περαιτέρω μπορούμε να θεωρήσουμε πως η κυματοσυνάρτηση *είναι περιοδική* (η ίδια σε διαδοχικά κουτιά μήκους L) με την συνθήκη

$$\Psi(x,t) = \Psi(x+L,t) \qquad (2.54)$$

απ' όπου

$$A\, e^{ikx} = A\, e^{ik(x+L)} \,. \qquad (2.55)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και

$$e^{ikL} = 1 \Rightarrow \cos kL = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \ . \tag{2.56}$$

Άρα, οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις είναι

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{1}{L}}\, e^{-iEt/\hbar}\, e^{i(2\pi n/L)x} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{2.57}$$

ενώ η ενέργεια λαμβάνει τις διακριτές τιμές

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2 \quad , \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \ . \tag{2.58}$$

Η *συνθήκη περιοδικότητας* που επιβάλαμε στην κυματοσυνάρτηση έκανε το *συνεχές* ενεργειακό φάσμα $E = p^2/2m$ του ελεύθερου σωματίου *διακριτό* που γίνεται ξανά συνεχές στο όριο $L \to \infty$. Το πρόβλημα της κανονικοποίησης με την γραφή της κυματοσυνάρτησης στην μορφή (2.57) κατά κάποιον τρόπο αίρεται. Το μήκος L δεν έχει ιδιαίτερη φυσική σημασία και όταν ταυτοχρόνως $n \to \infty$ και $L \to \infty$ το κυματάνυσμα k από την (2.56) παραμένει σταθερό με θετικές και αρνητικές τιμές. Οι λύσεις για το ελεύθερο σωμάτιο είναι της μορφής $\Psi(x,t) = \sqrt{1/L}\, \exp(-iEt/\hbar + ikx)$ με τον παράγοντα κανονικοποίησης $\sqrt{1/L}$ να απαλείφεται στους υπολογισμούς που μας ενδιαφέρουν.

2. Ο δυϊσμός σωματίου-κύματος από τις σχέσεις de Broglie είναι συνεπής αλλά με την ταχύτητα του *κυματοπακέτου* που αντιστοιχεί στο σωμάτιο. Αυτό φαίνεται σε ένα απλό παράδειγμα υπέρθεσης δύο μόνο ημιτονοειδών κυμάτων με τις ίδιες σχεδόν συχνότητες. Το κύμα που θα προκύψει από την συμβολή τους κινείται με μια διαφορετική ταχύτητα, συνήθως μικρότερη. Έστω οι

$$f(x,t) = \sin(kx - \omega t), \quad g(x,t) = \sin(k'x - \omega' t)$$

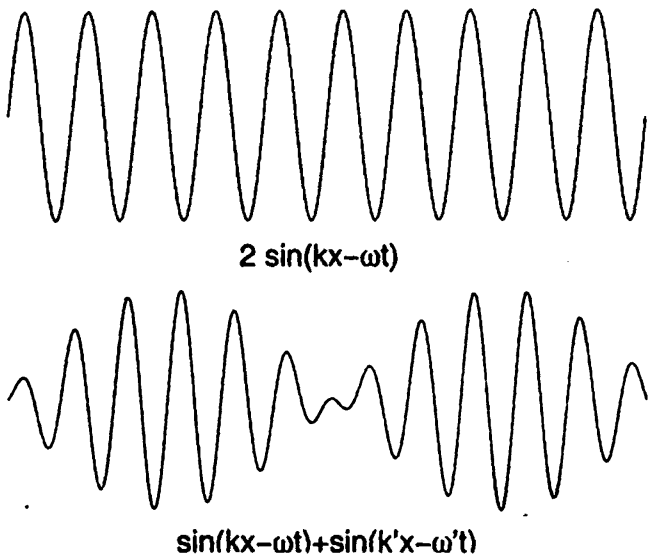
που περιγράφουν κύματα με $k \approx k', \omega \approx \omega'$. Το άθροισμα των δύο κυμάτων με την βοήθεια τριγωνομετρικών ταυτοτήτων γράφεται

$$f(x,t) + g(x,t) = \sin(kx - \omega t) + \sin(k'x - \omega' t)$$
$$= \cos\left(\frac{k-k'}{2}x - \frac{\omega - \omega'}{2}t\right) \sin\left(\frac{k+k'}{2}x - \frac{\omega + \omega'}{2}t\right)$$

και αφού $(k+k')/2 \approx k$ και $(\omega + \omega')/2 \approx \omega$ γίνεται

$$f(x,t) + g(x,t) = \cos\left(\frac{dk}{2}x - \frac{d\omega}{2}t\right) f(x,t) \ .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 2.5. *Το άθροισμα δύο κυμάτων με περίπου ίδιες παραμέτρους* $k \approx k'$, $\omega \approx \omega'$. *Το κυματοπακέτο (το περίγραμμα τύπου* cos *στο κάτω σχήμα) κινείται με ταχύτητα ομάδας ίση με την κλασσική ταχύτητα του σωματίου ενώ το κύμα με ταχύτητα φάσης την μισή της κλασσικής ταχύτητας.*

Η υπέρθεση των δύο κυμάτων που φαίνεται στο σχήμα συμπεριφέρεται ως το κύμα $f(x,t) = \sin(k\,x - \omega\,t)$ ταχύτητας ω/k που μεταφέρει το κυματοπακέτο $\cos((dk/2)x - (d\omega/2)t)$ ταχύτητας $d\omega/dk$. Στην περίπτωση αυτή το κυματοπακέτο κινείται με την ταχύτητα ομάδας $\upsilon_{ομάδας} = d\omega/dk$ ενώ το κύμα με την φασική ταχύτητα $\upsilon_{φασ} = \omega/k$. Η ταχύτητα ομάδας του κυματοπακέτου είναι ακριβώς ίση με την κλασσική ταχύτητα του αντίστοιχου σωματίου

$$\upsilon_{ομάδας} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m} = \upsilon\,, \qquad (2.59)$$

σε αγαστή συμφωνία με την αρχή κύματος-σωματίου de Broglie.

3. Η κανονικοποίηση του συνεχούς φάσματος ελεύθερου σωματίου στο κεφάλαιο 3.3 θα γίνει με την βοήθεια της *συνάρτησης δέλτα*.

Άσκηση 5. Να υπολογισθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές του τελεστή $-i\dfrac{d}{dx}$, όταν $\psi(x) = \psi(x+L)$, $L = σταθ$. Από τις λύσεις χωρίς την οριακή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συνθήκη να καταγραφούν οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής p για το ελεύθερο σωμάτιο. Να ευρεθούν και οι ιδιοτιμές ενέργειας και να εξετασθούν οι εκφυλισμοί ενέργειας και ορμής.

Λύση: Ο τελεστής $-i\dfrac{d}{dx}$ έχει εξίσωση ιδιοτιμών

$$-i\frac{d}{dx}\psi(x) = \lambda\,\psi(x) \tag{2.60}$$

με λύση την

$$\psi(x) = C\,e^{i\lambda x}\,,\ C = \sigma\tau\alpha\theta. \tag{2.61}$$

Από την ικανοποίηση της οριακής συνθήκης $\psi(x) = \psi(x+L)$

$$C\,e^{i\lambda x} = C\,e^{i\lambda\,(x+L)}$$

$$\Leftrightarrow e^{i\lambda L} = 1$$

$$\Leftrightarrow \cos\lambda L = 1$$

$$\Leftrightarrow \lambda L = 2\pi\,n,\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

Άρα οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του $-i\dfrac{d}{dx}$ γίνονται

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{L}n,\quad \psi_n(x) = C e^{i\frac{2\pi}{L}xn},\quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{2.62}$$

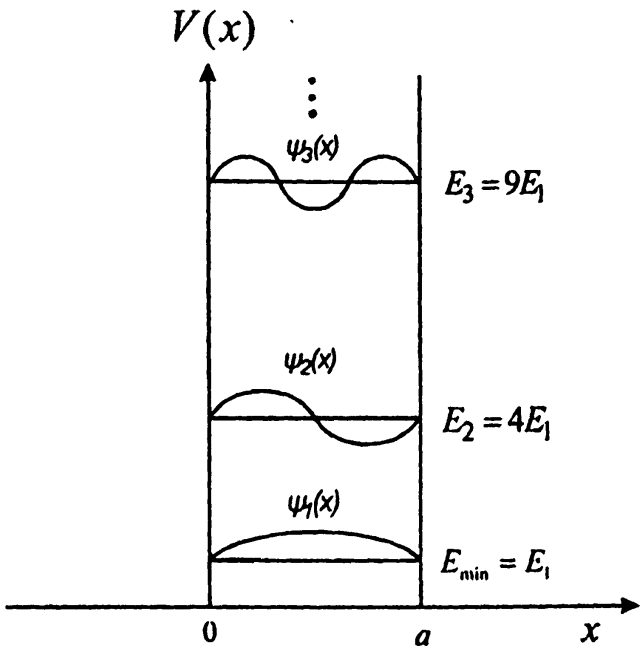
Παρομοίως, οι *ιδιοτιμές του τελεστή ορμής* $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ για ελεύθερο σωμάτιο (χωρίς την παραπάνω οριακή συνθήκη) με κύματα που κινούνται προς στις δύο κατευθύνσεις στον x άξονα είναι $\pm\hbar\,k$ με θετικό k και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις $\Psi_\pm(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi_\pm(x) = A\,e^{-iEt/\hbar}\,e^{\pm ikx}$. Οι *ιδιοτιμές ενέργειας* που αντιστοιχούν στις $\Psi_\pm(x,t)$ από την $\hat{H}\,\Psi_\pm = E\,\Psi_\pm$ με την αντικατάσταση του τελεστή $\hat{H}$ είναι $E = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ και το ενεργειακό φάσμα είναι συνεχές. Το φαινόμενο στην ίδια ιδιοτιμή να αντιστοιχούν διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις ονομάζεται *εκφυλισμός*. Στο ελεύθερο σωμάτιο η *ενέργεια E είναι διπλά εκφυλισμένη* επειδή αντιστοιχεί σε δύο κυματοσυναρτήσεις $\Psi_\pm(x,t)$. Η ορμή *δεν είναι εκφυλισμένη* επειδή οι $\pm\hbar\,k$ αντιστοιχούν στις $\Psi_\pm(x,t)$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

➤ **Α1.** Να επιλυθεί η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger στο *απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού* του σχήματος όπου η λύση $\psi(x)$ μηδενίζεται στα όρια $x = 0$ και $x = a$. Παρά την φαινομενική εξιδανίκευση του δυναμικού το αντίστοιχο φυσικό πρόβλημα είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον αφού το δυναμικό περιγράφει σωμάτια που κινούνται ελεύθερα στο διάστημα 0 μέχρι a σε ένα 'σύρμα' μήκους a. Στον τρισδιάστατο χώρο το πρόβλημα αντιστοιχεί σε ελεύθερα σωμάτια *σε κυβικό κουτί* πλευράς a. Αν εποικισθούν οι ενεργειακές στάθμες που θα προκύψουν τοποθετώντας όλα τα ηλεκτρόνια σε αυτές μέχρι την ενέργεια Fermi προκύπτει η *θεωρία του ηλεκτρονικού αερίου* της στατιστικής (*αέριο Fermi*) που ερμηνεύει πολλές κβαντικές ιδιότητες στις χαμηλές θερμοκρασίες, όπως η θερμοχωρητικότητα των στερεών. Όταν τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν με δυνάμεις Coulomb πάλι μπορεί να χρησιμοποιηθεί η ίδια εικόνα αλλά με *οιονεί-σωμάτια* στην θέση των σωματίων, σύμφωνα με την θεωρία του Landau (*υγρό Fermi*).

Λύση:



Εκτός $(x \le 0, x \ge a)$: Αφού το δυναμικό είναι άπειρο το σωμάτιο είναι αδύνατον να βρεθεί στην περιοχή αυτή όπου η λύση είναι $\psi(x) = 0$.

Εντός $(0 < x < a)$: Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger ικανοποιείται με δυναμικό $V(x) = 0$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x),$$

που μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = 2mE/\hbar^2,$$

με $E > 0$.[21] Παρατηρούμε πως την ικανοποιούν οι συναρτήσεις $\sin kx$ και $\cos kx$ αφού αν παραγωγισθούν δύο φορές δίνουν, εκτός από πολλαπλασιαστικές σταθερές, τον εαυτό τους:

$$\frac{d}{dx}\sin kx = k\cos kx \qquad \frac{d}{dx}\cos kx = -k\sin kx$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin kx = -k^2\sin(kx) \qquad \frac{d^2}{dx^2}\cos kx = -k^2\cos kx.$$

Επομένως, η γενική λύση της εξίσωσης[22] είναι ο γραμμικός συνδυασμός των δύο λύσεων για το ελεύθερο σωμάτιο

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx, \quad E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}.$$

Επισημαίνεται πως οι πλήρεις λύσεις θα προκύψουν από τις *οριακές συνθήκες* στα σημεία $x = 0, a$ αφού $\sin n\pi = 0, n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$.

$x = 0$: $\qquad \psi(0) = 0 \Rightarrow A\cos 0 + B\sin 0 = 0 \Rightarrow A = 0.$

$$x = a: \qquad \begin{cases} \psi(a) = 0 \Rightarrow B\sin ka = 0 \\ \qquad\qquad \Rightarrow \sin ka = 0 \\ \Rightarrow k = \dfrac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \end{cases}$$

Επομένως οι λύσεις[23] είναι

$$\psi_n(x) = B\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

με την B θετική πραγματική σταθερά που θα προκύψει από την κανονικοποίηση

---

[21] Όταν $E < 0$ η εξίσωση γράφεται $\psi(x)'' - \kappa^2\psi(x) = 0$ με $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$. Την εξίσωση ικανοποιούν οι $e^{+\kappa x}$ και $e^{-\kappa x}$ και ο γραμμικός τους συνδυασμός δεν μηδενίζεται για $x = a$. Άρα, δεν μπορεί να έχουμε $E < 0$ σε αυτό το πρόβλημα.

[22] Επιλέξαμε στάσιμα κύματα στην ελεύθερη κίνηση εντός του πηγαδιού για προφανείς λόγους.

[23] Αγνοούμε την τιμή $n = 0$ γιατί δίνει παντού $\psi = 0$ ενώ οι αρνητικές τιμές του n δίνουν ίδιες λύσεις με τις θετικές τιμές του n.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_n^*(x)\psi_n(x) = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^a dx\, |B|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^a dx \left(\frac{1-\cos\frac{2n\pi x}{a}}{2} \right) = 1$$

$$\Rightarrow |B|^2 \frac{a}{2} - |B|^2 \frac{a}{2n\pi} \left(\frac{\sin\frac{2n\pi a}{a} - \sin 0}{2} \right) = 1$$

$$\Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Οι κανονικοποιημένες λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για σωμάτιο μάζας m στο απειρόβαθο πηγάδι εύρους a τοποθετημένου στο $(0, a)$ είναι οι ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

με διαστάσεις μήκους$^{-1/2}$ ώστε το μέτρο στο τετράγωνο αν πολλαπλασιασθεί επί μήκος δίνει έναν αριθμό που εκφράζει πιθανότητα. Με αντικατάσταση των $\psi_n(x)$ στην εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right) = E\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right) = E\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)$$

προκύπτουν οι αντίστοιχες διακριτές ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \quad .$$

Το ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα προκύπτει από την κινητική ενέργεια $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ του σωματίου που είναι ελεύθερο εντός του πηγαδιού αν γίνει η αντικατάσταση $k = n\pi/a$ που ευρέθη παραπάνω. Άρα, με την επιλογή του k στις λύσεις $\sin kx$ και $\cos kx$ η ορμή είναι ακριβώς $p = \hbar k$.

Σχόλια:

- ✓ Μόνο ορισμένες ενέργειες επιτρέπονται. Το ενεργειακό φάσμα είναι *διακριτό*.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- ✓ Η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ δεν είναι μηδέν όπως στην κλασσική φυσική αλλά είναι η κβαντική *ενέργεια μηδενικού σημείου* του απειρόβαθου πηγαδιού.
- ✓ Παρατηρείστε στο σχήμα πως η $\psi_n(x)$ εμφανίζει $n-1$ κόμβους όπου μηδενίζεται, εκτός από τα όρια $x = 0, a$. Η μορφή των $\psi_n(x)$ είναι αυτή των στάσιμων κυμάτων αφού πρέπει να μηδενίζονται στα όρια και εκτός του πηγαδιού λόγω της παρουσίας άπειρου δυναμικού.
- ✓ Το ολοκλήρωμα που περιλαμβάνει κανονικοποίηση και ορθογωνιότητα των $\psi_n(x)$ μπορεί να υπολογισθεί ταυτόχρονα

$$\int_0^a dx\, \psi_n^*(x)\, \psi_m(x) = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a}$$

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

$$= \frac{\sin(n-m)\pi}{a} - \frac{\sin(n+m)\pi}{a}$$

$$= \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

και οι $\psi_n(x)$ λέγεται ότι είναι *ορθοκανονικές* (κανονικοποιημένες για $n = m$ και ορθογώνιες όταν $n \neq m$).

Συνοψίζουμε τα βήματα επίλυσης της εξίσωσης Schrödinger στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού $V(x)$:

1. Γραφή της Χαμιλτονιανής και της εξίσωσης Schrödinger.
2. Εύρεση των γενικών λύσεων για το ελεύθερο σωμάτιο $\psi(x)$ ενέργειας E.
3. Εφαρμογή των οριακών συνθηκών ώστε να υπολογισθεί το σύνολο των διακριτών λύσεων για τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ και τις αντίστοιχες ενέργειες E_n, με n τον κβαντικό αριθμό που χαρακτηρίζει την κατάσταση του σωματίου. Οι οριακές συνθήκες συνοψίζονται στην απαίτηση συνέχειας της $\psi(x)$ ενώ όταν το δυναμικό δεν παρουσιάζει άπειρη ασυνέχεια στο συγκεκριμένο σημείο συνέχεια και της παραγώγου $\psi'(x)$. Στο απειρόβαθο πηγάδι μόνο συνέχεια της $\psi(x)$ στα σημεία $x = 0, a$.

4. Κανονικοποίηση των ιδιοσυναρτήσεων $\psi_n(x)$ με το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_n^*(x)\, \psi_n(x) = 1.$$

Είναι επίσης εύκολο να δειχθεί η γενικότερη σχέση ορθοκανονικότητας των ιδιοσυναρτήσεων $\psi_n(x)$ με το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_n^*(x)\, \psi_m(x) = \delta_{nm}$$

που περιλαμβάνει την κανονικοποίηση $(n = m)$ και την ορθογωνιότητα $(n \neq m)$ μαζί από το γνωστό ως δέλτα του Kronecker

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}.$$

5. Η απουσία χρονικής εξάρτησης στο δυναμικό $V(x)$ επιτρέπει την άμεση εύρεση των χρονικά εξαρτημένων ιδιοσυναρτήσεων

$$\Psi_n(x,t) = \exp(-iE_n t/\hbar)\, \psi_n(x).$$

➤ **A2.** Να επιλυθεί το *πρόβλημα σκέδασης* δέσμης σωματίων ενέργειας E σε *βήμα δυναμικού* $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$, με V_0 θετική σταθερά. Όταν $E > V_0$ και $E < V_0$ να υπολογισθεί το ρεύμα πιθανότητας στις δύο περιοχές από την συνέχεια της $\psi(x)$ και της παραγώγου της $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$ στο σημείο ασυνέχειας του δυναμικού $x = 0$[24]. Να ευρεθεί το ποσοστό των ανακλώμενων σωματίων από τον ορισμό του συντελεστή ανάκλασης

---

[24] Η ψ *είναι πάντα συνεχής* και πεπερασμένη γιατί αν υπήρχε ασυνέχεια κάπου η πιθανότητα εύρεσης του σωματίου σε αυτό το σημείο θα είχε δύο τιμές που δεν είναι παραδεκτό. Η ψ' *είναι επίσης συνεχής στο σημείο* x *μόνον όταν η ασυνέχεια του* $V(x)$ *στο ίδιο σημείο είναι πεπερασμένη*. Εδώ η ψ' είναι συνεχής στο σημείο $x = 0$ αφού για μικρό $\varepsilon \to 0$

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{+\varepsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\varepsilon} = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx\, \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx\, \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x) - E\big) = 0$$

επειδή για $x = 0$ το *δυναμικό* $V(x)$ *παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια*. Η συνέχεια της ψ' προφανώς δεν ισχύει στα όρια του απειρόβαθου πηγαδιού (A1) όπου το δυναμικό παρουσιάζει άπειρη ασυνέχεια (ισχύει όμως στο πηγάδι δυναμικού με πεπερασμένα τοιχώματα του Κεφ.4).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$R = \frac{J_R}{J_I}$$

και το ποσοστό των διερχόμενων σωματίων από τον συντελεστή διέλευσης

$$T = \frac{J_T}{J_I},$$

όπου J_I είναι το προσπίπτον (incident) ρεύμα, J_R το ανακλώμενο (reflected) ρεύμα και J_T το διερχόμενο (transmitted) ρεύμα με $R+T=1$. Η σχέση αυτή ισχύει πάντα και ισοδυναμεί με την αρχή διατήρησης των εισερχόμενων και εξερχόμενων σωματίων.

Λύση:

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο μάζας m

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

μπορεί να γραφεί

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0.$$

Στην *κλασσικά επιτρεπτή περιοχή* I $(x<0)$ η εξίσωση ισοδυναμεί με αυτή του ελεύθερου σωματίου

$$\psi'' + k^2\,\psi(x) = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$ $p = \hbar k$

που έχει γενική λύση

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + r\,e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0,$$

προσπίπτοντος κύματος e^{ikx} πλάτους μονάδα, το οποίο εν μέρει ανακλάται από το βήμα δυναμικού $r\,e^{-ikx}$ με πλάτος r. Στην περιοχή I το συνολικό ρεύμα από τις (2.50), (2.51) είναι του προσπίπτοντος κύματος e^{ikx} ορμής $\hbar k$ με τιμή $J_I = \frac{\hbar k}{m}$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μείον το ρεύμα του ανακλώμενου κύματος $r\,e^{ikx}$ αντίθετης ορμής $-\hbar k$ με τιμή $J_R = |r|^2 \dfrac{\hbar k}{m}$, ώστε

$$J_I - J_R = \frac{\hbar k}{2m}\left(1-|r|^2\right).$$

Αυτό μπορεί να επιβεβαιωθεί με κατευθείαν υπολογισμό με την $\psi_I(x)$ στον τύπο του ρεύματος πιθανότητας

$$\begin{aligned} J_I - J_R &= \frac{\hbar}{2im}\left[\left(e^{ikx}+r\,e^{-ikx}\right)^* \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{ikx}+r\,e^{-ikx}\right)-\left(e^{ikx}+r\,e^{-ikx}\right)\frac{\partial}{\partial x}\left(e^{ikx}+r\,e^{-ikx}\right)^*\right] \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left[1-r^*r+r^*e^{2ikx}-r\,e^{-2ikx}+1-r^*r-r^*e^{2ikx}+r\,e^{-2ikx}\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m}\left(1-|r|^2\right). \end{aligned}$$

Το ρεύμα J είναι ανεξάρτητο του x όπως προβλέπεται από την εξίσωση συνέχειας αφού απουσιάζει η χρονική εξάρτηση στην $P = |\Psi|^2 = |\psi|^2$.

Η *περιοχή II* είναι κλασσικά επιτρεπτή μόνον όταν $E > V_0$ ενώ απαγορεύεται όταν $E < V_0$. Στην κβαντική διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις.

- $E > V_0$: Στην περιοχή II $(x > 0)$ η εξίσωση

$$\psi'' + k'^2\,\psi(x) = 0, \quad k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} > 0$$

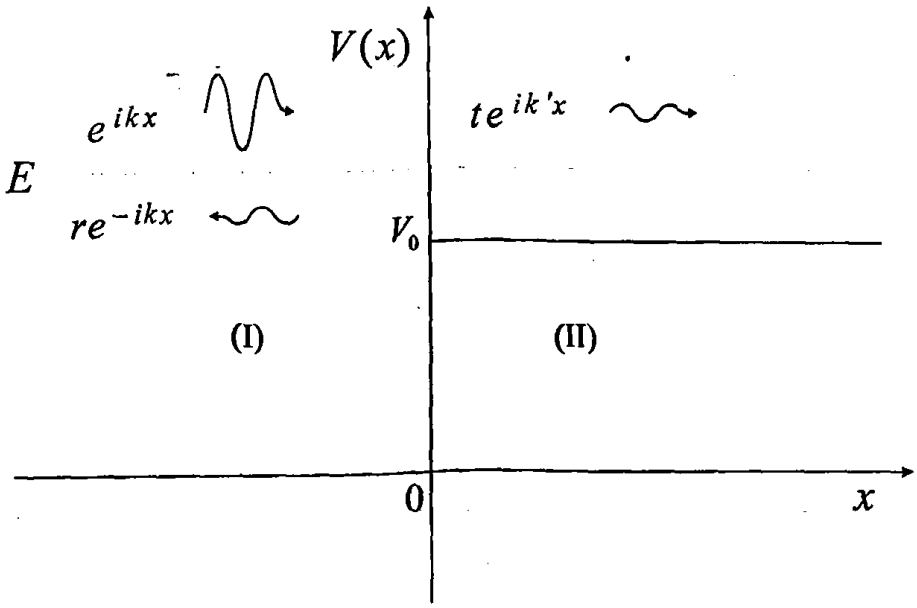
έχει λύση

$$\psi_{II}(x) = t\,e^{ik'x}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

για διερχόμενο κύμα $e^{ik'x}$ πλάτους t, ενώ υπάρχουν κύματα μόνο προς τα δεξιά αφού δεχθήκαμε το κύμα να προσπίπτει από αριστερά. Από τις περιοχές I και II

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΚΡΗΤΗΣ

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_0 .$$



Στην περιοχή II το διερχόμενο ρεύμα του κύματος ορμής $\hbar k'$ είναι

$$J_T = |t|^2 \frac{\hbar k'}{m},$$

ενώ η διατήρηση του ρεύματος πιθανότητας αριστερά και δεξιά $J_I - J_R = J_T$ δίνει

$$\frac{\hbar k}{m}\left(1 - |r|^2\right) = |t|^2 \frac{\hbar k'}{m} .$$

Από τους ορισμούς των συντελεστών ανάκλασης και διάδοσης

$$R = \frac{J_R}{J_I} = |r|^2 , \quad T = \frac{J_T}{J_I} = |t|^2 \frac{k'}{k},$$

ικανοποιείται η γενικότερη σχέση $R + T = 1$.

Η συνέχεια των $\psi(x)$, $\psi'(x)$ στο σημείο $x=0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$
$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$$

δίνει τις εξισώσεις

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$1 + r = t$$

$$k(1 - r) = k't$$

που επιλύονται με $r = (k - k')/(k + k')$ και $t = 2k/(k + k')$. Τα ποσοστά ανάκλασης και διάδοσης των σωματίων της δέσμης είναι αντιστοίχως

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2$$

$$T = |t|^2 \frac{k'}{k} = \frac{4kk'}{(k + k')^2}$$

ενώ οι κλασσικές τιμές είναι $R=0$, $T=1$. Παρατηρούμε πως στην κβαντική φυσική η προσπίπτουσα δέσμη και για $E > V_0$ 'αισθάνεται'[25] το βήμα δυναμικού V_0, με αποτέλεσμα να υπάρχει κάποιο ποσοστό ανάκλασης $R \neq 0$ και σε αυτήν την περίπτωση. Τα σωμάτια δεν βλέπουν το βήμα δυναμικού μόνον όταν $E >> V_0$ οπότε το ποσοστό των ανακλώμενων σωματίων μηδενίζεται, όπως στην κλασσική εικόνα.

- $E < V_0$: Στην περιοχή II $(x > 0)$ η εξίσωση

$$\psi'' + k'^2\, \psi(x) = 0, \quad k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} < 0$$

έχει την k'^2 αρνητική. Ο k' είναι τώρα *μιγαδικός αριθμός* $k' = i\kappa$ με $k'^2 = -\kappa^2$ ενώ η εξίσωση

$$\psi'' - \kappa^2\, \psi(x) = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$$

έχει λύση που ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες είναι μια *πραγματική συνάρτηση απλής εκθετικής* (φθίνουσας) μορφής

$$\psi_{II}(x) = t\, e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} > 0$$

[25] Τα κβαντικά σωμάτια δεν ταξιδεύουν σε ευθεία γραμμή (απλώς με μειωμένη ταχύτητα στην περιοχή II όπως τα κλασσικά για να μην αισθάνονται το βήμα δυναμικού όταν περνάνε από πάνω του) αλλά αντιστοιχούν σε κύματα κατά κάποιον τρόπο 'διαπλατυσμένα' και το δυναμικό τα επηρεάζει.

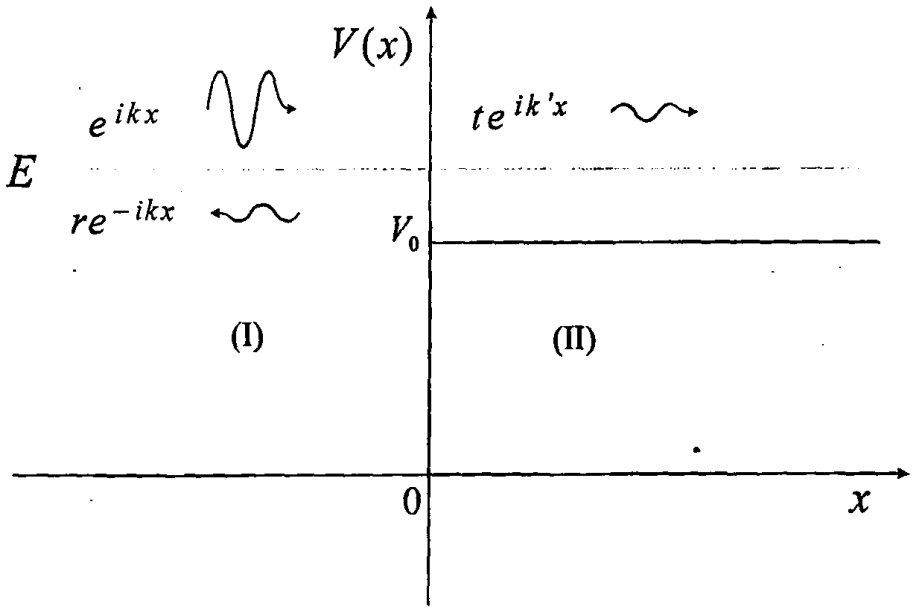
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_0$. Ο όρος $e^{+\kappa x}$ δεν υπάρχει στην $\psi_{II}(x)$ αφού απειρίζεται στο όριο $x \to +\infty$. Το διερχόμενο ρεύμα πιθανότητας λόγω της πραγματικής $\psi_{II}(x)$ είναι ακριβώς μηδέν $J_T = 0$. Αντίστοιχες πράξεις όπως στο ερώτημα (α) με την αντικατάσταση $k' = i\kappa$ δίνουν

$$R = \frac{J_R}{J_I} = |r|^2 = \left|\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right|^2 = \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right)^* \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right) = \frac{k^2 + \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} = 1$$

$$T = \frac{J_T}{J_I} = 1 - R = 0$$

σε συμφωνία με την κλασσική πρόβλεψη.

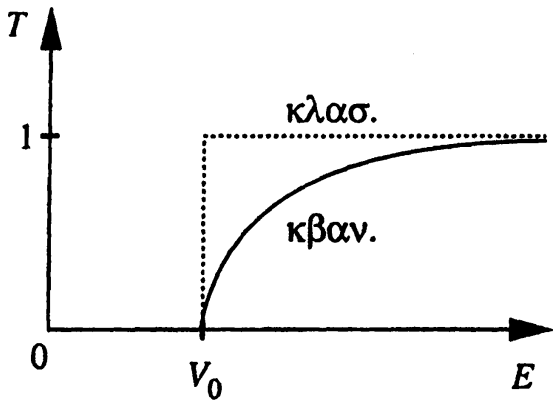


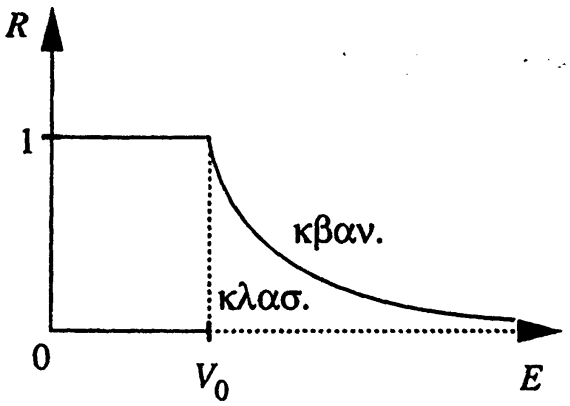
Η λύση $\psi_{II}(x) = t\, e^{-\kappa x}$ με $t = \frac{2k}{k + i\kappa} \neq 0$ επιτρέπει στα σωμάτια να υπεισέλθουν στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή πεπερασμένου V_0, χωρίς όμως και να διέρχονται, επειδή η πραγματική $\psi_{II}(x)$ εξασφαλίζει μηδενικό ρεύμα J_T (αφού $J_I = J_R$) με συντελεστή διέλευσης $T = J_T / J_I = 0$. Μια εκτίμηση του πόσο εισέρχεται το σωμάτιο στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή δίνεται με το *μήκος εισόδου* $\frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ από την μείωση της $\psi_{II}(x)$ στο e^{-1} της τιμής της.

Παρατηρούμε πως το μήκος εισόδου είναι αντιστρόφως ανάλογο της μάζας των σωματίων (τα μεγάλα σωμάτια διέρχονται ευκολότερα) ενώ στο κλασσικό όριο $\hbar = 0$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

το μήκος εισόδου μηδενίζεται. Τα σωμάτια όταν είναι μικρά εισέρχονται στην απαγορευμένη περιοχή αλλά δεν μένουν αρκετά σε αυτήν.





Οι συντελεστές R, $T = 1 - R$, με $R = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-V_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}}\right)^2$ για $E > V_0$, φαίνονται στο σχήμα συναρτήσει της ενέργειας E του προσπίπτόντος κύματος μαζί με το αντίστοιχο κλασσικό αποτέλεσμα για $\forall E$. Παρατηρούμε πως το κλασσικό όριο $\hbar = 0$ προκύπτει μόνο όταν $E >> V_0$ ενώ το γεγονός ότι υπολογισμοί των R, T δεν περιλαμβάνουν την κβαντική σταθερά $\hbar$ δεν σημαίνει βεβαίως πως είμαστε στο κλασσικό όριο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ

'things should be made as simple
as possible ... but not simpler'
A. Einstein

Οι κβαντικοί νόμοι της φυσικής περιγραφής του μικρόκοσμου, με την εισαγωγή των *κυματοσυναρτήσεων* Ψ για να περιγράψουν τις κβαντικές καταστάσεις και των *τελεστών* $\hat{A}$ για τις δυναμικές μεταβλητές A που χαρακτηρίζουν τα κβαντικά συστήματα (όπως τα σωμάτια μιας δέσμης), είναι ριζικά διαφορετικοί από αυτούς των μακροσκοπικών σωμάτων. Η γνώση της Ψ επιτρέπει τον υπολογισμό των μέσων ή αναμενόμενων τιμών $\langle A \rangle$ για τις διάφορες δυναμικές μεταβλητές που μετρούνται σε ένα πείραμα[1]. Επιπλέον, οι Ψ μπορεί να ιδωθούν ως *διανύσματα κατάστασης* σε έναν αφηρημένο μαθηματικό χώρο συναρτήσεων που αποτελείται από ένα σύνολο πολλών αξόνων $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \cdots$, συνήθως *ορθογώνιων* (κάθετων μεταξύ τους) και *κανονικοποιημένων* (μέτρου μονάδα). Ο συναρτησιακός χώρος της κβαντικής είναι γνωστός ως *διανυσματικός χώρος Hilbert* με τον κάθε άξονα του χώρου την *ιδιοσυνάρτηση* Ψ_n που αντιστοιχεί σε μία από τις δυνατές καταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρεθεί το σύστημα. Η βασική ιδέα είναι η δυνατότητα ενός συστήματος στην κβαντική κατάσταση Ψ να υπάρχει μια ορισμένη χρονική στιγμή σε ένα *'μίγμα'* όλων των δυνατών καταστάσεων, σύμφωνα με την ονομαζόμενη *αρχή της υπέρθεσης η επαλληλίας*. Η κυματοσυνάρτηση Ψ *πριν μια μέτρηση* εκφράζεται με τον γραμμικό συνδυασμό

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + c_3\Psi_3 + \cdots, \tag{3.1}$$

[1] Ένα πείραμα συνήθως γίνεται σε πολλά σωμάτια (ensemble) μιας δέσμης και το αποτέλεσμα της μέτρησης ενός φυσικού μεγέθους δεν είναι κάποια από τις ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή, όπως για ένα σωμάτιο, αλλά η μέση τιμή. Το κάθε σωμάτιο είναι σε μια ιδιοτιμή που πριν είχε μια πιθανότητα εμφάνισης ενώ η δέσμη των σωματίων δίνει την κβαντική μέση τιμή που μετρείται συνήθως.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

όπως ένα συνηθισμένο διάνυσμα με συνιστώσες τις προβολές του στους άξονες του Ευκλείδιου χώρου. Η διανυσματική εικόνα οδηγεί κατευθείαν στην *στατιστική περιγραφή* όπου το σύστημα έχει την δυνατότητα να βρεθεί σε κάποια από τις Ψ_n με αντίστοιχες πιθανότητες $|c_n|^2$. Όταν η Ψ είναι κανονικοποιημένη το άθροισμα των πιθανοτήτων είναι απαραιτήτως μονάδα $\sum_{n=1}^{N}|c_n|^2 = 1$ ενώ *μετά την μέτρηση* το σύστημα θα βρεθεί *με βεβαιότητα* σε κάποια από τις $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \cdots$. Η διαφορά από τον Ευκλείδιο χώρο είναι ότι τα διανύσματα του χώρου Hilbert είναι μιγαδικές συναρτήσεις, έχουν μήκη που προσδιορίζονται από το μέτρο[2] μιγαδικών αριθμών και ο αριθμός τους μπορεί να είναι άπειρος. Όταν οι $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \cdots$ είναι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger η γραμμικότητα του χώρου Hilbert εγγυάται πως το άθροισμα (3.1) είναι πάλι λύση ενώ η πρόσθεση ή ο πολλαπλασιασμός με βαθμωτό μέγεθος οποιονδήποτε διανυσμάτων του χώρου Hilbert δίνει διανύσματα του ίδιου χώρου.

Ο Dirac πρότεινε ένα διάνυσμα κατάστασης να συμβολίζεται στην γενική περίπτωση με το *διάνυσμα ket* $|\Psi\rangle$. Στον συμβολισμό του Dirac ένα διάνυσμα ket συμπληρώνεται από ένα *διάνυσμα bra* $\langle\Psi|$ με αποτέλεσμα όταν τα βάλουμε μαζί αποτελούν την παρένθεση *bracket* $\langle\Psi|\Psi\rangle$ που ορίζει το *εσωτερικό γινόμενο* των διανυσμάτων κατάστασης. Η υπέρθεση στο απλούστερο σύστημα *δύο καταστάσεων* επιτρέπει σε ένα διάνυσμα κατάστασης πριν την μέτρηση να γραφεί

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle. \tag{3.2}$$

Οι $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ είναι πιθανές καταστάσεις με αντίστοιχα πλάτη πιθανότητας τις μιγαδικές συνιστώσες c_1, c_2 και αντίστοιχες πιθανότητες $|c_1|^2, |c_2|^2$ να συμβούν. Επισημαίνεται πως υπέρθεση δεν σημαίνει πως η $|\Psi\rangle$ είναι 'κολλημένη' κάπου ανάμεσα από τις $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ αλλά μπορεί να ερμηνευθεί, σε αντίθεση προς την κοινή λογική, πως είναι *ταυτοχρόνως και στις δύο*, σαν να υπάρχει σε δύο παράλληλους κόσμους. Αυτό συνεπάγεται πως ένα κβαντικό σωμάτιο σε μια μέτρηση θα είναι με

---

[2] Το τετράγωνο του μέτρου ενός μιγαδικού αριθμού $z = a + ib$, $a, b \in \Re$, $i = \sqrt{-1}$, είναι ο θετικός πραγματικός αριθμός $|z|^2 = z^* z = (a - ib)(a + ib) = a^2 + b^2$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

βεβαιότητα πότε στην μία και πότε στην άλλη από τις δύο καταστάσεις, ενώ πριν την μέτρηση η κάθε μία έχει απλώς μια πιθανότητα να συμβεί. Το σύνολο των $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ εκτός την επιλογή να είναι *ορθοκανονικό* πρέπει να αποτελεί *μια πλήρη* βάση του διδιάστατου διανυσματικού χώρου Hilbert στην οποία εκφράζονται τα διανύσματα κατάστασης $|\Psi\rangle$. Η ορθοκανονικότητα σημαίνει πως οι $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ είναι *ορθογώνιες* με εσωτερικό γινόμενο $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0$ και *κανονικοποιημένες* με $\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle = 1$. Η *πληρότητα* επιτρέπει σε οποιοδήποτε διάνυσμα κατάστασης αυτού του χώρου Hilbert να αναπαρασταθεί ως άθροισμα της μορφής (3.2) με κατάλληλους μιγαδικούς συντελεστές c_1, c_2.

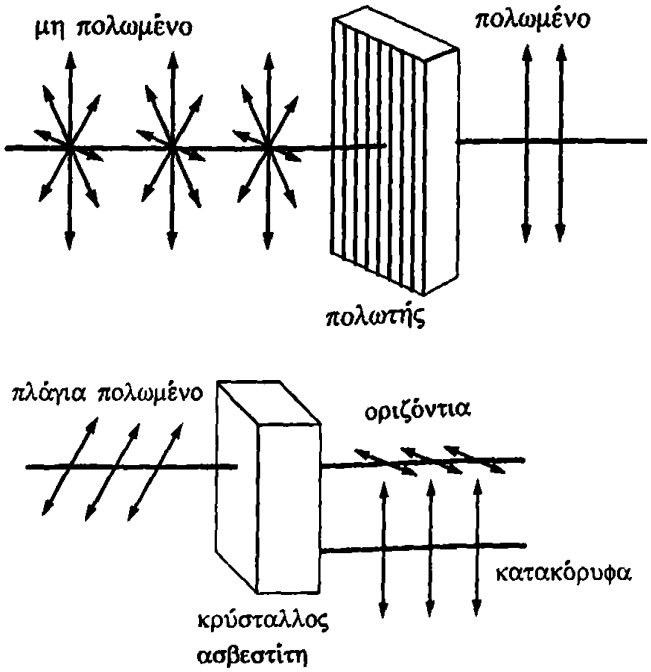
Η υπέρθεση μπορεί να κατανοηθεί στον διδιάστατο χώρο Hilbert με την έννοια της *πόλωσης του φωτός*. Ως πόλωση ορίζεται η κατεύθυνση ταλάντωσης του ηλεκτρικού πεδίου στο κάθετο επίπεδο προς την διάδοση ενός κύματος. Τα μη πολωμένα κύματα έχουν πόλωση σε όλες τις δυνατές κάθετες κατευθύνσεις ταλάντωσης ενώ όταν το φως περνάει από συγκεκριμένα κρυσταλλικά υλικά (πολωτές) τα εξερχόμενα κύματα πολώνονται σε μια συγκεκριμένη κατεύθυνση (Σχ. 3.1(α)). Οι πολωτές επιτρέπουν να διέλθει φως πολωμένο μόνο κάθετα σε έναν ορισμένο άξονα που λέγεται οπτικός άξονας του κρυστάλλου. Π.χ. αν το φως διαδίδεται στον y άξονα και ο οπτικός άξονας του κρυστάλλου είναι ο x από τον συγκεκριμένο πολωτή διέρχεται φως πολωμένο στην κατεύθυνση του άξονα z (κατακόρυφα). Επομένως, αν το προσπίπτον κύμα είναι ήδη πολωμένο κατακόρυφα (στον άξονα z) θα διέλθει από τον πολωτή ενώ αν είναι πολωμένο οριζόντια (στον άξονα x) όχι. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η περίπτωση που το προσπίπτον κύμα είναι πολωμένο σε μια αυθαίρετη (πλάγια) διεύθυνση γωνίας φ με τον οπτικό άξονα x. Τότε ένα ποσοστό του προσπίπτοντος κύματος, αυτό που αντιστοιχεί στην κατακόρυφη συνιστώσα, διέρχεται από τον πολωτή όπως προκύπτει από την ανάλυση της πλάγιας διεύθυνσης σε κατακόρυφη $\sin\varphi$ και οριζόντια $\cos\varphi$ συνιστώσα. Το κύμα που προέρχεται από την κατακόρυφη συνιστώσα επειδή εκφράζει το ενεργειακό περιεχόμενο της έντασης διέρχεται σε ποσοστό $\sin^2\varphi$ του προσπίπτοντος κύματος, ενώ δεν διέρχεται ποσοστό $\cos^2\varphi$ από την οριζόντια συνιστώσα.

Όμως, το φως αποτελείται από μια δέσμη φωτονίων και είναι αδύνατον κάθε φορά να διέρχεται ένα κλάσμα του φωτονίου. Αν μειώσουμε την ένταση του φωτός ώστε τα φωτόνια να προσπίπτουν στον κρύσταλλο *ένα-ένα* το κάθε φωτόνιο *άλλοτε*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

διέρχεται και άλλοτε όχι. Εδώ είναι η ουσία του προβλήματος: *δεν γνωρίζουμε αν <u>ένα φωτόνιο</u> διέρχεται ή όχι* αλλά μόνο την πιθανότητα $\sin^2\varphi$ να διέλθει καθώς και την συμπληρωματική πιθανότητα $\cos^2\varphi$ να μην διέλθει. Άρα, η διεύθυνση πόλωσης ενός φωτονίου δεν είναι προβλέψιμη επομένως ούτε η διέλευσή του ή όχι από τον πολωτή. Το φωτόνιο πολωμένο κατά μήκος του πλάγιου άξονα γωνίας φ με τον οπτικό άξονα του πολωτή θεωρείται πως είναι στην *κατάσταση υπέρθεσης*

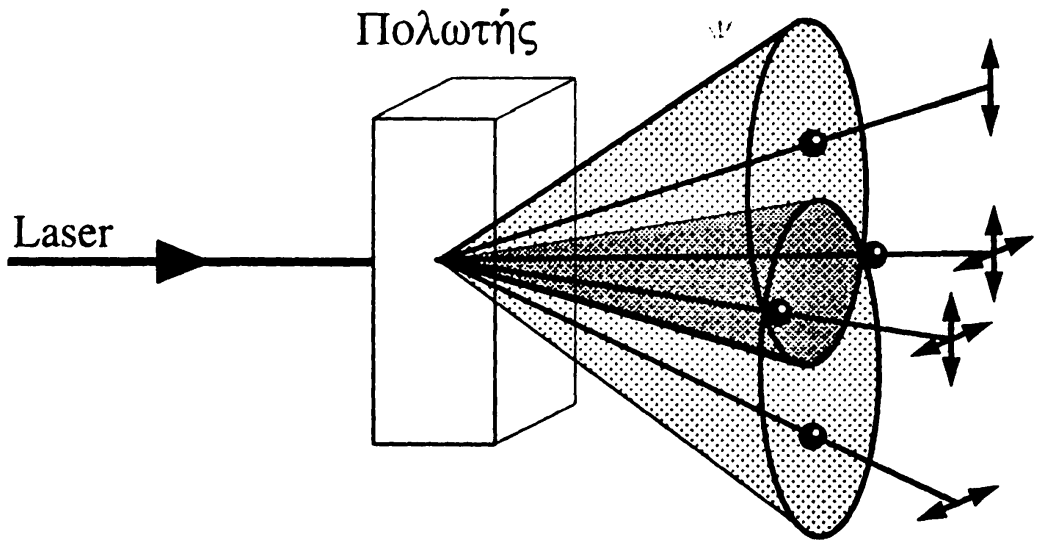
$$|/\rangle = \sin\varphi\,|\updownarrow\rangle + \cos\varphi\,|\leftrightarrow\rangle \tag{3.3}$$



Σχ.3.1. (α) *Αριστερά το φως δεν είναι πολωμένο και αποτελείται από φωτόνια πολωμένα σε όλες τις κατευθύνσεις. Δεξιά, μετά την διελευσή του από τον πολωτή, οι ταλαντώσεις του ηλεκτρικού πεδίου προσανατολίζονται με το φως πολωμένο στην κατακόρυφη κατεύθυνση.*
(β) *Ο πολωτής σπάει την δέσμη φωτονίων σε δύο στέλνοντας κατακόρυφα πολωμένα φωτόνια στην μια δέσμη και οριζόντια πολωμένα φωτόνια στην άλλη ενώ τα πλάγια πολωμένα φωτόνια είναι στην κβαντική υπέρθεση των δύο. Το κάθε φωτόνιο μπορεί να ανιχθευθεί στην μία ή την άλλη δέσμη με μια πιθανότητα που εξαρτάται από την γωνία.*

των καταστάσεων με το φωτόνιο κατακόρυφα και οριζόντια πολωμένο. Ενώ δεν μπορούμε να πούμε σε ποια από τις δύο καταστάσεις πόλωσης (κατακόρυφη ή οριζόντια) είναι το σύστημα που περιγράφεται από την (3.3), αν μετρηθεί θα δώσει την κατακόρυφη με πιθανότητα $\sin^2\varphi$ και την οριζόντια με πιθανότητα $\cos^2\varphi$. Το φωτόνιο *είναι ταυτόχρονα και στις δύο καταστάσεις πόλωσης* ενώ το άθροισμα των

πιθανοτήτων για τα δύο ενδεχόμενα είναι $\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$. Είδαμε λοιπόν πως μια αυθαίρετη (πλάγια) κατεύθυνση πόλωσης του προσπίπτοντος κύματος οδηγεί στην υπέρθεση των δύο δυνατοτήτων κατακόρυφης και οριζόντιας πόλωσης για το κάθε φωτόνιο, που έχει και τις δύο πολώσεις ταυτόχρονα. Αυτό φαίνεται στο παράδειγμα του Σχ. 3.1(β) πρόσπτωσης φωτός στον πολωτή από το υλικό ασβεστίτη (calcite). Κατά την πρόσπτωση ακτίνων φωτός laser στον κατάλληλο κρύσταλλο (Σχ. 3.2) ένα φωτόνιο, π.χ. στο υπεριώδες, διασπάται σε δύο φωτόνια μικρότερης ενέργειας. Στην πάνω κωνική διάταξη τα διερχόμενα φωτόνια είναι κατακόρυφα πολωμένα ενώ στην κάτω είναι πολωμένα στην οριζόντια κατεύθυνση. Η υπέρθεση



Σχ.3.2. *Δημιουργία εναγκαλισμένων ζευγών φωτονίων όταν laser διέρχεται από κατάλληλο πολωτή. Τα φωτόνια στην τομή των δύο κωνικών σχημάτων είναι στην κατάσταση υπέρθεσης των δύο κατευθύνσεων χωρίς να έχουν συγκεκριμένη πόλωση (δείτε το εξώφυλλο του βιβλίου).*

των δύο κατευθύνσεων πόλωσης υλοποιείται στην ενδιάμεση περίπτωση τομής των δύο κωνικών σχημάτων όπου τα ζεύγη φωτονίων δεν έχουν συγκεκριμένη πόλωση αλλά συμπληρωματικές πολώσεις το ένα με το άλλο. Τα δύο σωμάτια μπορεί να θεωρηθούν ως *εναγκαλισμένα*. Αν στην κατάσταση πόλωσης $|\updownarrow\rangle$ αντιστοιχηθεί το διάνυσμα $|0\rangle$ και στην κατάσταση πόλωσης $|\leftrightarrow\rangle$ το $|1\rangle$ η υπέρθεση των δύο, π.χ. η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

$\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$ σημαίνει πως ένα φωτόνιο *έχει ταυτοχρόνως και τις δύο πολώσεις* με πιθανότητες $(1/\sqrt{2})^2$ ή 50% να συμβεί η μία ή η άλλη σε μια μέτρηση.

Η κατάσταση πόλωσης του φωτονίου αποτελεί ένα παράδειγμα quantum bit (qubit), που είναι η *μονάδα κβαντικής πληροφορίας*. Αντίθετα με το συνηθισμένο κλασσικό bit 0 ή 1 το qubit ερμηνεύεται πως αναπαριστά *ταυτοχρόνως* τις καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ με την κατάσταση υπέρθεσης $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$, $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$. Τα qubits είναι τα βασικά στοιχεία των κβαντικών υπολογιστών που δίνουν την δυνατότητα κωδικοποίησης άπειρης πληροφορίας, με όλες τις ενδιάμεσες τιμές εκτός από 0 και 1.

3.1. Διανυσματικοί χώροι

Διανυσματικός χώρος είναι ένα σύνολο διανυσμάτων $|a\rangle,|b\rangle,|c\rangle,\cdots$ στον οποίο ορίζεται η *πρόσθεση* $|a\rangle+|b\rangle$ και ο *πολλαπλασιασμός* $\lambda|a\rangle$ *διανυσμάτων με βαθμωτό μέγεθος* λ.

- Το *άθροισμα* δύο διανυσμάτων είναι πάλι διάνυσμα $|a\rangle+|b\rangle=|c\rangle$ ενώ ισχύει η μεταθετική $|a\rangle+|b\rangle=|b\rangle+|a\rangle$ και η προσεταιριστική ιδιότητα $(|a\rangle+|b\rangle)+|c\rangle=|a\rangle+(|b\rangle+|c\rangle)$. Επιπλέον υπάρχει το μηδενικό διάνυσμα $|0\rangle$ και για κάθε $|a\rangle$ το αντίστροφό του $|-a\rangle$, ώστε $|a\rangle+|-a\rangle=|0\rangle$.
- Ο *πολλαπλασιασμός* διανύσματος $|\alpha\rangle$ με ένα μιγαδικό βαθμωτό μέγεθος λ δίνει το νέο διάνυσμα $|c\rangle=\lambda|a\rangle$ ενώ ισχύουν οι ιδιότητες $\lambda(|a\rangle+|b\rangle)=\lambda|a\rangle+\lambda|b\rangle$, $\lambda(\mu|a\rangle)=(\lambda\mu)|a\rangle$, $0|a\rangle=|0\rangle$, $1|a\rangle=|a\rangle$, κλπ.
- Το *εσωτερικό γινόμενο* δύο διανυσμάτων $|a\rangle,|b\rangle$ ορίζεται από τον *μιγαδικό αριθμό* $\langle a|b\rangle=\langle b|a\rangle^*$. Το εσωτερικό γινόμενο ενός διανύσματος με το εαυτό του είναι προφανώς πραγματικός αριθμός $\langle a|a\rangle=\langle a|a\rangle^*\geq 0$, με $\langle a|a\rangle=0$ όταν $|a\rangle=0$. Το μέτρο του διανύσματος $|a\rangle$ ορίζεται $\sqrt{\langle a|a\rangle}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Το διάνυσμα $|a\rangle$ είναι *κανονικοποιημένο* μέτρου μονάδα $\sqrt{\langle a|a\rangle}=1$ όταν $\langle a|a\rangle=1$ ενώ δύο διανύσματα $|a\rangle,|b\rangle$ είναι *ορθογώνια* όταν το εσωτερικό τους γινόμενο είναι $\langle a|b\rangle=0$. Το σύνολο των $|a\rangle,|b\rangle$ είναι *ορθοκανονικό* όταν τα $|a\rangle,|b\rangle$ είναι κανονικοποιημένα $\langle a|a\rangle=\langle b|b\rangle=1$ και ορθογώνια μεταξύ τους $\langle a|b\rangle=0$.

3.1.1. Ευκλείδιος διανυσματικός χώρος

Το πιο συνηθισμένο παράδειγμα διανυσματικού χώρου είναι ο *τρισδιάστατος χώρος*[3] συντεταγμένων όπου ένα διάνυσμα $|a\rangle$ στον συμβολισμό που επιλέξαμε γράφεται

$$|a\rangle = a_x|e_x\rangle + a_y|e_y\rangle + a_z|e_z\rangle\ , \tag{3.4}$$

αντί του συνηθισμένου $\vec{a}=a_x\,\vec{e}_x+a_y\,\vec{e}_y+a_z\,\vec{e}_z$ και τα *διανύσματα βάσης* αυτού του χώρου είναι $\{|e_x\rangle,|e_y\rangle,|e_z\rangle\}$ ή $\{\vec{e}_x,\vec{e}_y,\vec{e}_z\}$ με a_x,a_y,a_z τις *συνιστώσες* του διανύσματος. Τα διανύσματα βάσης είναι *ορθογώνια* όταν τα εσωτερικά γινόμενα ικανοποιούν μεταξύ τους τις σχέσεις

$$\langle e_x|e_y\rangle=0,\ \langle e_y|e_z\rangle=0,\ \langle e_z|e_x\rangle=0 \tag{3.5}$$

(ή $\vec{e}_x\cdot\vec{e}_y=0,\ \vec{e}_x\cdot\vec{e}_z=0,\ \vec{e}_y\cdot\vec{e}_z=0$) και *κανονικοποιημένα* όταν τα εσωτερικά γινόμενα με το εαυτό τους είναι μονάδα

$$\langle e_x|e_x\rangle=1,\ \langle e_y|e_y\rangle=1,\ \langle e_z|e_z\rangle=1 \tag{3.6}$$

(ή $\vec{e}_x\cdot\vec{e}_x=1,\ \vec{e}_y\cdot\vec{e}_y=1,\ \vec{e}_z\cdot\vec{e}_z=1$). Το διάνυσμα $|a\rangle$ επιτρέπεται να εκφρασθεί και σε οποιοδήποτε άλλο σύνολο διανυσμάτων βάσης, π.χ. στην νέα βάση $\{|e_1\rangle,|e_2\rangle,|e_3\rangle\}$

$$|a\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + a_3|e_3\rangle\ , \tag{3.7}$$

(ή $\vec{a}=a_1\,\vec{e}_1+a_2\,\vec{e}_2+a_3\,\vec{e}_3$) αρκεί να ικανοποιούνται οι προϋποθέσεις της γραμμικής ανεξαρτησίας των βασικών διανυσμάτων για να αποτελούν μια *πλήρη* βάση. Η βάση συνηθίζεται να είναι *ορθοκανονική*[4].

---

[3] Διάσταση ενός χώρου είναι ο αριθμός των γραμμικώς ανεξάρτητων διανυσμάτων βάσης.

[4] Όταν τα διανύσματα βάσης δεν είναι κανονικοποιημένα μπορούν εύκολα να κανονικοποιηθούν ενώ γίνονται ορθογώνια με την *διαδικασία ορθογωνοποίησης Gram-Schmidt* του Παραρτήματος Β.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Η έννοια της *ορθοκανονικότητας* περιλαμβάνει την ορθογωνιότητα και την κανονικοποίηση των $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$. Η ορθοκανονική βάση απαιτεί τα διανύσματά της να είναι ορθογώνια

$$\langle e_n | e_m \rangle = 0, \text{ όταν } n \neq m \tag{3.8}$$

ή $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = 0$ όταν $n \neq m$ και κανονικοποιημένα

$$\langle e_n | e_m \rangle = 1, \quad \text{όταν } n = m \tag{3.9}$$

ή $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = 1$ όταν $n = m$. Οι δύο σχέσεις ορθοκανονικότητας εκφράζονται συνοπτικά με το εσωτερικό γινόμενο

$$\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{n,m}, \tag{3.10}$$

ή $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = \delta_{n,m}$, όπου $\delta_{n,m}$ είναι το *δέλτα του Kronecker* με $\delta_{n,m} = 0$ όταν $n \neq m$ και $\delta_{n,m} = 1$ όταν $n = m$.

- Η έννοια της *πληρότητας* ενός διανυσματικού χώρου συνδέεται με την *γραμμική ανεξαρτησία* των διανυσμάτων βάσης. Αυτό φαίνεται αμέσως στον τρισδιάστατο διανυσματικό χώρο που περιέχει τρία γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα, ενώ οποιαδήποτε τέσσερα διανύσματα είναι απαραιτήτως γραμμικώς εξαρτημένα. Η μαθηματική διατύπωση της γραμμικής ανεξαρτησίας των $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$ γίνεται με την *αναγκαστική προϋπόθεση*

$$a_1 = a_2 = a_3 = 0 \tag{3.11}$$

για να *ικανοποιείται η συνθήκη* μηδενισμού

$$a_1 |e_1\rangle + a_2 |e_2\rangle + a_3 |e_3\rangle = 0. \tag{3.12}$$

Τότε τα τρία διανύσματα βάσης του τρισδιάστατου χώρου είναι *γραμμικώς ανεξάρτητα*, ενώ ένα επιπλέον διάνυσμα αφού μπορεί να εκφρασθεί συναρτήσει των τριών οδηγεί σε τέσσερα γραμμικώς εξαρτημένα διανύσματα αυτού του χώρου. Άρα μπορεί να ειπωθεί πως το σύνολο $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ αποτελεί μια *πλήρη βάση* του τρισδιάστατου διανυσματικού χώρου και κάθε διάνυσμα $|a\rangle$ αυτού του χώρου γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των τριών διανυσμάτων βάσης. Για να είναι βάση ένα σύνολο διανυσμάτων

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

απαραίτητη προϋπόθεση είναι η γραμμική τους ανεξαρτησία που συνεπάγεται την πληρότητα του διανυσματικού χώρου.

- Τα παραπάνω γενικεύονται εύκολα και για οποιοδήποτε $N-$ *διάστατο ορθοκανονικό* σύνολο διανυσμάτων $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \cdots, |e_N\rangle\}$ με εσωτερικό γινόμενο

$$\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{n,m}. \tag{3.13}$$

Το σύνολο αυτό για να είναι και *πλήρες* πρέπει οποιοδήποτε διάνυσμα του χώρου να μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων βάσης

$$|a\rangle = a_1 | e_1 \rangle + a_2 | e_2 \rangle + a_3 | e_3 \rangle + \cdots + a_N | e_N \rangle. \tag{3.14}$$

Το επιπλέον διάνυσμα $|a\rangle$ αυτού του χώρου μαζί με τα N διανύσματα βάσης οδηγεί απαραιτήτως σε $N+1$ εξαρτημένα διανύσματα. Το σύνολο των διανυσμάτων $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \cdots, |e_N\rangle\}$ επιλέγεται να είναι *ορθοκανονική και πλήρης* βάση του $N-$διάστατου διανυσματικού χώρου.

3.1.2. <u>Διανυσματικός χώρος συναρτήσεων</u>

Τα παραπάνω ισχύουν για έναν $\infty-$διάστατο διανυσματικό χώρο όπου τα διανύσματα είναι οι συναρτήσεις $f(x)$ και τα διανύσματα βάσης οι $u_n(x)$. Ένα παράδειγμα απειροδιάστατου διανυσματικού χώρου αποτελούν οι συναρτήσεις βάσης

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.15}$$

που υπεισέρχονται στην ανάπτυξη της συνάρτησης $f(x)$ σε σειρά Fourier

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \, u_n(x) \ , \tag{3.16}$$

στην ισοδύναμη μορφή

$$|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n |u_n\rangle \ . \tag{3.17}$$

Παρατηρούμε την πλήρη αντιστοιχία με την γραφή ενός συνηθισμένου διανύσματος με τις συναρτήσεις $|f\rangle = f(x)$ να αντιστοιχούν στα διανύσματα $|a\rangle$, τα πλάτη Fourier f_n στις συνιστώσες a_n και οι συναρτήσεις $|u_n\rangle = (1/\sqrt{\pi}) \cos nx$ στα

διανύσματα βάσης $|e_n\rangle$. Απομένει να ελεγχθεί αν τα $|u_n\rangle$, $x \in [-\pi, \pi]$, αποτελούν μια *ορθοκανονική* και *πλήρη* βάση αυτού του διανυσματικού χώρου. Για να γίνει αυτό χρειάζεται να ορισθεί το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων $u_n(x), u_m(x)$ του απειροδιάστατου χώρου με το ορισμένο ολοκλήρωμα [5]

$$\langle u_n | u_m \rangle = \int_{-\pi}^{+\pi} dx \; u_n(x) u_m(x). \tag{3.18}$$

✓ *Έλεγχος ορθοκανονικότητας της βάσης των* $|u_n\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle u_n | u_m \rangle &= \int_{-\pi}^{+\pi} dx \; u_n(x) u_m(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dx \cos nx \cos mx \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dx \left[\frac{\cos(n+m)x + \cos(n-m)x}{2} \right] \\
&= \left. \frac{\sin(n+m)x}{2(n+m)\pi} \right|_{-\pi}^{+\pi} + \left. \frac{\sin(n-m)x}{2(n-m)\pi} \right|_{-\pi}^{+\pi} \\
&= \begin{cases} 0 + \left. \dfrac{(\sin(n-m)x)'}{(2(n-m))'\pi} \right|_{-\pi}^{+\pi} = \left. \dfrac{x \cos 0}{2\pi} \right|_{-\pi}^{+\pi} = 1, & n = m \\ 0, \quad n \neq m \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

απ' όπου προκύπτει η σχέση ορθοκανονικότητας

$$\langle u_n | u_m \rangle = \int_{-\pi}^{+\pi} dx \; u_n(x) u_m(x) = \delta_{n,m} \tag{3.20}$$

ανάλογη της γνωστής $\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{n,m}$.

---

[5] Το εσωτερικό γινόμενο δύο N – διάστατων διανυσμάτων

$$\langle a | b \rangle = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \cdots = \sum_n a_n b_n$$

στο όριο $N \to \infty$ μπορεί να αντικατασταθεί από ένα ολοκλήρωμα της μορφής

$$\langle a | b \rangle = \int dx \; a(x) b(x).$$

Στην κβαντική η μορφή του γινομένου περιλαμβάνει τις μιγαδικές συνιστώσες του πρώτου διανύσματος

$$\langle a | b \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + a_3^* b_3 + \cdots \to \int dx \; a^*(x) b(x).$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

✓ *Έλεγχος πληρότητας της βάσης των* $|u_n\rangle$:

Η ιδιότητα της πληρότητας των $u_n(x)$ ικανοποιείται σύμφωνα με το ορισμό αφού αν πολλαπλασιάσουμε την

$$\sum_{n=0}^{\infty} f_n \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx = 0 \tag{3.21}$$

επί $\left(1/\sqrt{\pi}\right)\cos mx$ για κάθε m και ολοκληρώσουμε στο διάστημα ορισμού της $x \in [-\pi, \pi]$

$$\frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty} f_n \int_{-\pi}^{+\pi} dx \cos nx \cos mx = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \delta_{n,m} = f_m = 0. \tag{3.22}$$

Παρατηρούμε πως η συνθήκη μηδενισμού (3.21) απαιτεί όλα τα πλάτη να είναι μηδέν ($f_n = 0,\ n = 0,1,2,\cdots$). Αυτό ικανοποιεί επακριβώς τον ορισμό της γραμμικής ανεξαρτησίας των $|u_n\rangle = \left(1/\sqrt{\pi}\right)\cos nx$.

✓ *Υπολογισμός των πλατών Fourier* f_n:

Αν η $f(x)$ πολλαπλασιασθεί επί $u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos nx$ και ολοκληρωθεί από $-\pi$ έως $+\pi$, αλλάζοντας το σύμβολο από n σε m,

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{+\pi} dx\, f(x)\cos nx &= \frac{1}{\pi}\sum_m f_m \int_{-\pi}^{+\pi} dx\, f(x)\cos mx \cos nx \\ &= \sum_m f_m \delta_{n,m} \\ &= f_n,\end{aligned} \tag{3.23}$$

υπολογίζονται τα πλάτη Fourier

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{+\pi} dx\, f(x)\cos nx. \tag{3.24}$$

Οι συνιστώσες του διανύσματος $|a\rangle$ δίνονται από τα εσωτερικά γινόμενα

$$a_n = \langle e_n | a\rangle \tag{3.25}$$

όποτε το διάνυσμα $|a\rangle$ στην βάση των $|e_n\rangle$ γράφεται εξής τρόπο

$$|a\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle = \sum_n \langle e_n | a\rangle |e_n\rangle \ . \tag{3.26}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Στην περίπτωση του αναπτύγματος σε σειρά Fourier $|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n |u_n\rangle$ το εσωτερικό γινόμενο των διανυσμάτων βάσης $\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{n,m}$ αντικαθίσταται από το ολοκλήρωμα

$$\langle u_n | u_m \rangle = \int_{-\pi}^{+\pi} dx \; u_n(x) u_m(x) = \delta_{n,m} \tag{3.27}$$

και οι συνιστώσες $a_n = \langle e_n | a \rangle$ από τα πλάτη Fourier

$$f_n = \langle u_n | f \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{+\pi} dx \, f(x) \cos nx \tag{3.28}$$

3.1.3. <u>Διανυσματικός χώρος Hilbert</u>

Οι μαθηματικές ομοιότητες των εξισώσεων της κβαντικής και του εσωτερικού γινομένου δύο διανυσμάτων επιτρέπουν το διάνυσμα κατάστασης, που είναι ταυτόσημη έννοια με την κατάσταση ενός συστήματος, στην χρονικά ανεξάρτητη εκδοχή[6] να περιγράφεται από το ket $|\psi\rangle$. Σε αυτό αντιστοιχεί το συζυγές διάνυσμα bra που συμβολίζεται με $\langle \psi |$ και το εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων κατάστασης $|\psi\rangle$ και $|\varphi\rangle$ είναι το γινόμενο του bra της μιας $\langle \varphi |$ κατάστασης και του ket της άλλης $|\psi\rangle$ στην μορφή του μιγαδικού αριθμού $\langle \varphi | \psi \rangle$. Επισημαίνεται η μικρή διαφορά από τους χώρους των συναρτήσεων αφού *στους χώρους Hilbert πρέπει να διατηρηθεί η σειρά των όρων στο εσωτερικό γινόμενο* επειδή το ολοκλήρωμα περιλαμβάνει την μιγαδική συζυγή της πρώτης συνάρτησης

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int dx \, \varphi^*(x) \, \psi(x) \tag{3.29}$$

Από τον ορισμό του βαθμωτού γινομένου των δύο συναρτήσεων απορρέουν οι ιδιότητες

[6] Τα ίδια ισχύουν και για τις χρονικά εξαρτημένες $|\Psi\rangle$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\begin{aligned} &\langle\varphi|\psi\rangle = \int dx\, \varphi^*(x)\psi(x) = \left(\int dx\, \varphi(x)\psi^*(x)\right)^* = \langle\psi|\varphi\rangle^* \\ &\langle\varphi|\lambda\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle,\ \langle\lambda\varphi|\psi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\psi\rangle, \quad \lambda \in C \end{aligned} \quad , \tag{3.30}$$

ένω όταν $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ οι $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ είναι ορθογώνιες και όταν $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ η $|\psi\rangle$ είναι κανονικοποιημένη.

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{3.31}$$

είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών για τον Χαμιλτονιανό τελεστή $\hat{H}$ με ιδιοσυναρτήσεις $|\psi_n\rangle$ και αντίστοιχες ιδιοτιμές E_n. Το ορθοκανονικό και πλήρες σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων $\{|\psi_n\rangle\}$ *αποτελεί μια βάση ενός διανυσματικού χώρου συναρτήσεων* ώστε οποιαδήποτε ομαλή συνάρτηση $|\psi\rangle$ γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle \quad , \tag{3.32}$$

όπως και στην περίπτωση των σειρών Fourier. Το ανάπτυγμα της $|\psi\rangle$ στις ιδιοσυναρτήσεις $|\psi_n\rangle$ αντιστοιχεί στην έκφραση ενός διανύσματος σε πολυδιάστατο χώρο με συνιστώσες τις προβολές στους άξονές του $|a\rangle = \sum_n a_n|e_n\rangle$. Η ομοιότητα στις δύο περιπτώσεις επιτρέπει να ορισθεί η $|\psi\rangle$ στον απειροδιάστατο διανυσματικό χώρο συναρτήσεων χώρο Hilbert ενώ η επιλογή της βάσης καθορίζει το σύνολο των c_n.

Η ιδιοσυνάρτηση $|\psi_n\rangle$ σε μια αλλαγή συμβολισμού μπορεί να αντικατασταθεί από το διάνυσμα κατάστασης $|n\rangle$, όπου ο δείκτης n προσδιορίζει ένα σύνολο τιμών για φυσικές μεταβλητές ή τους κβαντικούς αριθμούς που την προσδιορίζουν. Η βάση τών ιδιοσυναρτήσεων $|n\rangle$ είναι ορθοκανονική και πλήρης

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \tag{3.33}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

σε αντιστοιχία με την $\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{n,m}$. Τα πλάτη της προβολής της $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ στις ιδιοσυναρτήσεις $|n\rangle$ μας ενημερώνουν για το 'πόσο πλάτος' της $|\psi\rangle$ ανήκει στην ιδιοσυνάρτηση $|n\rangle$ σε αντιστοιχία με την συνιστώσα $a_n = \langle e_n | a \rangle$.

- Τα πλάτη c_n υπολογίζονται από το εσωτερικό γινόμενο για κάθε $|m\rangle$

$$\begin{aligned} \langle m|\psi\rangle &= \langle m| \sum_n c_n |n\rangle \\ &= \sum_n c_n \langle m|n\rangle \\ &= \sum_n c_n \delta_{m,n} \\ &= c_m \end{aligned} \tag{3.34}$$

ώστε

$$c_n = \langle n|\psi\rangle, \forall |n\rangle \quad . \tag{3.35}$$

Επομένως, οι συνιστώσες ενός διανύσματος $|\psi\rangle$ στο σύνολο των διανυσμάτων $|n\rangle$ είναι οι μιγαδικοί αριθμοί $\langle n|\psi\rangle$ από τις προβολές του διανύσματος κατάστασης $|\psi\rangle$ στις ιδιοσυναρτήσεις της βάσης $|n\rangle$.

- Αν γράψουμε την $|\psi\rangle$ αντικαθιστώντας τα πλάτη

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle \\ &= \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle \end{aligned} \tag{3.36}$$

παρατηρούμε πως ισχύει γιά κάθε ket $|\psi\rangle$. Επομένως, το ket μπορεί να αφαιρεθεί από τα δύο μέλη επιτρέποντας να εξαχθεί η *βασική σχέση πληρότητας της κβαντικής*

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| \tag{3.37}$$

που δεν έχει ανάλογο στην διανυσματική ανάλυση[7].

[7] Η πληρότητα είναι *σχέση μεταξύ τελεστών*. Αν η (3.37) επιδράσει σε συναρτήσεις $\langle\varphi|$ αριστερά και $|\psi\rangle$ δεξιά δίνει το απαιτούμενο αποτέλεσμα, πχ της εξ. (3.39).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Από την $|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ το αντίστοιχο bra από την (3.37) είναι $\langle\psi| = \sum_n |n\rangle\langle n|\langle\psi| = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n| = \sum_n \langle n|\psi\rangle^* \langle n| = \sum_n c_n^* \langle n|$ και από την απαίτηση κανονικοποίησης $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \sum_n c_n^* \langle n| \sum_m c_m |m\rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle n|m\rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \delta_{n,m} \\ &= \sum_n |c_n|^2 = 1,\end{aligned} \tag{3.38}$$

το άθροισμα των μιγαδικών συντελεστών c_n είναι $\sum_n |c_n|^2 = 1$

- Αν οι $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, $|\varphi\rangle = \sum_n d_n |n\rangle$ έχουν συνιστώσες τις $c_n = \langle n|\psi\rangle$ και $d_n = \langle n|\varphi\rangle$ το εσωτερικό γινόμενο υπολογίζεται

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \sum_m d_m^* \langle m| \sum_n c_n |n\rangle \\ &= \sum_{n,m} d_m^* c_n \langle m|n\rangle \\ &= \sum_{n,m} d_m^* c_n \delta_{m,n} = \sum_n d_n^* c_n .\end{aligned} \tag{3.39}$$

Επομένως, σε αντιστοιχία με την διανυσματική εξίσωση $|a\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle$ έχουμε την συνάρτηση κατάστασης ως *υπέρθεση*

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle \\ &= \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle\end{aligned} \tag{3.40}$$

συναρτήσει των συνιστωσών $c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$ της $|\psi\rangle$ από την οποία προκύπτει η *σχέση πληρότητας*

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| \tag{3.41}$$

για το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων $|n\rangle$. Στο αριστερό μέλος της εξ. (3.41) είναι ο ταυτοτικός τελεστής $\hat{1} = 1$ ή τελεστής μονάδα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

3.2. Τελεστές

Η απεικόνιση ενός συνόλου μαθηματικών αντικειμένων $|\psi\rangle$ σε ένα άλλο ίδιο με το αρχικό $|\varphi\rangle$ γίνεται με έναν τελεστή $\hat{A}$

$$|\psi\rangle \to |\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \ . \tag{3.42}$$

Οι $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ μπορεί χρονικά ανεξάρτητες ή χρονικά εξαρτημένες κυματοσυναρτήσεις, με τις συνηθισμένες ιδιότητες όπως συνέχεια, παραγωγισιμότητα, κλπ, που διασφαλίζουν την δυνατότητα εκτέλεσης των αναγκαίων μαθηματικών πράξεων. Η γραμμικότητα ενός τελεστή $\hat{A}$ εκφράζεται από την σχέση

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = \left(c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle\right), \quad c_1, c_2 = const., \tag{3.43}$$

Η δράση του τελεστή $\hat{A}$ στον γραμμικό συνδυασμό των $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ είναι ο γραμμικός συνδυασμός των εικόνων τους $\hat{A}|\psi_1\rangle, \hat{A}|\psi_2\rangle$ που προκύπτουν από την δράση του $\hat{A}$ στις $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ ξεχωριστά.

- Ο *τελεστής θέσης* $\hat{x} = x$ απλώς πολλαπλασιάζει την συνάρτηση επί x και είναι γραμμικός αφού

$$\begin{aligned} \hat{x}\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right) &= c_1\hat{x}|\psi_1\rangle + c_2\hat{x}|\psi_2\rangle \\ &= c_1 x|\psi_1\rangle + c_2 x|\psi_2\rangle \end{aligned} \ . \tag{3.44}$$

- Ο *διαφορικός τελεστής* $\hat{D} = d/dx$ παραγωγίζει την αντίστοιχη συνάρτηση ως προς x και είναι, επίσης, γραμμικός αφού

$$\begin{aligned} \hat{D}\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right) &= c_1\hat{D}|\psi_1\rangle + c_2\hat{D}|\psi_2\rangle \\ &= c_1\frac{d}{dx}|\psi_1\rangle + c_2\frac{d}{dx}|\psi_2\rangle \end{aligned} \ . \tag{3.45}$$

Οι μαθηματικές πράξεις πρόσθεση, αφαίρεση, κλπ, μεταξύ τελεστών γίνονται όπως και με τους αριθμούς εκτός από την περίπτωση του πολλαπλασιασμού. Στους τελεστές δεν ισχύει πάντα η ιδιότητα της μεταθετικότητας στον πολλαπλασιασμό, δηλαδή $2\cdot 3 \neq 3\cdot 2$ για τους τελεστές[8]. Στην γενική περίπτωση για τους $\hat{A}, \hat{B}$ έχουμε

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \tag{3.46}$$

[8] Είναι σαν να επιχειρήσουμε να 'φορέσουμε πρώτα τα παπούτσια και μετά τις κάλτσες' υποθέτοντας πως είναι το ίδιο με την συνηθισμένη αντίστροφη πορεία.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που επιτρέπει να ορισθεί ο *μεταθέτης* δύο τελεστών

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\,\hat{B}-\hat{B}\,\hat{A} \quad . \tag{3.47}$$

Αν $\hat{A},\hat{B}$ ήταν αριθμοί ο μεταθέτης τους θα ήταν μηδέν ενώ στην περίπτωση των τελεστών συνήθως είναι διάφορος του μηδενός. Επομένως πρέπει να είμαστε πολύ προσεκτικοί στον πολλαπλασιασμό των τελεστών γιατί η σειρά με την οποία εμφανίζονται είναι σημαντική. Ένας τελεστής *δρα πάντα στην συνάρτηση που είναι αμέσως στα δεξιά του* ενώ στο αποτέλεσμα, που είναι μια νέα συνάρτηση, δρα ο τελεστής που είναι στα αριστερά. Στο παράδειγμα

$$\hat{A}\,\hat{B}|\psi\rangle=\hat{A}\left(\hat{B}|\psi\rangle\right) \tag{3.48}$$

ο $\hat{B}$ δρα στην $|\psi\rangle$ και ο $\hat{A}$ θα δράσει στο αποτέλεσμα της νέας συνάρτησης $\hat{B}|\psi\rangle$ που προκύπτει.

- Ο μεταθέτης των τελεστών θέσης και ορμής $\hat{x}=x,\ \hat{p}=-i\hbar(\partial/\partial x)$ είναι

$$\left[\hat{x},\hat{p}\right]=\hat{x}\,\hat{p}-\hat{p}\,\hat{x} \quad . \tag{3.49}$$

Μπορεί να υπολογισθεί αν βάλουμε κάθε μέλος της (3.49) να δράσει σε μια βοηθητική συνάρτηση $\psi(x)$, αρκεί αυτή να είναι παραγωγίσιμη, κλπ, ώστε

$$\hat{x}\,\hat{p}\psi(x)=x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)=-i\hbar\,x\psi'(x)$$

$$\hat{p}\,\hat{x}\psi(x)=-i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi(x))=-i\hbar(\psi(x)+x\psi'(x))$$

ώστε

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}]\,\psi(x)&=(\hat{x}\,\hat{p}-\hat{p}\,\hat{x})\,\psi(x)=-i\hbar x\psi'(x)+i\hbar(\psi(x)+x\psi'(x))\\&=i\hbar\psi(x) \quad .\end{aligned}$$

Επομένως,

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar. \tag{3.50}$$

Αυτός είναι ο πιο βασικός μεταθέτης της κβαντικής υπεύθυνος για την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg $\Delta x\cdot\Delta p\geq\hbar/2$ που εκφράζει την αδυναμία ταυτόχρονης μέτρησης θέσης και ορμής με αυθαίρετη ακρίβεια. Για δύο τελεστές $\hat{A},\hat{B}$ μπορεί να αποδειχθεί (παράρτημα Γ) η γενικευμένη σχέση Heisenberg για το γινόμενο των αβεβαιοτήτων

$$\Delta A\,\Delta B\geq|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|/2 \quad . \tag{3.51}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

Παρατηρούμε πως μόνον *όταν οι τελεστές μετατίθενται* $[\hat{A},\hat{B}]=0$ τα αντίστοιχα φυσικά μεγέθη που θεωρούνται συμβατά *μετρούνται ταυτοχρόνως με αυθαίρετη ακρίβεια*, διαφορετικά, όταν $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$, θεωρούνται ασύμβατα και υπάρχει όριο στην ακρίβεια μετρήσεων των A, B από την (3.51). Η μέτρηση του A με ακρίβεια οδηγεί στην μέτρηση του B με λιγότερη ακρίβεια και αντιστρόφως.

Τα παρατηρήσιμα μεγέθη A, B που αντιστοιχούν στους τελεστές[9] $\hat{A},\hat{B}$ λέγονται *συμβατά μεγέθη* τότε και μόνον τότε όταν ο μεταθέτης είναι μηδενικός $[\hat{A},\hat{B}]=0$. Όταν ο μεταθέτης δεν μηδενίζεται $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ είναι *ασύμβατα* και κατά την μέτρηση οδηγούν στην *αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg* $\Delta A\,\Delta B \geq |\langle[A,B]\rangle|/2$.

Η μέση τιμή και η αβεβαιότητα μιας μεταβλητής που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A}$ υπολογίζεται από την

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \sum_n c_n^*\langle n|\ \hat{A}\ \sum_m c_m|m\rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle n|\,\hat{A}\,|m\rangle\end{aligned} \tag{3.52}$$

και με την *εξίσωση ιδιοτιμών* $\hat{A}|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{n,m} c_n^* c_m\ \alpha_m\langle n|m\rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m\ \alpha_m\delta_{n,m} \\ &= \sum_n |c_n|^2\ \alpha_n\ .\end{aligned} \tag{3.53}$$

Μετά τον υπολογισμό και της μέσης τιμής $\langle A^2\rangle = \sum_n |c_n|^2\ \alpha_n^2$ υπολογίζεται η αβεβαιότητα $\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$.

[9] Τα παρατηρήσιμα μεγέθη συνήθως αντιστοιχούν σε ερμιτειανούς τελεστές (Κεφ. 3.2.1.)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

3.2.1 Ερμιτειανοί τελεστές

Ο *ερμιτειανός συζυγής* $\hat{A}^+$ του τελεστή $\hat{A}$ ορίζεται από την ισότητα

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle^* \quad \text{για } \forall\,|\psi\rangle,|\varphi\rangle \tag{3.54}$$

ή ισοδύναμα

$$\langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+\varphi\rangle^* = \langle\hat{A}^+\varphi|\psi\rangle \tag{3.55}$$

από την μιγαδική συζυγή ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου. Άν γράψουμε το πρώτο διάνυσμα με ένα νέο *ket* $|\chi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ από την ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου στον τελευταίο ορισμό

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle^* \tag{3.56}$$

έπεται το διάνυσμα *bra*

$$\langle\chi| = \langle\psi|\hat{A}^+ . \tag{3.57}$$

Ο τελεστής $\hat{A}$ είναι *ερμιτειανός* όταν ισούται με τον ερμιτειανό συζυγή του εαυτού του $\hat{A} = \hat{A}^+$

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^* . \tag{3.58}$$

- Όταν $|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ ο ορισμός ενός ερμιτειανού τελεστή ισοδυναμεί με την απαίτηση *πραγματικής μέσης τιμής* για το αντίστοιχο φυσικό μέγεθος

$$\langle A\rangle = \langle A\rangle^* \tag{3.59}$$

στις μετρήσεις στο κβαντικό στατιστικό ensemble.

- **Θεώρημα: (i)** *Οι ιδιοτιμές ερμιτειανού τελεστή είναι πραγματικές και* **(ii)** *οι ιδιοσυναρτησεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

Απόδειξη:

(i) Από τον ορισμό με την αντικατάσταση $|\psi\rangle = |\varphi\rangle = |n\rangle$ προκύπτει η $\langle n|\hat{A}|n\rangle = \langle n|\hat{A}^{+}|n\rangle^{*}$ και με την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$

$$\alpha_n\langle n|n\rangle = \alpha_n^{*}\langle n|n\rangle \Leftrightarrow \alpha_n = \alpha_n^{*}. \tag{3.60}$$

(ii) Από τον ορισμό του ερμιτειανού τελεστή $\langle n|\hat{A}|m\rangle = \langle m|\hat{A}|n\rangle^{*}$ με τις $\hat{A}|m\rangle = \alpha_m|m\rangle$, $\hat{A}|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$ και την συνθήκη πραγματικών ιδιοτιμών $\alpha_n = \alpha_n^{*}$ έπεται η σχέση ορθογωνιότητας $\langle n|\hat{A}|m\rangle - \langle m|\hat{A}|n\rangle^{*} = 0 \Leftrightarrow$ $\alpha_m\langle n|m\rangle - \alpha_n^{*}\langle n|m\rangle = 0 \Leftrightarrow (\alpha_m - \alpha_n)\langle n|m\rangle = 0 \Leftrightarrow \langle n|m\rangle = 0$, όταν $\alpha_n \neq \alpha_m$.

Οι ιδιότητες των ερμιτειανών τελεστών συνοψίζονται στις

$$\begin{aligned}
&\left(\hat{A}^{+}\right)^{+} = \hat{A} \\
&\left(\lambda\hat{A}\right)^{+} = \lambda^{*}\hat{A}^{+}, \lambda \in C \\
&\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{+} = \hat{A}^{+} + \hat{B}^{+} \\
&\left(\hat{A}\,\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

με πιό ενδιαφέρουσα την τελευταία που αποδεικνύεται ως εξής:

$$|\varphi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}|\chi\rangle, \; |\chi\rangle = \hat{B}|\psi\rangle, \; \langle\chi| = \langle\psi|\hat{B}^{+} \tag{3.62}$$

και

$$\langle\varphi| = \langle\chi|\hat{A}^{+} = \langle\psi|\hat{B}^{+}\hat{A}^{+} \tag{3.63}$$

ενώ $\langle\varphi| = \langle\psi|\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+}$ ο ορισμός (3.62) μαζί με την (3.63) δίνουν το απαιτούμενο αποτέλεσμα.

3.2.2. <u>Αναπαράσταση τελεστών με μήτρες</u>

Από την δράση του τελεστή $\hat{A}$ στην $|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle|n\rangle$ γραμμένη στην *αυθαίρετη βάση* $\{|n\rangle\}$, εισάγοντας $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$ και $1 = \sum_m |m\rangle\langle m|$ από την πληρότητα,

$$
\begin{aligned}
\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_n |n\rangle\langle n|\hat{A}|\psi\rangle \\
&= \sum_n |n\rangle\langle n|\,\hat{A}\sum_m |m\rangle\langle m|\;|\psi\rangle \\
&= \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\psi\rangle \\
&= \sum_{n,m} \hat{A}_{nm}|n\rangle\langle m|\psi\rangle \;.
\end{aligned}
\tag{3.64}
$$

Διώχνοντας την $|\psi\rangle$ από τα δύο μέλη ο τελεστής $\hat{A}$ γράφεται στην μορφή μήτρας $\hat{A}=\sum_{n,m}\hat{A}_{nm}|n\rangle\langle m|$ με *στοιχεία μήτρας*[10] $\hat{A}_{nm}=\langle n|\hat{A}|m\rangle$. Αν υπολογίσουμε όλα τα στοιχεία μήτρας στην συγκεκριμένη βάση η μήτρα είναι

$$
\hat{A}=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \;. \tag{3.65}
$$

Η μήτρα *διαγωνοποιείται* στην *βάση των ιδιοδιανυσμάτων* $\{|n\rangle\}$[11] *που ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών* $\hat{A}|n\rangle=\alpha_n|n\rangle$. Το στοιχείο μήτρας $\hat{A}_{nm}=\langle n|\hat{A}|m\rangle$ γίνεται $\hat{A}_{nm}=\alpha_m\langle n|m\rangle=a_m\,\delta_{n,m}$ και η $\hat{A}=\sum_{n,m}\hat{A}_{nm}|n\rangle\langle m|=\sum_{n,m}\alpha_m\,\delta_{n,m}|n\rangle\langle m|$ παίρνει την διαγώνια μορφή $\hat{A}=\sum_n\alpha_n|n\rangle\langle n|$ που γράφεται

$$
\hat{A}=\begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} , \tag{3.66}
$$

με τις ιδιοτιμές ως τα διαγώνια στοιχεία και τα μη διαγώνια μηδενικά. Επομένως, εκτός από την λύση της διαφορικής εξίσωσης Schrödinger, ο εναλλακτικός στόχος της κβαντικής είναι *η διαγωνοποίηση μιας μήτρας*, συνήθως για τον Χαμιλτονιανό τελεστή $\hat{H}$. Αν αυτό επιτευχθεί οι ιδιοτιμές, π.χ. της ενέργειας E_n, διαβάζονται από τα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου.

---

[10] Το στοιχείο μήτρας της n-οστής γραμμής και m-οστής στήλης δίνεται από το σάντουϊτς $\langle n|\hat{A}|m\rangle=\hat{A}_{nm}$.

[11] Η γραφή της μήτρας είναι διαφορετική στις δύο βάσεις που συνήθως δεν συμπίπτουν παρά το γεγονός ότι χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο. Όταν συμπέσουν η μήτρα είναι ήδη διαγώνια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Τα ιδιοδιανύσματα με μονάδα στην αντίστοιχη γραμμή και μηδέν αλλού

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \cdots \tag{3.67}$$

προφανώς αποτελούν μια ορθοκανονική βάση $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ στην οποία το bra $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ είναι διάνυσμα στήλης

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle + \cdots = c_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + c_3\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} + \cdots = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} . \tag{3.68}$$

Ο γραμμικός μετασχηματισμός $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = \sum_n c_n \hat{A}|n\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$ δίνει νέα πλάτη

$$\begin{aligned} d_m &= \langle m|\varphi\rangle \\ &= \langle m|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \sum_n c_n \langle m|\hat{A}|n\rangle \\ &= \sum_n \hat{A}_{mn}\, c_n \end{aligned} \tag{3.69}$$

και ο γραμμικός μετασχηματισμός $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ σε μορφή μήτρας εκφράζεται με το γινόμενο

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} , \tag{3.70}$$

που περιλαμβάνει τα δύο διανύματα στήλης και την απειροδιάστατη μήτρα. Η αντιστοιχία είναι

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}, \hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} . \tag{3.71}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η ερμιτειανή συζυγής μιας μήτρας έχει στοιχεία $\hat{A}^{+}_{nm} = \langle m|\hat{A}|n\rangle^{*}$ και προκύπτει από την αλλαγή των γραμμών σε στήλες με ταυτόχρονη λήψη των μιγαδικών συζυγών στοιχείων

$$\hat{A}^{+} = \begin{pmatrix} A^{*}_{11} & A^{*}_{21} & A^{*}_{31} & \cdots \\ A^{*}_{12} & A^{*}_{22} & A^{*}_{32} & \cdots \\ A^{*}_{13} & A^{*}_{23} & A^{*}_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad . \tag{3.72}$$

Η μήτρα *είναι ερμιτειανή* όταν $\hat{A}^{+} = \hat{A}$ ή $\hat{A}_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle = \langle m|\hat{A}|n\rangle^{*}$. Παρατηρούμε πως τα διαγώνια στοιχεία μιας ερμιτειανής μήτρας είναι *πραγματικοί αριθμοί* $\hat{A}_{nn} = \hat{A}^{*}_{nn}$ ενώ *τα συμμετρικά ως προς την κύρια διαγώνιο είναι ίσα με τα μιγαδικά συζυγή τους* $\hat{A}_{nm} = \hat{A}^{*}_{mn}, m \neq n$. Η ερμιτειανή μήτρα είναι $\hat{A}^{+} = \tilde{\hat{A}}^{*}$, όπου το σύμβολο ~ παριστάνει την *ανάστροφη μήτρα* που προκύπτει από αλλαγή των γραμμών σε στήλες και αντιστρόφως και ο αστερίσκος δηλώνει τον μιγαδικό συζυγή.

Στην γραμμική άγεβρα ενδιαφέρον παρουσιάζει η *αντίστροφη μήτρα* $\hat{A}^{-1}$ που ορίζεται από το γινόμενο $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = 1$ όπου 1 είναι η μήτρα του *τελεστή μονάδα* με διαγώνια στοιχεία ένα και μη διαγώνια μηδέν. Η *ορθογώνια μήτρα* ορίζεται ως $\tilde{\hat{O}} = \hat{O}^{-1}$. Ιδιαίτερου ενδιαφέροντος στην κβαντική είναι οι *μοναδιαίες μήτρες* που ορίζονται από την ισότητα

$$\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1} \quad . \tag{3.73}$$

Ένας *μοναδιαίος μετασχηματισμός* ορίζεται από την δράση του τελεστή $|\varphi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ και αφήνει αναλλοίωτο (διατηρεί) το εσωτερικό γινόμενο $\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$. Οι μοναδιαίοι μετασχηματισμοί διατηρούν τις πιθανότητες πριν και μετά στον μετασχηματισμό και είναι βασικοί στην κβαντική.

Πρόβλημα 1. Να δειχθεί ότι η μήτρα $\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix}$ είναι ερμιτειανή και η $\hat{U} = \exp(i\hat{A})$[12] είναι μοναδιαία. Η μήτρα $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ είναι ο *τελεστής*

[12] Ο $\hat{U}$ εδώ είναι μια εκθετική συνάρτηση τελεστή.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

χρονικής εξέλιξης που περιγράφει την κβαντική χρονική εξέλιξη όταν το δυναμικό δεν εξαρτάται από τον χρόνο.

Λύση:

Η ερμιτειανή συζυγής της $\hat{A}$ κατευθείαν από τον ορισμό είναι $\hat{A}^{+}=\begin{pmatrix}1^{*} & (-i)^{*}\\ i^{*} & 2^{*}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 2\end{pmatrix}=\hat{A}$, άρα η $\hat{A}$ είναι ερμιτειανή. Η συνάρτηση μήτρας $\hat{U}=\exp\left(i\hat{A}\right)$ ικανοποιεί τον ορισμό της μοναδιαίας μήτρας αφού $\hat{U}^{+}=\exp\left(-i\hat{A}^{+}\right)=\exp\left(-i\hat{A}\right)=\hat{U}^{-1}$. Το ίδιο συμβαίνει και γιά τον μοναδιαίο τελεστή χρονικής εξέλιξης με την κυματοσυνάρτηση σε χρόνο t $\Psi(x,t)=\hat{U}(t)\,\psi(x)=\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\psi(x)$ με $\Psi(x,0)=\psi(x)$. Η $\Psi(x,t)$ είναι λύση της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger.

Πρόβλημα 2. Να δειχθεί ότι η μήτρα $\hat{U}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$ είναι ορθογώνια και μοναδιαία. Να δειχθεί πως η δράση της $\hat{U}$ στην ορθοκανονική βάση $|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},|1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ δίνει τις *καταστάσεις υπέρθεσης* $|\pm\rangle=\frac{|0\rangle\pm|1\rangle}{\sqrt{2}}$, με 50% πιθανότητες να συμβεί η κάθε μία εκ των $|0\rangle$, $|1\rangle$ σε μια μέτρηση. Δίνεται η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}=\frac{2}{\sqrt{5}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{5}}|1\rangle.$$

με πιθανότητες λήψης των $|0\rangle$, $|1\rangle$ τις $\left(\frac{2}{\sqrt{5}}\right)^{2}=\frac{4}{5}$, $\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^{2}=\frac{1}{5}$ ή 80% και 20%, αντίστοιχα. Η κυματοσυνάρτηση που θα προκύψει από την δράση της μοναδιαίας μήτρας $\hat{U}$ ενισχύει ή μειώνει αυτές τις πιθανότητες;

Λύση:

Η αντίστροφη μήτρα $\hat{U}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}=\hat{U}$, που υπολογίζεται ώστε το γινόμενο $UU^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$, ικανοποιεί τον ορισμό της μοναδιαίας μήτρας $\hat{U}^{+}=\tilde{\hat{U}}^{*}=\hat{U}^{-1}$. Το αποτέλεσμα της δράσης της μοναδιαίας μήτρας $\hat{U}$ στην

$|\psi\rangle$ δίνει την $|\psi\rangle = \frac{3}{\sqrt{10}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}$ με νέες πιθανότητες $\left(\frac{3}{\sqrt{10}}\right)^2 = \frac{9}{10}$, $\left(\frac{1}{\sqrt{10}}\right)^2 = \frac{1}{10}$ λήψης της κάθε μίας εκ των $|0\rangle, |1\rangle$, που αντιστοιχούν σε ποσοστά 90% και 10% αντίστοιχα. Παρατηρούμε πως μετά την δράση της μήτρας $\hat{U}$ η μεν πρώτη ιδιοκατάσταση ενισχύεται (δημιουργική συμβολή) ενώ η άλλη μειώνεται (καταστροφική συμβολή).

Πρόβλημα 3. Ένα σύστημα δύο καταστάσεων στην ορθοκανονική και πλήρη βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ περιγράφεται από τις σχέσεις

$$\hat{H}|0\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$
$$\hat{H}|1\rangle = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \Re .$$

(i) Να βρεθεί η μήτρα που αναπαριστάνει τον τελεστή $\hat{H}$.

(ii) Να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{H}$.

(iii) Ποιά είναι η μήτρα $\hat{H}$ στην βάση των ιδιοσυναρτήσεων;

Λύση:

(i) Η μήτρα είναι $\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix}$ με στοιχεία μήτρας

$$H_{00} = \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \langle 0|(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha\langle 0|0\rangle + \beta\langle 0|1\rangle = \alpha$$

$$H_{01} = \langle 0|\hat{H}|1\rangle = \langle 0|(\beta|0\rangle + \alpha|1\rangle) = \beta\langle 0|0\rangle + \alpha\langle 0|1\rangle = \beta$$

$$H_{10} = \langle 1|\hat{H}|0\rangle = \langle 1|(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha\langle 1|0\rangle + \beta\langle 1|1\rangle = \beta$$

$$H_{11} = \langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 1|(\beta|0\rangle + \alpha|1\rangle) = \beta\langle 1|0\rangle + \alpha\langle 1|1\rangle = \alpha$$

ώστε

$$\hat{H} = \alpha(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) + \beta(|0\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 1|) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

(ii) Η διαγωνοποίηση της $\hat{H}$ γινεται από τον υπολογισμό της ορίζουσας

$$\det\begin{pmatrix} \alpha - E & \beta \\ \beta & \alpha - E \end{pmatrix} = 0$$

με την λύση της εξίσωσης $(\alpha - E)^2 - \beta^2 = 0$. Οι ιδιοτιμές είναι $E_\pm = \alpha \pm \beta$ ενώ οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $|\pm\rangle$ υπολογίζονται από

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

την λύση ενός γραμμικού και ομογενούς συστήματος. Για την E_+ το σύστημα $\begin{pmatrix} \alpha - E_+ & \beta \\ \beta & \alpha - E_+ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1^+ \\ c_2^+ \end{pmatrix} = 0$ δίνει $c_1^+ = c_2^+$ και επειδή απαιτείται η κανονικοποίηση $\langle + | + \rangle = 1 \Leftrightarrow |c_1^+|^2 + |c_2^+|^2 = 1$ έπεται η λύση[13] $c_1^+ = c_2^+ = 1/\sqrt{2}$. Για την E_- το $\begin{pmatrix} \alpha - E_- & \beta \\ \beta & \alpha - E_- \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1^- \\ c_2^- \end{pmatrix} = 0$ δίνει $c_1^- = -c_2^-$ και απο την κανονικοποίηση $c_1^- = -c_2^- = 1/\sqrt{2}$. Άρα, τα κανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ είναι οι καταστάσεις υπέρθεσης $|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}$ με $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

(iii) Η μήτρα $\hat{H}$ στην βάση των ιδιοδιανυσμάτων $|\pm\rangle$ έχει την διαγώνια μορφή

$$\hat{H} = E_+|+\rangle\langle +| + E_-|-\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}.$$

Πρόβλημα 4. Ο *τελεστής προβολής* ή *τελεστής μέτρησης* ορίζεται από την σχέση

$$P_n = |n\rangle\langle n| \, , \, P_n^2 = P_n$$

για $\forall$ ιδιοτιμή α_n στην εξίσωση $\hat{A}|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$. Ο τελεστής προβολής έχει δύο ιδιοτιμές: 1 ή 0 . Να δειχθεί ότι η *μη εκφυλισμένη ιδιοτιμή* 1 αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση $|n\rangle$ ενώ η *εκφυλισμένη ιδιοτιμή* 0 αντιστοιχεί στις ιδιοσυναρτήσεις $|m\rangle, m \neq n$. Επίσης, να δείξετε ότι ο $1 - P_n = 1 - |n\rangle\langle n|, (1 - P_n)^2 = P_n$ είναι επίσης τελεστής προβολής και να βρείτε τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις του *τελεστή ανάκλασης* $1 - 2P_n = 1 - 2|n\rangle\langle n|, (1 - 2P_n)^2 = 1$. Να περιγράψετε το αποτέλεσμα της δράσης αυτών των τελεστών. Γιατί ο τελεστής προβολής λέγεται και τελεστής μέτρησης;

Λύση: $P_n^2 = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle\langle n| = P_n$, $(1 - 2P_n)|n\rangle = |n\rangle - 2|n\rangle\langle n|n\rangle = -|n\rangle$ με

[13] Στα ιδιοδιανύσματα προφανώς έχουμε κάποια ευχέρεια επιλογής για τα c_1, c_2. Εδώ επιλέγουμε πραγματικούς αριθμούς.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ιδιοτιμή -1 κλπ. Από την δράση του P_n στην $|\psi\rangle = \sum_m c_m |m\rangle$ το αποτέλεσμα είναι η ιδιοκατάσταση $|n\rangle$ που προκύπτει σε μια μέτρηση.

Πρόβλημα 5. Σε ένα σύστημα δύο καταστάσεων οι τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ έχουν ο μεν πρώτος ιδιοτιμές α_0, α_1 και ιδιοσυναρτήσεις τα ορθοκανονικά διανύσματα $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ ενώ ο δεύτερος ορίζεται από την σχέση

$$\hat{B}|0\rangle = -i|1\rangle$$
$$\hat{B}|1\rangle = i|0\rangle \ .$$

(i) Να βρεθούν οι μήτρες που αναπαριστάνουν τους τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ στην βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

(ii) Να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{B}$. Πως αναπαριστάνεται ο τελεστής $\hat{A}$ στην βάση ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{B}$;

(iii) Στην κανονικοποιημένη κατάσταση

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}}(|0\rangle + i\lambda|1\rangle), \ \lambda \in \Re,$$

να υπολογίσετε τις μέσες τιμές $\langle A\rangle, \langle B\rangle$ και τις αβεβαιότητες ΔA, ΔB των αντίστοιχων με τους τελεστές μετρήσιμων μεγεθών.

Λύση: Οι μήτρες στην βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ είναι

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{A}^2 = \begin{pmatrix} \alpha_0^2 & 0 \\ 0 & \alpha_1^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{B}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \ .$$

Η διαγωνοποίηση της μήτρας $\hat{B}$ δίνει ιδιοτιμές-ιδιοδιανύσματα $\beta_\pm = \pm 1$, $|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \mp i|1\rangle}{\sqrt{2}}$. Στην νέα βάση των $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ οι μήτρες έχουν την μορφή

$$\hat{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \alpha_0 + \alpha_1 & \alpha_0 - \alpha_1 \\ \alpha_0 - \alpha_1 & \alpha_0 + \alpha_1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Οι μέσες τιμές στην συγκεκριμένη $|\psi\rangle$ υπολογίζονται από τις $\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$, $\langle B\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$, $\langle A^2\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle$, $\langle B^2\rangle = \langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle$. Π.χ. η μέση τιμή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left[\frac{\langle 0| - i\lambda\langle 1|}{\sqrt{1+\lambda^2}}\right]\hat{A}\left[\frac{|0\rangle + i\lambda|1\rangle}{\sqrt{1+\lambda^2}}\right]$$

$$= \frac{\langle 0|A|0\rangle + i\lambda\langle 0|A|1\rangle - i\lambda\langle 1|A|0\rangle - i^2\lambda^2\langle 1|A|1\rangle}{1+\lambda^2} = \frac{\alpha + i\lambda\beta - i\lambda\beta + \lambda^2\alpha}{1+\lambda^2} = \alpha .$$

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν μετά από πράξεις για τις αβεβαιότητες είναι $\Delta A = \dfrac{\lambda(\alpha_0 - \alpha_1)}{1+\lambda^2}$, $\Delta B = \dfrac{1-\lambda^2}{1+\lambda^2}$. Ενδιαφέρον παρουσιάζει και ο υπολογισμός της μέσης τιμής του τελεστή μετάθεσης $[A,B]$ αφού οι A,B πρέπει να ικανοποιούν την γενικευμένη αρχή της αβεβαιότητας (3.51). Το αποτέλεσμα είναι $\langle [A,B]\rangle = \langle\psi|[A,B]|\psi\rangle = 0$.

Πρόβλημα 6. Για τους ερμιτειανούς τελεστές $\hat{A}$, $\hat{B}$ ισχύουν οι ιδιότητες $A^2 = 1$, $B^2 = 1$, $AB = -BA$.

(i) Αν η $|0\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση του A με ιδιοτιμή +1 να δείξετε ότι η $|1\rangle = B|0\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση του A με ιδιοτιμή −1.

(ii) Να κατασκευάσετε τις μήτρες A, B.

(iii) Να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις του iAB.

Απάντηση:

$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, για τον iAB: ιδιοτιμές ± 1 και ιδιοσυναρτήσεις $|\pm\rangle = \dfrac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}$.

3.3. Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών-συνάρτηση δέλτα

Στην περίπτωση που το φάσμα ιδιοτιμών ενός τελεστή είναι συνεχές

$$\hat{A}|\psi_\alpha\rangle = \alpha|\psi_\alpha\rangle, \quad \alpha \in (-\infty, +\infty), \tag{3.74}$$

το ανάπτυγμα της $|\psi\rangle$ στην βάση των ιδιοδιανυσμάτων $|\psi_\alpha\rangle$ αντί αθροίσματος γίνεται με το ολοκλήρωμα

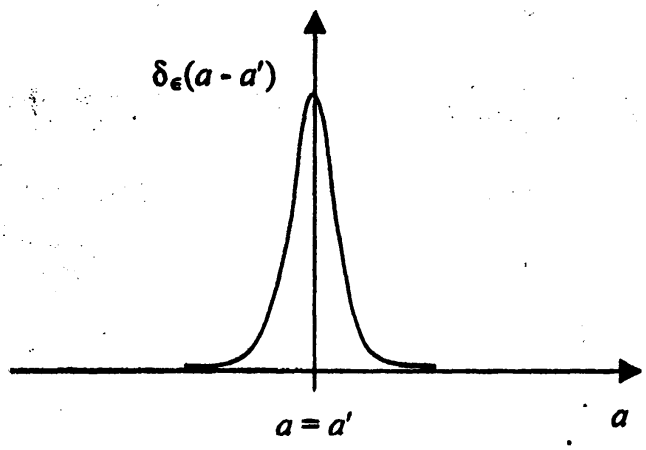
$$|\psi\rangle = \int d\alpha\, \langle\psi_\alpha|\psi\rangle\, |\psi_\alpha\rangle \tag{3.75}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με πλάτη πιθανότητας $\langle\psi_\alpha|\psi\rangle$ και την σχέση πληρότητας $1=\int d\alpha\,|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$. Η συνθήκη ορθοκανονικότητας της βάσης εκφράζεται με την μαθηματική *συνάρτηση δέλτα του Dirac*

$$\langle\psi_\alpha|\psi_{\alpha'}\rangle=\delta(\alpha-\alpha') \tag{3.76}$$

που αποτελεί γενίκευση του δέλτα του Kronecker $\delta_{n,m}$ στο συνεχές. Η τιμή της συνάρτησης δέλτα είναι μηδέν για $\alpha\neq\alpha'$ αφού οι $|\psi_\alpha\rangle$, $|\psi_{\alpha'}\rangle$ είναι ορθογώνιες και απειρίζεται για $\alpha=\alpha'$ γιατί οι $|\psi_\alpha\rangle$ *δεν είναι κανονικοποιημένες*, όπως τα επίπεδα κύματα στο Κεφ. 2.4.



Σχ. 3.3. *Η γενικευμένη συνάρτηση δέλτα* $\delta_\epsilon(a-a')=\dfrac{1}{\pi}\dfrac{\epsilon}{\epsilon^2+(a-a')^2}$ *με*

όρια:

$$a=a':\ \delta_\epsilon(a-a')=\frac{1}{\pi}\frac{1}{\epsilon}\to\infty$$

$$a\neq a':\ \delta_\epsilon(a-a')=\frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{(a-a')^2}\to 0.$$

Οι *ιδιότητες της συνάρτησης δέλτα* εκφράζονται με τα ολοκληρώματα:

- $\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\delta(x)\,\varphi(x)=\varphi(0)$ όπου επιβιώνει μόνο η τιμή $x=0$,
- $\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\delta(x-\alpha)\,\varphi(x)=\varphi(\alpha)$ επιβιώνει η τιμή $x=\alpha$,
- $\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\delta(x)=1$ και η $\delta(x)$ είναι κανονικοποιημένη,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

για οποιαδήποτε βοηθητική συνάρτηση $\varphi(x)$. Η $\delta(x)$ είναι μιά *γενικευμένη συνάρτηση*. Η ισότητα δύο γενικευμένων συναρτήσεων διαπιστώνεται από την εξίσωση των ολοκληρωμάτων τους μαζί με μιά βοηθητική συνάρτηση $\varphi(x)$. Είναι σχετικά εύκολο να δειχθούν οι βασικές σχέσεις της συνάρτησης $\delta(x)$:

- $x\delta(x) = 0$, (3.77)

- $\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|}\delta(x)$, $\lambda \in \Re$, (3.78)

- $\delta(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{\pm ikx}$. (3.79)

Η πρώτη αποδεικνύεται από την ισότητα των ολοκληρωμάτων για $\forall\varphi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(x\delta(x))\,\varphi(x) = 0\,\varphi(0) = 0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(0)\,\varphi(x) \Leftrightarrow x\delta(x) = 0\,. \tag{3.80}$$

Η δεύτερη με την αντικατάσταση $y = |\lambda|x$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(\delta(\lambda x))\varphi(x) = \frac{1}{|\lambda|}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\;\delta(y)\,\varphi(y/|\lambda|) = \frac{1}{|\lambda|}\varphi(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy\,\left(\frac{1}{|\lambda|}\delta(x)\right)\varphi(x), \tag{3.81}$$

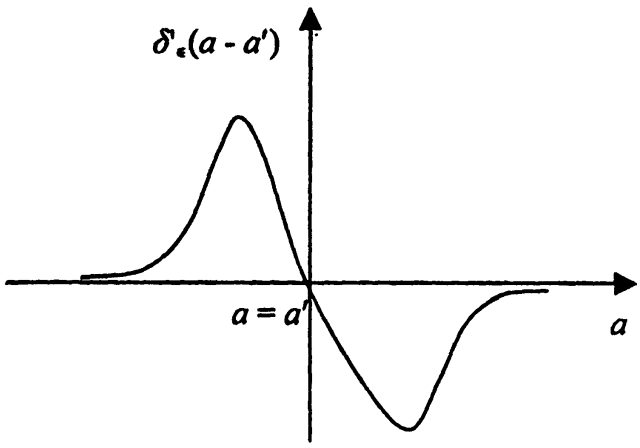
όπου για $\lambda = -1$ παρατηρούμε πως η συνάρτηση δέλτα είναι άρτια $\delta(-x) = \delta(x)$. Η ιδιότητα της κανονικοποίησης προκύπτει από τον *ευθύ* και *αντίστροφο* μετασχηματισμό Fourier της $\delta(x)$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\;e^{-ikx}\,\delta(x) = \frac{e^{-ik0}}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\ &\Leftrightarrow \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\;e^{+ikx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\;e^{+ikx} \end{aligned} \tag{3.82}$$

και παρομοίως για την $\delta(-x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{-ikx} = \delta(x)$. Επομένως, η παράγωγος της δέλτα $\delta'(x) = -\delta'(-x)$ είναι μια περιττή συνάρτηση. Χρήσιμη είναι και η δέλτα μιας συνάρτησης $\delta(f(x)) = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|f'(x_j)|}$ για την οποία χρειάζονται οι απλές ρίζες x_j της εξίσωσης $f(x) = 0$ στο διάστημα που μας αφορά. Η απόδειξη απαιτεί την

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

γραφή $f(x) = (x - x_j) f'(x_j)$ στα σημεία που μηδενίζεται η f και την (3.78). Π.χ. με την ιδιότητα αυτή να δείξετε ότι $\delta(x^2 - a^2) = \dfrac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2a}$.



Σχ. 3.4. Η παράγωγος $\delta'_\epsilon(a - a')$ της γενικευμένης συνάρτηση δέλτα.

Αναπαράσταση θέσης: Η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$ για τα διανύσματα θέσης ελεύθερου σωματίου αντιστοιχεί στο συνεχές φάσμα ιδιοτιμών $x' \in (-\infty, +\infty)$ με τις συνθήκες ορθοκανονικότητας $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ και πληρότητας $1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |x\rangle\langle x|$. Από το ανάπτυγμα του ket $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |x\rangle\langle x|\psi\rangle$ το πλάτος πιθανότητας στην *αναπαράσταση θέσης*

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, \delta(x' - x)\, \psi(x') = \psi(x) \tag{3.83}$$

ταυτίζεται με την $\psi(x)$ και το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων είναι

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \langle \varphi|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \langle x|\varphi\rangle^* \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi(x)^* \psi(x) \quad . \tag{3.84}$$

Αναπαράσταση ορμής: Η ορμή του *ελεύθερου σωματίου* αποτελεί επίσης παράδειγμα συνεχούς φάσματος με ιδιοτιμές p και ιδιοσυναρτήσεις $\psi_p(x) = c\, e^{ipx/\hbar}$ (Κεφ. 2.4)

$$p \in (-\infty, +\infty) \;\&\; \langle x|p\rangle = \langle p|x\rangle^* = c\, e^{ipx/\hbar} \;,\; c \in C, \tag{3.85}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

την συνθήκη ορθοκανονικότητας $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ και πληρότητας $1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\langle p|$. Με την βοήθεια των ιδιοτήτων της συνάρτησης δέλτα η κανονικοποίηση επιτρέπει τον υπολογισμό της σταθεράς

$$\langle p|p'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\langle x|p\rangle^*\langle x|p'\rangle = c^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{-ipx/\hbar}\,e^{ip'x/\hbar}$$

$$= c^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{-i(p-p')x/\hbar} = c^2 2\pi\,\delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right)$$

$$\Leftrightarrow \langle p|p'\rangle = c^2\,2\pi\hbar\,\delta(p-p') \Leftrightarrow c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ , \tag{3.86}$$

ώστε $\langle x|p\rangle = \langle p|x\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$. Από το ανάπτυγμα του ket $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\langle p|\psi\rangle$ το πλάτος πιθανότητας στην *αναπαράσταση ορμής* είναι

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle$$

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

$$\Leftrightarrow \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{-ipx/\hbar}\,\psi(x)\,. \tag{3.87}$$

Επομένως, το ket $|\psi\rangle$ μπορεί να γραφεί από τα πλάτη πιθανότητας στην *αναπαράσταση θέσης* $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ ή ισοδύναμα στην *αναπαράσταση ορμής* $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Οι $\psi(x)$, $\tilde{\psi}(p)$ συνδέονται με τον ευθύ μετασχηματισμό Fourier

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{-ipx/\hbar}\,\psi(x)\ , \tag{3.88}$$

και τον αντίστροφο

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,e^{+ipx/\hbar}\,\tilde{\psi}(p) \tag{3.89}$$

Στην αναπαράσταση ορμής το εσωτερικό γινόμενο είναι

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\langle\varphi|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\langle p|\varphi\rangle^*\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\tilde{\varphi}(p)^*\tilde{\psi}(p)\ . \tag{3.90}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Παράδειγμα 1: Η $\psi(x) = e^{ikx}$ δίνει $\tilde{\psi}(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\,\delta(p - \hbar k)$. Παρατηρούμε πως το κύμα $\psi(x)$ έχει αβεβαιότητα $\Delta x = \infty$ ενώ η $\tilde{\psi}(p)$ που είναι συγκεντρωμένη λόγω της συνάρτησης δέλτα μηδενική αβεβαιότητα $\Delta p = 0$.

Παράδειγμα 2: Η $\psi(x) = \delta(x - a)$ δίνει $\tilde{\psi}(p) = \left(1/\sqrt{2\pi\hbar}\right)e^{-ipa/\hbar}$. Εδώ συμβαίνει το αντίθετο με το παράδειγμα 1. Οι αβεβαιότητες είναι $\Delta x = 0$ και $\Delta p = \infty$.

Παράδειγμα 3: Η $\psi(x) = \left(1/2\pi\sigma^2\right)^{1/4} \exp\left[-x^2/4\sigma^2\right]$, $x \in (-\infty, +\infty)$ δίνει πυκνότητα πιθανότητας την συνάρτηση Gauss $P(x) = |\psi(x)|^2 = \left(1/2\pi\sigma^2\right)^{1/2} \exp\left[-x^2/2\sigma^2\right]$ με $\Delta x = \sigma$. Στην αναπαράσταση ορμής από το ολοκλήρωμα Gauss $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\alpha x^2 \pm bx} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{\frac{b^2}{4a}}$: $\tilde{\psi}(p) = \sqrt{\sigma/\hbar}\,(2/\pi)^{1/4} \exp\left[-\sigma^2 p^2/\hbar^2\right]$, $p \in (-\infty, +\infty)$ η πυκνότητα πιθανότητας είναι $\tilde{P}(p) = |\tilde{\psi}(p)|^2 = (\sigma/\hbar)(2/\pi)^{1/2} \exp\left[-2\sigma^2 p^2/\hbar^2\right]$. Η μέση τιμή της ορμής και του τετραγώνου της μπορεί τώρα να υπολογισθούν από τα αντίστοιχα ολοκληρώματα στην μία ή την άλλη αναπαράσταση

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; p\, \tilde{P}(p) = 0, \quad \langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; p^2\, \tilde{P}(p) = \hbar^2/4\sigma^2 \quad ,$$

ώστε η αβεβαιότητα ορμής είναι $\Delta p = \hbar/2\sigma$. Παρατηρούμε πως το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x\, \Delta p = \sigma\hbar/2\sigma = \hbar/2$ είναι σε *οριακή συμφωνία* με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg, όπως αναμένεται για κυματοσυναρτήσεις τύπου Gauss.

Παράδειγμα 4: Η κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης του συνεχούς φάσματος για το *ελεύθερο σωμάτιο* (δείτε Κεφ. 2.4) μπορεί να επιτευχθεί και με την βοήθεια της συνάρτησης δέλτα. Η $\psi_p(x) = \sqrt{1/2\pi\hbar} \exp[i\,px/\hbar]$, $x \in (-\infty, +\infty)$ από τις ιδιότητες της συνάρτησης δέλτα δίνει το ολοκλήρωμα κανονικοποίησης

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_p^*(x)\psi_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-ipx/\hbar}\, e^{ip'x/\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-i(p-p')x/\hbar} = \delta(p - p').$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η *τρισδιάστατη κίνηση ελεύθερου σωματίου* στην διεύθυνση ορμής $\vec{p}$ περιγράφεται από την

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = (1/2\pi\hbar)^{-3/2} \exp[i\,\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar]$$

με συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{r}\ \psi^*_{\vec{p}}(\vec{r})\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\ e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r}/\hbar} = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

$$= \delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z).$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

3.4. Ανακεφαλαίωση

• Το *εσωτερικό γινόμενο* των κυματοσυναρτήσεων $\varphi(x)$ και $\psi(x)$ στον διανυσματικό χώρο Hilbert ορίζεται

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi^*(x)\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \tilde{\varphi}^*(p)\, \tilde{\psi}(p) \tag{3.91}$$

με ιδιότητες

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int dx\, \varphi^*(x)\, \psi(x) = \left[\int dx\, \psi^*(x)\, \varphi(x)\right]^* = \langle\psi|\varphi\rangle^*,$$

$$\langle\varphi|\lambda\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle,\ \langle\lambda\varphi|\psi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\psi\rangle, \quad \lambda \in C,$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx\, |\psi(x)|^2 \geq 0, \text{ με } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ όταν } \psi(x) = 0 \text{ για } \forall x,$$

$\langle\varphi|\psi\rangle = 0$, όταν οι φ, ψ είναι ορθογώνιες, και

$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx\, |\psi(x)|^2 = 1$, όταν η ψ είναι κανονικοποιημένη.

• Οι *τελεστές* δρουν στις κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ ενώ υπακούουν στις εξισώσεις ιδοτιμών. Στην συνηθισμένη αναπαράσταση θέσης[14] οι πιό γνωστοί είναι

θέσης: $\hat{x}\ \psi(x) = x\,\psi(x)$

ορμής: $\hat{p}\ \psi(x) = -i\hbar \dfrac{\partial\psi(x)}{\partial x}$

Χαμιλτονιανής: $\hat{H}\ \psi(x) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x)$ στην μονοδιάστατη, και

[14] Στην αναπαράσταση ορμής $\hat{p} = p$, $\hat{x} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$, κλπ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

στην τρισδιάστατη περίπτωση $\hat{H}\,\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r})$,

στροφορμής: $\hat{\vec{l}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$,

με συνιστώσες

$$\hat{l}_x = y\,p_z - z\,p_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{l}_y = z\,p_x - x\,p_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{l}_z = x\,p_y - y\,p_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

- Αν A είναι μια δυναμική μεταβλητή συστήματος που περιγράφεται από τον τελεστή $\hat{A}$ τότε η *μέση τιμή* στην κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση ψ είναι

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int dx\;\psi^*(x)\;\hat{A}\;\psi(x) \tag{3.92}$$

π.χ. η μέση τιμή της θέσης όταν το σύστημα περιγράφεται απο την κυματοσυνάρτηση ψ είναι

$$\langle x\rangle = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$$
$$= \int dx\;\psi^*(x)\;\hat{x}\;\psi(x).$$

- Ο *ερμιτειανός συζυγής* $\hat{A}^+$ του τελεστή $\hat{A}$ ορίζεται από

$$\left\langle\varphi\middle|\hat{A}\psi\right\rangle = \left\langle\hat{A}^+\varphi\middle|\psi\right\rangle \text{ για } \forall\varphi,\psi,$$

ή με την ισοδύναμη σχέση

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle^* \quad . \tag{3.93}$$

- Ο $\hat{A}$ είναι *ερμιτειανός τελεστής* όταν είναι ερμιτειανός συζυγής του εαυτού του $\hat{A} = \hat{A}^+$

$$\left\langle\varphi\middle|\hat{A}\psi\right\rangle = \left\langle\hat{A}\varphi\middle|\psi\right\rangle \text{ για } \forall\varphi,\psi$$

ή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\int dx\, \varphi^*(x)\, \hat{A}\, \psi(x) = \int dx\ \psi^*(x)\, \hat{A}\ \varphi(x) \quad \text{για } \forall \varphi, \psi. \tag{3.94}$$

Οι πλειοψηφία των τελεστών της φυσικής είναι ερμιτειανοί και αντιστοιχούν σε *παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη*.

- Ένας ερμιτειανός τελεστής $\left(\hat{A} = \hat{A}^+\right)$ έχει πάντοτε *πραγματική μέση τιμή* που αντιστοιχεί στην μετρήσιμη τιμή του αντίστοιχου φυσικού μεγέθους A

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle &= \left\langle \hat{A}\psi \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle^* \\ &\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* \\ &\Rightarrow \langle A \rangle = \langle A \rangle^* \quad . \end{aligned}$$

- Ένας ερμιτειανός τελεστής $\left(\hat{A} = \hat{A}^+\right)$ έχει *πραγματικές ιδιοτιμές* α_n και *ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις* ψ_n, ψ_m που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές $\alpha_n \neq \alpha_m$. Από τον ορισμό του ερμιτειανού τελεστή και την ορθοκανονικότητα της βάσης $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$

$$\left.\begin{aligned} \left\langle \psi_n \middle| \hat{A}\psi_n \right\rangle &= \alpha_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \alpha_n \\ \left\langle \hat{A}\psi_n \middle| \psi_n \right\rangle &= \alpha_n^* \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \alpha_n^* \end{aligned}\right\} \Rightarrow \alpha_n = \alpha_n^*$$

και επομένως

$$\left.\begin{aligned} \left\langle \hat{A}\psi_n \middle| \psi_m \right\rangle &= \langle \alpha_n \psi_n | \psi_m \rangle = \alpha_n^* \langle \psi_n | \psi_m \rangle \\ \langle \psi_n | \hat{A}\psi_m \rangle &= \langle \psi_n | \alpha_m \psi_m \rangle = \alpha_m \langle \psi_m | \psi_m \rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$(\alpha_n - \alpha_m)\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0, \text{ όταν } \alpha_n \neq \alpha_m.$$

- **Θεώρημα:** *Όταν δύο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις μετατίθενται*

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad . \tag{3.95}$$

Απόδειξη: Έστω οι $\hat{A}$, $\hat{B}$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις $|n\rangle$ με ιδιοτιμές α_n, β_n αντίστοιχα

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}|n\rangle &= \alpha_n |n\rangle \\ \hat{B}|n\rangle &= \beta_n |n\rangle \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \left.\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}|n\rangle &= \hat{A}\beta_n |n\rangle = \alpha_n \beta_n |n\rangle \\ \hat{B}\hat{A}|n\rangle &= \hat{B}\alpha_n |n\rangle = \beta_n \alpha_n |n\rangle \end{aligned}\right\}$$

$$\Leftrightarrow \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)|n\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \quad .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- **Θεώρημα:** *Όταν δύο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$ που αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη A, B μετατίθενται*

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0, \tag{3.96}$$

έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις απουσία εκφυλισμού των ιδιοτιμών. Τα αντίστοιχα μεγέθη είναι συμβατά με απολύτως καθορισμένες τιμές συγχρόνως στην ίδια κατάσταση που σημαίνει πως τα A, B μετρούνται ταυτόχρονα με αυθαίρετη ακρίβεια ($\Delta A=\Delta B=0$). Αντιθέτως η σχέση μετάθεσης π.χ. η $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η θέση x και η ορμή p *δεν είναι ταυτόχρονα μετρήσιμα μεγέθη* (ισχύει η αρχή αβεβαιότητας $\Delta x\,\Delta p\geq\hbar/2$).

Απόδειξη: Όταν $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$ αν ο τελεστής $\hat{A}$ έχει ιδιοσυνάρτηση $|n\rangle$ με ιδιοτιμή α_n $\hat{A}|n\rangle=\alpha_n|n\rangle\Leftrightarrow\hat{A}\left(\hat{B}|n\rangle\right)=\hat{B}\left(\hat{A}|n\rangle\right)=\alpha_n\left(\hat{B}|n\rangle\right)$ θα έχει ιδιοσυνάρτηση και την $\hat{B}|n\rangle$ που αντιστοιχεί στην ίδια ιδιοτιμή α_n. Όταν δεν υπάρχει εκφυλισμός οι ιδιοσυναρτήσεις $|n\rangle$ και $\hat{A}|n\rangle$ δεν είναι ανεξάρτητες και πρέπει να συνδέονται με μια σταθερά αναλογίας, έστω την β_n, οπότε

$$\hat{B}|n\rangle=\beta_n|n\rangle$$

ώστε η $|n\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση και του τελεστή $\hat{B}$ με ιδιοτιμή β_n.

- Ο $\hat{U}$ είναι *μοναδιαίος τελεστής* όταν ικανοποιεί την

$$\hat{U}\hat{U}^{+}=\hat{U}^{+}\hat{U}=1, \tag{3.97}$$

ώστε $|\varphi'\rangle=\hat{U}\,|\varphi\rangle$ και $|\psi'\rangle=\hat{U}|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\varphi'|\psi'\rangle&=\left\langle\hat{U}\varphi\middle|\hat{U}\psi\right\rangle\\&=\left\langle\varphi\middle|\hat{U}^{+}\hat{U}\psi\right\rangle\\&=\langle\varphi|\psi\rangle\end{aligned}$$

αφού $\left\langle\hat{U}\varphi\middle|\psi\right\rangle=\left\langle\varphi\middle|\hat{U}^{+}\psi\right\rangle$ από τον ορισμό του ερμιτειανού συζυγή $\hat{U}^{+}$. Αποτέλεσμα είνα η δράση του $\hat{U}$ να διατηρεί αναλλοίωτο το εσωτερικό γινόμενο των συναρτήσεων.

- *Διακριτό φάσμα ιδιοτιμών*: Σε σύστημα που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτησ $|\psi\rangle$ ένα φυσικό μέγεθος A (π.χ. η ενέργεια E) μπορεί να λάβει μια οποιαδήποτε ιδιοτιμή a του $\hat{A}$ (η εξίσωση ιδιοτιμών είναι $\hat{A}|\psi_n\rangle=\alpha_n|\psi_n\rangle$), π.χ. μία από τις ιδιοτιμές της ενέργεια

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

E_n με πιθανότητα $P_n = |c_n|^2$, όπου c_n είναι οι συντελεστές στο ανάπτυγμα $|\psi\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle$ στον χώρο των ιδιοσυναρτήσεων (χώρο Hilbert) με πλάτη

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_n^*(x)\, \psi(x). \tag{3.98}$$

Το αντίστοιχο φυσικό μέγεθος A όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση $\psi(x)$ εκτιμάται από την μέση τιμή $\langle A \rangle$. Π.χ. η μέση τιμή της ενέργειας είναι

$$\langle E \rangle = \sum_n P_n\, E_n \tag{3.99}$$

και η αντίστοιχη αβεβαιότητα

$$\Delta E = \sqrt{< E^2 > - < E >^2} = \sqrt{\sum_n P_n E_n^2 - \left(\sum_n P_n E_n\right)^2} \text{ με } \sum_n P_n = 1. \tag{3.100}$$

- *Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών*: Στην περίπτωση συνεχούς φάσματος ιδιοτιμών ενός τελεστή

$$\hat{A}|\psi_\alpha\rangle = \alpha|\psi_\alpha\rangle, \quad \alpha \in (-\infty, +\infty), \tag{3.101}$$

η ορθοκανονικότητα γενικεύεται

$$\langle \psi_\alpha | \psi_{\alpha'} \rangle = \int dx\, \psi_\alpha^*(x)\, \psi_\alpha(x) = \delta(\alpha - \alpha'), \tag{3.102}$$

όπου $\delta(\alpha - \alpha')$ είναι η γενικευμένη συνάρτηση-δ του Dirac. Παραδείγματα συνεχούς φάσματος δίνουν οι ιδιοτιμές $x \in (-\infty, +\infty)$ του τελεστή θέσης $\hat{x}$ και $p \in (-\infty, +\infty)$ της ορμής $\hat{p} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$ για ελεύθερο σωμάτιο με ιδιοσυναρτήσεις θέσης

$$|x\rangle, \quad \text{με } \langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |x\rangle\langle x| = 1 \tag{3.103}$$

και ορμής

$$|\, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-ipx/\hbar}, \quad \text{με } \langle p \,|\, p' \rangle = \delta(p - p'), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, |\, p\rangle\langle p| = 1, \tag{3.104}$$

αντίστοιχα. Αν η $\psi(x)$ αναπτυχθεί στην βάση των ιδιοδιανυσμάτων θέσης στην *αναπαράσταση θέσης* τα πλάτη πιθανότητας $\langle x | \psi \rangle$ ταυτίζονται με την $\psi(x)$

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x). \tag{3.105}$$

Στην αναπαράσταση ορμής η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p) \tag{3.106}$$

οδηγεί στην αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση ορμής

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; e^{-ipx/\hbar}\psi(x) . \tag{3.107}$$

Επανάληψη:

- Η χρονική εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος προκύπτει από την λύση της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(x,t)$$
και η $\Psi(x,t)$ περιέχει όλη την πληροφορία για ένα κβαντικό σύστημα. Όταν το δυναμικό δεν εξαρτάται από τον χρόνο είναι αρκετή η λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger
$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle .$$

- Σε κάθε μετρήσιμη ποσότητα A αντιστοιχεί ένας κβαντικός τελεστής $\hat{A}$. Όταν γίνεται μια μέτρηση τα δυνατά αποτελέσματα για ένα φυσικό μέγεθος είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή (π.χ. οι δυνατές τιμές ενέργειας είναι οι ιδιοτιμές E_n από την εξίσωση Schrödinger $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$).

- Οι ιδιοσυναρτήσεις $|\psi_n\rangle$ οποιουδήποτε τελεστή που αντιστοιχεί σε ένα φυσικό μέγεθος αποτελούν πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο σε έναν χώρο Hilbert. Με άλλα λόγια μπορούμε να περιγράψουμε την κατάσταση ενός συστήματος με μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ (ή $\psi(x)$) που είναι γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή θέσης, είτε του τελεστή της ορμής, είτε του τελεστή της ενέργειας, κλπ.

- Αν ένα σύστημα περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ και ένας τελεστής $\hat{A}$ αντιστοιχεί στην φυσική μεταβλητή A τότε επαναλαμβανόμενες μετρήσεις τη χρονική στιγμή t στην ίδια κατάσταση του συστήματος θα δώσουν για το μέγεθος την μέση τιμή
$$\langle A\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \int dx\, \Psi^*(x,t)\, \hat{A}\, \Psi(x,t).$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

A1. Αν οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή, χωρίς να είναι ορθογώνιες με

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_1^*(x)\,\psi_2(x) = d \in \Re \ ,$$

να βρείτε τους *κανονικοποιημένους* γραμμικούς συνδυασμούς $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$, $c_1, c_2 \in \Re$ των $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ που είναι: (i) ορθογώνιοι με την $|\psi_1\rangle$ και (ii) ορθογώνιοι με την $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$. (Αν τα πλάτη είναι μιγαδικοί αριθμοί $c_1 = |c_1|e^{i\delta}$, $c_2 = |c_2|e^{i\delta}$, $\delta \in \Re$, αλλάζουν τα αποτελέσματά σας;)

Λύση:

$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$, $\langle\psi| = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$, $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$ και $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle = d \in \Re$. Από την κανονικοποιημένη $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Leftrightarrow c_1^* c_1\langle\psi_1|\psi_1\rangle + c_1^* c_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle + c_2^* c_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle + c_2^* c_2\langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$$
$$\Leftrightarrow |c_1|^2 + \left(c_1^* c_2 + c_2^* c_1\right)d + |c_2|^2 = 1$$
$$\Leftrightarrow c_1^2 + 2c_1c_2\,d + c_2^2 = 1, \text{ όταν } c_1, c_2 \in \Re .$$

(i) Η απαίτηση να είναι η $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ ορθογώνια με την $|\psi_1\rangle$ δίνει

$$\langle\psi_1|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow c_1\langle\psi_1|\psi_1\rangle + c_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$$
$$\Leftrightarrow c_1 + c_2 d = 0 \ .$$

Λύνουμε τις προηγούμενες γραμμοσκιασμένες εξισώσεις και

$$c_1 = \frac{d}{\sqrt{1-d^2}},\ c_2 = -\frac{1}{\sqrt{1-d^2}},\ |\psi\rangle = \frac{d}{\sqrt{1-d^2}}|\psi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{1-d^2}}|\psi_2\rangle \ .$$

(ii) Η απαίτηση να είναι η $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ ορθογώνια με την $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ δίνει $(c_1 + c_2)(d+1) = 0$ ώστε $c_2 = -c_1$ και από την κανονικοποίηση της $|\psi\rangle$

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2-2d}},\ c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2-2d}},\ |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2-2d}}|\psi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2-2d}}|\psi_2\rangle \ .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(Παρατηρούμε πως τα μιγαδικά πλάτη $c_1 = |c_1|e^{i\delta}$, $c_2 = |c_2|e^{i\delta}$, $\delta \in \Re$, είναι επίσης λύσεις).

➤ **A2.** Να εξηγήσετε τι εννοούμε όταν λέγουμε πως το σύνολο των $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, $|\psi_3\rangle, \cdots$ είναι κανονικοποιημένο, τι ορθογώνιο και τι ορθοκανονικό. Μιά *κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση* $|\psi\rangle$ *μπορεί να γραφεί με τον* γραμμικό συνδυασμό $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + c_3|\psi_2\rangle + \cdots$. **(i)** Να δώσετε την φυσική ερμηνεία των συντελεστών c_n να τους υπολογίσετε για συγκεκριμένες $|\psi\rangle$, $|\psi_n\rangle$ και να βρείτε το άθροισμα $\sum_n |c_n|^2$. **(ii)** Αν ένα φυσικό σύστημα αναπαράγεται πολλές φορές ώστε μια μέτρηση φυσικού μεγέθους που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A}$ δίνει κάθε φορά τα αποτελέσματα $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ με λόγους πιθανοτήτων $1:2:3$, να βρείτε *πρίν μια μέτρηση* την κυματοσυνάρτηση του συστήματος $|\psi\rangle$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, $|\psi_3\rangle$ και να ελέγξετε πως εξαρτάται από τα αποτελέσματά σας η κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ *μετά την μέτρηση*.

Λύση:

(ii) Από τους λόγους των πιθανοτήτων $\frac{|c_1|^2}{|c_2|^2} = \frac{1}{2}$, $\frac{|c_2|^2}{|c_3|^2} = \frac{2}{3}$ τα τετράγωνα είνα $|c_2|^2 = 2|c_1|^2$, $|c_3|^2 = \frac{3}{2}|c_2|^2 = 3|c_1|^2$ και την κανονικοποίηση της $|\psi\rangle$ στην ορθοκανονικ βάση των ιδιοσυναρτήσεων $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, $|\psi_3\rangle$ του $\hat{A}$:

$$\begin{aligned}
&\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Leftrightarrow c_1^* c_1 \langle\psi_1|\psi_1\rangle + c_2^* c_2 \langle\psi_2|\psi_2\rangle + c_3^* c_3 \langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1 \\
&\Leftrightarrow |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1 \\
&\Leftrightarrow |c_1|^2 + 2|c_1|^2 + 3|c_1|^2 = 1 \\
&\Leftrightarrow |c_1|^2 = \frac{1}{6}.
\end{aligned}$$

Επομένως, $|c_1|^2 = \frac{1}{6}$, $|c_2|^2 = \frac{1}{3}$, $|c_3|^2 = \frac{1}{2}$ από την οποία προκύπτουν τα πλάτ $c_1 = \pm\frac{1}{\sqrt{6}}$, $c_2 = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$, $c_3 = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ ώστε η κυματοσυνάρτηση πρίν μιά μέτρηση είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

$$|\psi\rangle = \pm\frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_2\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_3\rangle \ .$$

Μετά την μέτρηση το αποτέλεσμα είναι *μία* εκ των $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, $|\psi_3\rangle$ που παρατηρούνται με πιθανότητες $|c_1|^2 = \frac{1}{6}$, $|c_2|^2 = \frac{1}{3}$, $|c_3|^2 = \frac{1}{2}$, αντίστοιχα.

A3. Η κυματοσυνάρτηση αρμονικού ταλαντωτή μάζας m και κυκλικής συχνότητας ω είναι $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{2(a+b)^2}\right)$, με A, a και b πραγματικές σταθερές ενώ είναι γνωστή η ιδοσυνάρτηση $\psi_0(x) = \left(\pi a^2\right)^{-1/4}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$, $a^2 = \hbar/m\omega$, ενεργειακής ιδιοτιμής $E_0 = \hbar\omega/2$. Πια είναι η πιθανότητα μια μέτρηση της ενέργειας συστήματος που περιγράφεται από την $\psi(x)$ να δώσει την τιμή $E_0 = \hbar\omega/2$; Πότε γίνεται μονάδα αυτή η πιθανότητα;

Λύση:

Από το ολοκλήρωμα κανονικοποίησης

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Leftrightarrow A^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{(a+b)^2}} = 1$$

$$\Leftrightarrow A = \left[\pi(a+b)^2\right]^{-1/4}$$

προκύπτει η κανονικοποιημένη $\psi(x) = \frac{1}{\left[\pi(a+b)^2\right]^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2(a+b)^2}\right)$. Το ζητούμενο πλάτος πιθανότητας είναι

$$c_0 = \langle\psi_0|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_0^*(x)\,\psi(x) = \frac{1}{\left[\pi a^2\right]^{1/4}}\frac{1}{\left[\pi(a+b)^2\right]^{1/4}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{-\frac{x^2}{2(a+b)^2}}$$

$$= \left[\frac{2a(a+b)}{a^2+(a+b)^2}\right]^{1/2}.$$

Η πιθανότητα σύστημα στην κατάσταση $|\psi\rangle$ να δώσει την τιμή $E_0 = \hbar\omega/2$

$$|c_0|^2 = \frac{2a(a+b)}{a^2+(a+b)^2}$$

γίνεται μονάδα όταν $b = 0$. Στην περίπτωση αυτή $|\psi\rangle = c_0|\psi_0\rangle$ με $|c_0|^2 = 1$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

A4. **(i)** Όταν οι $\psi(x)$ και $\varphi(x)$ διαφέρουν κατά μία σταθερή φάση α ώς $\psi(x) = e^{i\alpha}\varphi(x)$ περιγράφουν την ίδια φυσική κατάσταση. Να δείξετε ότι αι ισχύει για οποιαδήποτε σταθερή τιμή του **α** και να εφαρμόσετε το αποτέλεσμα γι = $\pi/2$, π. Τι συμβαίνει στην μέση τιμής της ορμής όταν η φάση είναι $\alpha(x)$; **(ii)** Ό η $|\psi\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση $|\psi\rangle = |\psi_n\rangle$ ενός τελεστή $\hat{A}$ $\left(\hat{A}|\psi_n\rangle = \alpha_n|\psi_n\rangle\right)$ να δείξ πως μιά μέτρηση του αντίστοιχου φυσικού μεγέθους A δίνει ακριβώς την αντίστο ιδιοτιμή α_n με μηδενική αβεβαιότητα $\Delta A = 0$.

Απάντηση:

(i)
$$\langle p\rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(e^{i\alpha(x)}\varphi(x)\right)^* \left(-i\hbar e^{i\alpha(x)}\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x} - i\hbar\frac{i\partial\alpha(x)}{\partial x}e^{i\alpha(x)}\varphi(x)\right)$$

$$= \langle p\rangle_\varphi + \hbar\langle\alpha'(x)\rangle .$$

A5. **(i)** Όταν οι τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ *μετατίθενται* $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ *έχουν κο ιδιοσυναρτήσεις*. Το αντίστροφο ισχύει απουσία εκφυλισμού.

(ii) Αν οι ερμιτειανοί τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ μετατίθενται $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ να δείξετε πως κ τελεστής $\hat{A}\,\hat{B}$ είναι ερμιτειανός.

(iii) Αν οι τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ είναι ερμιτειανοί και οι τελεστές $\hat{A} + \hat{B}$, $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ ε ερμιτειανοί.

(iv) Αν οι τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ είναι ερμιτειανοί και δεν μετατίθενται ο μεταθέ $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ δεν είναι ερμιτειανός ενώ ο $i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ είναι ερμιτειανός.

(v) Δείξτε πως όταν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτειανός το ίδιο ισχύει και για $\hat{A}^n$, όπου n θετικός ακέραιος.

(vi) Αν μια φυσική ποσότητα A περιγράφεται από τον ερμιτειανό τελεστή $\hat{A}$ δείξετε πως η μέση τιμή $\langle A\rangle$ είναι πραγματικός αριθμός και ισ $\langle A^2\rangle = \int dx \left|\hat{A}\psi(x)\right|^2$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

A6. Ενα κβαντισμένο σύστημα δύο καταστάσεων περιγράφεται από τις $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ με αντίστοιχες ιδιοτιμές $E_1 = 5eV, E_2 = 10eV$. Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ την χρονική στιγμή t=0 είναι

$$|\psi\rangle = 0.8|\psi\rangle_1 + c|\psi_2\rangle$$

με c μια σταθερά.

(i) Να βρείτε την μέση ενέργεια $\langle E\rangle$.

(ii) Την πιθανότητα να μετρηθεί η τιμή ενέργειας $5eV$ ή $8eV$,

(iii) Την $\Psi(x,t)$.

Απάντηση: Η σταθερά από την κανονικοποίηση $0.8^2 + c^2 = 1$ είναι $c = 0.6$.

(i) $\langle E\rangle = |0.8|^2 E_1 + |0.6|^2 E_2 = 6.8eV$.

(ii) Η πιθανότητα μια μέτρηση της ενέργειας να δώσει $5eV$ είναι $P_1 = |0.8|^2 = 0.64$ ενώ είναι μηδενική η πιθανότητα να προκύψει η τιμή $8eV$.

(iii) $\Psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|\psi_n\rangle = 0.8e^{-5it/\hbar}|\psi_1\rangle + 0.6e^{-10it/\hbar}|\psi_2\rangle$.

A7. Σωμάτιο σε 'κουτί' (απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού) χαρακτηρίζεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{12}{a}}\frac{x}{a}, \qquad 0 < x < \frac{a}{2},$$
$$= \sqrt{\frac{12}{a}}\left(1 - \frac{x}{a}\right), \quad \frac{a}{2} < x < a.$$

Ποια είναι η πιθανότητα P_n να ληφθεί σε μια μέτρηση η ιδιοτιμή της ενέργειας E_n; Πως με την βοήθεια αυτού του αποτελέσματος μπορεί να υπολογισθεί το άθροισμα $\sum_{n=1,2,3} n^{-4}$;

Απάντηση:

Αφού $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$, $n = 1, 2, 3, \cdots$ (δείτε την A1 του Κεφ.2)

$$c_n = \int_0^{a/2} dx\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)\left(\sqrt{\frac{12}{a}}\frac{x}{a}\right) + \int_{a/2}^{a} dx\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)\left(\sqrt{\frac{12}{a}}\left(1 - \frac{x}{a}\right)\right)$$

$$= \frac{\sqrt{24}}{a}\left[\frac{a}{\pi^2}\int_0^{\pi/2} dy\ y\ \sin ny - \frac{a}{\pi^2}\int_{\pi/2}^{0} dy\ y\ \sin ny\right] = \frac{2\sqrt{24}}{\pi^2}\int_0^{\pi/2} dy\ y\ \sin ny$$

όπου έγινε η αντικατάσταση $\frac{\pi x}{a} = y$ στο πρώτο, $\frac{\pi x}{a} = \pi - y$ στο δεύτερο ολοκλήρωμα και

$\sin(n\pi - a) = \sin n\pi \cos a - \cos n\pi \sin a = -(-1)^n \sin a$. Μετά μετά από πράξεις

$$c_n = \sqrt{24}\,\frac{2}{n^2\pi^2}\sin\frac{n\pi}{2} = \begin{cases} \sqrt{24}\,\dfrac{2(-1)^{(n-1)/2}}{n^2\pi^2}, & n = 1, 3, 5, \cdots \\ 0, & n = 2, 4, 6, \cdots \end{cases}$$

και αντίστοιχη πιθανότητα να ληφθεί η E_n

$$P_n = \left|\sqrt{24}\,2\frac{(-1)^{\frac{n-1}{2}}}{\pi^2 n^2}\right|^2 = \begin{cases} \dfrac{96}{\pi^4}n^{-4}, & n = 1, 3, 5, \cdots \\ 0\ , & n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}.$$

Από την απαίτηση κανονικοποίησης $\sum_{n=1,2,3,\ldots} P_n = 1 \Leftrightarrow \sum_{n=1,3,5,\ldots} n^{-4} = \frac{\pi^4}{96}$ ενώ το άθροισμα στους άρτιους όρους είναι

$$\sum_{n=2,4,6,\ldots} n^{-4} = \sum_{k=1,2,3,\ldots}(2k)^{-4} = \frac{1}{16}\sum_{k=1,2,3,\ldots} k^{-4} = \frac{1}{16}\sum_{n=1,2,3,\ldots} n^{-4}$$

και το ολικό άθροισμα σε άρτιους και περιττούς

$$\sum_{n=1,2,3,\ldots} n^{-4} = \sum_{n=1,3,5,\ldots} + \sum_{n=2,4,6,\ldots} = \sum_{n=1,3,5,\ldots} n^{-4} + \frac{1}{16}\sum_{n=1,2,3,\ldots} n^{-4}$$

$$\Leftrightarrow \left(1 - \frac{1}{16}\right)\sum_{n=1,2,3,\ldots} n^{-4} = \frac{\pi^4}{96}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{n=1,2,3,\ldots} n^{-4} = \frac{\pi^4}{96}\frac{16}{15} = \frac{\pi^4}{90}.$$

Α8. Την χρονική στιγμή $t = 0$ σωμάτιο στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού είναι στην κατάσταση $\psi(x) = Ax(a - x)$, όπου a το εύρος του πηγαδιού. Ποιά είναι η κατανομή πιθανότητας των ενεργειών και η $\Psi(x,t)$;

Απάντηση:

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Από την κανονικοποίηση $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = 1 \Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$. Τα πλάτη πιθανότητας υπολογίζονται από το ολοκλήρωμα

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_n^*(x)\, \psi(x) = \int_0^a dx \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}\right)\left(\sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x)\right)$$

με την βοήθεια των

$$\int_0^{n\pi} dy\, y \sin y = -n\pi(-1)^n\,, \quad \int_0^{n\pi} dy\, y^2 \sin y = -n^2\pi^2(-1)^n + 2(-1)^n - 2\,,$$

$$P_n = \left|\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3 n^3}\left(1-(-1)^n\right)\right|^2 = \begin{cases} \left|\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3 n^3}\right|^2, & n = 1, 3, 5\cdots \\ 0, & n = 2,\ 4,\ 6,\cdots \end{cases}$$

Η μέση ενέργεια υπολογίζεται $\langle E\rangle = \sum_n P_n E_n = 5\frac{\hbar^2}{ma^2}$ και η κυματοσυνάρτηση

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1,3,..} \frac{4\sqrt{60}}{\pi^3 n^3}\left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\,, \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 .$$

A9. Να υπολογίσετε την μέση ενέργεια $\langle E\rangle = \sum P_n\, E_n$ στο απειρόβαθο πηγάδι με την $\psi(x)$ της A8 και να ελέγξετε το αποτέλεσμα από τον κατευθείαν υπολογισμό της μέσης τιμής $\langle H\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ αφού το σωμάτιο εκεί είναι ελεύθερο $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$. Πως υπολογίζονται οι $\langle E^2\rangle$ και ΔE με τους δύο τρόπους;

Απάντηση:

1ος τρόπος: $\langle E\rangle = \sum P_n\, E_n$

$$= \sum_{n=1,3,5,\cdots} \left|\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3 n^3}\right|^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2$$

$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\frac{16\cdot 60}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5,\cdots} \frac{1}{n^4}$$

$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\frac{16\cdot 60}{\pi^6}\frac{\pi^4}{96}$$

$$= 5\frac{\hbar^2}{ma^2}\ .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

2ος τρόπος:

$$\langle E\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{30}{a^5}\int_0^a dx\, x(a\text{-}x)\frac{(-i\hbar\partial/\partial x)^2}{2m}[x(a\text{-}x)]$$

$$= -\frac{30\hbar^2}{2ma^5}\int_0^a dx\, x(a\text{-}x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}[x(a\text{-}x)]$$

$$= \frac{30\hbar^2}{2ma^5}\,2\int_0^a dx\, x(a\text{-}x)$$

$$= 5\frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Παρομοίως, $\langle E^2\rangle = 1.2\,\langle E\rangle$.

A10. Στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού σωμάτιο στο $(0,a)$ χαρακτηρίζεται από την $\psi(x) = \psi_1(x) = \sqrt{2/a}\,\sin(\pi x/a)$ που αντιστοιχεί στην θεμελιώδη $n = 1$ στάθμη. Αν ο τοίχος μετακινηθεί *απότομα* από $x = a$ στο $x = 2a$ ώστε η κατάσταση του συστήματος παραμένει η $\psi(x)$ ορισμένη στο $(0,a)$ ποιά είναι η πιθανότητα μια μέτρηση της ενέργειας στο νέο πηγάδι να δώσει $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$, $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$ με n = άρτιο;

Απάντηση:

Θα αναπτυχθεί η $\psi(x) = \sqrt{2/a}\,\sin(\pi x/a)$, $x \in (0,a)$, στις νέες ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{2a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}\,,\quad n = 1, 2, 3, \cdots \quad x \in (0,2a)$$

με αντιστοιχες ιδιοτιμές

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2}n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,n^2,\quad n = 1, 2, 3, \cdots\ .$$

Επομένως,

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi_n^*(x)\,\psi(x) = \int_0^a dx\left(\sqrt{\frac{2}{2a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)$$

και το ολοκλήρωμα δίνει

$$c_n = \frac{2\sqrt{2}}{\pi}\int_0^{\pi/2} dy\,\sin 2y\,\sin y = \frac{4\sqrt{2}}{\pi}\,\frac{\sin\frac{n\pi}{2}}{4-n^2}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Για $n=2$ από την παραγώγιση αριθμητή και παρονομαστή έχουμε $c_2=\frac{2}{\sqrt{2}}$ ενώ οι άλλοι όροι για $n=$ άρτιο είναι μηδέν. Για $n=$ περιττό έχουμε

$$c_n=\frac{4\sqrt{2}}{\pi}\frac{(-1)^{(n-1)/2}}{4-n^2},\quad n=1,3,5,\cdots$$

ώστε

$$P_2=\left|\frac{\sqrt{2}}{2}\right|^2 \text{ και } P_n=0,\quad n=4,6,8,\cdots$$

$$P_n=\left|\frac{4\sqrt{2}}{\pi}\cdot\frac{(-1)^{(n-1)/2}}{4-n^2}\right|^2,\quad n=1,3,5,\cdots .$$

Η πιθανότητα $E=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}=E_1$ είναι $P\left[E=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\right]=P_1=\frac{32}{9\pi^2}$ και η πιθανότητα $E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}(2n)^2=E_4,E_8,E_{12},\ \cdots$ για n άρτιο είναι $P_4=P_8=P_{12}=\cdots=0$.

Παρατηρείστε πως π.χ. γιά n=4 η νέα ιδιοσυνάρτηση $\psi(x)=\sqrt{1/a}\,\sin(4\pi x/(2a))$ $x\in(0,2a)$ αποτελείται από δύο ημικύματα (θετικό και αρνητικό) στο διάστημα $x\in(0,a)$. Όταν πολλαπλασιασθεί με την $\psi(x)=\sqrt{2/a}\,\sin(\pi x/a)$ που είναι ένα θετικό ημικύμα στο ίδιο διάστημα ορισμού της $x\in(0,a)$, δίνει συνολικά μηδέν όταν ολοκληρωθεί λόγω θετικών και αρνητικών τιμών. Φυσικά προκύπτει μηδέν στο διάστημα ολοκλήρωσης $x\in(a,2a)$ λόγω μηδενισμού εκεί της $\psi(x)$.

A11. Σωμάτιο μάζας m περιορίζεται στο διάστημα $(0,\ a)$. Αν το σωμάτιο είναι στην κατάσταση που περιγράφεται από την $\psi(x)=\frac{2}{\sqrt{L}}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ να δείξετε ότι η $\psi(x)$ είναι γραμμικός συνδυασμός δύο ιδιοσυναρτήσεων με διαφορετικές ενέργειες. Να προσδιορίσετε τις πιθανές τιμές που θα προκύψουν στην μέτρηση της ενέργειας του συστήματος που περιγράφει η $\psi(x)$ και την πιθανότητα της κάθε μιας.

A12. (i) Να ελεγχθεί αν οι τελεστές $\hat{p}_x$, $\hat{x}\,\hat{p}_x$, $\hat{p}_x^2$ είναι ερμιτειανοί. Θεωρείστε πως οι κυματοσυναρτήσεις και οι παραγωγοί τους στο άπειρο τείνουν στο μηδέν.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

(ii) Δείξτε πως στην μονοδιάστατη περίπτωση $\langle \hat{p}_x \rangle = \frac{i\hbar}{2}\int dx\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$ με ολοκλήρωση κατά παράγοντες και την απαίτηση μηδενισμού της $\psi(x)$ στα όρια $x \to \pm\infty$.

(iii) Σε σύστημα σε απειρόβαθο πηγάδι στο (0, a) να βρείτε την μέση κινητική ενέργεια όταν είναι στην κατάσταση $\psi(x) = A\sin^2(\pi x/a)$ και όταν είναι στην $\psi(x) = Ax(a-x)$.

(iv) Να υπολογίσετε τις αβεβαιότητες $\Delta\varphi, \Delta l_z$ και το γινόμενό τους για ένα σύστημα στην κατάσταση $\psi(\varphi) = A\sin\varphi$ όπου $\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$.

(v) Να υπολογίστε την μέση τιμή του τετραγώνου της στροφορμής $\vec{l}^{\,2} = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ στην κατάσταση $\psi(\vartheta,\varphi) = A\sin\vartheta\cos\varphi$.

(i) Να δείξετε με κατευθείαν υπολογισμούς την ορθοκανονικότητα των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $\hat{H}$ σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.

Α13. Να ελέγξετε τις παρακάτω σχέσεις ισότητας μεταξύ τελεστών

$$\frac{d}{dx}x = 1 + x\frac{d}{dx},$$

$$x^2\frac{d}{dx}\frac{1}{x} = x\frac{d}{dx} - 1,$$

$$\left(1+\frac{d}{dx}\right)^2 = 1 + 2\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2},$$

$$\left(x+\frac{d}{dx}\right)^2 = 1 + x^2 + 2x\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2},$$

$$\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)^2 = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx},$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

Οι πράξεις θα γίνουν με την βοήθεια μιας *βοηθητικής συνάρτησης* $\psi(x)$ στην οποία δρουν οι τελεστές και ξεκινώντας από την δράση του αριστερού μέλους της ισότητας στην $\psi(x)$ θα καταλήξουμε στο δεξιό μέλος να δρά στην $\psi(x)$ και η ισότητα θα αποδειχθεί. Δεν εκτελούμε πράξεις στους τελεστές έστω κι αν αυτό φαίνεται

προκλητικά εύκολο, π. χ. είναι λάθος να γραφεί $\frac{d}{dx}x = 1$. Εκτελείται μόνο η δράση του πλησιέστερου τελεστή στην συνάρτηση $\psi(x)$. Το αποτέλεσμα είναι μιά νέα συνάρτηση στην οποία θα δράσει ο αμέσως επόμενος πλησιέστερος τελεστής, κλπ. Επιλύουμε δύο από τις παραπάνω:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)^2\psi(x) &= \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\psi(x) \\
&= \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\frac{1}{x}\frac{d}{dx}(x\psi(x)) \\
&= \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\frac{1}{x}\left(\psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx}\right) \\
&= \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx}\right) \\
&= \frac{1}{x}\left(\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d\psi(x)}{dx} + x\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right) \\
&= \left(\frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x)
\end{aligned}$$

και με την βοηθητική συνάρτηση $\psi(x,y)$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)^2\psi(x,y) &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x,y) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial\psi(x,y)}{\partial x} + \frac{\partial\psi(x,y)}{\partial y}\right) \\
&= \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y\partial x} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2} \\
&= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y)
\end{aligned}$$

A14. Να αποδείξετε τις *πολύ χρήσιμες σχέσεις μετάθεσης* $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ μεταξύ τελεστών:

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$$
$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

A15. Να ελέγξετε τις παρακάτω ισότητες με μεταθέτες όπου $f(x)$ είναι μια αυθαίρετη συνάρτηση του x

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

$$[x, \hat{p}_y] = 0$$

$$[x, \hat{p}_z] = 0$$

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

$$[f(x), \hat{p}_x^2] = 2i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \hat{p}_x + \hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

$$[x^2, [x, \hat{p}_x^2]] = -4\hbar^2 x$$

$$[\hat{H}, x] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x^2] = 2i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_x + \hbar^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \quad .$$

A16. Όταν $[\hat{A}, \hat{B}] = 1$ να δείξετε τότε ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις μεταξύ των τελεστών $\hat{A}, \hat{B}$

$$[\hat{A}, \hat{B}^2] = 2\hat{B}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}^3] = 3\,\hat{B}^2$$

$$[\hat{A}^2, \hat{B}^2] = 2(\hat{A}\,\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$$

A17. Η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών $p = \hbar k$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

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

έχει αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier την κυματοσυνάρτηση στον χώρο των θέσεων

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

(i) Να αποδείξετε το *θεώρημα Parseval*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \tilde{\psi}^*(p)\ \tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\ \psi(x)\,.$$

(ii) Να αποδείξετε πως η μέση τιμή $\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)$ εκφράζεται ισοδύναμα $\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \tilde{\psi}^*(p)\ p\ \tilde{\psi}(p)$ συναρτήσει της $\tilde{\psi}(p)$ και να ερμηνεύσετε την $\tilde{P}(p) = |\tilde{\psi}(p)|^2$. Να δείξετε, επίσης, ότι η μέση τιμή της θέσης είναι $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\, x\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \tilde{\psi}^*(p)\left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\tilde{\psi}(p)$. Από τα τελευταία ερωτήματα να ορισθούν οι τελεστές $\hat{p}, \hat{x}$ στην αναπαράσταση ορμής.

Λύση:

(i)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \tilde{\psi}^*(p)\ \tilde{\psi}(p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{+ipx/\hbar}\ \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, e^{-ipx'/\hbar}\ \psi(x') \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x) \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{+ipx/\hbar - ipx'/\hbar}\right)\psi(x') \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x) \left(\frac{2\pi\hbar}{2\pi\hbar}\delta(x-x')\right)\psi(x') \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\, \psi(x).
\end{aligned}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

(ii)

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \tilde{\psi}^*(p)\ p\ \tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{+ipx/\hbar}\ \psi^*(x)\ p\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ e^{-ipx'/\hbar}\ \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x) \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ p\ e^{+ipx/\hbar - ipx'/\hbar} \right) \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') \right) \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x).$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \tilde{\psi}^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \tilde{\psi}(p)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{+ipx/\hbar}\ \psi^*(x)\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ x'\ e^{-ipx'/\hbar}\ \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x) \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{+ipx/\hbar - ipx'/\hbar} \right) x'\ \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi^*(x)\ \delta(x-x')\ x'\ \psi(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi^*(x)\ x\ \psi(x).$$

Χρησιμοποιήσαμε τις

- $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ip(x-x')/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(x-x')$

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

- $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ p\ e^{ip(x-x')/\hbar} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) 2\pi\hbar\delta(x-x').$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΕΠΙΛΥΣΙΜΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

'να μπορούσε αυτοί οι υπολογισμοί
να γίνουν με μια μηχανή ατμού...'
C. Babbage

Η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger για το διάνυσμα κατάστασης $|\Psi(t)\rangle$ που είναι συνάρτηση του χρόνου t γράφεται

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H\,|\Psi(t)\rangle \tag{4.1}$$

με τον ερμιτειανό τελεστή[1] H να αντιστοιχεί στο παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος της ενέργειας, όπως στην κλασσική φυσική η Χαμιλτονιανή H είναι η ολική ενέργεια του συστήματος. Η εξίσωση Schrödinger για ένα κλειστό κβαντικό σύστημα είναι επιλύσιμη αφού με την αντικατάσταση

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\Psi(0)\rangle \quad , \tag{4.2}$$

όπου $|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle$ η χρονικά ανεξάρτητη λύση ενώ η Χαμιλτονιανή είναι $H(t)$ λόγω χρονικά εξαρτημένου δυναμικού $V(x,t)$ μπορεί να γραφεί από μαθηματική άποψη

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t) = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t) \tag{4.3}$$

Θα μελετήσουμε την περίπτωση που η Χαμιλτονιανή *δεν εξαρτάται από τον χρόνο* $H(t) = H$ οπότε η χρονική εξέλιξη περιγράφεται από τον μοναδιαίο τελεστή $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$.[2]

Η μέση τιμή μιας δυναμικής μεταβλητής A *εξαρτάται από τον χρόνο*

---

[1] Από το σημείο αυτό εγκαταλείπεται το 'καπέλλο' πάνω από τους τελεστές.

[2] Ισχύει το ανάπτυγμα του τελεστή $U(t) = 1 - (iHt/\hbar) + \frac{1}{2!}(iHt/\hbar)^2 - \frac{1}{3!}(iHt/\hbar)^3 + \cdots$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle A\rangle = \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \Psi^*(x,t)\ A\,\Psi(x,t) \tag{4.4}$$

και θα δούμε πως αλλάζει με τον χρόνο υπολογίζοντας την πρώτη χρονική παράγωγο. Αφού $H^+ = H$ η ερμιτειανή συζυγής της εξίσωσης (4.1) είναι $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)| = \langle\Psi|H$

$$\begin{aligned}\frac{d\langle A\rangle}{dt} &= \left(\frac{\partial\langle\Psi(t)|}{\partial t}\right) A|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\frac{\partial A}{\partial t}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\left(A\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t}\right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi(t)|\,(H\,A - A\,H)\,|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\,\frac{\partial A}{\partial t}\,|\Psi(t)\rangle\end{aligned} \tag{4.5}$$

απ' όπου καταλήγουμε στην *εξίσωση για τις μέσες τιμές*

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \quad . \tag{4.6}$$

Παρατηρούμε πως η μέση τιμή ενός τελεστή $\langle A\rangle$ *που δεν έχει φανερή εξάρτηση από τον χρόνο* $(\partial A/\partial t = 0)$ υπολογίζεται σε κάθε κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ από την μέση τιμή του μεταθέτη του με την Χαμιλτονιανή $\langle[A,H]\rangle$. Όταν $[A,H]=0$ η μέση τιμή $\langle A\rangle$ είναι χρονικά ανεξάρτητη και το αντίστοιχο παρατηρήσιμο μέγεθος μια *σταθερά της κίνησης*. Άρα, στην κβαντική φυσική η *διατήρηση της μέσης τιμής* $\langle A\rangle$ συνδέεται με τον *μηδενισμό του μεταθέτη* $[A,H]$ του αντίστοιχου σε αυτήν τελεστή με την Χαμιλτονιανή.

Παράδειγμα: Τα παραπάνω εφαρμόζονται στον υπολογισμό της μέσης τιμής της θέσης και της ορμής σωματίου που κινείται σε δυναμικό $V(x)$ ανεξάρτητο του χρόνου. Γιά τους τελεστές x, p ισχύουν οι εξισώσεις

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}, \quad \frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \tag{4.7}$$

σύμφωνα με το *θεώρημα του Ehrenfest* και οι μέσες τιμές υπακούουν στους νόμους της κλασσικής φυσικής.

Λύση:

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [x,H]\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[x, \frac{p^2}{2m} + V(x)\right]\right\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar 2m}\langle [x, p]p + p[x, p]\rangle$$

$$= \frac{\langle p\rangle}{m} \quad ,$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[p, \frac{p^2}{2m} + V(x)\right]\right\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\langle [p, V(x)]\rangle$$

$$= -\left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle \quad .$$

Στον υπολογισμό χρησιμοποιήσαμε τους μεταθέτες

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

ενώ $[p, f(p)] = 0$, $[x, V(x)] = 0$. Παρατηρούμε πως οι μέσες τιμές περιγράφονται από εξισώσεις ίδιες με τις κλασσικές εξισώσεις του Newton

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

για τις μεταβλητές x, p σωματίου μάζας m σε δυναμικό $V(x)$, σε συμφωνία με το *θεώρημα του Ehrenfest* που συνδέει την κβαντική με την κλασσική φυσική. Αν η κυματοσυνάρτηση $|\Psi(t)\rangle$ παριστάνει ένα κυματοπακέτο η μέση τιμή της θέσης $\langle x\rangle$ είναι στο κέντρο του και ο ρυθμός μεταβολής της ικανοποιεί τον κλασσικό νόμο κίνησης. Για να γίνει αυτό απαραίτητη προϋπόθεση είναι η δύναμη $-\partial V/\partial x$ που ασκείται στην θέση $x = \langle x\rangle$ να είναι ίση με την μέση δύναμη $-\langle \partial V/\partial x\rangle$, γεγονός που βεβαίως δεν ισχύει γενικά αφού

$$\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=\langle x\rangle} \neq -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \quad . \tag{4.8}$$

Όταν ένα κυματοπακέτο είναι επαρκώς εντοπισμένο οι διαφορές των δύο μελών της (4.8) είναι αμελητέες και η κίνησή του δεν διαφέρει από την κλασσική.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.1. Συμμετρίες-αρχές διατήρησης

Στην κλασσική φυσική η απουσία χρονικής εξάρτησης στην Χαμιλτονιανή σημαίνει πως το δυναμικό είναι χρονικά ανεξάρτητο $V \neq V(t)$ οπότε *διατηρείται η ενέργεια* σύμφωνα με την βασική *αρχή της ομογένειας του χρόνου*. Όταν το δυναμικό είναι χωρικά ανεξάρτητο $V \neq V(x)$ *διατηρείται η ορμή* στην βασική *αρχή ομογένειας του χώρου*. Επιπλέον όταν το δυναμικό δεν εξαρτάται από την γωνία στροφής γύρω από τον z άξονα διατηρείται η συνιστώσα ℓ_z της στροφορμής $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ ενώ για πλήρη σφαιρική συμμετρία $V \neq V(\theta, \phi)$ σε στροφές στις γωνίες θ, ϕ των σφαιρικών συντεταγμένων *διατηρείται η ολική στροφορμή* $\vec{\ell}$ σύμφωνα με την *αρχή ισοτροπίας του χώρου*. Τα κλασσικά συμπεράσματα επεκτείνονται και στην κβαντική φυσική για τις μέσες τιμές των αντίστοιχων φυσικών μεγεθών με τα ζεύγη: *χρονική συμμετρία - διατήρηση ενέργειας, χωρική συμμετρία - διατήρηση ορμής και σφαιρική συμμετρία - διατήρηση στροφορμής*.

Στην κβαντική φυσική:

- ✓ Από τον ρυθμό μεταβολής της μέσης τιμής της Χαμιλτονιανής H $\frac{d\langle H\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [H, H]\rangle + \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle$ προκύπτει η $\frac{d\langle H\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle$ ώστε η χρονική ανεξαρτησία του δυναμικού $V \neq V(t)$ (το ίδιο πάντα) συνεπάγεται την διατήρηση της μέσης ενέργειας $\langle H\rangle = \sigma\tau\alpha\theta$.
- ✓ Από την $\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$ η χωρική ανεξαρτησία του δυναμικού $V \neq V(x)$ (το ίδιο παντού) οδηγεί στην διατήρηση της μέσης τιμής της ορμής $\langle p\rangle = \sigma\tau\alpha\theta$.
- ✓ Όταν το δυναμικό δεν εξαρτάται από την γωνία στροφής ϕ γύρω από τον z άξονα $V \neq V(\varphi)$ μηδενίζεται η z συνιστώσα της ροπής $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F}$, $M_z = xF_y - yF_x = -x\frac{\partial V}{\partial y} + y\frac{\partial V}{\partial x} = 0$ και η μέση τιμή της z συνιστώσας $\ell_z = xp_y - yp_x$ της στροφορμής $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ έχει σταθερή χρονική

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

παράγωγο[3] $\dfrac{d\langle \ell_z \rangle}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}\langle [\ell_z, H] \rangle = \langle M_z \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle \ell_z \rangle = \sigma\tau\acute{\alpha}\theta.$ Στην περίπτωση κεντρικού ή σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού $V \neq V(\theta,\phi)$, ανεξάρτητου από τις γωνίες θ, ϕ των σφαιρικών συντεταγμένων, *διατηρείται η μέση τιμή της ολικής στροφορμής* $\langle \vec{\ell} \rangle$[4].

Άσκηση 1. Όταν οι x, p δεν εξαρτώνται φανερά από τον χρόνο να δειχθούν οι σχέσεις

$$\frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = \frac{\langle x\,p + px \rangle}{m},$$

$$\frac{d}{dt}\langle xp \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{m} - \left\langle x\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle p^2 \rangle = -\left\langle p\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}p \right\rangle.$$

Λύση: Προκύπτουν από αντικατάσταση στην (4.6) των μεταθετών

$$[x^2, H] = \left[x^2, \frac{p^2}{2m} + V(x)\right] = \frac{1}{2m}[x^2, p^2] = i\hbar\frac{(xp + px)}{m}$$

$$[xp, H] = \left[xp, \frac{p^2}{2m} + V(x)\right] = \frac{1}{2m}[xp, p^2] + [xp, V(x)] = i\hbar\frac{p^2}{m} - i\hbar x\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

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

---

[3] Για τους τελεστές $\ell_z = x\,p_y - y\,p_x$, $H = (1/2m)\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x,y,z)$ ισχύουν όπως εύκολα μπορείτε να το διαπιστώσετε οι σχέσεις μετάθεσης:

$$[x, H] = i\hbar\, p_x/m\ ,\ [y, H] = i\hbar\, p_y/m\ ,\ [z, H] = i\hbar\, p_z/m\ ,$$

$$[p_x, H] = -i\hbar\,\partial V/\partial x = i\hbar F_x\ ,\ [p_y, H] = -i\hbar\,\partial V/\partial y = i\hbar F_y\ ,\ [p_z, H] = -i\hbar\,\partial V/\partial z = i\hbar F_z\ .$$

[4] Στο Κεφ. 5 όπου περιγράφεται κίνηση σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$, π.χ. στο άτομο του υδρογόνου, διατηρείται το μέτρο της στροφορμής στο τετράγωνο $\vec{\ell}^{\,2}$ και μία συνιστώσα, π.χ. η ℓ_z. Επιπλέον ο μεταθέτης των ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z ξεχωριστά με την H είναι μηδέν ώστε από την (4.6) ισχύει $\langle \vec{\ell} \rangle$ =σταθ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

Άσκηση 2. Να μελετηθεί η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης $|\Psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}\,|\Psi(0)\rangle$ ή $\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\Psi(x,0) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x)$ ελεύθερου σωματίου $(V=0)$ με

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/4\sigma^2},\ x \in (-\infty,+\infty)$$

που για $t=0$ δίνει την *Γκαουσσιανή πυκνότητα πιθανότητας*

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2},\ x \in (-\infty,+\infty).$$

Να εξετασθεί επίσης η χρονική εξέλιξη του γινομένου των αβεβαιοτήτων $\Delta x(t)\,\Delta p(t)$ σε σχέση με την αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg.

Λύση:

Από την $\Psi(x,0) = \psi(x)$ υπολογίζονται (Κεφ. 3, σελ. 107, Παράδειγμα 3) οι μέσες τιμές για $t=0$:

$$\langle x\rangle_0 = 0,\ \langle p\rangle_0 = 0,\ \langle x^2\rangle_0 = \sigma^2,\ \langle p^2\rangle_0 = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

και

$$\langle xp\rangle_0 = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\, x \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(-\frac{2x}{4\sigma^2}\right) x \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2} = i\hbar/2$$

$$\langle px\rangle_0 = \langle xp\rangle_0 - i\hbar = -i\hbar/2$$

ώστε

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_0 = \langle x^2\rangle_0 - \langle x\rangle_0^2 = \sigma^2$$

$$\langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \langle p^2\rangle_0 - \langle p\rangle_0^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

Επομένως, το γινόμενο των αβεβαιοτήτων για $t=0$ είναι σε συμφωνία με την αρχή του Heisenberg στο όριο

$$\Delta x(0)\,\Delta p(0) = \sigma\,\frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η χρονική εξάρτηση υπολογίζεται από τους ρυθμούς μεταβολής των μέσων τιμών από την (4.6) για την θέση

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{\langle p\rangle}{m}$$

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}=\frac{\langle xp+px\rangle}{m}$$

$$\frac{d\langle(\Delta x)^2\rangle}{dt}=\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}-\frac{d\langle x\rangle^2}{dt}=\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}-2\langle x\rangle\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{\langle xp+px\rangle}{m}-2\frac{\langle x\rangle\langle p\rangle}{m}$$

και την ορμή

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=-\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

$$\frac{d\langle p^2\rangle}{dt}=-\left\langle p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p\right\rangle$$

$$\frac{d\langle(\Delta p)^2\rangle}{dt}=\frac{d\langle p^2\rangle}{dt}-\frac{d\langle p\rangle^2}{dt}=\frac{d\langle p^2\rangle}{dt}-2\langle p\rangle\frac{d\langle p\rangle}{dt}=-\left\langle p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p\right\rangle+2\langle p\rangle\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

ενώ

$$\frac{d\langle xp\rangle}{dt}=\frac{\langle p^2\rangle}{m}-\left\langle x\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

$$\frac{d\langle px\rangle}{dt}=\frac{\langle p^2\rangle}{m}-\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}x\right\rangle .$$

Όταν το δυναμικό είναι παντού μηδέν $V=0$ έχουμε για την ορμή

$$\boxed{\frac{d\langle(\Delta p)^2\rangle}{dt}=0\Leftrightarrow\langle(\Delta p)^2\rangle=\langle(\Delta p)^2\rangle_0=\frac{\hbar^2}{4\sigma^2}}\quad \text{για } \forall t.$$

Παρομοίως για την αβεβαιότητα θέσης

$$\frac{d\langle(\Delta x)^2\rangle}{dt}=\frac{\langle xp+px\rangle}{m}-2\frac{\langle x\rangle\langle p\rangle}{m}$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\langle(\Delta x)^2\rangle}{dt^2}=\frac{1}{m}\frac{d\langle xp+px\rangle}{dt}-\frac{2}{m}\frac{d\langle x\rangle}{dt}\langle p\rangle-\frac{2}{m}\langle x\rangle\frac{d\langle p\rangle}{dt}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{dt^2} = \frac{2\langle p^2\rangle}{m^2} - \frac{2\langle p\rangle^2}{m^2} = \frac{2}{m^2}\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{dt^2} = \frac{2}{m^2}\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle \quad .$$

Αφού αντικαταστήσουμε την $\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle$ επιλύουμε την διαφορική εξίσωση

$$\frac{d^2\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{dt^2} = \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2}$$

με μία ολοκλήρωση αφού ληφθούν υπ' όψιν οι μέσες τιμές για $t = 0$

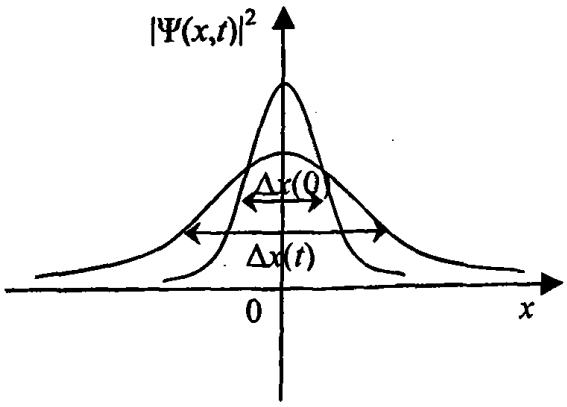
$$\frac{d\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2}t + \left.\frac{d\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}{dt}\right|_{t=0} = \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2}t + 0$$

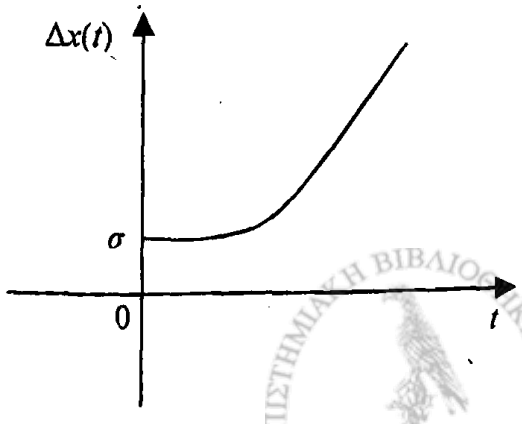
και δεύτερη, ώστε τελικά

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2}\frac{t^2}{2} + \left\langle(\Delta x)^2\right\rangle_0 = \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2}t^2 + \sigma^2 .$$

Από τις παραπάνω το γινόμενο των αβεβαιοτήτων είναι για $\forall t$:

$$\Delta x(t)\,\Delta p(t) = \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^2}t^2}\;\frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2} .$$





ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.1.1. Εικόνα Schrödinger - εικόνα Heisenberg

Από την λύση της εξίσωσης Schrödinger $|\Psi(t)\rangle = \exp(-i\hbar H/t)|\Psi(0)\rangle$ η μέση τιμή του A όταν δεν έχει φανερή χρονική εξάρτηση μπορεί να γραφεί

$$\langle A\rangle = \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|\left(e^{-iHt/\hbar}\right)^{+} A\, e^{-iHt/\hbar}|\Psi(0)\rangle$$

$$= \langle\Psi(0)|\, e^{+iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar}\, |\Psi(0)\rangle$$

$$= \langle\Psi(0)|\, A(t)\, |\Psi(0)\rangle \tag{4.9}$$

όπου η φανερή χρονική εξάρτηση μεταφέρεται από τις $|\Psi\rangle$ στον τελεστή A που είναι πλέον χρονικά εξαρτημένος με την βασική σχέση μετασχηματισμού

$$A(t) = U(t)^{+}\, A\, U(t) = e^{+iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar} \quad . \tag{4.10}$$

Η μέση τιμή στην *εικόνα Schrödinger* είχε χρονική εξάρτηση λόγω της $|\Psi(t)\rangle$ ενώ τώρα στην *εικόνα Heisenberg* έχει χρονική εξάρτηση από τον $A(t)$. Επομένως, η μέση τιμή ενός χρονικά ανεξάρτητου τελεστή A στην χρονικά εξαρτημένη κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ είναι ισοδύναμη με την μέση τιμή του χρονικά εξαρτημένου τελεστή $A(t)$ στην χρονικά ανεξάρτητη κατάσταση $|\Psi(0)\rangle$.

Οι δύο εικόνες της κβαντικής επιτρέπουν υπολογισμούς τύπου *μαύρου κουτιού*, δίνοντας δεδομένα στην είσοδο και λαμβάνοντας απαντήσεις στην έξοδο χωρίς να μας ενδιαφέρει τι συμβαίνει στο κουτί. Είναι ταυτόσημες με την έννοια ότι ίδια δεδομένα στην είσοδο θα δώσουν τις ίδιες ακριβώς απαντήσεις στην έξοδο, ανεξαρτήτως της εικόνας που έχουμε επιλέξει. Πιό βολική είναι ίσως η εικόνα του Heisenberg όπου τα διανύσματα του χώρου Hilbert δεν αλλάζουν με τον χρόνο και επιπλέον μοιάζει με την κλασσική περιγραφή αφού οι εξισώσεις για τους χρονικά εξαρτημένους τελεστές χωρίς τις μέσες τιμές είναι ίδιες με τις κλασσικές. Στη εικόνα Heisenberg η παράγωγος του χρονικά μεταβαλλόμενου τελεστή $A(t) = U(t)^{+}\, A\, U(t)$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

εκφράζεται από τον μεταθέτη[5] του $A(t)$ με την Χαμιλτονιανή H αντίστοιχα με την κλασσική εξίσωση

$$\frac{dA(t)}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} H\, e^{+iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar} + \frac{1}{i\hbar}\, e^{+iHt/\hbar} A H\, e^{-iHt/\hbar}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} H\, A(t) + \frac{1}{i\hbar} A(t) H$$

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H] \ , \tag{4.11}$$

π.χ. $\dfrac{dx(t)}{dt} = \dfrac{p(t)}{m}$, $\dfrac{dp(t)}{dt} = -\dfrac{\partial V(x)}{\partial x}$ και $\left\langle \dfrac{dx(t)}{dt} \right\rangle = \dfrac{\langle p(t) \rangle}{m}$, $\left\langle \dfrac{dp(t)}{dt} \right\rangle = -\left\langle \dfrac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle$

στην εικόνα Heisenberg ή την εικόνα Schrödinger, αντίστοιχα.

Η εικόνα Schrödinger αφορά χρονικά εξαρτημένες καταστάσεις και χρονικά ανεξάρτητους τελεστές ενώ η εικόνα Heisenberg χρονικά ανεξάρτητες καταστάσεις και χρονικά εξαρτημένους τελεστές. Οι δύο εικόνες είναι ισοδύναμες χωρίς τα αποτέλεσματα να εξαρτώνται από την επιλογή της μιάς ή της άλλης. Η εικόνα Schrödinger μετασχηματίζεται στην εικόνα Heisenberg από τις ιδιότητες του μοναδιαίου τελεστή U με την απεικόνιση

$$\left|\Psi^S\right\rangle \to \left|\Psi^H\right\rangle = U^+ \left|\Psi^S\right\rangle \tag{4.12}$$

$$A^S \to A^H = U^+ A^S U \tag{4.13}$$

και η εικόνα Heisenberg στην εικόνα Schrödinger με την απεικόνιση

$$\left|\Psi^H\right\rangle \to \left|\Psi^S\right\rangle = U \left|\Psi^H\right\rangle \tag{4.14}$$

$$A^H \to A^S = U A^H U^+ \quad . \tag{4.15}$$

Οι Χαμιλτονιανές στην μία και την άλλη εικόνα συνδέονται με

$$\frac{\partial H^S}{\partial t} = U \frac{\partial H^H}{\partial t} U^+ \tag{4.16}$$

αφού οι δύο άλλοι όροι από την (4.2) εξουδετερώνονται.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

[5] Ο τελεστής H μετατίθεται με οποιαδήποτε συνάρτηση τελεστή $f(H)$.

Άσκηση 3. Σωμάτιο είναι στην κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$, όχι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή A που δεν εξαρτάται φανερά από τον χρόνο, και μετατίθεται με την Χαμιλτονιανή H. Να δειχθεί ότι: **(i)** η $\langle A\rangle$ δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο και **(ii)** οι πιθανότητες λήψης *συγκεκριμένων τιμών* του A είναι, επίσης, χρονικά ανεξάρτητες.

Λύση: (ii) Επειδή $[A,H]=0$ οι τελεστές A, H έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$
$$A|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$$

με ιδιοτιμές E_n, α_n, αντίστοιχα. Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi(t)\rangle$ που περιγράφει την κβαντική κατάσταση του συστήματος μπορεί να αναπτυχθεί στις κοινές ιδιοσυναρτήσεις $\{|n\rangle\}$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$
$i\hbar\frac{d}{dt}\sum_n c_n|n\rangle = \sum c_n H|n\rangle$
$i\hbar\sum_n \frac{d}{dt}c_n|n\rangle = \sum c_n E_n|n\rangle$
$i\hbar\frac{d}{dt}c_n = E_n c_n$

με πλάτη πιθανοτήτων $c_n(t)$. Με αντικατάσταση στην (4.1) προκύπτουν οι εξισώσεις για τα πλάτη

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = E_n\, c_n(t)$$

με λύσεις $c_n(t) = c_n(0)e^{-iE_n t/\hbar}$ ώστε

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \sigma\tau\alpha\theta.$$

4.1.2. <u>Κατοπτρική συμμετρία-διατήρηση ισοτιμίας</u>

Η ισότιμία αφορά την διατήρηση της φύσης της κυματοσυνάρτησης, *άρτια* όπως το cos ή *περιττή* όπως το sin, όταν το δυναμικό είναι *κατοπτρικά συμμετρικό* $V(x)=V(-x)$. Ο *τελεστής ισοτιμίας* Π ορίζεται από την δράση στην συνάρτηση $\psi(x)$

$$\Pi\psi(x) = \psi(-x) \tag{4.17}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

όπου αλλάζει το πρόσημο της μεταβλητής $x \to -x$. Η επαναληπτική δράση του τελεστή Π ισοδυναμεί με δύο διαδοχικές ανακλάσεις που δεν αλλάζουν την $\psi(x)$

$$\Pi^2 \psi(x) = \Pi\psi(-x) = \psi(x) \tag{4.18}$$

και μπορούμε να γράψουμε $\Pi^2 = 1$, όπου 1 ο ταυτοτικός τελεστής με ιδιοτιμή μονάδα.

- Ο τελεστής ισοτιμίας είναι *ερμιτειανός* $\Pi = \Pi^+$.
- Ο τελεστής ισοτιμίας είναι *μοναδιαίος* $\Pi^+ = \Pi^{-1}$.
- Οι *ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις* του Π είναι ± 1, $\psi_\pm(x)$ με $\Pi\psi_\pm(x) = \pm\psi_\pm(x)$.

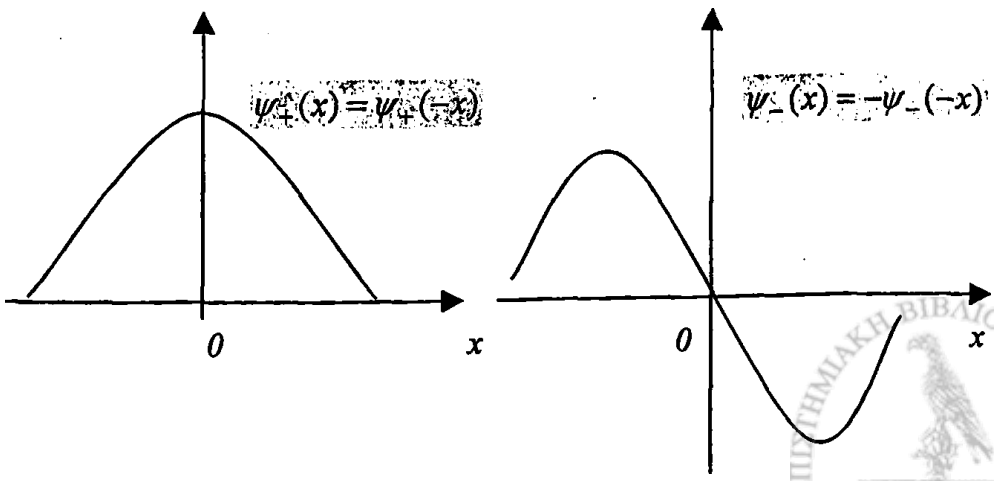
  Απάντηση στο τελευταίο ερώτημα: Η εξίσωση ιδιοτιμών $\Pi\psi(x) = \lambda\psi(x)$ με δράση του Π και στα δύο μέλη δίνει ιδιοτιμές

$$\Pi^2 \psi(x) = \lambda \Pi\psi(x) = \lambda^2 \psi(x)$$

$$\lambda^2 = 1 \Leftrightarrow \lambda = \pm 1 \quad . \tag{4.19}$$

  Οι ιδοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda = \pm 1$ είναι οι $\psi_\pm(x)$. Για $\lambda = +1$ η *άρτια ιδιοσυνάρτηση* $\Pi\psi_+(x) = \psi_+(x) = \psi_+(-x)$ και για $\lambda = -1$ η *περιττή ιδιοσυνάρτηση* $\Pi\psi_-(x) = -\psi_-(x) = \psi_-(-x)$, που γράφονται συνοπτικά $\psi_\pm(x) = \pm\psi_\pm(-x)$.

$\lambda = +1$ **(άρτια)** $\qquad\qquad$ $\lambda = -1$ **(περιττή)**



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Με την παρουσία *κατοπτρικής συμμετρίας ή συμμετρίας ανάκλασης* $H(-x)=H(x)$ η ισοτιμία είναι σταθερά της κίνησης και συνεπάγεται την μετάθεση της ισοτιμίας με την Χαμιλτονιανή

$$[\Pi, H]=0 \quad . \tag{4.20}$$

Επομένως, *οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών* Π, H *είναι κοινές* με αποτέλεσμα ιδιοσυναρτήσεις της H που επιζητούμε να είναι άρτιες (θετικής ισοτιμίας) ή περιττές (αρνητικής ισοτιμίας) απουσία εκφυλισμού.

Παραδείγματα: Το δυναμικό $V(x)=(1/2)m\omega^2x^2$ του αρμονικού ταλαντωτή παρουσιάζει κατοπτρική συμμετρία αφού $V(x)=V(-x)$ που οδηγεί σε διατήρηση της ισοτιμίας με άρτιες ή περιττές λύσεις για τις ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας. Το πηγάδι δυναμικού στο διάστημα $(0,a)$ έχει κατοπτρική συμμετρία γύρω από την τιμή $a/2$ με συμμετρικές και αντισυμμετρικές λύσεις. Η συμμετρία γίνεται εμφανής (Άσκηση 6) όταν το πηγάδι τοποθετηθεί στο $(-a/2, +a/2)$ οπότε $V(x)=V(-x)$ με λύσεις άρτιες ή περιττές εναλλάξ.

Ένα κβαντικό πρόβλημα επιλύεται ευκολότερα όταν υπάρχει κατοπτρική συμμετρία $V(x)=V(-x)$ που συνεπάγεται την διατήρηση της ισοτιμίας και απουσία εκφυλισμού[6] οδηγεί σε *άρτιες ή περιττές ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής* H με θετική ή αρνητική ισοτιμία αντίστοιχα.

Άσκηση 4. Να δειχθεί ότι οποιαδήποτε αυθαίρετη συνάρτηση $\psi(x)$ γράφεται ως άθροισμα μιας άρτιας και μιας περιττής

$$\psi(x)=\frac{\psi(x)+\psi(-x)}{2}+\frac{\psi(x)-\psi(-x)}{2}=\psi_+(x)+\psi_-(x). \tag{4.21}$$

Άσκηση 5. Να δειχθεί ότι οι τελεστές

[6] Στην περίπτωση εκφυλισμού μπορεί να υπάρξει *μικτή ισοτιμία* όπου άρτιες και περιττές λύσεις αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$P_{\pm} = \frac{1 \pm \Pi}{2} \tag{4.22}$$

ικανοποιούν τις σχέσεις

$$P_{\pm}^2 = P_{\pm}\,,\ P_+P_- = P_-P_+ = 0\,,\ P_+ + P_- = 1 \tag{4.23}$$

και να υπολογισθούν τα γινόμενα $\Pi P_{\pm}$ εισάγοντας τις $|\psi_{\pm}\rangle = P_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle$ που είναι άρτιες ή περιττές αντίστοιχα.

Λύση:

$$P_{\pm}^2 = \frac{1}{4}\left(1 + \Pi^2 \pm 2\Pi\right) = \frac{1}{4}(1 + 1 \pm 2\Pi) = P_{\pm}\,,$$

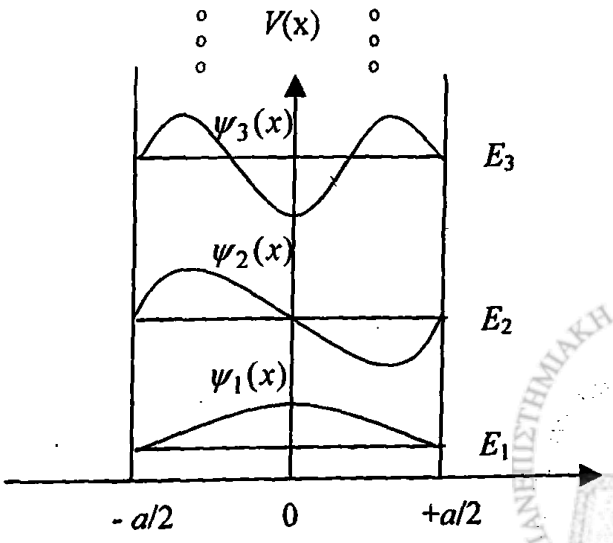
$$P_+P_- = \frac{1}{4}\left(1 + \Pi - \Pi - \Pi^2\right) = P_-P_+ = 0\,,\ P_+ + P_- = 1\,.$$

$$\Pi\, P_{\pm} = \frac{1}{2}\Pi(1 \pm \Pi) = \pm\frac{(1 \pm \Pi)}{2} = \pm P_{\pm}$$

ώστε $\Pi\,|\psi_{\pm}\rangle = \pm P_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle = \Pi\, P_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle = \pm|\psi_{\pm}\rangle$ με τις άρτιες και περιττές $\psi_{\pm}$, αντίστοιχα. Οι $\psi_{\pm}$ υπακούουν σε ξεχωριστές εξισώσεις και δεν αναμιγνύονται μεταξύ τους.

Άσκηση 6. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις *παρουσία κατοπτρικής συμμετρίας με διατήρηση της ισοτιμίας* σωματίου μάζας m στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού του σχήματος, ελεύθερου σωματίου εντός των ορίων $x = -a/2$ και $x = +a/2$.

Λύση:



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

Η έκδηλη κατοπτρική συμμετρία $V(x) = V(-x)$ από τον μηδενισμό του μεταθέτη $[\Pi, H] = 0$ οδηγεί στην διατήρηση της ισοτιμίας και οι μη εκφυλισμένες ενεργειακές ιδιοτιμές χαρακτηρίζονται από συγκεκριμένη ισοτιμία +1 ή −1 με ιδιοσυναρτήσεις απουσία εκφυλισμού, *είτε άρτιες είτε περιττές*. Η αναγνώριση ύπαρξης μιας συμμετρίας εκτός από την αισθητική πλευρά του θέματος συνήθως δεν επιλύει το πρόβλημα αλλά απλώς βοηθάει στην λύση του[7]. Εδώ ξεχωρίζουν δύο ανεξάρτητα υποπροβλήματα για τις άρτιες και τις περιττές λύσεις που *μπορεί να λυθούν ξεχωριστά*.

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger στο δυναμικό $V(x) = 0$ εντός του πηγαδιού

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = 2mE/\hbar^2, \; E > 0,$$

δέχεται την γενική λύση μορφής στάσιμων κυμάτων (Κεφ. 2, Α1)

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx, \; A, B = \sigma\tau\alpha\theta, \quad E = \hbar^2 k^2/2m.$$

Από την απαίτηση μηδενισμού της $\psi(x)$ εκτός του πηγαδιού (στο άπειρο δυναμικό) σε συνδυασμό με την απαίτηση συνέχειας (προφανώς μόνο για την ψ) στα σημεία $x = -a/2, +a/2$, προκύπτουν οι οριακές συνθήκες[8]

$$\psi(-a/2) = \psi(+a/2) = 0.$$

Για τις άρτιες λύσεις επιβιώνει ο όρος $\cos kx$ και για τις περιττές λύσεις ο όρος $\sin kx$. Η οριακή συνθήκη για τις *άρτιες λύσεις* δίνει

$$\cos k\frac{a}{2} = 0 \Leftrightarrow ka = \pm\pi, \pm 3\pi, \pm 5\pi, \cdots \Leftrightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \; n = 1, 3, 5, \cdots$$

ενώ για τις *περιττές λύσεις*

$$\sin k\frac{a}{2} = 0 \Leftrightarrow ka = 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \cdots \Leftrightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \; n = 2, 4, 6, \cdots.$$

---

[7] Παρατηρούμε πως η προσπάθεια να λυθούν τα επιμέρους προβλήματα στα οποία ανάγεται ένα πρόβλημα με την βοήθεια της συμμετρίας είναι σαφώς μικρότερη από την λύση του αρχικού. Στην περιγραφή με μήτρες *η συμμετρία μετατρέπει την αρχική Χαμιλτονιανή μήτρα σε μπλόκ-διαγώνια μορφή* και οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις υπολογίζονται από την διαγωνοποίηση *των επιμέρους μητρών*, ένα σαφώς ευκολότερο πρόβλημα.

[8] Αν δεν χρησιμοποιηθεί η συμμετρία το πρόβλημα λύνεται ως εξής: Από την αντικατάσταση της ψ στις οριακές συνθήκες $A\cos k\,a/2 + B\sin k\,a/2 = 0$ και $A\cos k\,a/2 + B\sin k\,a/2 = 0$. Αν επιλύσουμε και τις δύο ως προς $A\cos k\,a/2$ και εξισώσουμε τότε $B\sin k\,a/2 = 0$ απ' όπου, είτε B=0 που οδηγεί στις άρτιες λύσεις είτε $B\sin k\,a/2 = 0$ που ισοδυναμεί με A=0 και οδηγεί στις περιττές λύσεις.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Οι αρνητικές τιμές $n<0$ είναι ίδιες με τις θετικές ενώ αποκλείεται η μηδενική λύση $\psi=0$ γιά n=0. Άρα, οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις για σωμάτιο μάζας m στο απειρόβαθο πηγάδι εύρους a τοποθετημένου στο $(-a/2,+a/2)$ είναι *εναλλάξ άρτιες και περιττές θετικής και αρνητικής ισοτιμίας*[9]

$$\begin{aligned}\psi_n(x)&=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{n\pi x}{a}, \quad n=1,3,5,\cdots\\ &=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n=2,4,6,\cdots\end{aligned} \qquad \text{για} \quad |x|<\frac{a}{2}$$

και

$$\psi_n(x)=0 \qquad \text{για} \quad |x|>\frac{a}{2} \ .$$

Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας από την $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ είναι ήδη γνωστές

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad n=1,2,3,\cdots \ .$$

Η κανονικοποίηση, π.χ. για τις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις ελέγχεται από το ολοκλήρωμα

$$\int_{-a/2}^{+a/2}dx\,\psi_n^*(x)\,\psi_n(x)=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}dx\,\cos^2\frac{n\pi x}{a}=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}dx\left\{\frac{\cos\frac{2n\pi x}{a}+1}{2}\right\}$$

$$=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}dx\frac{1}{2}+\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}dx\frac{\cos\frac{2n\pi x}{a}}{2}=\frac{2}{a}\frac{a}{2}+0=1, \quad n=1,3,5,\cdots,$$

κλπ.

Ερώτηση: *Τι άλλαξε από την τοποθέτηση του απειρόβαθου πηγαδιού στο διάστημα $(-a/2,+a/2)$ αντί για το διάστημα $(0,a)$;*

Απάντηση: Ουσιαστικά τίποτε. Οι ιδιοτιμές που εξαρτώνται μόνο από το εύρος του πηγαδιού a παραμένουν ίδιες στην μορφή και την μαθηματική γραφή τους ενώ και οι ιδιοσυναρτήσεις με την μορφή των στάσιμων κυμάτων

[9] Οι άρτιες συναρτήσεις στο πηγάδι αντιστοιχούν στους περιττούς κβαντικούς αριθμούς n=1, 3, 5, ... και οι περιττές στους άρτιους αριθμούς n=2, 4, 6, ... Το αντίστροφο συμβαίνει στον αρμονικό ταλαντωτή (Κεφ. 4.4) όπου οι άρτιες αντιστοιχούν στους άρτιους αριθμούς και οι περιττές στους περιττούς αριθμούς.

είναι ίδιες στα δύο προβλήματα. Αυτό όμως που αλλάζει είναι *η μαθηματική περιγραφή των ιδιοσυναρτήσεων* λόγω αλλαγής του κέντρου άξονα του πηγαδιού: από sin που ήταν με την κατοπτρική συμμετρία $V(x)=V(-x)$ ξεχωρίζουν σε άρτιες cos και περιττές sin. Όταν το πηγάδι είναι στο διάστημα $(0,a)$ οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλάξ συμμετρικές και αντισυμμετρικές γύρω από το σημείο $x=a/2$. Στην μεταφορά του πηγαδιού στο διάστημα $(-a/2,+a/2)$ οι ιδιοσυναρτήσεις γίνονται άρτιες και περιττές γύρω από το x=0. Τα αποτελέσματα της αλλαγής στην γραφή των ιδιοσυναρτήσεων για το πηγάδι στο διάστημα $(-a/2,+a/2)$ μπορεί επίσης να προκύψουν από τις λύσεις για το πηγάδι στο διάστημα $(0,a)$ με τον μετασχηματισμό $x\to x-a/2$. Αν μεγαλώσουμε το εύρος του πηγαδιού, π.χ. από a σε $2a$, στις λύσεις για τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις απλώς θέτουμε όπου a το $2a$.

Στην αναπαράσταση ορμής: Από τις $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$, $n=1,2,3,\cdots$ για το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, π.χ. τοποθετημένου στο διάστημα $(0,a)$, μπορεί να υπολογισθούν οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις στον χώρο των ορμών από τα ολοκληρώματα Fourier $\tilde{\psi}_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a dx\,\psi_n(x)\,e^{-ipx/\hbar}$. Μετά από πράξεις με την βοήθεια της συνάρτησης δέλτα οι ιδιοσυναρτήσεις γράφονται με το άθροισμα

$$\tilde{\psi}_n(p)=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}}\,e^{i(n\pi/2-pa/2\hbar)}\left[F(p-n\pi\hbar/a)+(-1)^{n+1}F(p+n\pi\hbar/a)\right],\quad n=1,2,3,\cdots$$

που περιλαμβάνει τις 'συναρτήσεις περίθλασης'

$$F(p)=\sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)\Big/\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)$$

μετατοπισμένες στα σημεία $p=\pm n\pi\hbar/a$. Οι $\tilde{\psi}_n(p)$ είναι ουσιαστικά αθροίσματα δύο συναρτήσεων $F(p)$ με κέντρα τα σημεία $p=\pm n\pi\hbar/a$ και περιγράφονται από εικόνες περίθλασης όπως στο σχήμα 1.4.[10] Για τις υψηλά διεγερμένες καταστάσεις

[10] Να σχεδιασθούν οι δύο πρώτες $\tilde{\psi}_1(p),\tilde{\psi}_2(p)$ και οι αντίστοιχες πυκνότητες πιθανότητας $\tilde{P}_1(p),\tilde{P}_2(p)$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

$n \to \infty$ τα δύο κυματοπακέτα ξεχωρίζουν και απομακρύνονται με αντίθετες κατευθύνσεις στον p άξονα σε αντιστοιχία με την κλασσική κίνηση ίδιας ενέργειας και ορμής $p = \pm\hbar k$. Από τις $\tilde{\psi}_n(p)$ στην n-οστή ενεργειακή στάθμη μπορεί να υπολογισθούν οι μέσες τιμές της ορμής[11]

$$\langle p \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; p\, |\tilde{\psi}_n(p)|^2 = 0\,, \quad \langle p^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; p^2\, |\tilde{\psi}_n(p)|^2 = (n\pi\hbar/a)^2$$

ώστε $\Delta p_n = n\pi\hbar/a$ όπως οι αντίστοιχες

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; x\, |\psi_n(x)|^2 = a/2\,, \quad \langle x^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; x^2\, |\psi_n(x)|^2 = \left(a^2/12\right)\left(4 - 6/\pi^2 n^2\right)$$

στην αναπαράσταση θέσης (Κεφ.2. Άσκηση 4). Οι μέσες τιμές των θέσεων στην n-οστή ενεργειακή στάθμη υπολογίζονται ισοδύναμα στην αναπαράσταση ορμής από τα ολοκληρώματα

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; \tilde{\psi}_n^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \tilde{\psi}_n(p)\,, \quad \langle x^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; \tilde{\psi}_n^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \tilde{\psi}_n(p)$$

αν ληφθεί υπ' όψιν ότι στην *αναπαράσταση ορμής* αλλάζει ο ορισμός των τελεστών με ορμή $\hat{p} = p$ και $\hat{x} = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p}$ ενώ στην *αναπαράσταση θέσης* ήταν $\hat{x} = x$ και $\hat{p} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$.

Άσκηση 7. Η κατάσταση ενός σωματίου σε απειρόβαθο πηγάδι την χρονική στιγμή t=0 είναι $|\Psi(0)\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)/\sqrt{2}$ με $\psi_1(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{\pi x}{a}$, $\psi_2(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{2\pi x}{a}$ τις δύο πρώτες ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής H. Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi(t)\rangle$ την χρονική στιγμή t όπως είναι γνωστό είναι[12]

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-iE_1 t/\hbar}\, |\psi_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} |\psi_2\rangle \right) .$$

[11] Να δείξετε με την βοήθεια της συνάρτησης δέλτα πως οι μέσες τιμές είναι ίδιες στην μία ή την άλλη αναπαράσταση, με τον κατάλληλο ορισμό των τελεστών.

[12] Ένα παράδειγμα του γενικού αποτελέσματος: *κάθε γραμμικός συνδυασμός των λύσεων της εξίσωσης Schrödinger είναι πάλι λύση* λόγω γραμμικότητας της εξίσωσης.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(i) Να δείξετε ότι η $|\Psi(t)\rangle$ είναι κανονικοποιημένη λύση της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger με $E_1 = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$, $E_2 = 4E_1$.

(ii) Να υπολογισθεί η πυκνότητα πιθανότητας $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ και να σχεδιασθεί η εξάρτηση από την θέση x των διαδοχικών όρων της διακρίνοντας τις καταστάσεις '1', '2' και '1+2'. Ποιά είναι η συχνότητα ταλάντωσης μεταξύ των '1' και '2';

(iii) Να αποδειχθούν οι σχέσεις για τις χρονικά εξαρτημένες μέσες τιμές:

$$\langle x\rangle = \int_0^a dx\, x\,|\Psi(x,t)|^2 = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos\omega_{21}t$$

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_0^a dx\,\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{8\hbar}{3a}\sin\omega_{21}t$$

με $\omega_{21} = \dfrac{E_2 - E_1}{\hbar}$, ώστε $d\langle x\rangle/dt = \langle p\rangle/m$. Επιπλέον, δίνεται το ολοκλήρωμα

$$\int_0^a dx\, x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a} = -\frac{8a^2}{9\pi^2}.$$

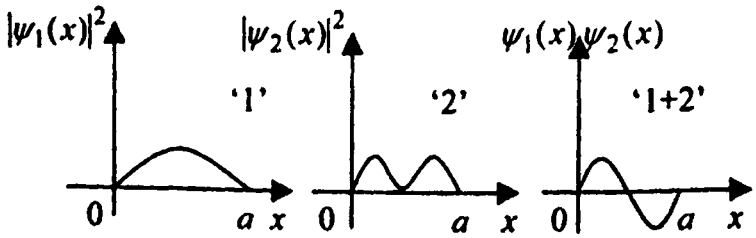
(iv) Να δείξετε την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg στην μορφή $\Delta E\,\Delta t \geq \hbar/2$.

Λύση:

(ii) Η συχνότητα ταλάντωσης μεταξύ των '1' και '2' είναι

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}.$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}|\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{2}|\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x)\,\psi_2(x)\cos\omega_{21}t$$



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

(iii) Η μέση τιμή του x' είναι

$$\begin{aligned}\langle\Psi|x'|\Psi\rangle &= \langle\psi_1|x'|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|x'|\psi_2\rangle + e^{-i\omega_{21}t}\langle\psi_1|x'|\psi_2\rangle + e^{+i\omega_{21}t}\langle\psi_2|x'|\psi_1\rangle \\ &= \langle\psi_1|x'|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|x'|\psi_2\rangle + 2\,\mathrm{Re}\left\{e^{-i\omega_{21}t}\langle\psi_1|x'|\psi_2\rangle\right\} .\end{aligned}$$

Ο μετασχηματισμός $x' = x - a/2$ δίνει

$$\langle\psi_1|x'|\psi_1\rangle = 0\ ,\ \langle\psi_2|x'|\psi_2\rangle = 0 \quad \text{και}$$

$$\langle\psi_1|x'|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|x|\psi_2\rangle - \frac{a}{2}\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, x \sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a} = -\frac{16a}{9\pi^2}.$$

Επομένως,

$$\begin{aligned}\langle x'\rangle &= 2\,\mathrm{Re}\left\{e^{-i\omega_{21}t}\langle\psi_1|x'|\psi_2\rangle\right\} \\ &= \left\{\langle\psi_1|x'|\psi_2\rangle e^{-i\omega_{21}t} + \langle\psi_2|x'|\psi_1\rangle e^{-i\omega_{21}t}\right\} \\ &= -\frac{16a}{9\pi^2}\cos\omega_{21}t\end{aligned}$$

απ΄όπου προκύπτει το απαιτούμενο αποτέλεσμα για την μέση τιμή $\langle x\rangle = \langle x'\rangle + a/2$. Παρομοίως αποδεικνύεται η μέση τιμή της ορμής $\langle p\rangle$.

(iv) Η μέση ενέργεια είναι $\langle H\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 E_1 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 E_2 = \frac{5}{4}E_1$, η μέση τιμή του τετραγώνου $\langle H^2\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 E_1^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 E_2^2 = \frac{17}{4}E_1^2$ και η αβεβαιότητα

$$\Delta E = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = \frac{3}{2}E_1$$

που δεν εξαρτάται από τον χρόνο αφού η H είναι σταθερά της κίνησης. Η αβεβαιότητα στον χρόνο εκτιμάται από $\Delta t \sim \frac{1}{\omega_{21}} = \frac{\hbar}{E_2 - E_1}$ ώστε το γινόμενο των αβεβαιοτήτων γίνεται

$$\Delta E\ \Delta t \sim \frac{3}{2}E_1\frac{\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{3}{2}E_1\frac{\hbar}{3E_1} = \frac{\hbar}{2}$$

σε οριακή συμφωνία με την *αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg για τις μεταβλητές ενέργειας-χρόνου* $\Delta E\ \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επανάληψη: Η εξίσωση Schrödinger σε σταθερό δυναμικό V_0

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x),\quad V(x)=V_0=\text{σταθ.}$$

$$E>V_0:\qquad \psi''+k^2\psi=0\,,\quad k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)>0\,,$$

έχει λύσεις είτε cos, sin είτε e^{+ikx}, e^{-ikx} και τους γραμμικούς συνδυασμούς

$$\psi(x)=A\cos kx+B\sin kx$$

ή ισοδύναμα

$$\psi(x)=A\cdot e^{+ikx}+Be^{-ikx}\,.$$

$$E<V_0:\qquad \psi''-\kappa^2\psi=0\,,\quad \kappa^2=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)>0\,,$$

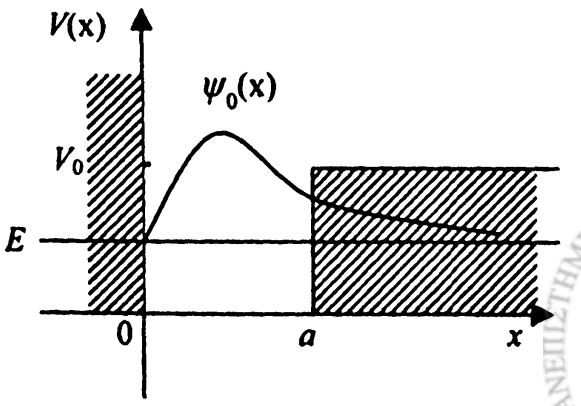
επιδέχεται πραγματικές λύσεις, αύξουσας ή φθίνουσας εκθετικής μορφής $e^{+\kappa x}$, $e^{-\kappa x}$ και τον γραμμικό συνδυασμό

$$\psi(x)=A\,e^{+\kappa x}+Be^{-\kappa x}\,.$$

Οι *πλήρεις λύσεις ευρίσκονται μόνο από τις οριακές συνθήκες.* Απαίτηση συνέχειας της $\psi(x)$, ενώ όταν το δυναμικό δεν παρουσιάζει άπειρη ασυνέχεια απαίτηση συνέχειας και της παραγώγου $\psi'(x)$.

Άσκηση 8. Σωμάτιο είναι στο δυναμικό

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



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

a) Όταν $E < V_0$ να δείξετε ότι $\tan\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$.

b) Να σχεδιάσετε την $\psi_0(x)$.

Λύση:

a) $0 \le x \le a$: $\psi'' + k^2\psi = 0$, $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$ με γενική λύση

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx\,,\ A, B = \sigma\tau\alpha\theta.$$

Η οριακή συνθήκη (μόνο για την ψ) όταν $x = 0$, επειδή $\psi(x) = 0$ στην περιοχή άπειρου δυναμικού $x < 0$, δίνει

$$\psi(0) = A\cos k0 + B\sin k0 = 0 \Leftrightarrow A = 0.$$

Άρα,

$$\psi(x) = B\sin kx\,,\ B = \sigma\tau\alpha\theta\,,\quad 0 \le x \le a.$$

$x > a$: $\psi'' - \kappa^2\psi = 0$, $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 > 0$ με γενική λύση

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}\,,\ C, D = \sigma\tau\alpha\theta.$$

Η απαίτηση τετραγωνικά ολοκληρώσιμης λύσης με $\psi = 0$ για $x \to \infty$, μηδενίζει τον πρώτο όρο για τον οποίο ισχύει $Ce^{\kappa x} \to \infty, x \to \infty$ ενώ παραμένει ο δεύτερος όρος με $De^{-\kappa x} \to 0, x \to \infty$. Άρα,

$$\psi(x) = De^{-\kappa x}\,,\ D = \sigma\tau\alpha\theta\,,\quad x > a.$$

Από την προσαρμογή των $\psi(x)$ και $\psi'(x)$ στο $x = a$ (εδώ το δυναμικό παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια και η οριακή συνθήκη αφορά τις ψ, ψ')

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\left.\begin{aligned} B\sin ka &= D\,e^{-\kappa a} \\ kB\cos ka &= -\kappa D\,e^{-\kappa a} \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \tan ka = -\frac{k}{\kappa}$$

$$\Leftrightarrow \tan\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \quad .$$

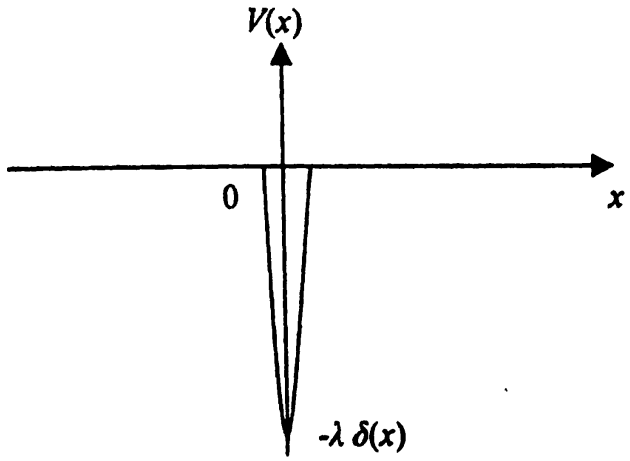
b) Η $\psi(x) = 0$ για $x = 0$ ενώ $\psi(x) = 0$ για $x \to \infty$ δίνει για την ιδιοσυνάρτηση της χαμηλότερης ενεργειακής στάθμης $\psi_0(x)$ με

$$\psi_0(0) = \psi_0(\infty) = 0\,,$$

που σύμφωνα με το 'θεώρημα των κόμβων' έχει ένα μόνο ακρότατο (μέγιστο) και η γραφική της παράσταση φαίνεται στο σχήμα.

Άσκηση 9. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις στο *δυναμικό συνάρτησης δέλτα* $V(x) = -\lambda\,\delta(x)$, $\lambda > 0$. Οι ιδιότητες της συνάρτησης δέλτα περιγράφονται στο Κεφ. 3.3.

Λύση:



Το δυναμικό $V(x) = -\lambda\,\delta(x)$ που φαίνεται στο σχήμα για $\lambda > 0$ είναι μια οριακή περίπτωση του απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού. Η εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \lambda\delta(x)\psi = E\psi$$

στις περιπτώσεις $E < 0$ και $E > 0$ επιλύεται με δέσμιες καταστάσεις και σκέδασης, αντίστοιχα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Δέσμιες καταστάσεις

$\underline{E<0}$: Η λύση στην περιοχή $x<0$ όπου $V(x)=0$ από την

$$\psi''-\kappa^2\psi=0,\ \kappa=\sqrt{-2mE}/\hbar>0,$$

είναι

$$\psi(x)=Ae^{+\kappa x}\ ,x<0,$$

αφού ο όρος $e^{-\kappa x}\xrightarrow{x\to-\infty}\infty$. Στην περιοχή $x>0$ όπου πάλι $V(x)=0$ η λύση είναι

$$\psi(x)=Be^{-\kappa x}\ ,x>0,$$

αφού $e^{+\kappa x}\xrightarrow{x\to+\infty}\infty$. Από την απαίτηση συνέχειας της $\psi(x)$ στο σημείο $x=0$ προκύπτει $A=B$ με την γενική λύση (Κεφ. 2, Άσκ. 1)

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{+\kappa x}\ ,x\le 0\\ Ae^{-\kappa x}\ ,x\ge 0\end{cases}.$$

Το δυναμικό απειρίζεται στο σημείο $x=0$ ώστε η οριακή συνθήκη για την συνέχεια της παραγώγου $d\psi/dx$ δεν είναι εφικτή αφού και η παράγωγος είναι ασυνεχής. Θα ολοκληρώσουμε λοιπόν την εξίσωση Schrödinger στο διάστημα $(-\varepsilon,+\varepsilon)$ για $\varepsilon\to 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}dx\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}dx\,\lambda\,\delta(x)\psi(x)=E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}dx\,\psi(x)\ ,$$

όπου το πρώτο ολοκλήρωμα δίνεται από την παράγωγο $d\psi/dx$ στα σημεία $-\varepsilon,+\varepsilon$, ενώ λόγω συνέχειας της ψ το ολοκλήρωμα στο δεξιό μέλος τείνει στο μηδέν, ώστε

$$\left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{x=-\varepsilon}^{x=+\varepsilon}+\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}dx\,\lambda\,\delta(x)\psi(x)=0\,.$$

Από τις ιδιότητες της συνάρτησης δέλτα (Κεφ. 3.3)[13] έχουμε

$$\left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{x=-\varepsilon}^{x=+\varepsilon}+\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)=0$$

και η ασυνέχεια της παραγώγου της $\psi(x)$ υπολογίζεται στα όρια

[13] Η ιδιότητα της δέλτα συνάρτησης να διώχνει το ολοκλήρωμα δίνοντας την τιμή της συνάρτηση στο ολοκληρωμα δεν εξαρτάται αν τα όρια είναι $\pm\infty$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{d\psi(x)}{dx}\bigg|_{x=-\varepsilon}^{x=+\varepsilon} = \lim_{\varepsilon\to 0}\left(-A\kappa e^{-\kappa\varepsilon} - A\kappa e^{+\kappa(-\varepsilon)}\right) = -2A\kappa .$$

Επίσης ισχύει

$$\psi(0) = A$$

ώστε από την παραπάνω

$$-2A\kappa + \frac{2m\lambda}{\hbar^2}A = 0 \Leftrightarrow \kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}.$$

Επομένως, η επιτρεπτή ενέργεια από την $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar > 0$ είναι

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

και η αντίστοιχη κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = 1\right)$, με την θετική επιλογή της σταθεράς A για ευκολία,

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar}e^{-m\lambda|x|/\hbar^2}.$$

Άρα, το δυναμικό της συνάρτησης δέλτα δίνει πάντα μία δέσμια κατάσταση ανεξαρτήτως του λ.

Σκέδαση

$\underline{E > 0}$: Η γενική λύση στην περιοχή $x < 0$ όπου $V(x) = 0$ από την

$$\psi'' + k^2\psi = 0,\ k = \sqrt{2mE}/\hbar > 0$$

είναι

$$\psi(x) = Ae^{+ikx} + B\ e^{-ikx},\ x < 0,$$

ενώ στην περιοχή $x > 0$ όπου πάλι $V(x) = 0$ η λύση είναι

$$\psi(x) = Ce^{+ikx} + D\ e^{-ikx},\ x > 0.$$

Επομένως, με την οριακή συνθήκη στο σημείο $x = 0$, όπου απαιτείται η συνέχεια της $\psi(x)$, έχουμε $A + B = C + D$ ενώ από την συνέχεια των παραγώγων στο σημείο $x = 0$ μετά από πράξεις

$$ik(C - D - A + B) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}(A + B).$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Η λύση των δύο τελευταίων εξισώσεων για τους αγνώστους A, B, C, D επιτυγχάνεται αν θεωρήσουμε σκέδαση από αριστερά με $D = 0$, όπως συνήθως συμβαίνει στο πείραμα. Οι λύσεις των εξισώσεων

$$B = \frac{i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 - i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2 k}} A, \quad C = \frac{1}{1 - i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2 k}} A$$

επιτρέπουν τον υπολογισμό του συντελεστή ανάκλασης $R = |B|^2 / |A|^2$ και διάδοσης $T = |C|^2 / |A|^2$:

$$R = \frac{1}{1 + 2\hbar^2 E / m\lambda^2}, \quad T = \frac{1}{1 + m\lambda^2 / 2\hbar^2 E},$$

με την γνωστή απαίτηση $R + T = 1$.

Σχόλια:

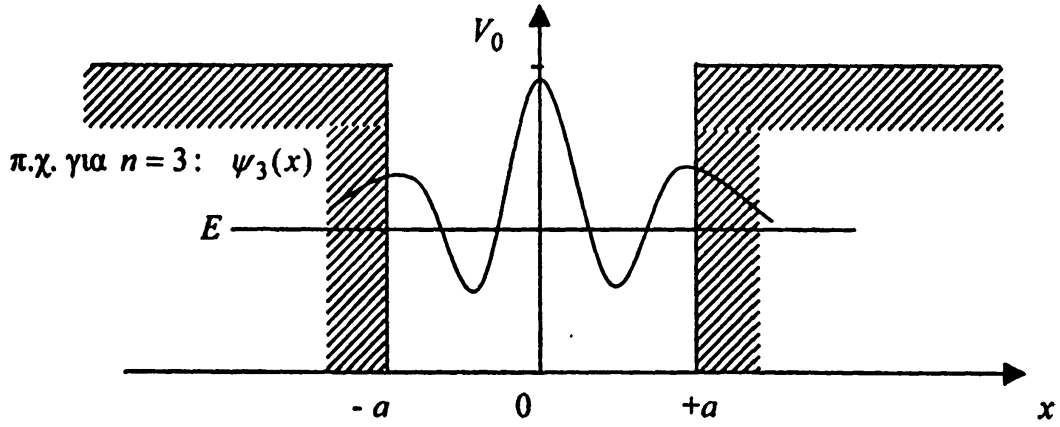
1. Επειδή η λύση ($\propto \lambda^2$) δεν εξαρτάται από το πρόσημο της σταθεράς λ η σκέδαση σε φράγμα δυναμικού $V(x) = \lambda\, \delta(x)$ με $\lambda > 0$ δίνει τους ίδιους ακριβώς συντελεστές ανάκλασης και διάδοσης που βρέθηκαν παραπάνω. Είναι προφανές πως σε αυτήν την περίπτωση ($\lambda > 0$) δεν θα υπάρξουν δέσμιες καταστάσεις. Επομένως, σκέδαση σε πηγάδι συνάρτησης δέλτα ή σε φράγμα συνάρτησης δέλτα δίνουν την ίδια πιθανότητα διέλευσης για το σωμάτιο.
2. Οι λύσεις σκέδασης δεν είναι κανονικοποιημένες αφού αντιπροσωπεύουν ελεύθερα σωμάτια. Στο Κεφ. 2.4. έχουν προταθεί τρόποι αντιμετώπισης αυτού του προβλήματος, όπως η εισαγωγή των κυματοπακέτων για να αναπαρασταθούν τα σωμάτια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.2. Το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

$$V(x)=\begin{cases} V_0, & x<-a, \\ 0, & -a<x<-a, \\ V_0, & x>+a. \end{cases} \tag{4.24}$$

Δέσμιες καταστάσεις για $E<V_0$:



Στο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού του σχήματος με πεπερασμένα τοιχώματα οι διακριτές λύσεις για $E<V_0$ αντιστοιχούν στις *δέσμιες καταστάσεις* του σωματίου ενώ οι *ιδιοσυναρτήσεις υπεισέρχονται και στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή* $x<-a$, $x>+a$. Οι εξισώσεις Schrödinger στο δυναμικό $V(x)=V_0$ εκτός και $V(x)=0$ εντός

$$\begin{aligned} &\psi''(x)-\kappa^2\psi(x)=0, \quad \kappa^2=2m(V_0-E)/\hbar^2, \quad x<-a, \\ &\psi''(x)+k^2\psi(x)=0, \quad k^2=2mE/\hbar^2, \quad -a<x<+a, \\ &\psi''(x)-\kappa^2\psi(x)=0, \quad \kappa^2=2m(V_0-E)/\hbar^2, \quad x>+a, \end{aligned} \tag{4.25}$$

επιδέχονται τις λύσεις

$$\begin{aligned} &\psi(x)=A_1\,e^{\kappa x}, \quad x<-a, \\ &\psi(x)=A\cos kx+B\sin kx, \quad -a<x<+a, \\ &\psi(x)=A_2\,e^{-\kappa x}, \quad x>+a. \end{aligned} \tag{4.26}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Στις λύσεις δέσμιας μορφής απουσιάζουν οι εκθετικά αύξουσες ιδιοσυναρτήσεις που τείνουν στο άπειρο για $x \to \pm\infty$, λόγω απαίτησης τετραγωνικής ολοκληρωσιμότητας της ψ. Έτσι δεν υπάρχει όρος $e^{-\kappa x}$ για $x < -a$ όπως και ο όρος $e^{+\kappa x}$ για $x > a$.

Το πρόβλημα επιδεικνύει κατοπτρική συμμετρία ή συμμετρία ανάκλασης γύρω από το μηδέν, με διατήρηση της ισοτιμίας. Η παρουσία της συμμετρίας θα μας βοηθήσει να διερευνήσουμε ξεχωριστά *άρτιες και περιττές* λύσεις. Για τις *άρτιες λύσεις*

$$A_2 = A_1 \ , \ B = 0$$

κια για τις *περιττές λύσεις*

$$A_2 = -A_1 \ , \ A = 0 \ .$$

Η προσαρμογή των ψ και των παραγώγων τους ψ' στα σημεία $x = +a$[14] δίνει για τις *άρτιες λύσεις*

$$\left.\begin{aligned} A\cos ka &= A_1\, e^{-\kappa a} \\ -Ak\sin ka &= -\kappa\, A_1\, e^{-\kappa a} \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \tan ka = \frac{\kappa}{k} \tag{4.27}$$

και για τις *περιττές λύσεις*

$$\left.\begin{aligned} B\sin ka &= -A_1\, e^{-\kappa a} \\ Bk\cos ka &= \kappa\, A_1\, e^{-\kappa a} \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \tan ka = -\frac{k}{\kappa} \ . \tag{4.28}$$

Γραφική λύση: Οι υπερβατικού τύπου εξισώσεις (4.27) και (4.28) δεν επιλύονται αναλυτικά παρά μόνο αριθμητικά στον υπολογιστή. Επειδή και τα δύο μέλη εξαρτώνται από την ενέργεια E μια λύση ιδιοτιμής E_n προκύπτει όταν η E συμπέσει και στα δύο μέλη. Επομένως, οι εξισώσεις επιδέχονται γραφική λύση με την εύρεση των ιδιοτιμών E_n από τα σημεία τομής των αντίστοιχων καμπυλών. Τα πράγματα διευκολύνονται με τις αντικαταστάσεις

$$\lambda = \left(k^2 + \kappa^2\right)a^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 \ , \quad y = ka \ , \tag{4.29}$$

ώστε για τις *άρτιες ιδιοσυναρτήσεις* η (4.27) γράφεται

$$\tan y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} \tag{4.30}$$

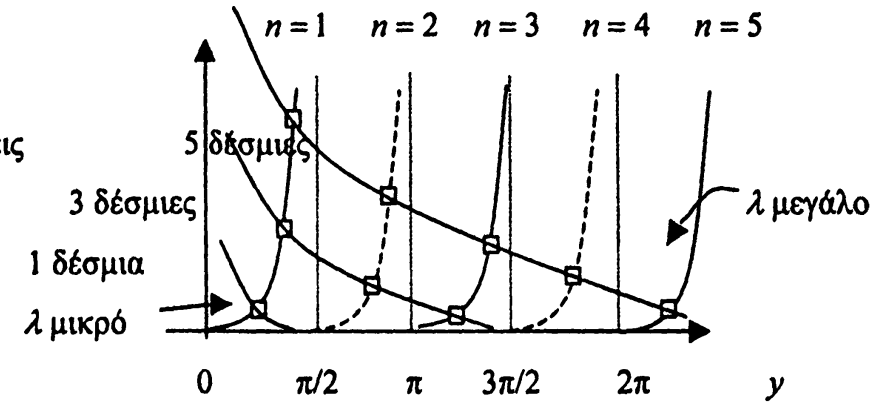
και οι διακριτές ιδιοτιμές E_n, όταν υπάρχουν, προκύπτουν από τα *σημεία τομής* y_n της $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ (φθίνουσα) με τις $\tan y$ (αύξουσες, με τιμές της y:

[14] Αρκούν οι λύσεις για $x=a$. Οι εξισώσεις είναι παρόμοιες για $x = -a$ λόγω συμμετρίας.

$y \in (0,\pi/2)\cup(\pi,3\pi/2)\cup(2\pi,5\pi/2)\cup\cdots$) όπως φαίνονται στο σχήμα. Για τις *περιττές ιδιοσυναρτήσεις* η (4.28) γράφεται

$$-\frac{1}{\tan y}=\frac{\sqrt{\lambda-y^2}}{y} \tag{4.31}$$

και επειδή $-\frac{1}{\tan y}=\tan\left(y+\frac{\pi}{2}\right)$ οι καμπύλες $\tan y$ μετατοπίζονται κατά $\pi/2$ (διακεκομμένες γραμμές) με τιμές της y: $y \in (\pi/2,\pi)\cup(3\pi/2,2\pi)\cup(5\pi/2,3\pi)\cup\cdots$. Επισημαίνεται πως για δεδομένο V_0, ή λ, η $\sqrt{\lambda-y^2}/y$ τέμνει τις $\tan y$ σε τιμές που αντιστοιχούν σε $n=1,3,5,\cdots$ για τις *άρτιες* και $n=2,4,6,\cdots$ για τις *περιττές* λύσεις.



Η συνθήκη $\lambda >>$ σημαίνει $V_0 >>$ ή $a >>$ (βαθύ ή πλατύ πηγάδι ή και τα δύο) ενώ οι $\frac{\sqrt{\lambda-y^2}}{y}$ εκτείνονται σε μεγάλα y με περισσότερα σημεία τομής με τις $\tan y$, άρα περισσότερες δέσμιες καταστάσεις που αντιστοιχούν σε μεγαλύτερο αριθμό ιδιοτιμών ενέργειας E_n. Το αντίθετο ακριβώς συμβαίνει για μικρό $\lambda <<$. Όμως, παρατηρούμε πως γιά οσοδήποτε μικρό λ *υπάρχει πάντα τουλάχιστον μία άρτια δέσμια κατάσταση*[15]. Για $\lambda >>$ οι γραμμές τείνουν στις προσεγγιστικές τιμές τομής $y \approx n\pi/2$, $n=1,3,5,\cdots$ και $n=2,4,6,\cdots$ για τις περιττές λύσεις. Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές από την $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2y^2}{2ma^2}$ είναι

[15] Αυτό συμβαίνει πάντα σε μονο- και διδιάστατα πηγάδια. Τα τρισδιάστατα πηγάδια πρέπει να είναι αρκετά βαθιά και πλατιά για να υποστηρίξουν δέσμιες καταστάσεις.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$E_n \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2 \ , \ n = 1, 2, 3, \cdots \tag{4.32}$$

συμπίπτουν με αυτές του απειρόβαθου πηγαδιού[16], όπως αναμένεται. Παρατηρούμε πως δεν υπάρχει αναγκαστικά σημείο τομής για τις *περιττές ιδιοσυναρτήσεις*. Για να υπάρχει ένα μόνο τέτοιο σημείο πρέπει

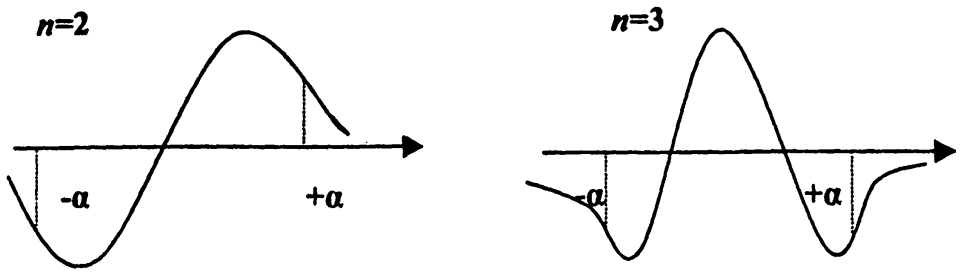
$$\left.\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}\right|_{y=\pi/2} > 0 \Leftrightarrow \sqrt{\lambda - \frac{\pi^2}{4}} > 0 \Leftrightarrow V_0 \geq \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} \ . \tag{4.33}$$

Ερώτηση: *Τι άλλαξε στην λύση του απειρόβαθου πηγαδιού για το πηγάδι με πεπερασμένα τοιχώματα;*
Απάντηση: Αρκετά άλλαξαν. Αξιοσημείωτη είναι η διείσδυση στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή αριστερά και δεξιά του πηγαδιού λόγω πεπερασμένης τιμής του δυναμικού εκεί σε αντίθεση με το απειρόβαθο πηγάδι. Ο μηδενισμός των ιδιοσυναρτήσεων στο άπειρο είναι τώρα υπεύθυνος για τις διακριτές ιδιοτιμές ενέργειας των δέσμιων καταστάσεων. Ο *αριθμός των δέσμιων καταστάσεων* καθορίζεται από το σημείο όπου μηδενίζεται η $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ (σημείο τομής με τον οριζόντιο άξονα που συμβαίνει όταν $E = V_0$, αφού $\lambda - y^2 = 0 \Leftrightarrow \left(k^2 + \kappa^2\right)a^2 - k^2a^2 = 0$ όταν $\kappa^2a^2 = 0 \Leftrightarrow 2m(V_0 - E)\,a^2/\hbar^2 = 0$). Είναι εύκολο να δούμε πως ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων προσδιορίζεται από την τιμή του μηδενισμού $y = ka = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ σε σχέση με τον αριθμό των $\pi/2$. Άρα, ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων εξαρτάται από το βάθος και το πλάτος του πηγαδιού και δίνεται από τον αμέσως μεγαλύτερο ακέραιο του αριθμού p στην σχέση $a\sqrt{2mV_0/\hbar^2} = p\dfrac{\pi}{2}$.

Ερώτηση: *Πόσες είναι οι δέσμιες καταστάσεις σωματίου μάζας* $m = 9\times10^{-31}Kg$ *σε μονοδιάστατο τετραγωνικό πηγάδι με βάθος* $V_0 = 10eV = 1.6\times10^{-18}J$ *και πλάτος* $a = 0.2nm = 2.\times10^{-10}m$ $\left(\hbar = 1.05\times10^{-34}Js\right)$;
Απάντηση: Από τον τύπο $a\sqrt{2mV_0/\hbar^2} = p\pi/2$ έχουμε $p \approx 2.06$ και επομένως 3 δέσμιες καταστάσεις. Οι δύο διεγερμένες από αυτές είναι της μορφής:

[16] Το απειρόβαθο πηγάδι είναι στο διάστημα $(-a,+a)$ με ιδιοτιμές $E_n = \left(\hbar^2\pi^2/8ma\right)n^2$, $n = 1, 2, 3, \cdots$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

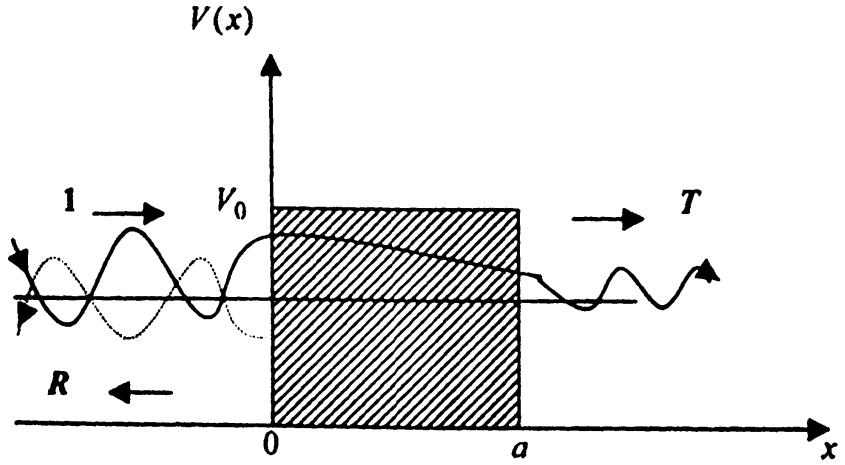


4.3. Φράγμα δυναμικού

Θα επιλυθεί το πρόβλημα σκέδασης στο δυναμικό

$$V(x)=\begin{cases} 0, & x<0, \\ V_0, & 0<x<a, \\ 0, & x>a, \end{cases} \tag{4.34}$$

για τιμές ενέργειας E. Στην σκέδαση στο πεπερασμένο βήμα δυναμικού V_0 (Κεφ. 2: Α1) που εκτείνεται από $x=0$ μέχρι $x\to\infty$ η κβαντική περιγραφή για $E<V_0$ έδωσε μηδενικό συντελεστή διέλευσης, όπως η κλασσική. Στο φράγμα δυναμικού που εξετάζουμε το δυναμικό εκτείνεται μόνο μέχρι το σημείο $x=a$ με αποτέλεσμα ένα μέρος του προσπίπτοντος από αριστερά κύματος να διέρχεται στην δεξιά περιοχή ακόμη και όταν $E<V_0$. Παρατηρούμε πως για $E<V_0$ το σωμάτιο υπεισέρχεται στην ενδιάμεση κλασσικά απαγορευμένη περιοχή. Αυτό στην κβαντική είναι γνωστό ως το κβαντικό *φαινόμενο σήραγγας*. Πριν το δούμε με λεπτομέρεια θα διαπιστώσουμε επιπλέον πως στην επιτρεπτή κλασσικά περιοχή $E>V_0$ υπάρχουν συντονισμοί μηδενικής ανάκλασης με κλασσική περιγραφή αλλά μόνο για ορισμένες τιμές της ενέργειας.



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

➢ Για $E > V_0$ οι εξισώσεις Schrödinger και οι λύσεις τους στο δυναμικό $V(x) = 0$ εκτός και $V(x) = V_0$ εντός του φράγματος γράφονται

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad \psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \; k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \; x < 0,$$

$$\psi''(x) + k'^2\psi(x) = 0, \quad \psi(x) = B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, \; k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}, \; 0 < x < a,$$

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad \psi(x) = Ce^{ikx}, \; k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad x > a, \tag{4.35}$$

με το ίδιο k αριστερά και δεξιά. Επομένως, η προσπίπτουσα ροή είναι $\hbar k/2m$, η ανακλώμενη $\hbar k|A|^2/2m$ και η διερχόμενη $\hbar k|C|^2/2m$ ενώ ο συντελεστής ανάκλασης $R = |A|^2$ και διέλευσης $T = |C|^2$, με $R + T = 1$.

Οι σταθερές A, C μπορούν να υπολογισθούν από τις εξισώσεις προσαρμογής των ψ, ψ' στα σημεία $x = 0$, a:

$$1 + A = B_+ + B_-$$

$$ik(1 - A) = ik'(B_+ - B_-)$$

$$B_+ e^{ik'a} - B_- e^{-ik'a} = Ce^{ika} \tag{4.36}$$

$$ik'\left(B_+ e^{ik'a} - B_- e^{-ik'a}\right) = ik\,C\,e^{ika}$$

και από τον υπολογισμό του B_+/B_- επιλύουμε ως προς A

$$A = i\frac{\sin k'a\left(k'^2 - k^2\right)}{2kk'\cos k'a - i\left(k'^2 + k^2\right)\sin k'a}. \tag{4.37}$$

Ο συντελεστής ανάκλασης είναι

$$R = |A|^2 = \frac{\left(k'^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k'a}{4k^2 k'^2 \cos^2 k'a + \left(k'^2 + k^2\right)^2 \sin^2 k'a}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \frac{\left(k'^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k'a}{4k^2 k'^2 + \left(k'^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k'a}$$
$$= \frac{\left(2mV_0/\hbar^2\right)^2 \sin^2 k'a}{4k^2 k'^2 + \left(2mV_0/\hbar^2\right)^2 \sin^2 k'a} \tag{4.38}$$

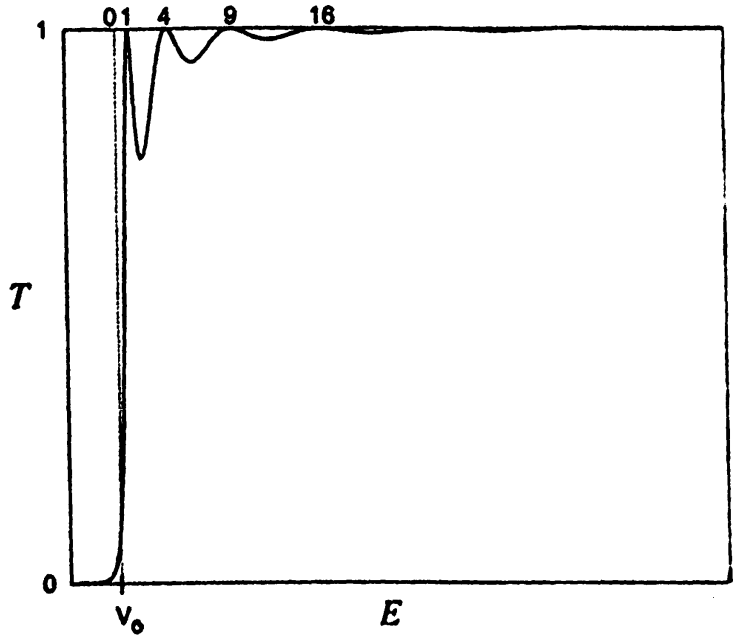
και ο συντελεστής διάδοσης

$$T = 1 - R = \frac{4k^2 k'^2}{\left(2mV_0/\hbar^2\right)^2 \sin^2 k'a + 4k^2 k'^2} \ . \tag{4.39}$$

Συντονισμοί διάδοσης[17]**:** Όταν $\sin k'a = 0 \Leftrightarrow k'a = n\pi$, $n = 1,2,3,\cdots$, ή για αντίστοιχα μήκη κύματος $\lambda' = 2a/n = k'/2\pi$, $n = 1, 2, 3, \cdots$, για ενέργειες $E > V_0$

$$E_n = V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 \ , \ n = 1,2,3,\cdots \tag{4.40}$$

παρατηρούνται συντονισμοί διάδοσης με μηδενικό συντελεστή ανάκλασης R=0 ώστε T=1.



Σχ. 4.1. *Ο συντελεστής διάδοσης T συναρτήσει της ενέργειας E. Στα σημεία όπου T = 1 παρατηρούνται συντονισμοί διάδοσης με n^2=0,1,4,9,16* (4.40).

[17] Η εκμετάλευση της παρουσίας των συντονισμών γίνεται με το 'συμβολόμετρο' Fabry-Perot.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

➢ Όταν $E<V_0$ η αντικατάσταση $k'=i\kappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}$, $\kappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}$ δίνει

$k'^2=-\kappa^2$, $\sin k'a=\frac{1}{2i}\left(e^{ik'a}-e^{-ik'a}\right)=\frac{i}{2}\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)=i\sinh\kappa a$, $\sin^2 k'a=-\sinh^2\kappa a$

με συντελεστές ανάκλασης και διάδοσης

$$R=\frac{(2mV_0/\hbar)^2\sinh^2\kappa a}{\left(2mV_0/\hbar^2\right)^2\sinh^2\kappa a+4k^2\kappa^2}\ , \tag{4.41}$$

$$T=1-R=\frac{4k^2\kappa^2}{\left(2mV_0/\hbar^2\right)^2\sinh^2\kappa a+4k^2\kappa^2}\ . \tag{4.42}$$

Η γραφική παράσταση του συντελεστή διάδοσης T για $E>V_0$ και $E<V_0$ φαίνεται στο σχήμα 4.1.

Φαινόμενο σήραγγας: Όταν το φράγμα είναι πλατύ ($\kappa a>>1$) η διάδοση για $E<V_0$ από την $\sinh\kappa a=\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)/2\approx e^{\kappa a}/2$ οδηγεί σε εκθετική μείωση του συντελεστή διάδοσης T με το πλάτος a από την (4.41) που γράφεται προσεγγιστικά

$$T(E)\approx 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)e^{-2\kappa a}\ . \tag{4.43}$$

Αξίζει να σημειωθεί η ευαισθησία του $T(E)$ στις μεταβολές της ενέργειας E και του εύρους του φράγματος a. Αυτό συμβαίνει π.χ. κατά την εκπομπή ακτινοβολίας α – σωματίων[18] από πυρήνες, όπου πολύ μικρές μεταβολές στην ενέργεια E ή το a είναι αρκετές για να προκαλέσουν τεράστιες μεταβολές στον συντελεστή T. Αν αγνοήσουμε την εξάρτηση από την E στον παράγοντα της συνάρτησης πρίν τον εκθετικό όρο

$$T(E)\approx e^{-2\kappa a}\ ,\ \kappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)} \tag{4.44}$$

η κυματοσυνάρτηση εμφανίζει εκθετική μείωση από το $x=0$ στο a

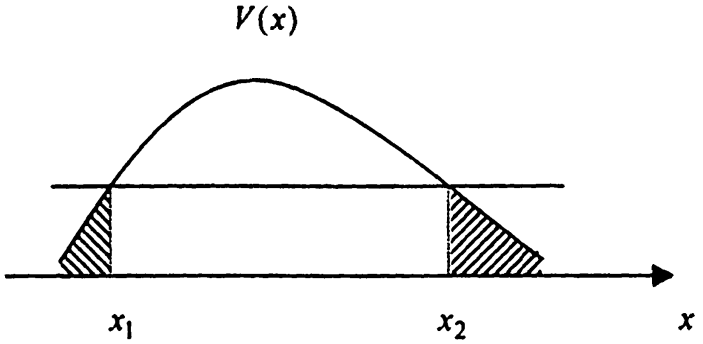
$$\frac{\psi(0)}{\psi(a)}\approx e^{-\kappa a}\ . \tag{4.45}$$

[18] Ο Gamow το 1928 υπέθεσε πως τα σωμάτια συγκρατούνται στον πυρήνα με δυναμικό τύπου φράγματος και η εκπομπή α-σωματίων οφείλεται στο φαινόμενο σήραγγας.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το αποτέλεσμα αυτό είναι γενικό και ισχύει και για κάθε μορφής δυναμικό, όπως στο σχήμα, στην οιονεί-κλασσική προσέγγιση WKB[19]

$$T(E) \approx e^{-2\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}} . \tag{4.46}$$



Ερώτηση: *Τι άλλαξε πηγαίνοντας από το βήμα στο φράγμα δυναμικού;*

Απάντηση: Ένα κύμα που προσπίπτει σε φράγμα δυναμικού (i) με ενέργεια που το ξεπερνά $E > V_0$ ανακλάται εν μέρει, όπως και στο βήμα δυναμικού, γεγονός *που δεν συμβαίνει* στα κλασσικά σωμάτια. Όμως στην σκέδαση σε φράγμα δυναμικού εμφανίζεται και για τα κβαντικά σωμάτια η κλασσική συμπεριφορά αλλά σε ορισμένες τιμές της ενέργειας (4.40), όπου παρατηρούνται *συντονισμοί διάδοσης* χωρίς καθόλου ανάκλαση. (ii) Όταν η ενέργεια του προσπίπτοντος κύματος είναι μικρότερη από το ύψος του φράγματος $E < V_0$ παρατηρούμε πως στο φράγμα υπάρχει κάποια διάδοση που απουσίαζε στο βήμα δυναμικού. Αυτό είναι το κβαντικό *φαινόμενο σήραγγας* που δεν έχει ανάλογο στην κλασσική φυσική. Η ύπαρξη του σωματίου στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή σημαίνει πιθανότητα να βρεθεί με αρνητική ενέργεια. Αυτό μπορεί να συμβεί στην κβαντική, όπου σύμφωνα με το θεώρημα του Ehrenfest διατηρείται μόνο η μέση τιμή της ενέργειας, ενώ οι τιμές ενέργειας μπορεί να είναι πάνω και κάτω από αυτήν σε ένα εύρος τιμών ΔE που δίνεται από την αβεβαιότητα στην ενέργεια. Επειδή το σωμάτιο εντοπίζεται στο φράγμα έχουμε $\Delta x \approx a$ και από την αρχή της αβεβαιότητας $\Delta p >> \hbar/(2a)$ ώστε $\Delta E >> \hbar^2/(8ma^2)$. Επομένως για να επιτευχθεί το φαινόμενο σήραγγας είναι απαραίτητη κάποια 'δοσοληψία'[20] μεταφοράς ενέργειας ΔE μικρότερη της E. Όταν

[19] Wentzel-Kramers-Brillouin.

[20] Σαν ένας όχι τίμιος ταμίας που κλέβει την τράπεζα αλλά επανατοποθετεί εγκαίρως το ποσό που έκλεψε πριν ένει ο έλεγχος και συλληφθεί.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΚΡΗΤΗΣ

η E είναι πολύ μικρότερη της διαφοράς $V_0 - E$ η συνθήκη παρατήρησης της αρνητικής ενέργειας γράφεται

$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} >> E >> \frac{\hbar^2}{8ma^2} \tag{4.47}$$

που σημαίνει $\kappa a >> 1$ με εκθετικά μικρή πιθανότητα διέλευσης του σωματίου (4.44). Το φαινόμενο σήραγγας έχει πληθώρα εφαρμογών και στην μεσοσκοπική φυσική των νανοδομών.

4.4. Αρμονικός ταλαντωτής

Αν το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή $V(x)$ αναπτυχθεί σε σειρά μέχρι τον τετραγωνικό όρο ως προς x

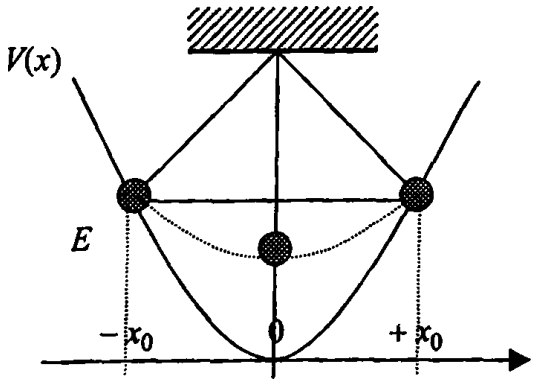
$$V(x) = V(0) + x\,V'(x)\big|_{x=0} + \frac{x^2}{2}V''(x)\Big|_{x=0} \tag{4.48}$$

η απαίτηση ύπαρξης ελάχιστου για $x = 0$ δίνει $V'(x)|_{x=0} = 0$ και $V''(x)|_{x=0} = K > 0$, $K = \sigma\tau\alpha\theta$. Όταν $V(0) = 0$ το δυναμικό είναι

$$V(x) = \frac{K}{2}x^2 \tag{4.49}$$

που δίνει την γνωστή δύναμη επαναφοράς $F(x) = -\dfrac{\partial V(x)}{\partial x} = -K\,x$. Αν επιπλέον εισάγουμε την $\omega^2 = K/m$ το δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή για σωμάτιο μάζας m που εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση κυκλικής συχνότητας ω έχει την μορφή

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2\,,\quad x \in (-\infty, +\infty) \tag{4.50}$$



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.4.1. Κλασσική λύση

Η εξίσωση του Newton $m x''(t) + m\omega^2 x(t) = 0$ έχει λύσεις

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \sin(\omega t + \phi) \\ x'(t) &= x_0\, \omega \cos(\omega t + \phi) \end{aligned} \tag{4.51}$$

με σταθερές x_0, ϕ που καθορίζονται από τις αρχικές συνθήκες $x(0)$, $x'(0)$. Το σωμάτιο ενέργειας E εκτελεί ταλαντώσεις γύρω από το σημείο x=0 εντός των ορίων $\pm x_0 = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, αφού η διείσδυση είναι απαγορευμένη στην περιοχή δεξιά και αριστερά[21] όπου η δυναμική ενέργεια είναι μεγαλύτερη από την ολική ενέργεια E. Η *κλασσική πυκνότητα πιθανότητας* $P_{\kappa\lambda}(x)dx$ εύρεσης του σωματίου στο απειροστικό διάστημα $(x, x+dx)$ προκύπτει από το ποσοστό του χρόνου που το σωμάτιο παραμένει στο στοιχειώδες διάστημα dx κατά την διάρκεια μιας ταλάντωσης με περίοδο T. Από το πηλίκο του χρονικού διαστήματος dt που παραμένει στο $(x, x+dx)$ δια του χρόνου $T/2$ που χρειάζεται για να διανύσει το $(-x_0, +x_0)$ με ταχύτητα $x'(t) = dx/dt$ και $\omega = 2\pi/T$ έχουμε $P_{\kappa\lambda}(x)\, dx = \frac{dt}{T/2} = \frac{dx/x'(x)}{T/2}$ και η κατανομή πιθανότητας είναι

$$\begin{aligned} P_{\kappa\lambda}(x) &= \frac{2}{T}\frac{1}{x'(t)} = \frac{2}{T\omega x_0 \sqrt{1-\sin^2(\omega t+\varphi)}} \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}}, \qquad x \in (-x_0, +x_0) \ . \end{aligned} \tag{4.52}$$

Η κλασσική πυκνότητα πιθανότητας $P_{\kappa\lambda}(x)$ φαίνεται μαζί με την κβαντική στο σχήμα 4.2.

4.4.2 Κβαντική λύση

Η εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \tag{4.53}$$

[1] Το σημείο x_0 προκύπτει από την εξίσωση της δυναμικής ενέργειας με την E αφού στο όριο της κλασσικής ταλάντωσης η κινητική ενέργεια μηδενίζεται.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

γράφεται

$$\psi''(x)+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right]\psi(x)=0 \tag{4.54}$$

στην μορφή μιας διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης με μεταβλητούς (x-εξαρτώμενους) συντελεστές[22]. Αν γίνει η αντικατάσταση με την αδιάστατη μεταβλητή ξ

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x=\frac{x}{x_0} \tag{4.55}$$

η εξίσωση γίνεται

$$\psi''(\xi)+\left[\lambda-\xi^2\right]\psi(\xi)=0 \quad \text{με} \quad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{4.56}$$

Όταν $\xi\to\pm\infty$ λαμβάνει την *ασυμπτοτική μορφή*

$$\psi''_\infty-\xi^2\psi_\infty=0 \tag{4.57}$$

αφού ο πρώτος όρος στην αγκύλη της (4.56) είναι αμελητέος σε σχέση με τον όρο που περιέχει το ξ^2. Η (4.57) είναι μια διβάθμια διαφορική εξίσωση με βαθμούς –2, 2, 2 που επιδέχεται την λύση $\psi_\infty=c_1e^{-\frac{\xi^2}{2}}+c_2e^{+\frac{\xi^2}{2}}$. Ο δεύτερος όρος φεύγει επειδή απειρίζεται στα όρια $\xi\to\pm\infty$ ώστε η ασυμπτοτική λύση χωρίς τον παράγοντα κανονικοποίησης γράφεται $\psi_\infty=e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Οι φυσικώς αποδεκτές λύσεις $\psi=h\,\psi_\infty$ της αρχικής εξίσωσης (4.56) θα προκύψουν με αντικατάσταση των $\psi=h\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, $\psi'=(h'-\xi h)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

---

[22] Η *επιλυσιμότητα μιας διαφορικής εξίσωσης* ορίζεται στο βιβλίο Κβαντική Ι του Σ. Τραχανά. Ο όρος του τύπου $x^n\psi^{(m)}$, που περιλαμβάνει την n δύναμη του x και την m-οστή παράγωγο της $\psi(x)$, χαρακτηρίζεται από τον 'βαθμό' $d=n-m$. Οι βαθμοί των όρων της συγκεκριμένης εξίσωσης –2, 0, 2, 0 έχουν τρείς διαφορετικές τιμές και η εξίσωση χαρακτηρίζεται ως *τριβάθμια*. *Οι τριβάθμιες εξισώσεις δεν είναι επιλύσιμες*. Αν αφαιρεθεί η ασυμπτοτική τους συμπεριφορά μετατρέπονται σε *διβάθμιες που επιλύονται με την μέθοδο των δυναμοσειρών*.

$\psi'' = \left[h'' - 2\xi h' + \left(\xi^2 - 1\right)h\right]e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ οπότε ανάγεται στην διβάθμια *διαφορική εξίσωση του Hermite*

$$h'' - 2\xi h' + (\lambda - 1)h = 0 \quad . \tag{4.58}$$

Η (4.58) είναι διβάθμια με βαθμούς –2, 0, 0, 0 άρα επιλύσιμη για την συνάρτηση $h(\xi)$ με την μέθοδο των δυναμοσειρών.

Η λύση εκφράζεται με την δυναμοσειρά

$$h(\xi) = \alpha_0 + \alpha_1\xi + \alpha_2\xi^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k\xi^k \tag{4.59}$$

και τις παραγώγους της

$$h'(\xi) = \alpha_1 + 2\alpha_2\xi + 3\alpha_3\xi^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}k\alpha_k\xi^{k-1} \tag{4.60}$$

$$h''(\xi) = 2\alpha_2 + 2\cdot 3\alpha_3\xi + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}(k+1)(k+2)\alpha_{k+2}\xi^k \tag{4.61}$$

που με αντικατάσταση στην (4.58) δίνουν

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left[(k+1)(k+2)\alpha_{k+2} - 2k\alpha_k + (\lambda-1)\alpha_k\right]\xi^k = 0 \ . \tag{4.62}$$

Από την απαίτηση μοναδικότητας οι όροι της κάθε δύναμης στις δυναμοσειρές μηδενίζονται

$$(k+1)(k+2)\alpha_{k+2} - 2k\alpha_k + (\lambda-1)\alpha_k = 0 \tag{4.63}$$

απ' όπου προκύπτει η *αναδρομική σχέση*

$$\alpha_{k+2} = \frac{(2k+1-\lambda)}{(k+1)(k+2)}\alpha_k \quad . \tag{4.64}$$

Η (4.64) είναι η λύση της διαφορικής εξίσωσης αφού με δεδομένους τους α_0, α_1 επιτρέπει τον υπολογισμό όλων των υπόλοιπων όρων της δυναμοσειράς (4.59) για την $h(\xi)$. Από τον α_0 υπολογίζονται οι άρτιοι όροι $\alpha_2, \alpha_4, \alpha_6, \cdots$ και από τον α_1 οι περιττοί όροι $\alpha_3, \alpha_5, \alpha_7, \cdots$. Οι άρτιοι είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\alpha_{2k} = (-2)^k \frac{n(n-2)\cdots(n-2k+4)(n-2k+2)}{(2k)!}\alpha_0 \tag{4.65}$$

και οι περιττοί

$$\alpha_{2k+1} = (-2)^k \frac{(n-1)(n-3)\cdots(n-2k+3)(n-2k+1)}{(2k+1)!}\alpha_1 \ . \tag{4.66}$$

Από την απαίτηση οι λύσεις της (4.58) να είναι κανονικοποιημένες[23] η σειρά πρέπει να τερματίζεται σε μιά δύναμη $k=n$ και με αντικατάσταση στην (4.64) οδηγεί στην *συνθήκη τερματισμού*

$$2n-(\lambda-1)=0 \tag{4.67}$$

από την οποία προκύπτουν οι ενεργειακές ιδιοτιμές του αρμονικού ταλαντωτή

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \ , \quad n=0,1,2,\cdots. \tag{4.68}$$

Η αναδρομική σχέση (4.58) για τις επιτρεπτές τιμές της ενέργειας συναρτήσει του n γράφεται

$$\alpha_{k+2} = -\frac{2(n-k)}{(k+1)(k+2)}\alpha_k \ . \tag{4.69}$$

- Για $n=0$: $\alpha_2=0$, με $\alpha_1=0$ ώστε να μηδενίζονται οι περιττοί όροι, $h_0(\xi)=\alpha_0$ και η άρτια λύση είναι $\psi_0(\xi)=\alpha_0\, e^{-\xi^2/2}$.
- Για $n=1$: $\alpha_3=0$, με $\alpha_0=0$ ώστε να μηδενίζονται οι άρτιοι όροι, $h_1(\xi)=\alpha_1\,\xi$ και η περιττή λύση είναι $\psi_1(\xi)=\alpha_1\,\xi\, e^{-\xi^2/2}$.
- Για $n=2$: $\alpha_2=-2\alpha_0$ και $k=2$ δίνει $\alpha_4=0$ με $h_2(\xi)=\alpha_0\left(1-2\xi^2\right)$ και την άρτια λύση $\psi_2(\xi)=\alpha_0\left(1-2\xi^2\right)e^{-\xi^2/2}$, κλπ.

---

[23] Διαφορετικά για μεγάλο k η αναδρομική σχέση δίνει προσεγγιστικά $\alpha_k \approx \frac{c}{(k/2)!}$, c=*σταθ.* που αν κρατήσουμε την μεγαλύτερη δύναμη οδηγεί στην μη αποδεκτή λύση $h(\xi)=c\,e^{\xi^2}$ που απειρίζεται στα όρια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Για αυθαίρετη τιμή του n οι λύσεις $h_n(\xi)$ είναι πολυώνυμα n-οστής τάξης στην μεταβλητή ξ. Οι λύσεις συνήθως εκφράζονται με τα *πολυώνυμα του Hermite* $H_n(\xi)$, όπου γίνεται επιλογή του αυθαίρετου παράγοντα κανονικοποίησης ώστε ο συντελεστής της υψηλότερης δύναμης του ξ να είναι 2^n. Οι *κανονικοποιημένες λύσεις για τις ιδιοσυναρτήσεις του απλού αρμονικού ταλαντωτή* είναι

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x, \quad n = 0,1,2,\cdots, \tag{4.70}$$

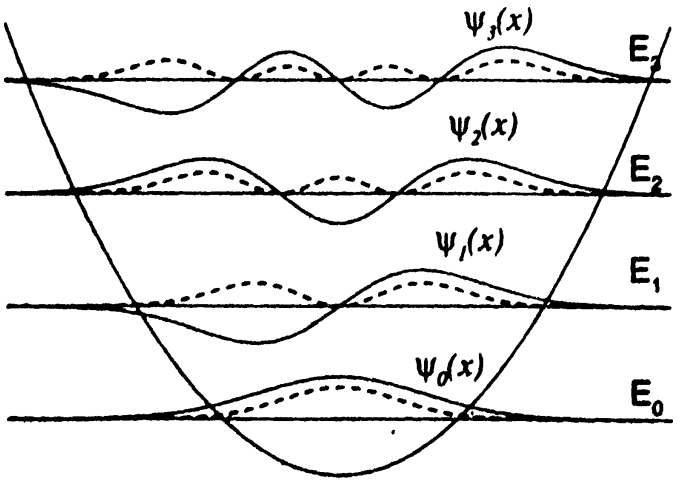
με τα πολυώνυμα του Hermite $H_n(\xi)$ αντί των $h_n(\xi)$. Τα πρώτα πολυώνυμα είναι

$$H_0(\xi) = 1,\ H_1(\xi) = 2\xi,\ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\ H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \cdots \tag{4.71}$$

και υπακούουν στην κανονικοποίηση

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, H_n^2(\xi)\, e^{-\xi^2} = 2^n\, n!\, \sqrt{\pi}, \quad n = 0,1,2,\cdots . \tag{4.72}$$

Οι τέσσερις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις από την (4.70) φαίνονται στο παρακάτω σχήμα με τις διακεκομμένες γραμμές να παριστούν την αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας.



Σχόλια:

(i) **Τα πολυώνυμα του Hermite υπολογίζονται από τους αναδρομικούς τύπους**

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - \frac{dH_n}{d\xi} \tag{4.73}$$

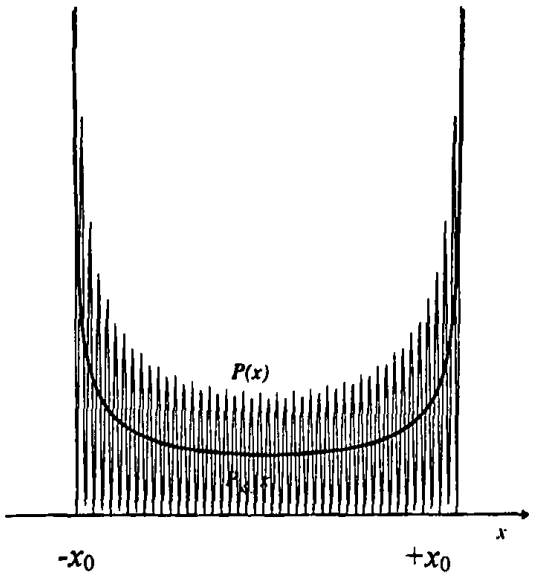
$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_n . \tag{4.74}$$

(ii) Η κβαντική πυκνότητα πιθανότητας στην n-οστή στάθμη

$$P_n(x)\, dx = |\psi_n(x)|^2\, dx \tag{4.75}$$

από τον ασυμπτοτικό τύπο για τα πολυώνυμα για αρκετά μεγάλο n φαίνεται στο σχήμα 4.2 μαζί με την κλασσική εικόνα. Παρατηρούμε πως η κβαντική $P_n(x)$ από την (4.75) μοιάζει με την κλασσική $\widetilde{P}_{\kappa\lambda}(x)$ από την (4.52) και οι ιδιοσυναρτήσεις τείνουν να περιορισθούν εντός των κλασσικών ορίων $(-x_0,+x_0)$. Οι κβαντικές τιμές είναι διπλάσιες αλλά η *μέση τιμή* της κβαντικής πυκνότητας πιθανότητας $P_n(x)$ καταλήγει ακριβώς στην κλασσική πυκνότητα $\widetilde{P}_{\kappa\lambda}(x)$ στο όριο $n \to \infty$. Αυτό ισοδυναμεί με μήκος κύματος που τείνει στο μηδέν και αδυναμία περίθλασης γύρω από οποιοδήποτε αντικείμενο, όπως στην κλασσική εικόνα.

(iii) Η πιθανότητα εύρεσης του σωματίου εκτός του διαστήματος κλασσικής ταλάντωσης $(-x_0,+x_0)$ δεν είναι μηδέν με την δυνατότητα του σωματίου να υπεισέλθει στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή.



Σχ. 4.2. *Η κβαντική πυκνότητα πιθανότητας $P(x)$ για μεγάλο n από την ασυμπτωτική μορφή για τα πολυώνυμα Hermite μαζί με την κλασσική $P_{\kappa\lambda}(x)$ από την (4.52). Η κβαντική πυκνότητα εμφανίζει $n+1$ μέγιστα και είναι ακριβώς διπλάσια της κλασσικής ενώ η ακριβής ποσοτική εξίσωση επιτυγχάνεται για την τοπική μέση τιμή της $P(x)$ με $\frac{1}{2\varepsilon}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx'\, P(x') = P_{\kappa\lambda}(x)$.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.4.3. Αλγεβρική λύση

Η Χαμιλτονιανή του μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \tag{4.76}$$

με x την θέση, p την ορμή και ω την γωνιακή συχνότητα της κλασσικής ταλάντωσης που συνδέεται με την σταθερά ελατηρίου K μέσω της $\omega = \sqrt{K/m}$. Θα επιχειρήσουμε να παραγοντοποιηθεί η H στην μορφή διαφοράς τελείων τετραγώνων

$$H = \frac{1}{2m}\left[(m\omega x)^2 - (\hbar\,\partial/\partial x)^2\right] \quad , \tag{4.77}$$

χωρίς βεβαίως να ξεχνάμε πως οι $x = x$, $p = -i\hbar\,\partial/\partial x$ είναι ερμιτειανοί τελεστές που δεν μετατίθενται. Αν ορισθούν οι τελεστές $a \sim m\omega x + \hbar\,\partial/\partial x$ και $a^+ \sim m\omega x - \hbar\,\partial/\partial x$ η δράση του γινομένου σε μιά αυθαίρετη συνάρτηση $f(x)$ από την σχέση μετάθεσης $[x, p] = i\hbar$ δίνει

$$\begin{aligned} a\,a^+ f(x) &= (m\omega x + \hbar\,\partial/\partial x)(m\omega x - \hbar\,\partial/\partial x) f(x) \\ &= (m\omega x)^2 f(x) - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \hbar m\omega x \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \hbar m\omega \frac{\partial}{\partial x}(x f(x)) \\ &= (2mH + \hbar m\omega) f(x) \quad . \end{aligned} \tag{4.78}$$

και

$$\begin{aligned} a^+ a\, f(x) &= (m\omega x - \hbar\,\partial/\partial x)(m\omega x + \hbar\,\partial/\partial x) f(x) \\ &= (m\omega x)^2 f(x) - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \hbar m\omega x \frac{\partial f(x)}{\partial x} - \hbar m\omega \frac{\partial}{\partial x}(x f(x)) \\ &= (2mH - \hbar m\omega) f(x) \quad . \end{aligned} \tag{4.79}$$

Όταν οι (4.78), (4.79) αφαιρεθούν κατά μέλη $\left(a a^+ - a^+ a\right) f(x) = 2\hbar m\omega f(x)$ αδιάστατο αποτέλεσμα για τον μεταθέτη $\left[a, a^+\right] = a a^+ - a^+ a = 2\hbar m\omega$ επιβάλλει την διαίρεση των a, a^+ με $\sqrt{2\hbar m\omega}$, ώστε

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega x + \hbar\,\partial/\partial x), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega x - \hbar\,\partial/\partial x) \tag{4.80}$$

και $\left[a, a^+\right] = a a^+ - a^+ a = 1$. Επομένως, ορίζονται ισοδύναμα[24] οι τελεστές *καταστροφής* a και *δημιουργίας* a^+

---

[24] Απαιτείται ιδιαίτερη προσοχή στις πράξεις με τελεστές. Παρατηρείστε πως το άθροισμα στην παρένθεση και με + στον ορισμό του τελεστή καταστροφής a ενώ με - στον τελεστή δημιουργίας a^+, το ίδιο στην μορφή (4.80) με τις παραγώγους ως προς x αλλά και στην (4.81) με τους τελεστές x και p.

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right) \\ a^{+} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right) \end{aligned} \tag{4.81}$$

με $a=\left(a^{+}\right)^{+}$.

- Από την γνωστή σχέση μετάθεσης $[x,p]=i\hbar$ ισχύουν οι $\left[a,a^{+}\right]=1$, $a^{+}a=\dfrac{H}{\hbar\omega}-\dfrac{1}{2}$ και $aa^{+}=\dfrac{H}{\hbar\omega}+\dfrac{1}{2}$ ώστε η Χαμιλτονιανή γράφεται $H=\hbar\omega\left(a^{+}a+\dfrac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(N+\dfrac{1}{2}\right)$, με $N=a^{+}a$ τον *αριθμητικό τελεστή* που προφανώς είναι ερμιτειανός αφού $N^{+}=\left(a^{+}a\right)^{+}=a^{+}\left(a^{+}\right)^{+}=a^{+}a=N$.

Μεταθέτης $\left[a,a^{+}\right]=1$:

$$\begin{aligned} \left[a,a^{+}\right] &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x+\frac{ip}{m\omega},x-\frac{ip}{m\omega}\right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x,-\frac{ip}{m\omega}\right]+\frac{m\omega}{2\hbar}\left[\frac{ip}{m\omega},x\right] \\ &= -\frac{i}{2\hbar}[x,p]+\frac{i}{2\hbar}[p,x] \\ &= -\frac{2i}{2\hbar}[x,p] \\ &= -\frac{2i\,i\hbar}{2\hbar} \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \left[a,a^{+}\right]=1 \quad . \tag{4.82}$$

Αριθμητικός τελεστής $N=a^{+}a$:

$$\begin{aligned} a^{+}a &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right)\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^{2}+\frac{i}{m\omega}(xp-px)+\frac{p^{2}}{m^{2}\omega^{2}}\right) \end{aligned}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{i}{2\hbar}[x,p] + \frac{p^2}{2\hbar m\omega}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right) - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right). \tag{4.83}$$

Οι τελεστές H και N *διαγωνοποιούνται ταυτόχρονα* επειδή $[H,N]=0$ και υπακούουν στις εξισώσεις ιδιοτιμών[25]

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= E_n|n\rangle \\ N|n\rangle &= n|n\rangle \end{aligned} \tag{4.84}$$

με κοινές ιδιοσυναρτήσεις των H και N τα ket $|n\rangle$.

Από τις *ιδιοτιμές* $n = 0,1,2,\cdots$ *του αριθμητικού τελεστή* N υπολογίζονται οι *ιδιοτιμές ενέργειας του απλού αρμονικού ταλαντωτή* $E_n = (n+1/2)\,\hbar\omega,\quad n = 0,1,2,3,\cdots$.

- Μπορεί να δειχθεί ότι $[N,a] = -a$ και $[N,a^+] = a^+$ ώστε

$$N(a|n\rangle) = (n-1)\,(a|n\rangle) \tag{4.85}$$

$$N\left(a^+|n\rangle\right) = (n+1)\left(a^+|n\rangle\right). \tag{4.86}$$

Από την ταυτότητα $[AB,C] = A[B,C] + [A,C]B$ οι

$$[N,a] = \left[a^+a,a\right] = a^+[a,a] + \left[a^+,a\right]a = -\left[a,a^+\right]a = -a$$

και

$$\left[N,a^+\right] = \left[a^+a,a^+\right] = a^+\left[a,a^+\right] + \left[a^+,a^+\right]a = a^+\left[a,a^+\right] = a^+$$

οδηγούν στις

[25] Ο αριθμητικός τελεστής N ονομάζεται έτσι επειδή οι ιδιοτιμές του είναι οι αριθμοί $n = 0,1,2,\cdots$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$Na|n\rangle = (aN - a)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$$

και

$$N a^{+}|n\rangle = \left(a^{+}N + a^{+}\right)|n\rangle = (n+1)a^{+}|n\rangle \ .$$

Άρα, οι $a|n\rangle$, $a^{+}|n\rangle$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του αριθμητικού τελεστή N με ιδιοτιμές $n-1$, $n+1$, αντίστοιχα.

- Οι ιδιοσυναρτήσεις $a|n\rangle$ και $|n-1\rangle$ είναι ίδιες εκτός από μια πολλαπλασιαστική σταθερά $c \in C$ ενώ το ίδιο συμβαίνει γιά τις $a^{+}|n\rangle$ και $|n+1\rangle$ και μπορεί να δειχθεί ότι

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1> \\ a^{+}|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1> \end{aligned} \tag{4.87}$$

Απόδειξη:

Η πρώτη σχέση αποδεικνύεται από

$$\begin{aligned} & a|n\rangle = c|n-1\rangle \Leftrightarrow \langle n|a^{+} = \langle n-1|c^{*} \\ & \Leftrightarrow \langle n|a^{+}a|n\rangle = \langle n-1|c^{*}c|n-1\rangle \\ & \Leftrightarrow \langle n|N|n\rangle = |c|^{2} \\ & \Leftrightarrow n = |c|^{2} \\ & \Leftrightarrow c = \sqrt{n} \end{aligned}$$

και η δεύτερη

$$\begin{aligned} & a^{+}|n\rangle = c|n+1\rangle \Leftrightarrow \langle n|a = \langle n+1|c^{*} \\ & \Leftrightarrow \langle n|a\,a^{+}|n\rangle = \langle n+1|c^{*}c|n+1\rangle \\ & \Leftrightarrow \langle n|\left(\left[a,a^{+}\right] + a^{+}a\right)|n\rangle = |c|^{2} \\ & \Leftrightarrow \langle n|(1+N)|n\rangle = |c|^{2} \\ & \Leftrightarrow 1+n = |c|^{2} \\ & \Leftrightarrow c = \sqrt{1+n} \ . \end{aligned}$$

Με επαναληπτική δράση του τελεστή καταστροφής a στην $|n\rangle$ προκύπτει η ακολουθία προς τα κάτω

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1>$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$a^2|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}\,|n-2>$$

$$a^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,|n-3>$$

$$\vdots$$

που τερματίζεται όταν n=0 από την συνθήκη

$$n = \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^+a|n\rangle = \left(\langle n|a^+\right)(a|n\rangle) = |a|n\rangle|^2 \geq 0.$$

Με τον τρόπο αυτό υπολογίζεται η μικρότερη τιμή της ενέργειας E_0.

Οι *ιδιοσυναρτήσεις* $|n\rangle$, $n = 0,1,2,\cdots$ *του απλού αρμονικού ταλαντωτή* κατασκευάζονται με την επαναληπτική δράση του τελεστή δημιουργίας a^+ στην $|0\rangle$ ως εξής:

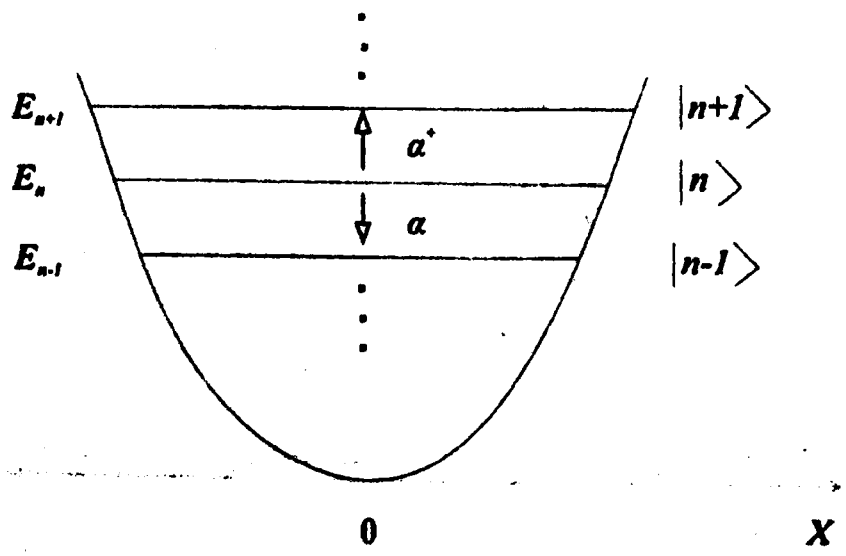
$$|1\rangle = a^+|0\rangle$$

$$|2\rangle = \frac{a^+}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{(a^+)^2}{\sqrt{2!}}|0\rangle$$

$$|3\rangle = \frac{a^+}{\sqrt{3}}|2\rangle = \frac{(a^+)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle$$

.....

$$|n\rangle = \frac{a^+}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,\ n = 0, 1, 2, \cdots \quad . \tag{4.88}$$



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 10. Να υπολογισθούν στην βάση $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \cdots$ τα στοιχεία μήτρας

$$\langle n|a|n'\rangle, \quad \langle n|a^+|n'\rangle, \quad \langle n|x|n'\rangle, \quad \langle n|p|n'\rangle, \quad \text{για} \quad \forall n, n' = 0, 1, 2, \cdots$$

για τους τελεστές

$$a, a^+, \; H, x, p$$

και να δειχθεί η μορφή των μητρών στην γνωστή ως *αριθμητική αναπαράσταση*

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \end{pmatrix}, \quad H = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots \end{pmatrix}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdot \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \end{pmatrix}, \quad p = -\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 & \cdot \\ -i & 0 & i\sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & -i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \end{pmatrix}.$$

Λύση: Από τους ορισμούς (4.81) επιλύουμε ως προς x, p

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^+\right) \\ p &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a - a^+\right) \end{aligned} \tag{4.89}$$

και υπολογίζουμε τα στοιχεία μήτρας

$$\begin{aligned} \langle n|x|n'\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n|a|n'\rangle + \langle n|a^+|n'\rangle\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'}\,\langle n|n'-1\rangle + \sqrt{n'+1}\,\langle n|n'+1\rangle\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,n'} + \sqrt{n}\,\delta_{n-1,n'}\right) \end{aligned}$$

και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\begin{aligned}\langle n|p|n'\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\langle n|a|n'\rangle - \langle n|a^{+}|n'\rangle\right)\\ &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n'}\langle n|n'-1\rangle - \sqrt{n'+1}\langle n|n'+1\rangle\right)\\ &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} - \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1}\right)\\ &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,n'} - \sqrt{n}\,\delta_{n-1,n'}\right) .\end{aligned}$$

Παρατηρούμε πως στην βάση $|0\rangle,|1\rangle,|2\rangle,\cdots$ οι μήτρες x, p είναι *τριδιαγώνιες* (έχουν στοιχεία στις πρώτες διαγώνιες πάνω και κάτω από την κύρια διαγώνιο) και ερμιτειανές, αφού

$$\langle n|p|n'\rangle = \langle n'|p|n\rangle^{*}, \langle n|x|n'\rangle = \langle n'|x|n\rangle^{*}$$

με τα στοιχεία πάνω και κάτω από την κύρια διαγώνιο μιγαδικά συζυγή μεταξύ τους. Οι μήτρες a, a^{+} προφανώς δεν είναι ερμιτειανές. Η Χαμιλτονιανή H έχει την μορφή μιας *διαγώνιας* μήτρας με διαγώνια στοιχεία τις *ιδιοτιμές* ενέργειας

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots$$

Άσκηση 11. Για την ιδιοσυνάρτηση $\psi_0(x)$ της βασικής στάθμης του ταλαντωτή η δράση του τελεστή καταστροφής a δίνει

$$a\psi_0(x) = 0 .$$

Η $\psi_0(x)$ και η αντίστοιχη ενεργειακή ιδιοτιμή E_0 υπολογίζονται αν αντικατασταθεί ο a με την διαφορική του μορφή των x και p και λυθεί η διαφορική εξίσωση

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right]\psi_0(x) = 0 .$$

Η $\psi_0(x)$ είναι Γκαουσσιανής μορφής όπως ήδη έχουμε δεί ενώ η $\psi_1(x)$ υπολογίζεται αν δράσουμε στην $\psi_0(x)$ με τον a^{+} .

Λύση: Η διαφορική εξίσωση λύνεται

$$x\psi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d\psi_0(x)}{dx} = 0$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\Leftrightarrow \int \frac{d\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int dx\, x$$

$$\Leftrightarrow \ln\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sigma\tau\alpha\theta.$$

$$\psi_0(x) = \mathrm{A}_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \quad x \in (-\infty,+\infty)$$

και με αντικατάσταση στην $H\psi_0(x) = E_0\,\psi_0(x)$ προκύπτει η αντίστοιχη ιδιοτιμή ενέργειας $E_0 = \hbar\omega/2$. Η σταθερά κανονικοποίησης δίνεται από το ολοκλήρωμα Gauss

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|\psi_0(x)|^2 = 1 \Leftrightarrow A_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-2\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = 1 \Leftrightarrow A_0^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \Leftrightarrow A_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Η $\psi_1(x)$ υπολογίζεται από την $a^+\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x)$ για $n = 0$:

$$\psi_1(x) = a^+\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}}\left[x - \frac{\hbar}{m\omega}\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)x\right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\, x\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

με αντίστοιχη ιδιοτιμή ενέργειας $E_1 = 3\hbar\omega/2$.

Άσκηση 12. Να δειχθεί ότι στην ιδιοσυνάρτηση $|n\rangle$ του απλού αρμονικού ταλαντωτή οι μέσες (αναμενόμενες) τιμές της θέσης και της ορμής είναι

$$\langle x\rangle = \langle n|x|n\rangle = 0, \quad \langle p\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0$$

όπως και στον κλασσικό ταλαντωτή. Να υπολογισθεί στην κατάσταση $|n\rangle$ η μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας $\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$ και της κινητικής ενέργειας $\langle E_{\kappa\iota\nu}\rangle = E - \langle V\rangle$ αφού πρώτα αποδειχθούν οι $\langle aa^+\rangle = n+1$, $\langle a^+a\rangle = n$. Το αποτέλεσμα $\langle \mathrm{E}_{\kappa\iota\nu}\rangle = \langle V\rangle = E/2$ είναι το κλασσικό *θεώρημα ισχυρότητας* (virial

theorem)[26] για τις κβαντικές μέσες τιμές. Αν Δx, Δp είναι οι αβεβαιότητες θέσης και ορμής στην n – οστή κατάσταση

$$\Delta x\,\Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\,,\quad n=0,1,2,\cdots$$

που είναι συνεπές με την αρχή της αβεβαιότητας.

Λύση: Από τις

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a+a^{+}\right),\ p=-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a-a^{+}\right)$$

υπολογίζονται οι μέσες τιμές

$$\langle x\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle a\rangle+\left\langle a^{+}\right\rangle\right)=0,\ \langle p\rangle=-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\langle a\rangle-\left\langle a^{+}\right\rangle\right)=0$$

αφού

$$\langle a\rangle=\langle n|a|n\rangle=\sqrt{n}\,\langle n|n-1\rangle=0\,,\quad \left\langle a^{+}\right\rangle=\langle n|a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}\,\langle n|n+1\rangle=0\,.$$

Οι μέσες τιμές των τετραγώνων

$$\begin{aligned}\left\langle x^2\right\rangle&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\left(a+a^{+}\right)^2\right\rangle\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\left\langle a^2\right\rangle+\left\langle\left(a^{+}\right)^2\right\rangle+\left\langle aa^{+}\right\rangle+\left\langle a^{+}a\right\rangle\right)\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\end{aligned}$$

---

[26] Οι *κλασσικές μέσες τιμές* σε μια πλήρη ταλάντωση ολικής ενέργειας E με την (4.52) είναι

$$\left\langle E_{\kappa\iota\nu}\right\rangle=\frac{m}{2}\left\langle x'^2\right\rangle=\frac{m}{2}\int_{-x_0}^{+x_0}dx\,x'^2\,P_{\kappa\lambda}(x)=\frac{m}{2}\int_{-x_0}^{+x_0}dx\left(\omega\sqrt{x_0^2-x^2}\right)^2\frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2-x^2}}$$

$$=\frac{m\omega^2}{2\pi}\int_{-x_0}^{+x_0}dx\,\sqrt{x_0^2-x^2}=\frac{m\omega^2x_0^2}{2\pi}\int_{-1}^{+1}dx\,\sqrt{1-x^2}=\frac{m\omega^2x_0^2}{4}=\frac{E}{2}$$

και

$$\langle V\rangle=\frac{m}{2}\left\langle x^2\right\rangle=\frac{m\omega^2}{2}\int_{-x_0}^{+x_0}dx\,x^2\,P_{\kappa\lambda}(x)=\frac{m\omega^2}{2}\int_{-x_0}^{+x_0}dx\,x^2\,\frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2-x^2}}$$

$$=\frac{m\omega^2x_0^2}{2\pi}\int_{-1}^{+1}dx\,\frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}}=\frac{m\omega^2x_0^2}{4}=\frac{E}{2}.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\begin{aligned}\langle p^2\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\langle\left(a-a^+\right)^2\right\rangle \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\langle\left(aa^+ - a^+a\right)\right\rangle \\ &= \frac{m\hbar\omega}{2}\left(2\langle a^+a\rangle + 1\right) \\ &= m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

προκύπτουν από τις

$$\langle a^2\rangle = \langle n|a^2|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|a|n-1\rangle = 0\,,\ \left\langle\left(a^+\right)^2\right\rangle = \langle n|\left(a^+\right)^2|n\rangle = 0\,,$$

$$\langle aa^+\rangle = \langle n|aa^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|a|n+1\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle\,,$$

$$\langle a^+a\rangle = \langle n|\left(aa^+ - 1\right)|n\rangle = n+1-1 = n\quad,$$

ώστε

$$\langle E_{\kappa\iota\nu}\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} = \frac{m\hbar\omega}{2m}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}\,,$$

$$\langle V\rangle = \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2} = \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}$$

και $\Delta x\,\Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$.

Άσκηση 13. Να επαληθευθεί η λύση $\psi_0(x) = \mathrm{A}_0\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$, $x\in(-\infty,+\infty)$, της εξίσωσης Schrödinger για σωμάτιο μάζας m στο δυναμικό απλού αρμονικού ταλαντωτή $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Να βρείτε την ενέργεια E, την σταθερά κανονικοποίησης A_0 και να σχεδιάσετε σε ένα διάγραμμα την $\psi_0(x)$ υποδεικνύοντας τις τιμές του x όπου $\psi_0''(x) = 0$. Να σχεδιάσετε, επίσης, την δυναμική ενέργεια, την ολική ενέργεια και να υποδείξετε την περιοχή όπου το σωμάτιο είναι κλασσικά εντοπισμένο. Ποιές είναι οι μέσες τιμές της δυναμικής και κινητικής ενέργειας;

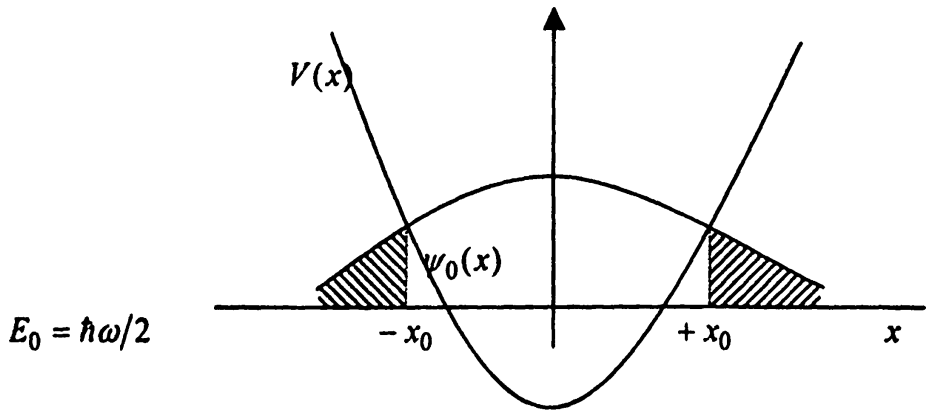
Λύση: Η αντικατάσταση της $\psi_0(x)$ στην εξίσωση Schrödinger προκύπτουν οι τιμές των E, A_0. Από την $\psi_0''(x) = 0$ έχουμε $x = \pm x_0 = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, ακριβώς στα σημεία

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

εριορισμού της κλασσικής ταλαντωτικής κίνησης. Η δυναμική ενέργεια του σωματίου $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ και η ολική ενέργεια $E_0=\frac{\hbar\omega}{2}$ είναι η ιδιοτιμή της $\psi_0(x)$. Η περιοχή $(-x_0,+x_0)$ όπου κινείται το κλασσικό σωμάτιο υπολογίζεται από την εξίσωση $\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{\hbar\omega}{2}\Leftrightarrow x=\pm x_0$ ενώ υπολογίζονται οι μέσες τιμές της δυναμικής και κινητικής ενέργειας στην $\psi_0(x)$

$$\langle V\rangle=\frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle=\frac{\hbar\omega}{4}=\frac{E_0}{2} \text{ και } E_{\kappa\iota\nu}=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}=\frac{1}{2m}\frac{m\hbar\omega}{2}=\frac{\hbar\omega}{4}=\frac{E_0}{2}$$

ε συμφωνία με το θεώρημα ισχυρότητας.



Άσκηση 14. Να δείξετε ότι η εξάρτηση από την συχνότητα ω των τελεστών καταστροφής, δημιουργίας θέσης και ορμής στην *εικόνα Heisenberg της κβαντικής* (Κεφ. 4.1.1.) είναι

$$a(t)=a\exp(-i\omega t),\ a^+(t)=a^+\exp(+i\omega t),$$

$$x(t)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a\exp(-i\omega t)+a^+\exp(+i\omega t)\right).$$

$$p(t)=-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a\exp(-i\omega t)-a^+\exp(+i\omega t)\right)$$

Λύση: Με αντικατάσταση του μεταθέτη

$$[H,a]=\hbar\omega\left(a^+aa-aa^+a\right)=-\hbar\omega\left[a^+,a\right]a=-\hbar\omega a$$

ην γενική σχέση (4.11) $\frac{dA(t)}{dt}=-\frac{i}{\hbar}[A(t),H]$, όπου ο χρονικά εξαρτημένος τελεστής είναι

$$A(t)=\exp(+iHt/\hbar)A\exp(-iHt/\hbar),$$

:ν $A=a$ προκύπτει η σχέση για τον $a(t)$, κλπ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Άσκηση 15. Ένα ακόμη επιλύσιμο πρόβλημα είναι αυτό του *μετατοπισμένου αρμονικού ταλαντωτή*, π.χ. παρουσία σταθερού ηλεκτρικού πεδίου F, που δίνει τον επιπλέον όρο eFx στην Χαμιλτονιανή H. Η Χαμιλτονιανή στην περίπτωση αυτή γράφεται

$$H = \hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)+\lambda\left(a+a^+\right),\quad \lambda = eF\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Να δειχθεί ότι διαγωνοποιείται ακριβώς με εύρεση ιδιοτιμών-ιδιοσυναρτήσεων.

Λύση: Με την εισαγωγή των μετατοπισμένων τελεστών καταστροφής και δημιουργίας

$$A = a+\frac{\lambda}{\hbar\omega},\ A^+ = a^+ + \frac{\lambda}{\hbar\omega},$$

και

$$\left[A,A^+\right]=\left[a+\frac{\lambda}{\hbar\omega},a^+ + \frac{\lambda}{\hbar\omega}\right]=1$$

$$\left[A,A^+\right]=0\,,\left[A^+,A\right]=0$$

αν λύσουμε ως προς a,a^+ η Χαμιλτονιανή

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)+\lambda\left(a+a^+\right)\\ &= \hbar\omega\left(A^+-\frac{\lambda}{\hbar\omega}\right)\left(A-\frac{\lambda}{\hbar\omega}\right)+\frac{\hbar\omega}{2}+\lambda\left(A+A^+-\frac{2\lambda}{\hbar\omega}\right)\\ &= \hbar\omega\left(A^+A+\frac{1}{2}\right)-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\end{aligned}$$

είναι σε *διαγώνια μορφή* με ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις από τις

$$H|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega},$$

$$|n\rangle = \frac{\left(a^+\right)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,\quad n=0,1,2,\cdots$$

Παρατηρούμε πως από τις ιδιοτιμές παρουσία του σταθερού ηλεκτρικού πεδίου F

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega},\ n=0,1,2,\cdots,$$

αφαιρείται ένας σταθερός όρος ανάλογος του $\lambda^2 \propto F^2$. Ο τελεστής θέσης γίνεται

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(A\exp(-i\omega t)+A^+\exp(+i\omega t)-\frac{2\lambda}{\hbar\omega}\right)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και το σύστημα (ελατήριο σταθεράς K) έχει *νέα θέση ισορροπίας*

$$\bar{x} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{2\lambda}{\hbar\omega} = -\frac{eF}{K}\,,\; K = m\omega^2$$

σε σχέση με τον αρχικό ταλαντωτή. Ο μετατοπισμένος απλός αρμονικός ταλαντωτής ταλαντώνεται με την ίδια συχνότητα γύρω από την νέα θέση ισορροπίας $\bar{x}$ με παρόμοιες κβαντισμένες ταλαντώσεις[27].

4.5. Χρονική εξέλιξη σε σύστημα δύο καταστάσεων- φαινόμενο Ζήνωνα

Δίνεται η Χαμιλτονιανή μήτρα $H = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix}$ στην βάση $|0\rangle, |1\rangle$. Οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις της είναι

$$E_\pm = \pm\epsilon\;,\quad |\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}\;. \tag{4.88}$$

Η μήτρα είναι διαγώνια στην βάση $|\pm\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} +\epsilon & 0 \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ll} +\epsilon & |+\rangle \\ \hline -\epsilon & |-\rangle \\ \hline \end{array}$$

και η χρονικά εξαρτημένη κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί από τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= c_+ e^{-iE_+ t/\hbar}|+\rangle + c_- e^{-iE_- t/\hbar}|-\rangle \\ &= c_+ e^{-i\omega t}|+\rangle + c_- e^{+i\omega t}|-\rangle\;,\quad \omega = \epsilon/\hbar\,, \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow |\Psi(t)\rangle = \frac{\left(c_+ e^{-i\omega t} + c_- e^{+i\omega t}\right)}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{\left(c_+ e^{-i\omega t} - c_- e^{+i\omega t}\right)}{\sqrt{2}}|1\rangle\,. \tag{4.89}$$

- Η $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$ δίνεται από το ανάπτυγμα της μοναδιαίας *μήτρας χρονικής εξέλιξης*

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(-iHt/\hbar) = 1 - iHt/\hbar + (iHt/\hbar)^2/2! - (iHt/\hbar)^3/3! + \cdots \\ &= \left[1 - \frac{(Ht/\hbar)^2}{2!} + \frac{(Ht/\hbar)^4}{4!} - \cdots\right] - i\left[(Ht/\hbar) - \frac{(Ht/\hbar)^3}{3!} + \frac{(Ht/\hbar)^5}{5!} - \cdots\right]. \end{aligned}$$

[27] Το ίδιο αποτέλεσμα προκύπτει στον χώρο των θέσεων με την αντικατάσταση $x \to x - \bar{x}$ στην H .

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Επειδή για τις δυνάμεις της συγκεκριμένης μήτρας ισχύουν οι σχέσεις

$$H^{2n} = \epsilon^{2n}\, 1 = \epsilon^{2n}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ H^{2n+1} = \epsilon^{2n}\, H = \epsilon^{2n+1}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad n = 0,1,2,\cdots$$

ο μοναδιαίος τελεστής $U(t)$ στην αρχική βάση $|0\rangle, |1\rangle$ γράφεται

$$U(t) = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{(\omega t)^2}{2!} + \dfrac{(\omega t)^4}{4!} - \cdots & -i\left[(\omega t) - \dfrac{(\omega t)^3}{3!} + \dfrac{(\omega t)^5}{5!} - \cdots\right] \\ -i\left[(\omega t) - \dfrac{(\omega t)^3}{3!} + \dfrac{(\omega t)^5}{5!} - \cdots\right] & 1 - \dfrac{(\omega t)^2}{2!} + \dfrac{(\omega t)^4}{4!} - \cdots \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow U(t) = \begin{pmatrix} \cos\omega t & -i\sin\omega t \\ -i\sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}$$

ή $$U(t) = \cos\omega t\,|0\rangle\langle 0| - i\sin\omega t\,|0\rangle\langle 1| - i\sin\omega t\,|1\rangle\langle 0| + \cos\omega t\,|1\rangle\langle 1| \ . \tag{4.90}$$

Από τα στοιχεία μήτρας

$$U_{++}(t) = \langle +|U(t)|+\rangle = \langle +|e^{-iHt/\hbar}|+\rangle = \langle +|e^{-iE_+ t/\hbar}|+\rangle = e^{-i\omega t}$$

$$U_{+-}(t) = \langle +|U(t)|-\rangle = \langle +|e^{-iHt/\hbar}|-\rangle = 0$$

$$U_{-+}(t) = \langle -|U(t)|+\rangle = \langle -|e^{-iHt/\hbar}|+\rangle = 0$$

$$U_{--}(t) = \langle -|U(t)|-\rangle = \langle -|e^{-iHt/\hbar}|-\rangle = \langle -|e^{-iE_- t/\hbar}|-\rangle = e^{+i\omega t}$$

είναι διαγώνιος στην βάση $|\pm\rangle$

$$U(t) = e^{-i\omega t}|+\rangle\langle +| + e^{+i\omega t}|-\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{+i\omega t} \end{pmatrix}. \tag{4.91}$$

➢ Όταν την αρχική στιγμή $t = 0 : |\Psi(0)\rangle = |0\rangle$

$$\frac{c_+ + c_-}{\sqrt{2}} = 1\,,\ \frac{c_+ - c_-}{\sqrt{2}} = 0$$

$$\Leftrightarrow c_+ = c_- = 1/\sqrt{2}$$

για κάθε χρονική στιγμή t από την (4.89), ή την $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$ από την ισοδύναμη μορφή (4.90),

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\omega t\,|0\rangle - i\sin\omega t\,|1\rangle\ ,\quad \omega = \epsilon/\hbar \ . \tag{4.92}$$

Η πιθανότητα παραμονής στην αρχική κατάσταση $|0\rangle$ είναι $P_0 = \cos^2\omega t$ ενώ η *πιθανότητα μετάβασης στην* $|1\rangle$ *είναι* $P_1 = \sin^2\omega t$ [28].

[28] Η ταλαντωνόμενη πιθανότητα $P_1 = \sin^2\omega t$ μηδενίζεται στους χρόνους $t = 2n\pi/\omega$, $n = 1,2,\cdots$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

➢ Αν όμως το σύστημα την χρονική στιγμή T μετρηθεί ισοδύναμα[29] σε πολλά διακριτά χρονικά βήματα $\Delta t = T/N$, δηλαδή με *στροβοσκοπικό τρόπο*, οι αντίστοιχες πιθανότητες[30] είναι

$$\begin{aligned} &\Delta t: \quad \sin^2 \omega\Delta t \\ &2\Delta t: \quad \sin^4 \omega\Delta t \\ &\cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ &T = N\Delta t: \quad \sin^{2N} \omega\Delta t \approx \left(\frac{\omega T}{N}\right)^{2N} \to 0 \end{aligned} \tag{4.93}$$

και παρατηρούμε πως η πιθανότητα μετάβασης στην $|1\rangle$ την χρονική στιγμή T τείνει στο μηδέν. Το σύστημα σε *διαδοχικές μετρήσεις* παραμένει στη αρχική κατάσταση $|0\rangle$ ενώ σε *μιά μόνο μέτρηση* έχει πεπερασμένη πιθανότητα $\sin^2 \omega T$ μετάβασης στην $|1\rangle$ την χρονική στιγμή T εκτός από ορισμένες τιμές[31]. Αυτό είναι το *κβαντικό φαινόμενο του Ζήνωνα γνωστό και ως 'φαινόμενο του φύλακα'*[32], όπου πολλές επαναλαμβανόμενες μετρήσεις αφήνουν το σύστημα στην αρχική κατάσταση.

➢ Αν μια κατάσταση γραφεί $|\alpha\rangle = \cos\alpha|0\rangle + \sin\alpha|1\rangle$, $\alpha \in \Re$, με εσωτερικό γινόμενο $\langle\alpha'|\alpha''\rangle = \cos\alpha'\cos\alpha'' + \sin\alpha'\sin\alpha'' = \cos(\alpha' - \alpha'')$ οι καταστάσεις βάσης είναι $|0\rangle = \cos 0\,|0\rangle + \sin 0\,|1\rangle = |0\rangle$, $|\pi/2\rangle = \cos\pi/2|0\rangle + \sin\pi/2\,|1\rangle = |1\rangle$. Αν μετρηθούν διαδοχικά οι τελεστές $P_n = |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|$, $\alpha_n = n\dfrac{\pi}{2N}$, $n = 1, 2, \cdots, N$:

$$P_1|0\rangle = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|0\rangle = \cos\left(\frac{\pi}{2N} - 0\right)|\alpha_1\rangle = \cos\frac{\pi}{2N}|\alpha_1\rangle$$

$$P_2 P_1|0\rangle = \cos\frac{\pi}{2N}|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle = \cos\frac{\pi}{2N}\cos\left(2\frac{\pi}{2N} - \frac{\pi}{2N}\right)|\alpha_2\rangle = \cos^2\frac{\pi}{2N}|\alpha_2\rangle$$

$$\cdots$$

---

[29] Υπενθυμίζεται πως στην μέτρηση μιας φυσικής μεταβλητής A το μόνο δυνατό αποτέλεσμα που μπορεί να προκύψει είναι μια ιδιοτιμή του αντίστοιχου τελεστή. Όταν ένα σύστημα περιγράφεται από την $|\Psi(t)\rangle$ επαναλαμβανόμενες μετρήσεις ενός παρατηρήσιμου μεγέθους A χαρακτηρίζονται από την μέση τιμή $\langle A\rangle$.

[30] Η πιθανότητα σε επαναλαμβανόμενες ανεξάρτητες μετρήσεις είναι ίση με το γινόμενο των πιθανοτήτων.

[31] $T = 2n\pi/\omega$, $n = 1, 2, \cdots$.

[32] Σαν να παρατηρούμε (μετρούμε) *συνεχώς* ένα φαγητό που βράζει και αυτό δεν βράζει ποτέ! Όμως, τα φαγητά στον κλασσικό κόσμο βράζουν, ανεξαρτήτως αν τα παρατηρούμε ή όχι.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$P_N P_{N-1} \cdots P_2 P_1 |0\rangle = \cos^N \frac{\pi}{2N} |\alpha_N\rangle \tag{4.94}$$

το σύστημα είναι κάθε φορά στην κατάσταση $|\alpha_n\rangle$, $n = 1, 2, \cdots, N$. Η πιθανότητα το αποτέλεσμα να είναι μονάδα για αρκετά μεγάλο N δίνεται από τον ασυμπτωτικό τύπο για $N \to \infty$: $\cos^N \frac{\pi}{2N} \approx 1 - N\left(\frac{\pi}{2N}\right)^2$. Παρατηρούμε πως η κατάσταση $|0\rangle$ μετά από N *διαδοχικές μετρήσεις* μεταβαίνει στην κατάσταση $|1\rangle$ με πιθανότητα επιτυχίας *αυθαίρετα κοντά στην μονάδα*[33] αφού

$$P_N P_{N-1} \cdots P_2 P_1 |0\rangle = \cos^N \frac{\pi}{2N} |\alpha_N\rangle \approx |\alpha_N\rangle = \left|N\frac{\pi}{2N}\right\rangle = |\pi/2\rangle = |1\rangle \tag{4.95}$$

ενώ η πιθανότητα είναι μηδενική *σε μια μέτρηση*

$$P_N|0\rangle = |\alpha_N\rangle\langle\alpha_N|0\rangle = \cos\left(N\frac{\pi}{2N} - 0\right)|\alpha_N\rangle = \cos\frac{\pi}{2}|1\rangle = 0\,. \tag{4.96}$$

[33] Το παράδειγμα αυτό μπορεί να θεωρηθεί ως μια διαδικασία *'ανάστασης της γάτας του Schrödinger'* που, δυστυχώς, δεν είναι υλοποιήσιμη στην πράξη αφού απαιτούνται οι κατάλληλες συσκευές που να αναγνωρίζουν τις ενδιάμεσες καταστάσεις $|\alpha_n\rangle$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

'όσο περισσότερο σκέφτομαι το φυσικό μέρος της θεωρίας του Schrödinger τόσο λιγότερο ελκυστικό μου φαίνεται'

W. Heisenberg

Η επιτυχία της κβαντικής φυσικής στην περιγραφή του μικρόκοσμου υλοποιείται με το απλούστερο παράδειγμα του ατόμου του υδρογόνου όπου η εξίσωση Schrödinger επιλύεται ακριβώς στο δυναμικό Coulomb $V(r) = -e^2/r$. Το δυναμικό αυτό είναι ακτινικής μορφής (κεντρικό ή σφαιρικά συμμετρικό $V(\vec{r}) = V(r)$ αφού εξαρτάται μόνο από την ακτινική απόσταση $r = |\vec{r}|$) ενώ το πρόβλημα σε σφαιρικές συντεταγμένες διαχωρίζεται σε γωνιακό και ακτινικό μέρος που επιλύονται ανεξάρτητα.

5.1. Η τρισδιάστατη εξίσωση Schrodinger

Η ρεαλιστική τρισδιάστατη εξίσωση Schrödinger σε ορισμένες περιπτώσεις ανάγεται σε μονοδιάστατα προβλήματα με την *μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών*. Αυτό συμβαίνει όταν το τρισδιάστατο δυναμικό μπορεί να γραφεί ως άθροισμα συναρτήσεων μιας μεταβλητής $V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$ οπότε η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger διασπάται σε τρεις μονοδιάστατες εξισώσεις στις συντεταγμένες x, y, z με δυναμικά $V_1(x), V_2(y), V_3(z)$, αντίστοιχα. Η πλήρης λύση της τρισδιάστατης εξίσωσης αποτελείται από ιδιοσυναρτήσεις που είναι απλώς το *γινόμενο* των λύσεων της κάθε μίας μονοδιάστατης εξίσωσης (έχουμε επιλύσει αρκετές περιπτώσεις στα προηγούμενα κεφάλαια)

$$\psi(\vec{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \tag{5.1}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

και ιδιοτιμές το *άθροισμα*

$$E = E_1 + E_2 + E_3 . \tag{5.2}$$

Στην συνέχεια θα εξετάσουμε: (i) σωμάτιο σε 'κουτί' με δυναμικό $V(\vec{r}) = 0$ εντός και ∞ εκτός που αποτελεί γενίκευση του απειρόβαθου πηγαδιού (Κεφ.2, A1) σε οποιαδήποτε διάσταση και (ii) την επίσης επιλύσιμη περίπτωση σωματίου σε κεντρικό δυναμικό $V(\vec{r}) = V(r)$ που εξαρτάται μόνο από την ακτινική απόσταση $r = |\vec{r}|$.

Υπενθυμίζουμε τις παρακάτω γενικεύσεις στον τρισδιάστατο χώρο:

- Η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο μάζας m $i\hbar \dfrac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(\vec{r},t)$ γράφεται με τον Χαμιλτονιανό τελεστή

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) . \tag{5.3}$$

- Όπως στην μονοδιάστατη περίπτωση όταν το δυναμικό $V(\vec{r})$ δεν εξαρτάται από τον χρόνο διαχωρίζεται σε χρονικά εξαρτημένο και χρονικά ανεξάρτητο μέρος με $\Psi(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(\vec{r})$, όπου η $\psi(\vec{r})$ ικανοποιεί την τρισδιάστατη *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) . \tag{5.4}$$

- Επιπλέον, όταν $V = V^*$ ισχύει η εξίσωση συνέχειας $\dfrac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$ με πυκνότητα πιθανότητας

$$P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 \tag{5.5}$$

και ρεύμα πιθανότητας, αντίστοιχα,

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\Psi^*(\vec{r},t)\right). \tag{5.6}$$

- Οι κανονικοποιημένες λύσεις επίπεδου κύματος για το ελεύθερο σωμάτιο με την συνθήκη (2.54) $\psi(x) = \psi(x+L), \psi(y) = \psi(y+L), \psi(z) = \psi(z+L)$ είναι

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2(2\pi/L)^2}{2m}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right), n_1, n_2, n_3 \in Z , \tag{5.7}$$

με πυκνότητα και ρεύμα πιθανότητας

$$P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{1}{L^3}, \quad \vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{L^3 m}\vec{k} = \frac{\hbar}{L^3 m}\frac{2\pi}{L}\left(n_1\vec{e}_x + n_2\vec{e}_y + n_3\vec{e}_z\right) . \tag{5.8}$$

5.1.1. Μέθοδος χωρισμού μεταβλητών

Όταν το δυναμικό μπορεί να γραφεί ως άθροισμα συναρτήσεων μιας μεταβλητής $V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$ η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger είναι

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)\right]\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z)$$

$$\Leftrightarrow \left[H_x + H_y + H_z\right]\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z) \tag{5.9}$$

όπου

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V_1(x),\ H_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+V_2(y),\ H_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+V_3(z). \tag{5.10}$$

Με αντικατάσταση της $\psi(\vec{r}) = \psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ και διαίρεση με το ίδιο γινόμενο η (5.9) λαμβάνει την μορφή

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2}+V_1(x)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{\partial^2\psi_2(x)}{\partial y^2}+V_2(y)\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_3(z)}\frac{\partial^2\psi_3(z)}{\partial z^2}+V_3(z) = E.\end{aligned} \tag{5.11}$$

Επειδή η ισότητα ισχύει για $\forall x,y,z$ ο κάθε όρος στο άθροισμα αφορά διαφορετική μεταβλητή που πρέπει απαραιτήτως να ισούται με μια σταθερά για να δώσει το άθροισμα την E. Με κατάλληλη επιλογή αυτών των *σταθερών διαχωρισμού* E_1, E_2, E_3 η εξίσωση διασπάται στις μονοδιάστατες εξισώσεις Schrödinger

$$\begin{aligned}H_x\,\psi_1(x) &= E_1\,\psi_1(x)\\ H_y\,\psi_2(y) &= E_2\,\psi_2(y)\\ H_z\,\psi_3(z) &= E_3\,\psi_3(z)\end{aligned} \tag{5.12}$$

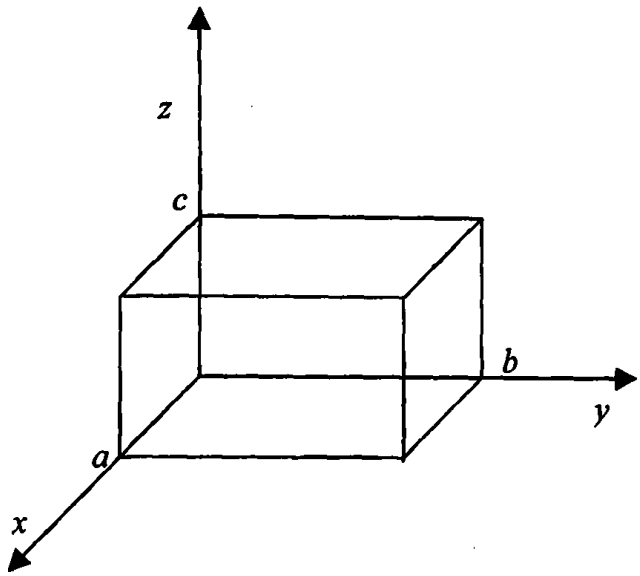
που γράφονται ισοδύναμα

$$\begin{aligned}\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V_1(x))\,\psi_1(x) = 0\\ \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - V_2(y))\,\psi_2(x) = 0\\ \psi_3'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_3 - V_3(z))\,\psi_3(x) = 0\end{aligned} \tag{5.13}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

με $E = E_1 + E_2 + E_3$.

5.1.2. Σωμάτιο σε 'κουτί'



Το σωμάτιο είναι ελεύθερο με μηδενική τιμή του δυναμικού $V=0$ εντός του κουτιού $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$ ενώ οπουδήποτε αλλού $V = \infty$. Αυτό το πρόβλημα αποτελεί γενίκευση του απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού στις τρεις διαστάσεις, όπου $V=0$ εντός και $V = \infty$ εκτός, ενώ θεωρείται μια πρώτη προσέγγιση π.χ. των ηλεκτρονίων στα μέταλλα με τον κρύσταλλο ως ένα κουτί διαστάσεων *a, b, c*. Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrodinger για το σωμάτιο εντός του κουτιού γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{5.14}$$

και επειδή αποτελεί μια τετριμμένη περίπτωση της μεθόδου χωρισμού των μεταβλητών με $V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) = V_1(x) = V_2(y) = V_3(z) = 0$, επιδέχεται ως λύση το γινόμενο

$$\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z). \tag{5.15}$$

Με αντικατάσταση στην (5.14) προκύπτουν οι μονοδιάστατες εξισώσεις

$$\psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + k_2^2\psi_2 = 0, \quad \psi_3'' + k_3^2\psi_3 = 0 \tag{5.16}$$

με γνωστές λύσεις από την A1, Κεφ. 2 ώστε

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m}. \tag{5.17}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- Με τις οριακές συνθήκες της $\psi(x,y,z)$ στα όρια του κουτιού όπου μηδενίζονται οι ψ όπως στην A1 του Κεφ. 1, είναι εύκολο να δειχθεί ότι

$$k_1 = \frac{n_1\pi}{a}, \quad k_2 = \frac{n_2\pi}{b}, \quad k_3 = \frac{n_3\pi}{c}, \tag{5.18}$$

όπου n_1, n_2, n_3 είναι θετικοί ακέραιοι αριθμοί (όχι απαραιτήτως ίσοι).

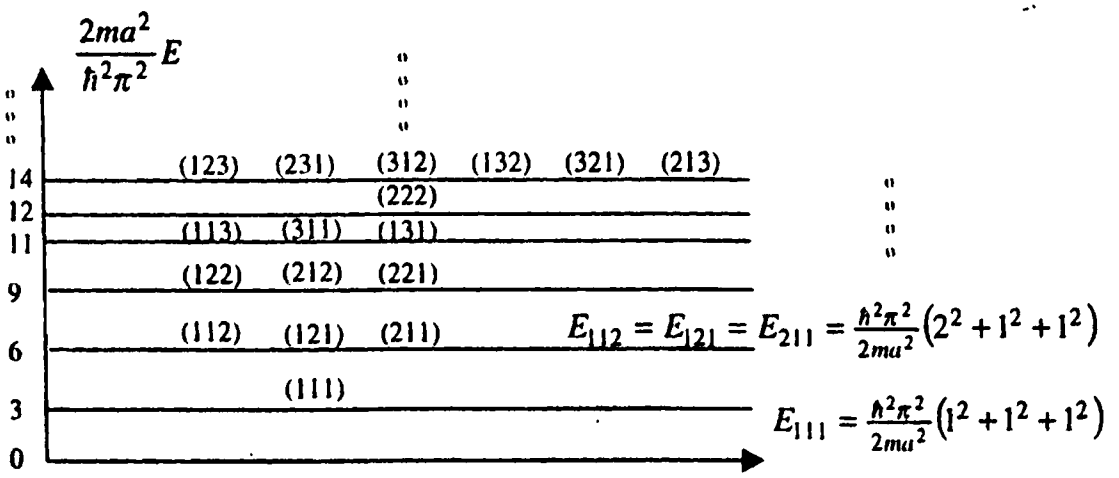
- Οι *κβαντικοί αριθμοί* n_1, n_2, n_3 καθορίζουν τις ιδιοτιμές- ιδιοσυναρτήσεις για σωμάτιο στο 'κουτί' με

$$E_{n_1,n_2,n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \cdots$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \psi_{n_1}(x)\,\psi_{n_2}(y)\,\psi_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c} \tag{5.19}$$

- Οι ιδιοτιμές E_{n_1,n_2,n_3} φαίνονται στο σχήμα με τις τριάδες n_1, n_2, n_3 σε παρενθέσεις για 'κυβικό κουτί' πλευράς a όπου οι ενεργειακές στάθμες (ιδιοτιμές) του σωματίου δίνονται από την

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \cdots \tag{5.20}$$



- Παρατηρούμε πως σε δεδομένη τιμή της E είναι δυνατόν να αντιστοιχούν περισσότερα του ενός σύνολα τιμών των κβαντικών αριθμών n_1, n_2, n_3. Αυτό σημαίνει πως περισσότερες από μια *γραμμικώς ανεξάρτητες* κυματοσυναρτήσεις ψ αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια E με *εκφυλισμό της ενέργειας*. Οι πρώτες 6 ενεργειακές στάθμες που φαίνονται στο σχήμα έχουν

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

εκφυλισμούς 1, 3, 3, 3, 1, 6, ... Π. χ. ο εκφυλισμός της τρίτης ενεργειακής στάθμης με $E = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ είναι τριπλός αφού οι ιδιοτιμές είναι $E_{122} = E_{212} = E_{221}$ ενώ οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι διαφορετικές

$$\psi_{122} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a} \neq \psi_{212} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}$$
$$\neq \psi_{221} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\sin\frac{\pi z}{a}. \tag{5.21}$$

- Ο *εκφυλισμός* συνδέεται με την *ύπαρξη συμμετρίας* σε ένα πρόβλημα ενώ αίρεται (φεύγει) όταν η συμμετρία 'θρυμματισθεί'. Στο πρόβλημα του σωματίου σε 'κουτί' επειδή $H = H_x + H_y + H_z$ με μεταθέτες $[H_x,H_y]=0$, $[H_x,H_z]=0$, κλπ. που μηδενίζονται, υπάρχει μεγάλη συμμετρία με αποτέλεσμα να παρατηρείται έντονος εκφυλισμός. Η συμμετρία στην μία διάσταση είναι προφανώς μικρότερη και ο εκφυλισμός μικρότερος, π.χ. ο εκφυλισμός απουσιάζει τελείως στο διακριτό ενεργειακό φάσμα (δέσμιες καταστάσεις) του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού. Όμως, για συνεχή φάσματα υπάρχει εκφυλισμός ακόμη και στην μία διάσταση, π.χ. ο διπλός εκφυλισμός για τις ιδιοτιμές του τελεστή της ορμής στο ελεύθερο σωμάτιο όπου οι ψ_p, ψ_{-p} αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια $p^2/2m$ αλλά σε θετική ή αρνητική ορμή (Κεφ. 2.4, Άσκηση 5).
- Όταν το 'κουτί' τοποθετηθεί στο $[-a/2,+a/2], [-b/2,+b/2], [-c/2,+c/2]$ οι λύσεις είναι cos ή sin *με περιττούς ακέραιους για την άρτια cos* και *άρτιους ακέραιους για την περιττή sin,* αντίστοιχα (Κεφ. 4.1, Άσκηση 6). Στην περίπτωση αυτή μπορεί να δειχθεί ότι η *ισοτιμία της ολικής* ψ που εκφράζεται με το γινόμενο $\psi = \psi_1\psi_2\psi_3$ είναι *άρτια όταν το* $n_1 + n_2 + n_3$ *είναι περιττό* αφού περιττό άθροισμα τριών ακεραίων σημαίνει ότι: (i) και οι τρεις είναι περιττοί ώστε οι ψ_1,ψ_2,ψ_3 είναι άρτιες με γινόμενο ψ άρτια, ή (ii) ο ένας είναι περιττός και οι δύο άρτιοι ώστε αν η ψ_1 είναι άρτια και οι ψ_2,ψ_3 περιττές το γινόμενο ψ είναι άρτια. Με παρόμοια συζήτηση η ισοτιμία της $\psi = \psi_1\psi_2\psi_3$ είναι *περιττή όταν το* $n_1 + n_2 + n_3$ *είναι άρτιος.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αριθμητική εφαρμογή: Να εκτιμηθεί προσεγγιστικά η τιμή του αθροίσματος $n_1^2+n_2^2+n_3^2$ ώστε η ενέργεια ηλεκτρονίου μάζας $m_e = 9.1\times10^{-31}Kg$ σε 'κουτί' μεγέθους της ακτίνας Bohr $a \approx 5.3\times10^{-11}m$ να είναι $5eV$. Όταν ένα ηλεκτρόνιο βρεθεί σε ένα *μακροσκοπικό 'κουτί'* με $a = 4m$ ποια είναι η ενεργειακή διαφορά $E_{2,1,1}-E_{1,1,1}$; Να επαναλάβετε τον υπολογισμό σας για ένα ηλεκτρόνιο σε *μικροσκοπικό 'κουτί'* ατομικών διαστάσεων με $a = 40nm$.

Άσκηση1. Σωμάτιο μάζας m περιορίζεται σε *διδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι* δυναμικού με $V(x,y)=0$ στα όρια $0<x<a,\ 0<y<b,\ a,b=const.$ και $V(x,y)=\infty$ αλλού. Να βρείτε τις ιδιοσυναρτήσεις και τις αντίστοιχες ενεργειακές στάθμες. Ποιος είναι ο εκφυλισμός της βασικής και της πρώτης διεγερμένης στάθμης όταν $a=b$;

Λύση:
$$E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_1^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_2^2,$$

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a},\ n_1,n_2 = 1,2,3,\cdots.$$

5.2. Κεντρικό δυναμικό και η θεωρία της στροφορμής

Όταν το δυναμικό $V(\vec{r})=V(x,y,z)$ εξαρτάται *μόνο από την ακτινική απόσταση* r, ώστε $V(\vec{r})=V(r)$ και είναι ανεξάρτητο από τις γωνίες θ,ϕ, οι επιφάνειες σταθερού δυναμικού (ισοδυναμικές επιφάνειες) είναι ομόκεντρες σφαίρες με την δύναμη $\vec{F}=-\vec{\nabla}V(r)=-\frac{\partial V(r)}{\partial r}\frac{\vec{r}}{r}$ παράλληλη στην διεύθυνση της θέσης $\vec{r}$. Επομένως η ροπή είναι μηδενική $\vec{r}\times\vec{F}=0$ ενώ η παράγωγος της στροφορμής $\vec{\ell}=\vec{r}\times\vec{p}$ που είναι ίση με την ροπή μηδενίζεται: $\frac{d\vec{\ell}}{dt}=\vec{r}\times\vec{F}=0$. Άρα, *στην κλασσική κίνηση σε κεντρικό δυναμικό η στροφορμή* $\vec{\ell}$ *διατηρείται* στον χρόνο. Ένα παράδειγμα *κεντρικού (ή σφαιρικά συμμετρικού) δυναμικού* αποτελεί το δυναμικό Coulomb $V(r)\propto 1/r$, όπως είναι το ελκτικό δυναμικό στο άτομο του υδρογόνου $V(r)=-e^2/r$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

5.2.1. Στροφορμή

Στην κβαντική η στροφορμή προκύπτει από το εξωτερικό γινόμενο $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ με αντικατάσταση των μεγεθών θέσης και ορμής από τους αντίστοιχους τελεστές $\vec{r} \to \vec{r}$ και $\vec{p} \to -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z\right)$.

- Οι συνιστώσες της στροφορμής ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z εκφράζονται συναρτήσει των $x, y, z, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$.
- Επειδή $(\ell_x\ell_y - \ell_y\ell_x)\psi(x,y,z) = i\hbar\ell_z\,\psi(x,y,z)$ για κάθε παραγωγίσιμη συνάρτηση ψ ο βασικός μεταθέτης είναι $[\ell_x, \ell_y] = i\hbar\ell_z$ και παρομοίως (κυκλικά) οι μεταθέτες $[\ell_y, \ell_z] = i\hbar\ell_x$, $[\ell_z, \ell_x] = i\hbar\ell_y$.
- Από την σχέση μεταξύ μεταθετών $[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$ προκύπτουν οι μεταθέτες

$$[\ell_x, \vec{\ell}^2] = [\ell_y, \vec{\ell}^2] = [\ell_z, \vec{\ell}^2] = 0 \tag{5.22}$$

με $\vec{\ell}^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2$.

- Από τα παραπάνω στην κβαντική $\vec{\ell} \times \vec{\ell} = i\hbar\vec{\ell}$.

Απόδειξη:

$$[\ell_x, \ell_y]\psi = \ell_x\ell_y\psi - \ell_y\ell_x\psi$$

$$= (-i\hbar)^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) - (-i\hbar)^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} + zx\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z}\right)$$

$$+\hbar^2\left(zy\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right)$$

$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} + yz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial x} + zx\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z} - zy\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} - x\frac{\partial\psi}{\partial y} - xz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial y}\right)$$

$$= i\hbar\left[-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi$$

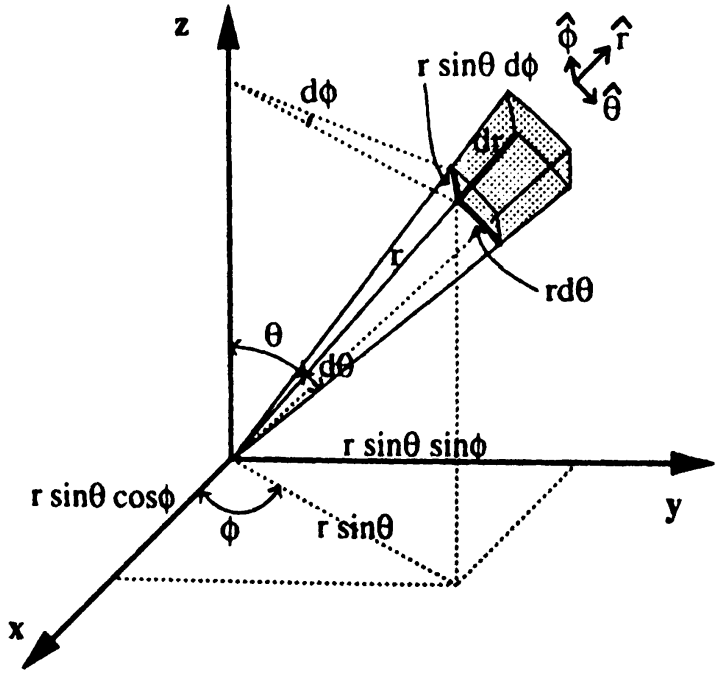
$$= i\hbar\ell_z\psi.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$
\begin{aligned}
[\ell_x, \vec{\ell}^2] &= [\ell_x, \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2] = [\ell_x, \ell_x^2] + [\ell_x, \ell_y^2] + [\ell_x, \ell_z^2] \\
&= 0 + [\ell_x, \ell_y]\ell_y + \ell_y[\ell_x, \ell_y] + [\ell_x, \ell_z]\ell_z + \ell_z[\ell_x, \ell_z] \\
&= i\hbar\ell_z\ell_y + i\hbar\ell_y\ell_z - i\hbar\ell_y\ell_z - i\hbar\ell_z\ell_y = 0 \\
\vec{\ell} \times \vec{\ell} &= (\ell_x\vec{e}_x + \ell_y\vec{e}_y + \ell_z\vec{e}_z) \times (\ell_x\vec{e}_x + \ell_y\vec{e}_y + \ell_z\vec{e}_z) \\
&= [\ell_x, \ell_y]\vec{e}_z + [\ell_y, \ell_z]\vec{e}_x + [\ell_z, \ell_x]\vec{e}_y \\
&= i\hbar\,(\ell_x\vec{e}_x + \ell_y\vec{e}_y + \ell_z\vec{e}_z) = i\hbar\vec{\ell} \quad .
\end{aligned}
$$

Οι ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z δεν μετατίθενται μεταξύ τους (δεν έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις άρα δεν είναι ταυτόχρονα μετρήσιμες) αλλά μόνο η κάθε μία από αυτές μετατίθεται με το τετράγωνο του μέτρου $\vec{\ell}^2$. Αφού *δεν υπάρχουν δύο συνιστώσες της στροφορμής* $\vec{\ell}$ *που να μετατίθενται* είναι αδύνατον να έχουμε μια κατάσταση όπου *περισσότερες της μιας* συνιστώσες της στροφορμής έχουν απολύτως καθορισμένες τιμές όπως στην κλασσική φυσική. Επομένως, για κεντρικό δυναμικό $V = V(r)$ οι κβαντικές καταστάσεις χαρακτηρίζονται από ορισμένο $\vec{\ell}^2$ και *μία* μόνο εκ των συνιστωσών της $\vec{\ell}$, π.χ. την ℓ_z, αφού το $\vec{\ell}^2$ μετατίθεται με τις συνιστώσες της $\vec{\ell}$. Άρα, *οι κβαντικές καταστάσεις για το γωνιακό μέρος καθορίζονται από τις ιδιοτιμές των τελεστών* $\vec{\ell}^2, \ell_z$, όπως θα δούμε με αντίστοιχους κβαντικούς αριθμούς $\ell = 0,1,2,\cdots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ και γράφονται $|\ell, m\rangle$.

Οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής $\vec{\ell}$ υπολογίζονται σε σφαιρικές πολικές



$$d^3\vec{r} = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} 0 \le r < \infty \\ 0 \le \theta \le \pi \\ 0 \le \phi \le 2\pi \end{aligned}\right\}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συντεταγμένες $\left(r,\theta,\phi,\frac{\partial}{\partial r},\frac{\partial}{\partial \theta},\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$:

- Από τον αντίστροφο μετασχηματισμό

$$\left.\begin{aligned} r^2 &= x^2+y^2+z^2 \\ \cos\theta &= \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{z}{r} \\ \tan\phi &= \frac{y}{x} \end{aligned}\right\} \qquad \left.\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned}\right\}$$

όπου ικανοποιούνται οι

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\frac{x}{r}=\sin\theta\cos\phi\,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial x}=\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,, \qquad \frac{\partial \phi}{\partial x}=-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}$$

$$\frac{\partial r}{\partial y}=\frac{y}{r}=\sin\theta\sin\phi\,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial y}=\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,, \qquad \frac{\partial \phi}{\partial y}=\frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}$$

$$\frac{\partial r}{\partial z}=\frac{z}{r}=\cos\theta\,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial z}=-\frac{1}{r}\sin\theta\,, \qquad \frac{\partial \phi}{\partial z}=0\,.$$

Από τις παραπάνω σχέσεις οι συνιστώσες της στροφορμής είναι

$$\begin{aligned} \ell_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \\ \ell_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta}-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \\ \ell_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \tag{5.23}$$

- Ισοδύναμα στο ορθοκανονικό σύστημα των σφαιρικών συντεταγμένων $\left(\hat{r},\hat{\theta},\hat{\phi}\right)$ από το σχήμα με $\vec{\nabla}=\frac{\partial}{\partial r}\hat{r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\hat{\theta}+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\hat{\phi}$ έχουμε

$$\left.\begin{aligned} \hat{r} &= \sin\theta\cos\phi\,\vec{e}_x+\sin\theta\sin\phi\,\vec{e}_y+\cos\theta\,\vec{e}_z \\ \hat{\theta} &= \cos\theta\cos\phi\,\vec{e}_x+\cos\theta\sin\phi\,\vec{e}_y-\sin\theta\,\vec{e}_z \\ \hat{\phi} &= -\sin\phi\,\vec{e}_x+\cos\phi\,\vec{e}_y \end{aligned}\right\}$$

οπότε η αντικατάσταση των $\left(\hat{r},\hat{\theta},\hat{\phi}\right)$ στην $\vec{\nabla}$ δίνει τις συνιστώσες ℓ_x,ℓ_y,ℓ_z στις σφαιρικές συντεταγμένες όπως στην (5.23).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

□ Από την (5.23) υπολογίζεται το μέτρο της στροφορμής στο τετράγωνο

$$\vec{\ell}^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 = -\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}. \tag{5.24}$$

Η (5.24) οδηγεί στο βασικό αποτέλεσμα όπου το γωνιακό μέρος του Λαπλασιανού τελεστή $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ εκφράζεται συναρτήσει του $\vec{\ell}^2$ με

$$\vec{\ell}^2 = -\hbar^2 \nabla^2_{\theta,\phi} \quad . \tag{5.25}$$

Η μορφή του $\nabla^2_{\theta,\phi}$ είναι παρόμοια με την (5.29) αν ληφθούν και εκεί οι σχετικές παράγωγοι.

5.2.2. Κεντρικό δυναμικό $V(r)$

Το πρόβλημα σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ λύνεται αν βασισθούμε:

1. Στην γραφή της Λαπλασιανής ∇^2 σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες.
2. Στην επαναληπτική εφαρμογή της μεθόδου χωρισμού των μεταβλητών που μετατρέπει τα 3-διάστατα προβλήματα σε μονοδιάστατα.

1. Η εξίσωση Schrodinger στην τρισδιάστατη μορφή γράφεται

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) \tag{5.26}$$

όπου η *Λαπλασιανή* ∇^2 στις *σφαιρικές συντεταγμένες* (r,θ,ϕ) να διαχωρίζεται σε ακτινικό και γωνιακό μέρος

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla^2_{\theta,\phi}, \tag{5.27}$$

με *ακτινική* συνιστώσα

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{5.28}$$

και *γωνιακή* συνιστώσα

$$\nabla^2_{\theta,\phi} = \nabla_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\nabla_\phi^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{5.29}$$

όπου

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\nabla_\theta^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right), \quad \nabla_\phi^2 = \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{5.30}$$

Είναι ιδιαίτερα σημαντικό ότι το γωνιακό μέρος εκφράζεται από το τετράγωνο του τελεστή της στροφορμής από την (5.25)

$$\nabla_{\theta,\phi}^2 = -\frac{\bar{\ell}^2}{\hbar^2}. \tag{5.31}$$

2. Η μέθοδος χωρισμού των μεταβλητών εφαρμόζεται στην 3-διάστατη εξίσωση Schrodinger με την αντικατάσταση

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi) \tag{5.32}$$

ώστε

$$\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\phi}^2\right)RY + k^2\,RY = 0 \tag{5.33}$$

πολ/ζοντας επί $\frac{r^2}{RY}$ αφού ο ∇_r^2 δρά μόνο στην $R(r)$ και ο $\nabla_{\theta,\phi}^2$ μόνο στην $Y(\theta,\phi)$

$$\frac{r^2}{R}\nabla_r^2 R + \frac{1}{Y}\nabla_{\theta,\phi}^2 Y + r^2k^2 = 0 \tag{5.34}$$

$$\Leftrightarrow \frac{r^2}{R}\nabla_r^2 R + r^2k^2 = -\frac{\nabla_{\theta,\phi}^2 \mathrm{Y}}{\mathrm{Y}} = \lambda, \tag{5.35}$$

όπου λ *είναι μια σταθερά διαχωρισμού* (το πρώτο μέλος εξαρτάται μόνο από την r και το δεύτερο μόνο από τις γωνίες θ,ϕ επομένως για να είναι ίσα πρέπει το καθένα να είναι ίσο με μια σταθερά λ). Επομένως, προκύπτουν δύο εξισώσεις, η ακτινική με μεταβλητή την ακτίνα r

'ακτινική' $$\nabla_r^2 R(r) + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R(r) = 0 \tag{5.36}$$

και η γωνιακή τις γωνίες θ,ϕ

'γωνιακή' $$\nabla_{\theta,\phi}^2 Y(\theta,\phi) + \lambda\,Y(\theta,\phi) = 0. \tag{5.37}$$

Θα ασχοληθούμε πρώτα μόνο με το γωνιακό μέρος (5.37) όπου μια ακόμη εφαρμογή της μεθόδου χωρισμού των μεταβλητών (ελπίζω να είναι πλέον γνωστή!)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{5.38}$$

αντικατάσταση στην (5.37) και διαίρεση με $\Theta\Phi$ δίνει

$$\Leftrightarrow \left(\nabla_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\nabla_\phi^2\right)\Theta\Phi + \lambda\,\Theta\Phi = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\Theta}\nabla_\theta^2\Theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{\Phi}\nabla_\phi^2\Phi + \lambda = 0 \tag{5.39}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sin^2\theta}{\Theta}\nabla_\theta^2\Theta + \lambda\sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi}\nabla_\phi^2\Phi = m^2$$

όπου m^2 *είναι η νέα (δεύτερη μετά την* λ*) σταθερά διαχωρισμού* (αφού το πρώτο μέλος εξαρτάται μόνο από την θ και το δεύτερο μόνο από την ϕ για να είναι ίσα πρέπει το καθένα πρέπει να ισούται με μια σταθερά, έστω m^2). Επομένως αντί της εξ. (5.37) αρκεί να επιλυθούν οι εξισώσεις για τις $\Theta(\theta)$ και $\Phi(\phi)$

$$\text{'}\textit{γωνιακή} - \theta\text{'} \quad \nabla_\theta^2\Theta(\theta) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = 0 \tag{5.40}$$

$$\text{'}\textit{γωνιακή} - \phi\text{'} \quad \nabla_\phi^2\Phi(\phi) + m^2\Phi(\phi) = 0\,. \tag{5.41}$$

Η κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ που θα προκύψει από την επίλυση των τριών εξισώσεων στο τρισδιάστατο πρόβλημα δίνεται από τις

$$\begin{aligned}\int d^3\vec{r}\;\psi^*(r,\theta,\phi)\psi(r,\theta,\phi) &= \int_0^\infty dr\, r^2\, R^*(r)R(r)\int d\Omega\, Y^*(\theta,\phi)Y(\theta,\phi)\\ &= \int_0^\infty dr\, r^2\, R^*(r)R(r)\int_0^\pi d\theta\sin\theta\;\Theta^*(\theta)\Theta(\theta)\int_0^{2\pi} d\phi\;\Phi^*(\phi)\Phi(\phi) = 1,\end{aligned} \tag{5.42}$$

όπου $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$, αφού στις σφαιρικές συντεταγμένες $r \in (0,\infty)$, $\theta \in (0,\pi)$, $\phi \in (0,2\pi)$. Η κανονικοποίηση μπορεί να γίνει ξεχωριστά για την κάθε μία μεταβλητή

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, R^*(r)R(r) = 1, \quad \int_0^\pi d\theta\sin\theta\;\Theta^*(\theta)\Theta(\theta) = 1, \quad \int_0^{2\pi} d\phi\;\Phi^*(\phi)\Phi(\phi) = 1. \tag{5.43}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

5.2.3. Λύση της γωνιακής εξίσωσης ως προς ϕ

Η εξίσωση (5.41) για την $\Phi(\phi)$

$$\nabla_\phi^2\Phi(\phi)+m^2\Phi(\phi)=0\,,\quad 0\le\phi\le 2\pi\,, \tag{5.44}$$

έχει την κανονικοποιημένη λύση

$$\Phi_m(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{5.45}$$

π.χ. το ηλεκτρόνιο είναι ένα τρέχον κύμα $e^{\pm im\phi}$ γύρω από τον πυρήνα, που το γράφουμε $e^{im\phi}$ με τον m να λαμβάνει *θετικές και αρνητικές* τιμές. Επιπλέον, η οριακή συνθήκη $\Phi_m(\phi)=\Phi_m(\phi+2\pi)$ οδηγεί στην κβάντωση των τιμών του m από την $e^{im2\pi}=1\Rightarrow m=0,\pm1,\pm2\cdots$. Η $\Phi_m(\phi)$ είναι κανονικοποιημένη αφού το ολοκλήρωμα κατά τα γνωστά είναι

$$\int_0^{2\pi}d\phi\;\Phi_m^*(\phi)\Phi_{m'}(\phi)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\phi\;e^{-i(m-m')\phi}=\delta_{m,m'}. \tag{5.46}$$

Η $z-$συνιστώσα του τελεστή της στροφορμής $\ell_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ από την (5.23) σύμφωνα με τα παραπάνω ικανοποιεί την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\ell_z\Phi_m(\phi)=\hbar m\,\Phi_m(\phi),\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{5.47}$$

με ιδιοτιμές τον ακέραιο *κβαντικό αριθμό* $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$ πολλαπλασιασμένο με την σταθερά του Planck $\hbar$. Παρατηρούμε πως αφενός προσδιορίσθηκε η μία (m) από τις δύο σταθερές διαχωρισμού και αφετέρου υπολογίσθηκαν οι τιμές $0,\pm\hbar,\pm2\hbar,\cdots$ που μπορεί να λάβει η ℓ_z συνιστώσα της στροφορμής.

5.2.4. Λύση της γωνιακής εξίσωσης ως προς θ

Η εξίσωση (5.40) που περιέχει την απροσδιόριστη ακόμη σταθερά διαχωρισμού λ

$$\nabla_\theta^2\Theta(\theta)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta)=0 \tag{5.48}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με την αντικατάσταση $\xi = \cos\theta$ και $\nabla_\theta^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})$ γίνεται η *συναφής εξίσωση Legendre*[1]

$$\left[(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\right]\Theta(\xi) = 0; \quad \xi \in [-1,+1] \tag{5.49}$$

που είναι *τριβάθμια*, ορίζοντας τον βαθμό κάθε όρου $x^n d^m/dx^m$ ως $d = n - m$. Αν πολλαπλασιάσουμε όλους τους όρους της παραπάνω εξίσωσης με $1-\xi^2$ οι βαθμοί των όρων που προκύπτουν είναι $-2,2,0,0,2,0,2,0$ (3 διαφορετικοί, οι $-2,0,2$). Οι τριβάθμιες εξισώσεις δεν είναι επιλύσιμες και για να επιλυθεί μια τέτοια εξίσωση με την μέθοδο των δυναμοσειρών πρέπει να μετατραπεί σε διβάθμια. Παρατηρούμε πως αν απουσίαζε ο όρος $m^2/(1-\xi^2)$ που απειρίζεται στα όρια $\xi = \pm 1$ θα είχαμε την *διβάθμια εξίσωση Legendre*

$$\left[(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \lambda\right]\Theta(\xi) = 0, \; \xi \in [-1,1], \tag{5.50}$$

που με δύο διαφορετικούς βαθμούς $-2, 0$ είναι επιλύσιμη.

Όπως και στην εξίσωση Hermite του αρμονικού ταλαντωτή (Κεφ. 4.4) βρίσκουμε πρώτα την ασυμπτωτική λύση της συναφούς εξίσωσης Legendre (αφού $\xi = \cos\theta$ εδώ τα όρια είναι στο $\xi = \pm 1$). Με την αντικατάσταση των $\Theta(\xi) = (1-\xi^2)^{s/2}F(\xi)$, Θ', Θ'' και διαίρεση των δύο μελών με τον ασυμπτωτικό όρο $(1-\xi^2)^{s/2}$ η συναφής Legendre γίνεται

$$(1-\xi^2)\,F''(\xi) - 2\xi(s+1)\,F'(\xi) + \left(\lambda - s(s+1) + \frac{s^2-m^2}{1-\xi^2}\right)F(\xi) = 0 \tag{5.51}$$

ενώ ο απειριζόμενος όρος φεύγει όταν $s = \pm|m|$. Άρα, η *ασυμπτωτική λύση* είναι

$$\Theta_{\pm 1}(\xi) = (1-\xi^2)^{\pm|m|/2} \tag{5.52}$$

και αφού η συναφής εξίσωση Legendre εξαρτάται μόνο από το m^2 θα αναζητήσουμε λύσεις θετικού $|m|$ (η λύση για $-|m|$ διαφέρει μόνο κατά μια πολλαπλασιαστική σταθερά). Επομένως, με την αντικατάσταση

---

[1] $\frac{\partial}{\partial\theta} = -\sin\theta\frac{\partial}{\partial\xi}$, $\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} = -\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + (1-\xi^2)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}$,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\Theta(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2} F(\xi) \tag{5.53}$$

λαμβάνεται (να ελεγχθεί!) η διβάθμια διαφορική εξίσωση

$$(1-\xi^2)\, F''(\xi) - 2\xi(|m|+1)\, F'(\xi) + (\lambda - |m|\,(|m|+1))\, F(\xi) = 0 \tag{5.54}$$

επιλύσιμη με την μέθοδο των δυναμοσειρών.

Ο *ελαχιστοβάθμιος όρος* της (5.54) $F''(\xi)$ είναι βαθμού -2 και με την αντικατάσταση $F \sim \xi^s \Rightarrow (\xi^s)'' = s(s-1)\xi^{s-2} = 0$ οδηγεί στις συνθήκες έναρξης s=0,1 της δυναμοσειράς επίλυσης. Οι *μεγιστοβάθμιοι όροι* βαθμού 0 είναι περισσότεροι του ενός (τρείς) $-\xi^2 F''(\xi) - 2\xi\,(|m|+1)F'(\xi) + [\lambda - |m|(|m|+1)]F(\xi)$. Με την αντικατάσταση $F \sim \xi^n$ έχουμε

$$-\xi^2(\xi^n)'' - 2\xi(|m|+1)(\xi^n)' + [\lambda - |m|(|m|+1)]\,\xi^n = 0$$

$$\Leftrightarrow [-n(n-1) - 2(|m|+1)n + \lambda - |m|(|m|+1)]\,\xi^n = 0 \tag{5.55}$$

απ' όπου εξισώνοντας τους όρους ίδιας τάξης προκύπτει μετά από πράξεις η τιμή της σταθεράς διαχωρισμού

$$\lambda = (n+|m|)(n+|m|+1) = \ell(\ell+1) \tag{5.56}$$

αρκεί να εισαχθεί ο *κβαντικός αριθμός* ℓ

$$\ell = n + |m| = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.57}$$

απ' όπου

$$m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell \quad . \tag{5.58}$$

Οι πλήρεις λύσεις της γωνιακής διαφορικής εξίσωσης (5.49) δίνονται από τα *συναφή πολυώνυμα Legendre*[2]

$$\Theta_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2} F_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_\ell(\xi)}{d\xi^{|m|}}, \tag{5.59}$$

όπου $P_\ell(\xi)$ είναι τα *πολυώνυμα Legendre*, λύσεις της απλούστερης *εξίσωσης Legendre*

---

[2] Η λύση της (5.54) δίνεται από τα πολυώνυμα $F_\ell^m(\xi)$ που από την συνθήκη τερματισμού είναι $n = \ell - |m|$ βαθμού.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$(1-\xi^2)P''(\xi)-2\xi P'(\xi)+\ell(\ell+1)P(\xi)=0\ , \tag{5.60}$$

με προσοχή στη αντικατάσταση της Θ από την P. Αντί των $\Theta_l^m(\xi)$ χρησιμοποιούνται συνήθως τα *συναφή πολυώνυμα Legendre* με τον συμβολισμό $P_l^m(\xi)$, όπου τα *πολυώνυμα Legendre* είναι $P_l(\xi)=P_l^0(\xi)$.

Από τις λύσεις των εξισώσεων ως προς ϕ και θ προσδιορίζεται πλήρως η γωνιακή εξάρτηση του προβλήματος που έχει την μορφή των σφαιρικών αρμονικών

$$Y_\ell^m(\theta,\phi)\sim P_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\phi} \tag{5.61}$$

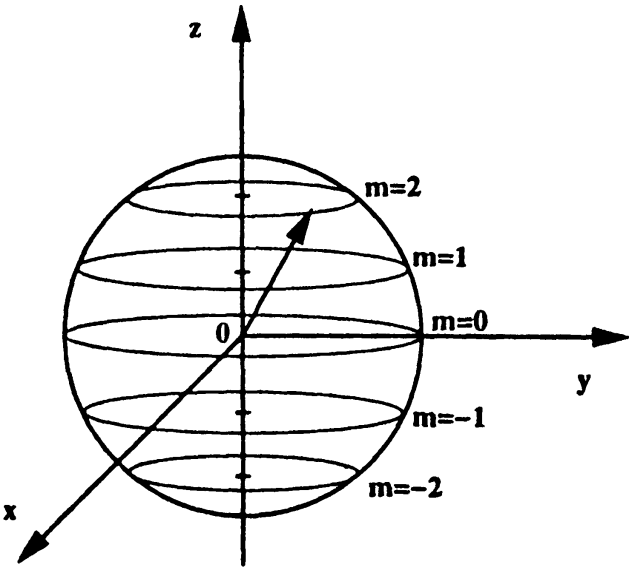
που πρέπει επιπλέον να κανονικοποιηθούν. Με την αντικατάσταση $\nabla^2_{\theta,\phi}=-\vec{\ell}^2/\hbar^2$ στην γωνιακή εξίσωση $\nabla^2_{\theta,\phi}Y(\theta,\phi)+\lambda Y(\theta,\phi)=0$ προκύπτει η εξίσωση ιδιοτιμών

$$\vec{\ell}^2 Y_l^m(\theta,\phi)=\hbar^2\ell(\ell+1)Y_l^m(\theta,\phi),\ \ \ell=0,1,2,\cdots \tag{5.62}$$

απ' όπου οι ιδιοτιμές για το $\vec{\ell}^2$ είναι $\hbar^2\ell(\ell+1)$.

Οι γωνιακοί κβαντικοί αριθμοί είναι:

- $\ell=0,1,2,3,\cdots$: ο *κβαντικός αριθμός μέτρου της στροφορμής* $\vec{\ell}^2$ (ή τροχιακός κβαντικός αριθμός).
- $m=-\ell,\ell+1,\cdots,\ell-1,+\ell$: ο *κβαντικός αριθμός της προβολής της στροφορμής* ℓ_z *στον z άξονα* (ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός)



Στο σχήμα φαίνεται η στροφορμή $\vec{\ell}$ για ℓ=2 με ακτίνα $|\vec{\ell}|=\hbar\sqrt{2(2+1)}$. Η $\vec{\ell}$ περιορίζεται στα ίχνη των κυκλικών τομών και οι προβολές στον z-άξονα $\ell_z=0,\pm\hbar,\pm 2\hbar,\forall\ell_x,\ell_y$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

5.2.5. <u>Σφαιρικές αρμονικές</u> $|\ell m\rangle = Y_\ell^m$

Το γωνιακό μέρος της λύσης που συνοψίζεται στις *σφαιρικές αρμονικές* $Y_\ell^m(\theta,\phi) = \Theta_\ell^m(\theta)\,\Phi_m(\phi)$ είναι προφανώς το ίδιο για οποιοδήποτε ακτινικό δυναμικό $V(r)$. Οι σφαιρικές αρμονικές κανονικοποιούνται με το ολοκλήρωμα

$$\int d\Omega\, Y_\ell^m(\theta,\phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}, \quad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi. \tag{5.63}$$

Στον συμβολισμό Dirac οι σφαιρικές αρμονικές γράφονται $|\ell m\rangle$ με τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις για τον τελεστή του μέτρου της στροφορμής από

$$\vec{\ell}^2|\ell m\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)|\ell m\rangle \tag{5.64}$$

και για τον τελεστή της προβολής της στροφορμής

$$\ell_z|\ell m\rangle = \hbar m|\ell m\rangle \quad , \tag{5.65}$$

ενώ ικανοποιείται η συνθήκη κανονικοποίησης

$$\langle \ell m|\ell' m'\rangle = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}. \tag{5.66}$$

Θα πρέπει να περιμένουμε λίγο για να δούμε τις λύσεις της ακτινικής εξίσωσης (ως προς r) που εκτός από την συγκεκριμένη μορφή του δυναμικού $V(r)$ εξαρτώνται και από το $\vec{\ell}^2$. Στην περίπτωση του ατόμου του υδρογόνου όπου $V(r) = -e^2/r$ στο Κεφ. 5.3 απαιτείται η επίλυση της εξίσωσης Laguerre.

<u>Αλγεβρική μέθοδος:</u> Ορίζονται οι τελεστές *δημιουργίας και καταστροφής* όπως στο Κεφ.4.4 για τον απλό αρμονικό ταλαντωτή

$$\begin{aligned} \ell_+ &= \ell_x + i\ell_y \\ \ell_- &= \ell_x - i\ell_y \end{aligned} \tag{5.67}$$

με ℓ_x, ℓ_y τις συνιστώσες της στροφορμής, για τις οποίες ως γνωστόν ισχύει $[\ell_x, \ell_y] = i\hbar\ell_z$ και οι αντίστοιχες σχέσεις από κυκλική μετάθεση.

❖ Ικανοποιούνται οι σχέσεις μετάθεσης

$$\begin{aligned} [\ell_+, \ell_-] &= 2\hbar\,\ell_z \\ [\ell_z, \ell_\pm] &= \pm\hbar\,\ell_\pm \end{aligned} \tag{5.68}$$

και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

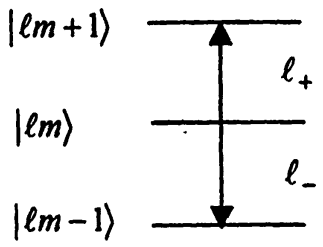
$$\left[\vec{\ell}^2, \ell_\pm\right] = 0 \tag{5.69}$$

ενώ ισχύει

$$\vec{\ell}^2 = \ell_z^2 + \frac{1}{2}(\ell_+\ell_- + \ell_-\ell_+) = \ell_z^2 + \ell_+\ell_- - \hbar\ell_z = \ell_z^2 + \ell_-\ell_+ + \hbar\ell_z. \tag{5.70}$$

Απόδειξη:

$$\begin{aligned}
[\ell_+, \ell_-] &= [\ell_x + i\ell_y, \ell_x - i\ell_y] \\
&= -i[\ell_x, \ell_y] + i[\ell_y, \ell_x] \\
&= -i\,i\hbar\ell_z + i(-i\hbar\ell_z) \\
&= 2\hbar\ell_z
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
[\ell_z, \ell_\pm] &= [\ell_z, \ell_x \pm i\ell_y] \\
&= [\ell_z, \ell_x] \pm i[\ell_z, \ell_y] \\
&= i\hbar\ell_y \pm i(-i\hbar\ell_x) \\
&= \pm\hbar(\ell_x \pm i\ell_y) \\
&= \pm\hbar\ell_\pm
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\vec{\ell}^2, \ell_\pm\right] &= \left[\ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2, \ell_x \pm i\ell_y\right] \\
&= \left[\ell_x^2, \pm i\ell_y\right] + \left[\ell_y^2, \ell_x\right] + \left[\ell_z^2, \ell_x\right] + \left[\ell_z^2, \pm i\ell_y\right] = \\
&= \pm i\{\ell_x[\ell_x, \ell_y] + [\ell_x, \ell_y]\ell_x\} + \{\ell_y[\ell_y, \ell_x] + [\ell_y, \ell_x]\ell_y\} \\
&\quad + \{\ell_z[\ell_z, \ell_x] + [\ell_z, \ell_x]\ell_z\} \pm i\{\ell_z[\ell_z, \ell_y] + [\ell_z, \ell_y]\ell_z\} \\
&= \pm ii\hbar\{\ell_x\ell_z + \ell_z\ell_x\} - i\hbar\{\ell_y\ell_z + \ell_z\ell_y\} + i\hbar\{\ell_z\ell_y + \ell_y\ell_z\} \mp ii\hbar\{\ell_z\ell_x + \ell_x\ell_z\} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

❖ Από τις βασικές εξισώσεις ιδιοτιμών (5.64), (5.65) η $|\ell m\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση των $\vec{\ell}^2$ *και* ℓ_z με ιδιοτιμές $\ell(\ell+1)\hbar^2$ και $m\hbar$, αντίστοιχα. Οι συναρτήσεις που προκύπτουν από την δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής $\ell_\pm|\ell m\rangle$ είναι επίσης ιδιοσυναρτήσεις των $\vec{\ell}^2$ και ℓ_z με ιδιοτιμές $\hbar^2\ell(\ell+1)$ και $(m\pm1)\hbar$, αντίστοιχα. Παρατηρούμε πως η ιδιοτιμή της $\vec{\ell}^2$ με ιδιοσυνάρτηση $\ell_\pm|\ell m\rangle$ παραμένει η ίδια και αλλάζει η ιδιοτιμή της ℓ_z σε $(m\pm1)\hbar$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Απόδειξη:

Από την σχέση μετάθεσης

$$\left[\vec{\ell}^2, \ell_\pm\right] = 0 \Leftrightarrow \vec{\ell}^2(\ell_\pm|\ell m\rangle) = \ell_\pm \vec{\ell}^2|\ell m\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2(\ell_\pm|\ell m\rangle)$$

οι $\ell_\pm|\ell m\rangle$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του $\vec{\ell}^2$ με ιδιοτιμές $\hbar^2\ell(\ell+1)$ και από την

$$[\ell_z, \ell_\pm] = \pm\hbar\ell_\pm \Leftrightarrow \ell_z\ell_\pm = \ell_\pm\ell_z \pm \hbar\ell_\pm$$

έχουμε

$$\begin{aligned}\ell_z(\ell_\pm|\ell m\rangle) &= (\ell_\pm\ell_z \pm \hbar\ell_\pm)|\ell m\rangle \\ &= (\ell_\pm m\hbar \pm \hbar\ell_\pm)|\ell m\rangle \\ &= (m\pm 1)\hbar(\ell_\pm|\ell m\rangle)\end{aligned}$$

ώστε οι $\ell_\pm|\ell m\rangle$ είναι επίσης ιδιοσυναρτήσεις της ℓ_z με ιδιοτιμές $(m\pm 1)\hbar$. Το αποτέλεσμα αυτό να ελεγχθεί όταν $\ell = 1$ με δράση της ℓ_+ που πρώτα θα γραφεί συναρτήσει των θ, ϕ από την (5.23).

❖ Από τις (5.64). (5.65) οι $|\ell m\pm 1\rangle$ είναι προφανώς ιδιοσυναρτήσεις των $\vec{\ell}^2$ *και* ℓ_z με ιδιοτιμές $\ell(\ell+1)\hbar^2$ και $(m\pm 1)\hbar$, αντίστοιχα και οι ιδιοτιμές αυτές αντιστοιχούν στις ιδιοσυναρτήσεις $\ell_\pm|\ell m\rangle$. Άρα, $\ell_\pm|\ell m\rangle \propto |\ell m\pm 1\rangle$ και με προσδιορισμό των σταθερών αναλογίας οι τελεστές ℓ_+, ℓ_- προκύπτουν οι βασικές σχέσεις

$$\begin{aligned}\ell_+|\ell m\rangle &= \{\ell(\ell+1) - m(m+1)\}^{1/2}\hbar|\ell m+1\rangle \\ \ell_-|\ell m\rangle &= \{\ell(\ell+1) - m(m-1)\}^{1/2}\hbar|\ell m-1\rangle.\end{aligned} \tag{5.71}$$

Οι $|\ell m\rangle$ για ορισμένη τιμή του ℓ και τις τιμές $m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell$ αποτελούν *μια σκάλα με* $2\ell+1$ *ίσα σκαλοπάτια.* Ο τελεστής ℓ_+ μας οδηγεί ένα σκαλοπάτι ψηλότερα αλλάζοντας τον m κατά +1 ενώ ο ℓ_- ένα σκαλοπάτι χαμηλότερα αλλάζοντας τον m κατά -1. Οι τελεστές $\ell_\pm$ εκτός από τελεστές δημιουργίας και καταστροφής λέγονται και *τελεστές ανύψωσης* και *κατάβασης*, αντίστοιχα με

$$\begin{aligned}\ell_+|\ell\ \ell\rangle &= 0 \\ \ell_-|\ell - \ell\rangle &= 0\end{aligned} \tag{5.72}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συνεπές με το γεγονός ότι η σκάλα περιορίζεται από τα όρια $m = \pm\ell$.

Απόδειξη:

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής δεν είναι ερμιτειανοί $\left(\ell_\pm^\dagger = \ell_\mp\right)$ αφού δεν αντιστοιχούν σε μετρήσιμα φυσικά μεγέθη. Οι συντελεστές αναλογίας $c_\pm$ στις

$$\ell_\pm|\ell m\rangle = c_\pm|\ell m \pm 1\rangle \Leftrightarrow \langle \ell m|\ell_\pm^\dagger = \langle \ell m|\ell_\mp = \langle \ell m \pm 1|c_\pm^*$$

υπολογίζονται από τα διαγώνια στοιχεία μήτρας

$$\langle \ell m|\ell_-\ell_+|\ell m\rangle = (\langle \ell m|\ell_-)(\ell_+|\ell m\rangle)$$
$$= \langle \ell m|c_+^* c_+|\ell m\rangle = |c_+|^2.$$

Επίσης, από την (5.70)

$$\ell_+\ell_- = \bar{\ell}^2 - \ell_z(\ell_z - \hbar)$$
$$\ell_-\ell_+ = \bar{\ell}^2 - \ell_z(\ell_z + \hbar)$$

και την ορθοκανονικότητα των $|\ell m\rangle$ (5.66) έχουμε

$$\langle \ell m|\ell_-\ell_+|\ell m\rangle = \langle \ell m|\left(\bar{\ell}^2 - \ell_z(\ell_z + \hbar)\right)|\ell m\rangle$$
$$= \ell(\ell+1)\hbar^2 - m(m+1)\hbar^2.$$

Επομένως, από τις δύο τελευταίες σχέσεις προκύπτει η σταθερά αναλογίας

$$c_+ = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}$$

και παρομοίως

$$c_- = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}.$$

Άσκηση 2. Να κατασκευασθούν οι σφαιρικές αρμονικές με $\ell = 2$.

Λύση:

Οι σφαιρικές αρμονικές από την (5.61) είναι

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) \sim P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}\ , \quad \ell = 0,1,2,\cdots, \quad m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell$$

με τα συναφή πολυώνυμα Legendre

$$P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2}\,\frac{d^m P_\ell(\xi)}{d\xi^m}, \quad \xi = \cos\theta$$

και εξίσωση Legendre

$$(1-\xi^2)P_\ell''(\xi) - 2\xi P_\ell'(\xi) + \ell(\ell+1)P_\ell(\xi) = 0.$$

Αφού $\ell = 2$ θα αναζητήσουμε πολυώνυμο στην μορφή $P_2(\xi) \propto \xi^2 + a$ (μια άρτια συνάρτηση με όρους μέχρι δεύτερης τάξης, χωρίς όρους περιττής τάξης, αφού είναι άρτιας ισοτιμίας $P = (-1)^\ell = (-1)^2 = 1$). Με αντικατάσταση του $P_2(\xi)$ στην εξίσωση Legendre προκύπτει η σταθερά $a = -1/3$ και χωρίς κανονικοποίηση σε αυτό το στάδιο έχουμε

$$P_2(\xi) \propto \xi^2 - 1/3$$

ώστε από την

$$P_2^m(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^m(3\xi^2-1)}{d\xi^m}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 .$$

$$m = \pm 2: \; P_2^2(\xi) = (1-\xi^2)^{2/2} \frac{d^2(3\xi^2-1)}{d\xi^2} \propto 1-\xi^2 = 1-\cos^2\theta = \sin^2\theta,$$

$$m = \pm 1: \; P_2^1(\xi) = (1-\xi^2)^{1/2} \frac{d(3\xi^2-1)}{d\xi} \propto \xi\sqrt{1-\xi^2} = \cos\theta \sin\theta,$$

$$m = 0: \; P_2^0(\xi) \propto 3\xi^2 - 1 = 3\cos^2\theta - 1 .$$

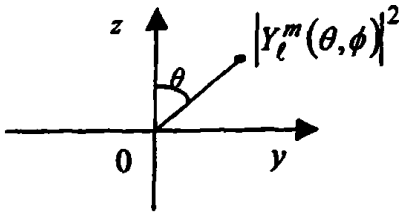
Άρα, οι σφαιρικές αρμονικές $Y_\ell^m \propto P_\ell^m(\xi)\, e^{im\phi}$ είναι:

$$Y_2^{\pm 2}(\theta,\phi) \propto \sin^2\theta \; e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta,\phi) \propto \sin\theta\cos\theta \; e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0(\theta,\phi) \propto 3\cos^2\theta - 1 .$$

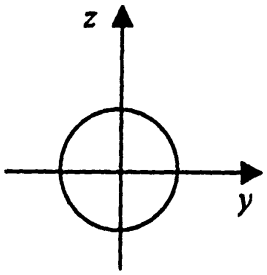
Πολικά διαγράμματα: Δείχνουν την *γωνιακή κατανομή πιθανότητας* $|Y_\ell^m|^2$ εύρεσης στα διαστήματα $[\theta, \theta + d\theta], [\phi, \phi + d\phi]$, με σταθερή απόσταση r από το κέντρο. Συνήθως, εκφράζονται με διδιάστατα σχήματα συναρτήσει της γωνίας θ μεταξύ του z άξονα και του ισημερινού επιπέδου, αφού η $|Y_\ell^m|^2$ δεν εξαρτάται από την γωνία ϕ. Το τρισδιάστατα σχήματα προκύπτουν από περιστροφή γύρω από τον z άξονα.



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

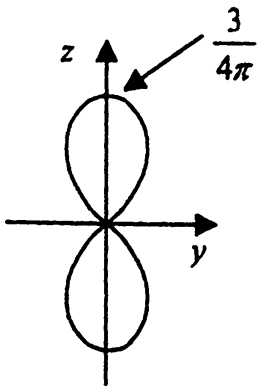
Οι κανονικοποιημένες σφαιρικές αρμονικές για $\ell = 0, 1, 2$ και τα αντίστοιχα πολικά διαγράμματα είναι

s-τύπου για $\ell = 0: Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

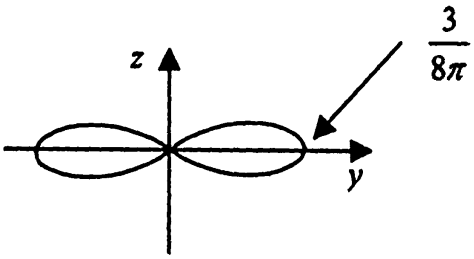


$\ell = 0, m = 0$

p-τύπου για $\ell = 1: Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$



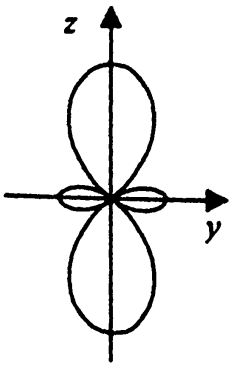
$\ell = 1, m = 0$



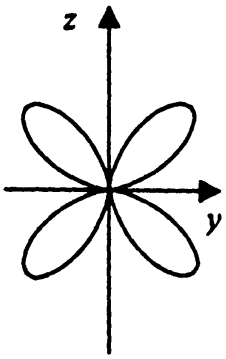
$\ell = 1, m = \pm 1$

d-τύπου για $\ell = 2$:

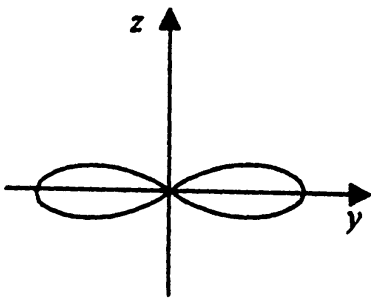
$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{\pm i\phi}, Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$



$\ell = 2, m = 0$



$\ell = 2, m = \pm 1$



$\ell = 2, m = \pm 2$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Άσκηση 3. Να δείξετε πως η ισοτιμία των σφαιρικών αρμονικών είναι $P=(-1)^{\ell}$.

Λύση: Από τον ορισμό $\psi(-\vec{r})=P\psi(\vec{r})$ η αντικατάσταση $\vec{r}\to-\vec{r}$ στις σφαιρικές συντεταγμένες δίνει (να ελεγχθεί)

$$\begin{cases} r\to r \\ \theta\to\pi-\theta \\ \phi\to\pi+\phi \end{cases}$$

ενώ $\xi=\cos\theta\to-\xi$. Επίσης, τα P_ℓ^m είναι πάντα είτε άρτιας είτε περιττής μορφής

$$P_\ell^m(-\xi)\propto\left(1-(-\xi)^2\right)^{m/2}d^mP_\ell(-\xi)/d(-\xi)^m=(-1)^{\ell-m}P_\ell^m(\xi),$$

αφού ο βαθμός του πολυωνύμου $d^m P_\ell(\xi)/d\xi^m$ είναι $\ell-m$ και

$$d^m P_\ell(-\xi)/d(-\xi)^m=(-1)^{\ell-m}\,d^m P_\ell(\xi)/d\xi^m.$$

Άρα,

$$Y_\ell^m(\theta,\phi)\propto P_\ell^m(\xi)\,e^{im\phi}\to Y_\ell^m(\pi-\theta,\pi+\phi)\propto P_\ell^m(-\xi)\,e^{im(\pi+\phi)}=(-1)^{\ell-m}(-1)^m Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

ώστε

$$\psi(\vec{r})\to\psi(-\vec{r})=R(r)Y_\ell^m(\pi-\theta,\pi+\phi)=(-1)^\ell Y_\ell^m(\theta,\phi)=(-1)^\ell\psi(\vec{r}).$$

Επομένως, η ισοτιμία είναι άρτια ή περιττή αν ο κβαντικός αριθμός ℓ είναι άρτιος ή περιττός, αντίστοιχα.

Άσκηση 4. Να δείξετε από την $\ell_x=(\ell_++\ell_-)/2$ πως οι μέσες ή αναμενόμενες τιμές για σύστημα στην κατάσταση $|\ell m\rangle$ είναι

$$\langle\ell_x\rangle=0,\quad \langle\ell_x^2\rangle=\frac{1}{2}\{\ell(\ell+1)-m^2\}\hbar^2$$

$$\langle\ell_x^2\rangle=\langle\ell_y^2\rangle=\frac{1}{2}\{\langle\vec{\ell}^2\rangle-\langle\ell_z^2\rangle\}=\frac{1}{2}\{\ell(\ell+1)-m^2\}\hbar^2.$$

Άσκηση 5. Αν $\psi_{+1},\psi_0,\psi_{-1}$ ονομασθούν οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών της τροχιακής στροφορμής με

$$\ell=1,\quad m=+1,0,-1$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του ℓ_x αφού πρώτα δράσετε με τους ℓ_+, ℓ_-.

Απάντηση: Από την $\ell_x = (\ell_+ + \ell_-)/2$ την δράση των $\ell_\pm$ στις $\psi_{+1}, \psi_0, \psi_{-1}$ και την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\ell_x(a\psi_{+1} + b\psi_0 + c\psi_{-1}) = \lambda\,(a\psi_{+1} + b\psi_0 + c\psi_{-1})$$

να προσδιορίστε τις σταθερές a, b, c. Το αποτέλεσμα είναι

ιδιοσυναρτήσεις:	ιδιοτιμές:
$(\psi_1 + \sqrt{2}\psi_0 + \psi_{-1})/2$	$\hbar$
$(\psi_1 - \psi_{-1})/\sqrt{2}$	0
$(\psi_1 - \sqrt{2}\psi_0 + \psi_{-1})/2$	$-\hbar$.

Άσκηση 6. Είδαμε πως για την γωνιακή στροφορμή $\vec{\ell}$ ισχύουν οι σχέσεις ιδιοτιμών

$$\vec{\ell}^2|\ell m\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2|\ell m\rangle$$
$$\ell_z|\ell m\rangle = m\hbar|\ell m\rangle$$

αφού οι τελεστές $\vec{\ell}^2, \ell_z$ μετατίθενται έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις, τις σφαιρικές αρμονικές $|\ell m\rangle$. Επομένως, οι ιδιοτιμές του τετραγώνου του μέτρου και της προβολής της στροφορμής είναι συγκεκριμένες και ορίζονται με ακρίβεια

$$|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$$
$$\ell_z = m\hbar, \quad m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell,$$

όπου ℓ ο τροχιακός και m ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Επειδή $[\ell_x, \ell_y] \neq 0, [\ell_y, \ell_z] \neq 0, [\ell_z, \ell_z] \neq 0$ οι τιμές των ℓ_x, ℓ_y δεν είναι καθορισμένες. Από τον ορισμό $\ell_\pm = \ell_x \pm i\ell_y$ να δείξετε τα στοιχεία μήτρας

$$\langle \ell m|\ell_z|\ell' m'\rangle = m\hbar\,\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}$$

$$\langle \ell m|\ell_\pm|\ell' m'\rangle = \sqrt{\ell'(\ell'+1) - m'(m'\pm 1)}\,\hbar\,\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'\pm 1}$$

και επειδή οι $\ell_\pm$ έχουν μη μηδενικά στοιχεία μόνο όταν $\ell = \ell'$ να κατασκευάσετε τις μήτρες για τους $\ell_z, \ell_\pm$ για την περίπτωση $\ell = 1$ στην

βάση $\{|\ell=1,m=1\rangle,|\ell=1,m=0\rangle,|\ell=1,m=-1\rangle\}$. Να σχηματίσετε επίσης τα γινόμενα των μητρών και να ελέγξετε ότι

$$[\ell_+,\ell_-]=\ell_+\ell_- - \ell_-\ell_+ = 2\hbar\ell_z.$$

Απάντηση: $\langle 1m|\ell_\pm|1m'\rangle = \sqrt{2-m'(m'\pm 1)}\,\hbar\,\delta_{m,m'\pm 1}$

$$\ell_z=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad \ell_+=\hbar\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\0&0&\sqrt{2}\\0&0&0\end{pmatrix},\quad \ell_-=\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\\sqrt{2}&0&0\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}.$$

Άσκηση 7. Να δείξετε ότι $(\Delta\ell_x)^2_{\min}=(\Delta\ell_y)^2_{\min}=\hbar^2\ell/2$.

Λύση:

Οι αβεβαιότητες στο τετράγωνο είναι

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

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

με $\langle\ell_x\rangle=\langle\ell_y\rangle=0$ επειδή $\langle(\ell_++\ell_-)/2\rangle=\langle(\ell_+-\ell_-)/2i\rangle=0$. Από τις παραπάνω έχουμε

$$\vec{\ell}^2=\ell_x^2+\ell_y^2+\ell_z^2\Rightarrow(\Delta\ell_x)^2+(\Delta\ell_y)^2=\langle\vec{\ell}^2\rangle-\langle\ell_z^2\rangle$$

$$\Rightarrow(\Delta\ell_x)^2+(\Delta\ell_y)^2=\ell(\ell+1)\hbar^2-m^2\hbar^2,\quad m=-\ell,\cdots,0,\cdots,\ell$$

και αν στο δεξί μέλος αφαιρέσουμε την μέγιστη τιμή $m=\ell$ έχουμε το *άθροισμα των ελάχιστων*

$$(\Delta\ell_x)^2_{\min}+(\Delta\ell_y)^2_{\min}=\frac{\hbar^2}{2}\ell+\frac{\hbar^2}{2}\ell.$$

Από την γενικευμένη αρχή της αβεβαιότητας (ΠΑΡ.Γ)

$$(\Delta A)^2\,(\Delta B)^2\geq\frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Rightarrow (\Delta\ell_x)^2\,(\Delta\ell_y)^2 \geq \frac{1}{4}|\langle i\hbar\ell_z\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4}m^2$$

$$\Rightarrow (\Delta\ell_x)^2\,(\Delta\ell_y)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\ell^2\hbar^2,$$

με την μέγιστη τιμή $m=\ell$ στο δεξί μέλος το *γινόμενο των ελάχιστων* είναι

$$(\Delta\ell_x)^2_{\min}\,(\Delta\ell_y)^2_{\min} = \frac{\hbar^2}{2}\ell\,\frac{\hbar^2}{2}\ell.$$

Αν επιλυθούν οι δύο γραμμοσκιασμένες εξισώσεις

$$(\Delta\ell_x)^2_{\min} = (\Delta\ell_y)^2_{\min} = \frac{\hbar^2}{2}\ell.$$

Ανακεφαλαίωση:

Όταν το δυναμικό είναι κεντρικό ή σφαιρικά συμμετρικό $V(r)$ η εξίσωση Schrodinger στις σφαιρικές συντεταγμένες r,θ,ϕ, όπου η κινητική ενέργεια είναι $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\vec{\ell}^2}{\hbar^2 r^2}\right)$, γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\left[V(r)+\frac{\vec{\ell}^2}{2mr^2}\right]\psi = E\psi. \qquad (5.73)$$

Με την αντικατάσταση $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$ το *γωνιακό μέρος* επιλύεται *για κάθε* $V(r)$ με τις σφαιρικές αρμονικές $Y_l^m(\theta,\phi)$ που χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς ℓ,m. Οι σφαιρικές αρμονικές είναι της μορφής $Y_l^m(\theta,\phi)\sim P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\phi}$ με $P_l^m(\cos\theta)$ τα συναφή πολυώνυμα Legendre, ενώ αποτελούν τις κοινές ιδιοσυναρτήσεις του ζεύγους $\vec{\ell}^2,\vec{\ell}_z$, με ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις για τον *τελεστή του μέτρου της στροφορμής στο τετράγωνο*

$$\vec{\ell}^2\,Y_\ell^m(\theta,\phi) = \hbar^2\ell(\ell+1)\,Y_\ell^m(\theta,\phi),\quad \ell=0,1,2,\cdots$$

και για τον *τελεστή της προβολής της στροφορμής*

$$\ell_z\,Y_\ell^m(\theta,\phi) = \hbar m\,Y_\ell^m(\theta,\phi),\quad m=-\ell,-\ell+1,\cdots,0,\cdots,\ell-1,\ell.$$

Το *ακτινικό μέρος* $R(r)$ θα μας απασχολήσει στο Κεφ. 5.3 και εξαρτάται από την μορφή του δυναμικού $V(r)$ με το *επιπλέον φράγμα δυναμικού λόγω της* $\vec{\ell}^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\left[V(r)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r) = ER(r). \qquad (5.74)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

5.3. Η ακτινική εξίσωση

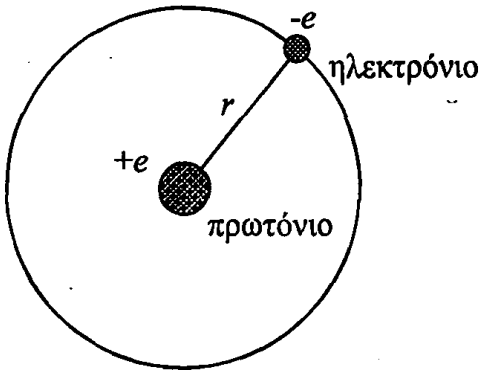
Το άτομο του υδρογόνου είναι σύστημα δυο σωματίων (ηλεκτρόνιο και πρωτόνιο) όπου λόγω της πολύ μεγαλύτερης μάζας του m_p το πρωτόνιο του πυρήνα μπορεί να θεωρηθεί ως ένα ακίνητο ελκτικό κέντρο γύρω από το οποίο κινείται το ηλεκτρόνιο μάζας m_e. Όπως είναι γνωστό από την κλασσική φυσική το πρόβλημα ακριβέστερα ανάγεται στην κίνηση του κέντρου μάζας και ενός υποθετικού σωματίου με *'ανηγμένη μάζα'*

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad , \tag{5.75}$$

υπό την επίδραση του δυναμικού μεταξύ των σωματίων

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \tag{5.76}$$

και $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ τις συντεταγμένες θέσης των σωματίων.

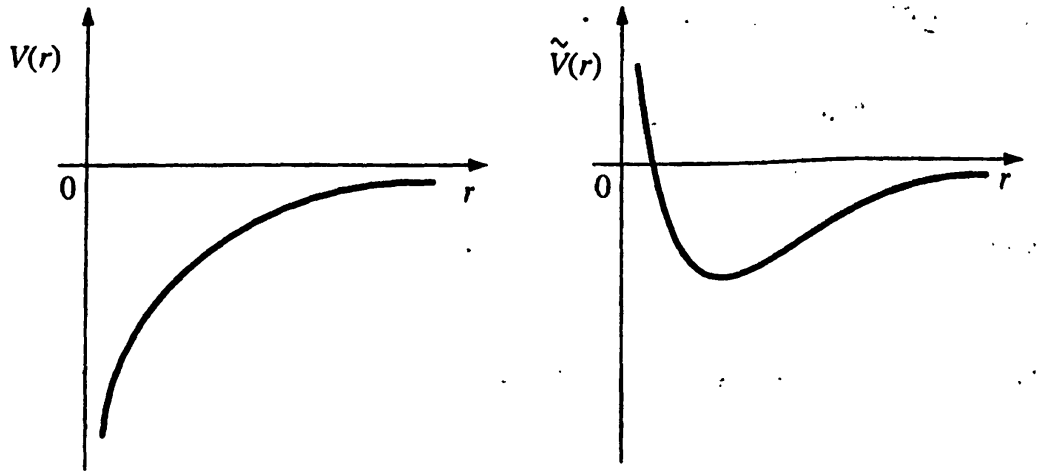


Σχ. 5.1. *Το άτομο του υδρογόνου.*

Θα επιλύσουμε την ακτινική εξίσωση Schrödinger (5.74) στο δυναμικό $V=V(r)$. Το γωνιακό μέρος λόγω του κεντρικού δυναμικού έχει ήδη επιλυθεί με τις σφαιρικές αρμονικές στο Κεφ. 5.2. Επειδή $m_p \approx 2000 m_e$ η ανηγμένη μάζα από την (5.75) στο δυναμικό Coulomb μεταξύ των σωματίων είναι $\mu \approx m_e$. Επομένως αρκεί να επιλυθεί το πρόβλημα για μάζα m και αν στο τέλος επιθυμούμε μεγαλύτερη ακρίβεια μπορούμε να αντικαταστήσουμε την m με την ανηγμένη μάζα μ του συστήματος ηλεκτρόνιο-πυρήνας.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το δυναμικό τύπου Coulomb ελκτικής μορφής είναι $V(r) = -e^2/r$ ενώ



Σχ. 5.2. *Το αυθεντικό και το τροποποιημένο δυναμικό στο άτομο του υδρογόνου.*

στην ακτινική εξίσωση υπεισέρχεται το τροποποιημένο δυναμικό[3]

$$\tilde{V}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}. \tag{5.77}$$

Πριν επιλύσουμε την ακτινική εξίσωση θα συζητήσουμε πρώτα το κβαντικό πρόβλημα *δύο σωματίων* (ελεύθερα και αλληλεπιδρώντα) στις συντεταγμένες του κέντρου μάζας.

5.3.1. Δύο ελεύθερα σωμάτια στο σύστημα κέντρου μάζας

Η εξίσωση Schrödinger για *σύστημα δύο ελεύθερων (μη αλληλεπιδρώντων) σωματίων* μάζας m_1 και m_2 με συντεταγμένες x_1 και x_2 με την μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών Κεφ. 5.1.1 έχει λύσεις τα γινόμενα

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2) \tag{5.78}$$

όπου οι $\psi_1(x_1), \psi_2(x_2)$ ικανοποιούν τις εξισώσεις

---

[3] Η απλή φυσική του ερμηνεία του δεύτερου (απωστικού) όρου αφορά την γωνιακή κινητική ενέργεια $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(r\dot{\theta})^2 = \frac{1}{2}m\frac{\bar{\ell}^2}{m^2r^2} = \frac{\bar{\ell}^2}{2mr^2}$ σωματίου μάζας m σε τροχιά ακτίνας r γύρω από το σταθερό κέντρο δύναμης, με στροφορμή $\ell = mvr = m(r\dot{\theta})r = mr^2\dot{\theta}$. Ο όρος αυτός συνήθως αποκαλείται *φυγόκεντρο φράγμα δυναμικού*.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\psi_1''(x_1)+k_1^2\,\psi_1(x_1)=0$$
$$\psi_2''(x_2)+k_2^2\,\psi_2(x_2)=0 \tag{5.79}$$

με $k_1^2=\dfrac{2m_1E_1}{\hbar^2}$, $k_2^2=\dfrac{2m_2E_2}{\hbar^2}$ και $E=E_1+E_2$. Εφ' όσον οι λύσεις για κάθε ελεύθερο σωμάτιο είναι γνωστές οι ιδιοσυναρτήσεις-ιδιοτιμές είναι το γινόμενο-άθροισμα

$$\psi(x_1,x_2)=C\exp(ik_1x_1+ik_2x_2)$$
$$E=\frac{\hbar^2k_1^2}{2m_1}+\frac{\hbar^2k_2^2}{2m_2}. \tag{5.80}$$

Οι *συντεταγμένες του κέντρου μάζας (Κ.Μ.)* ορίζονται

$$M=m_1+m_2,\quad X=\frac{m_1x_1+m_2x_2}{M},$$
$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2},\quad x=x_1-x_2, \tag{5.81}$$

ενώ $k_1x_1+k_2x_2=KX+kx$ με *ολική ορμή* του Κ.Μ.

$$K=k_1+k_2\Rightarrow P=\hbar K=p_1+p_2 \tag{5.82}$$

και *σχετική ορμή* ως προς το Κ.Μ.

$$k=\frac{m_2k_1-m_1k_2}{M}\Rightarrow p=\hbar k=\frac{m_2}{M}p_1-\frac{m_1}{M}p_2. \tag{5.83}$$

Επομένως οι λύσεις στις συντεταγμένες του κέντρου μάζας είναι

$$\psi(x,X)=C\exp(iKX+ikx)$$
$$E=\frac{\hbar^2k_1^2}{2m_1}+\frac{\hbar^2k_2^2}{2m_2}=\frac{\hbar^2K^2}{2M}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}. \tag{5.84}$$

5.3.2. <u>Δύο αλληλεπιδρώντα σωμάτια στο σύστημα κέντρου μάζας</u>

Αν τα δύο σωμάτια της προηγούμενης άσκησης δεν είναι ελεύθερα αλλά *αλληλεπιδρούν με δυναμικό* $V(x_1-x_2)$ η εξίσωση Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\psi(x_1,x_2)+V(x_1-x_2)\,\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2) \tag{5.85}$$

με την αντικατάσταση από την (5.81)

$$x_1=X+\frac{\mu}{m_1}x,\quad x_2=X-\frac{\mu}{m_2}x \tag{5.86}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

στις συντεταγμένες κέντρου μάζας X, x γράφεται

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,X)=E\psi(x,X)\ . \qquad (5.87)$$

Η λύση είναι το γινόμενο

$$\psi(x,X)=\exp(iKX)\varphi(x) \qquad (5.88)$$

όπου τώρα η $\varphi(x)$ προκύπτει από την εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο μάζας μ

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V(x)\varphi(x)=\varepsilon\,\varphi(x) \qquad (5.89)$$

με

$$\varepsilon=E-\frac{\hbar^2K^2}{2M},\quad M=m_1+m_2,\quad \mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}. \qquad (5.90)$$

Στο αντίστοιχο *τρισδιάστατο πρόβλημα* για το κέντρο μάζας ισχύουν

$$\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{M},\quad \vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2,\quad M=m_1+m_2 \qquad (5.91)$$

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,\quad \vec{p}=\frac{m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2}{m_1+m_2},\quad \mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \qquad (5.92)$$

ενώ η Χαμιλτονιανή $H=\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1}+\frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2}+V(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)$ με $r=|\vec{r}|$ ανάγεται στην

$$H=\frac{\vec{P}}{2M}+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu}+V(r) \qquad (5.93)$$

με λύσεις $\psi(\vec{R},\vec{r})=u(\vec{P},\vec{R})\,\varphi(\vec{r})$ με $u(\vec{P},\vec{R})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\vec{P}\vec{R}/\hbar)$ ενώ η $\varphi(\vec{r})$ ικανοποιεί την εξίσωση Schrodinger με μάζα μ

$$\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu}+V(r)\right)\phi(\vec{r})=\varepsilon\,\phi(\vec{r})\ , \qquad (5.94)$$

$$\varepsilon=E-\frac{\vec{P}^2}{2M}. \qquad (5.95)$$

5.3.3. Λύση της ακτινικής εξίσωσης

Στο *άτομο του υδρογόνου* απαιτείται η λύση της ακτινικής εξίσωσης για την $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\left[V(r)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r)=E\,R(r) \qquad (5.96)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

σε δυναμικό $V(r) = -e^2/r$ ενώ το γωνιακό μέρος έχει ήδη λυθεί στο Κεφ. 5.2 για κάθε κεντρικό δυναμικό $V(r)$. Με την νέα μεταβλητή $y(r) = r\,R(r)$ λαμβάνει την μορφή

$$y''(r) + \tilde{k}^2(r)\, y(r) = 0\,, \tag{5.97}$$

με οριακές συνθήκες

$$y(0)=y(\infty)=0 \tag{5.98}$$

και

$$\begin{aligned} \tilde{k}^2(r) &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - \tilde{V}(r)) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right). \end{aligned} \tag{5.99}$$

Η εξίσωση (5.97) είναι γνωστή ως *η συναφής εξίσωση Laguerre*

$$y''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) y(r) = 0, \quad 0 \le r \le \infty \ . \tag{5.100}$$

- Η εξίσωση (5.100) είναι *τριβάθμια*, με βαθμούς $-2, 0, -1, -2$, και επομένως μη επιλύσιμη. Θα αφαιρέσουμε κατά τα γνωστά την ασυμπτωτική λύση.
- Η ασυμπτωτική λύση προκύπτει στο όριο $r \to \infty$ από την

$$y''(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\, y(r) = 0\ , \tag{5.101}$$

αφού στην (5.100) οι ασυμπτωτικοί όροι $\propto \frac{1}{r}, \frac{1}{r^2} \to 0$. Επειδή για δέσμιες καταστάσεις $E < 0$ θέτουμε $\gamma^2 = -2mE/\hbar^2 > 0$, ώστε $y''_\infty - \gamma^2 y_\infty = 0$ οι με λύσεις $y_\infty = e^{-\gamma r}$ που μηδενίζονται στο όριο $r \to \infty$.

- Επομένως, με την αντικατάσταση $y(r) = y_\infty(r) F(r)$ από την συναφή Laguerre οδηγούμεθα στην *διβάθμια* και επιλύσιμη *εξίσωση Laguerre*

$$F''(r) - 2\gamma\, F'(r) + \left(\frac{2me^2}{\hbar^2 r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) F(r) = 0\ . \tag{5.102}$$

- Η δυναμοσειρά λύσης επιτυγχάνεται με αντικατάσταση του r^s στους ελαχιστοβάθμιους όρους και του r^n στους μεγιστοβάθμιους από τις συνθήκες *έναρξης* και *τερματισμού*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\left(r^s\right)'' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} r^s = 0 \Leftrightarrow s = \ell+1, -\ell \tag{5.103}$$

και

$$-2\gamma\left(r^n\right)' + \frac{2me^2}{\hbar^2 r} r^n = 0 \Leftrightarrow n = \frac{me^2}{\hbar^2\gamma}. \tag{5.104}$$

Επομένως, η *δύναμη έναρξης της δυναμοσειράς* είναι $s = \ell+1$ (κρατάμε μόνο την θετική) και η *δύναμη τερματισμού* είναι $n = \frac{me^2}{\hbar^2\gamma}$. Αφού ο n αρχίζει από την $\ell+1$ υποχρεωτικά λαμβάνει τις θετικές ακέραιες τιμές

$$n = 1,2,3,\cdots \tag{5.105}$$

ενώ οι τιμές του $\ell = 0,1,2,\cdots$ από την $\ell+1 \le n$ περιορίζονται στις

$$\ell = 0,1,2,3,\cdots,n-1. \tag{5.106}$$

➢ Οι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης οδηγούν στις ενεργειακές ιδιοτιμές

$$E_n = -\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1,2,3\cdots, \tag{5.107}$$

και τις ιδιοσυναρτήσεις

$$y_{n\ell}(r) \propto e^{-\frac{me^2}{\hbar^2}\frac{r}{n}} F_{n\ell}(r), \quad \ell = 0,1,2,\cdots,n-1 \quad . \tag{5.108}$$

Οι ολικές ιδιοσυναρτήσεις για το άτομο του υδρογόνου συμπεριλαμβάνουν και τις σφαιρικές αρμονικές

$$\psi_{nlm} = R_{n\ell}(r)\, Y_\ell^m(\theta,\phi) = \frac{y_{n\ell}(r)}{r}\, Y_\ell^m(\theta,\phi) \quad . \tag{5.109}$$

Σχόλια:

- Το ακτινικό δυναμικό $V = V(r)$ οποιασδήποτε μορφής είναι ανεξάρτητο των θ,ϕ και λόγω της περιστροφικής συμμετρίας στο ενεργειακό φάσμα δίνει τον *περιστροφικό εκφυλισμό* (όπου η ενέργεια εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς n, ℓ ενώ οι ενέργειες είναι ίδιες για όλα τα m). Ο περιστροφικός

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

εκφυλισμός αίρεται παρουσία μαγνητικού πεδίου $\bar{B}$ (*φαινόμενο Zeeman*) όπου η περιστροφική συμμετρία θρυμματίζεται. Όμως, στο φάσμα του ατόμου του υδρογόνου παρατηρούμε πως η ενέργεια (5.107) δεν εξαρτάται ούτε από τον κβαντικό αριθμό ℓ, αλλά *μόνο από τον n*. Αυτό δηλώνει την παρουσία του *δυναμικού ή συμπτωματικού εκφυλισμού* όπου έχουμε ίδιες ενέργειες για όλα τα ℓ. Ο δυναμικός εκφυλισμός οφείλεται στην ειδική μορφή του δυναμικού Coulomb $V(r) = -e^2/r$ που είναι ακόμη πιο συμμετρικό από ένα οποιοδήποτε κεντρικό $V(r)$.

- Ο *περιστροφικός εκφυλισμός* οφείλεται στην σφαιρική συμμετρία του $V(r)$ (ισχύει για $\forall V(r)$ που δεν εξαρτάται από τις θ, ϕ) και η ενέργεια E_n δεν εξαρτάται από τον m που λαμβάνει τιμές $m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell$, άρα ο εκφυλισμός είναι για $\forall \ell$: $d_\ell = 2\ell+1$. Ο *δυναμικός ή συμπτωματικός εκφυλισμός* οφείλεται στην επιπλέον συμμετρία λόγω ειδικής μορφής του $V(r) \propto 1/r$ και η ενέργεια E_n για το άτομο του υδρογόνου δεν εξαρτάται ούτε από τον ℓ. Αφού $\ell = 0,1,2,\cdots,n-1$, ενώ για $\forall \ell$ έχουμε εκφυλισμό d_ℓ, ο *ολικός εκφυλισμός* της $n-$οστής ενεργειακής στάθμης (5.107) στο άτομο του υδρογόνου είναι

$$d_n = \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = 2\sum_{\ell=0}^{n-1}\ell + 1\times(n-1+1) = 2\frac{(n-1)n}{2} + n \Leftrightarrow d_n = n^2.$$

- Οι σφαιρικές αρμονικές $Y(\theta,\phi)$ δεν έχουν διαστάσεις, έχει όμως η ακτινική $R(r)$. Η $\psi(\bar{r})$ πρέπει να έχει διαστάσεις όγκου$^{-1/2}$ ώστε η στοιχειώδης πιθανότητα $|\psi(\bar{r})|^2 d^3\bar{r}$ να είναι αδιάστατη ποσότητα (όγκος^{-1} × όγκος).
- Το *έργο ιονισμού* (η ενέργεια που απαιτείται ώστε ένα ηλεκτρόνιο από την βασική στάθμη n=0 να καταστεί ελεύθερο) είναι 13.6 eV.
- Οι καταστάσεις με $\ell = 0, 1, 2, 3, \cdots$ στην ατομική φυσική ονομάζονται $s, p, d, f, \cdots$ αντίστοιχα, ώστε οι καταστάσεις με κβαντικούς αριθμούς $n = 1,2,3,\cdots$ δηλώνονται 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, κλπ. Π.χ. στο άτομο του υδρογόνου η βασική στάθμη 1s έχει ενέργεια E_1 με εκφυλισμό $d_1 = 1$, οι 2s, 2p ενέργεια E_2 με εκφυλισμό $d_2 = 2^2 = 4$, οι 3s, 3p, 3d, ενέργεια E_3 με εκφυλισμό $d_3 = 3^2 = 9$, κλπ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ανακεφαλαίωση

Στο άτομο του υδρογόνου εξετάζουμε την *ακτινική εξίσωση Schrodinger*

$$y''(r)+\tilde{k}^2(r)y(r)=0 \ \mu\varepsilon \ \tilde{k}^2(r)=\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right) \qquad (5.110)$$

με δυναμικό Coulomb $V(r)=-e^2/r$ και οριακές συνθήκες $y(0)=y(\infty)=0$. Στην εξίσωση αυτή αντί της μάζας m του ηλεκτρονίου πρέπει να τεθεί η ενεργός μάζα μ, αφού πρόκειται για πρόβλημα δύο σωματίων (ηλεκτρόνιο και πρωτόνιο), αλλά συνήθως αρκούμεθα στην προσέγγιση $\mu=m$ επειδή η μάζα του πυρήνα είναι πολύ μεγάλη. Από τις λύσεις της ακτινικής εξίσωσης προκύπτουν οι *ενεργειακές ιδιοτιμές*

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad \{n=1,2,3,4,\cdots \qquad (5.111)$$

με n τον *κύριο κβαντικό αριθμό* και οι *ιδιοσυναρτήσεις*

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=R_{n\ell}(r)\,Y_\ell^m(\theta,\phi)=\frac{y_{n\ell}(r)}{r}Y_\ell^m(\theta,\phi), \quad \begin{cases}\ell=0,1,2,\cdots,n-1\\ m=-\ell,\cdots,0,\cdots+\ell\end{cases} \qquad (5.112)$$

όπου ℓ, m οι *γωνιακοί κβαντικοί αριθμοί*.

Η *γωνιακή πιθανότητα*

$$d\phi\, d\theta \sin\theta \left|Y_\ell^m(\theta,\phi)\right|^2$$

εύρεσης του σωματίου σε σφαίρα σταθερής ακτίνας στο διάστημα μεταξύ $\phi, \phi+d\phi$, $\theta, \theta+d\theta$ κανονικοποιείται με $\int_0^\pi d\phi \int_0^{2\pi} d\theta \sin\theta \left|Y_\ell^m(\theta,\phi)\right|^2=1$. Η *ακτινική πιθανότητα*

$$r^2\left|R_{n,\ell}(r)\right|^2=\left|y_{n,\ell}(r)\right|^2$$

εύρεσης του σωματίου μεταξύ δύο σφαιρών με ακτίνες $r, r+dr$ κανονικοποιείται με $\int_0^\infty dr\, r^2\left|R_{n,\ell}(r)\right|^2=\int_0^\infty dr\left|y_{n,\ell}(r)\right|^2=1$. Η *ολική πιθανότητα* είναι το γινόμενο ακτινικής και γωνιακής με την κανονικοποίηση

$$\int d^3\bar{r}\left|\psi_{n,\ell,m}(\bar{r})\right|^2=\int_0^\infty dr\, r^2\left|R_{n,\ell}(r)\right|^2\int_0^\pi d\phi\int_0^{2\pi} d\theta\sin\theta\left|Y_\ell^m(\theta,\phi)\right|^2=1.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

➤ **Α1.** Ο τρισδιάστατος αρμονικός ταλαντωτής (για τον μονοδιάστατο δείτε το Κεφ. 4.4.) περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\left(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2\right)$$

Να υπολογισθούν οι πιθανές ενέργειες του συστήματος και να εκτιμηθεί ο εκφυλισμός καθώς και η ισοτιμία της κάθε μίας όταν $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$.

Λύση:

Αφού $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$ το πρόβλημα καταλήγει σε 3 ανεξάρτητους μονοδιάστατους αρμονικούς ταλαντωτές με συχνότητες $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ στους άξονες *x, y, z* αντίστοιχα, άρα η κυματοσυνάρτηση είναι το *γινόμενο*

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \left(\frac{m^3\omega_1\omega_2\omega_3}{\hbar^3\pi^3}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^{(n_1+n_2+n_3)}n_1!n_2!n_3!}\right)^{1/2} H_{n_1}(\xi_1)H_{n_2}(\xi_2)H_{n_3}(\xi_3)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2\right)\right]$$

ενώ η ενέργεια το *άθροισμα*

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_3\left(n_3+\frac{1}{2}\right) \quad , n_1,n_2,n_3 = 0,1,2,3,\cdots$$

$$\xi_1 = \sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}x, \quad \xi_2 = \sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}y, \quad \xi_3 = \sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}}z$$

και $H_n(\xi)$ τα πολυώνυμα του Hermite.

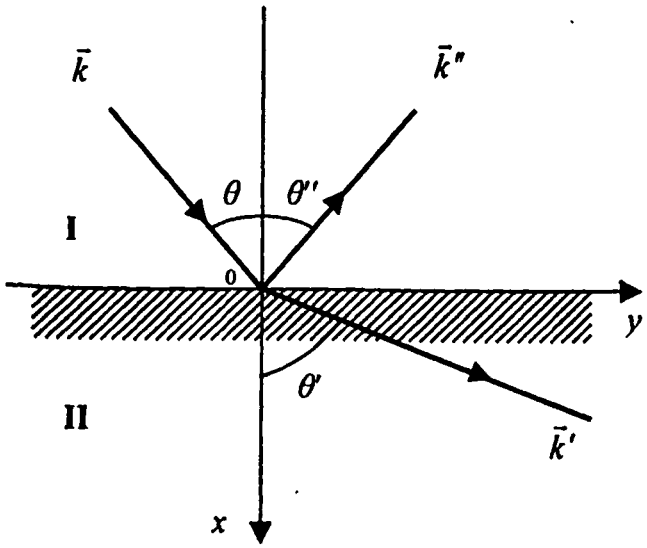
Στην ισοτροπική περίπτωση $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$ μπορεί να δειχθεί ότι ο εκφυλισμός της $E_n = \hbar\omega(n+3/2)$, $n = n_1 + n_2 + n_3$ είναι $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$, ενώ η ισοτιμία είναι άρτια όταν ο $n = n_1 + n_2 + n_3$ είναι άρτιος και περιττή όταν ο $n = n_1 + n_2 + n_3$ είναι περιττός[4].

---

[4] Για σταθερό n αν επιλεγεί μια σταθερή τιμή του n_1 παρατηρούμε πως το άθροισμα $n_2 + n_3 = n - n_1$ = σταθ. μπορεί να γίνει με $n - n_1 + 1$ τρόπους αφού οι $0 + (n-n_1), 1 + (n-n_1-1), 2 + (n-n_1-2), \cdots, (n-n_1-1)+1, (n-n_1)+0$ έχουν το ίδιο σταθερό άθροισμα $n - n_1$ Άρα ο εκφυλισμός δίνεται από το άθροισμα $\sum_{n_1=0}^{n}(n-n_1+1) = (n+1)(n+2)/2$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

A2. Η *σκέδαση σε τρισδιάστατο βήμα δυναμικού* αφορά σωμάτιο μάζας m που προσπίπτει με ενέργεια E στο βήμα δυναμικού $V(x)=V_0$ όταν $x>0$ και 0 όταν $x<0$, με $E>V_0$. Αν το διάνυσμα πρόσπτωσης $\vec{k}=k_x\vec{e}_x+k_y\vec{e}_y$ είναι στο επίπεδο xy να δείξετε ότι τα διανύσματα ανάκλασης $\vec{k}''$ και διάθλασης $\vec{k}'$ είναι στο ίδιο επίπεδο με το $\vec{k}$. Να δείξετε επίσης πως ισχύουν οι $k=k'', \theta=\theta''$ & $\dfrac{\sin\theta}{\sin\theta'}=\sqrt{1-\dfrac{V_0}{E}}$ και να υπολογίσετε τα ρεύματα πιθανότητας J στις δύο περιοχές[5].



Λύση: Για την προσπίπτουσα, την ανακλώμενη και την διαθλώμενη ενέργεια ισχύει

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2k''^2}{2m}=\frac{\hbar^2k'^2}{2m}+V_0$$

$$\Leftrightarrow k=k''.$$

Αφού $\vec{k}=k_x\vec{e}_x+k_y\vec{e}_y$ στις δύο περιοχές με κύματα του τύπου $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$\psi_I(x,y,z)=Ae^{ik_xx+ik_yy}+Be^{ik''_xx+ik''_yy+ik''_zz},$$

$$\psi_{II}(x,y,z)=Ce^{ik'_xx+ik'_yy+ik'_zz}$$

ενώ για $x=0$:

[5] Υπόδειξη: $Ae^{i\alpha x}+Be^{i\beta x}=Ce^{i\gamma x}\Leftrightarrow\alpha=\beta=\gamma$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\psi_I(0,y,z) = \psi_{II}(0,y,z)$$

$$\Rightarrow Ae^{ik_y y} + Be^{ik''_y y + ik''_z z} = Ce^{ik'_y y + ik'_z z}$$

$$\Rightarrow k'_z = k''_z = 0, \quad \mu\varepsilon\ y = 0, \text{ άρα} \quad \vec{k}, \vec{k}', \vec{k}'' \text{ είναι διδιάστατα.}$$

Έπεται, λοιπόν,

$$Ae^{ik_y y} + Be^{ik''_y y} = Ce^{ik'_y y}$$
$$\Rightarrow k_y = k'_y = k''_y.$$

Η σχέση $k_y = k''_y$ δίνει $k\sin\theta = k''\sin\theta'' \Rightarrow \theta = \theta''$ ενώ από την $k_y = k'_y$ προκύπτει η $k\sin\theta = k'\sin\theta'$, ώστε

$$\sqrt{E}\sin\theta = \sqrt{E - V_0}\sin\theta' \Rightarrow \frac{\sin\theta}{\sin\theta'} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}},$$

που είναι ο νόμος του Snell. Από την επιπλέον συνθήκη μηδενισμού των παραγώγων στο $x = 0$ λαμβάνουμε $A + B = C$, $Ak_x + Bk''_x = Ck'_x$, απ' όπου μπορούν να υπολογισθούν και οι πυκνότητες πιθανότητας J_I, J_{II} στις δύο περιοχές.

➤ **A3.** Να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας του *κυκλικού περιστροφέα*[6] όπου σωμάτιο κινείται σε σφαιρική επιφάνεια ακτίνας a. Αυτή είναι η απλούστερη περίπτωση κεντρικού δυναμικού $V(r)$ αφού $V = 0$ για $r = a$ ενώ $V = \infty$ για $r \neq a$. Επειδή το σωμάτιο έχει σταθερή πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης *μόνο στην επιφάνεια* $r = a$ για το ακτινικό μέρος της κυματοσυνάρτησης ισχύει

$$R(r) = R(a) = \sigma\tau\alpha\theta.$$

Λύση:

Αφού $V(a) = 0$ και $R(a) = \sigma\tau\alpha\theta. \Leftrightarrow \nabla_r^2 R(a) = 0$ ώστε από την ακτινική εξίσωση προκύπτουν για $r = a$:

$$\nabla_r^2 R(a) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(a) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2ma^2}\right)R(a) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\ell(\ell+1)}{2ma^2}\right) = 0$$

[6] Έχει εφαρμογή στο πρόβλημα ενός διατομικού μορίου.

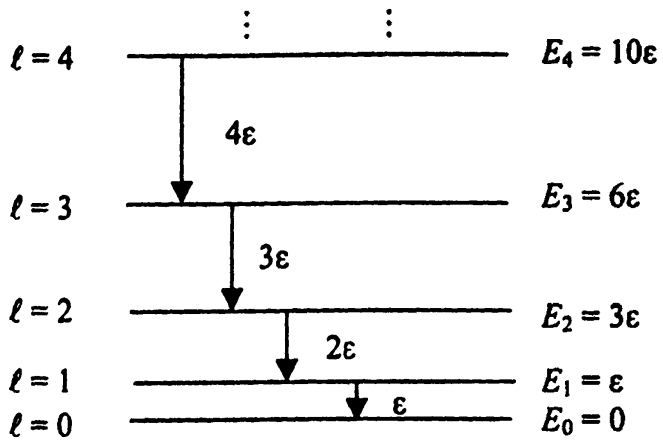
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Leftrightarrow E_\ell = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I}, \quad \ell = 0, 1, 2, \ldots$$

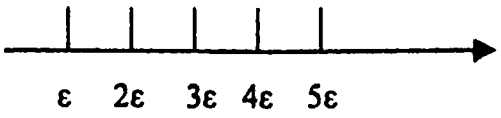
οι ιδιοτιμές ενέργειας με $I = ma^2$ την *ροπή αδράνειας* που φαίνονται στο σχήμα με εκφυλισμό $d_\ell = 2\ell + 1$ για $\forall \ell$ (εδώ δεν υπάρχει δυναμικός εκφυλισμός). Οι αντίστοιχες *ιδιοσυναρτήσεις* είναι οι σφαιρικές αρμονικές που έχουν μόνο γωνιακή εξάρτηση $\psi_{\ell,m} \sim Y_\ell^m(\theta,\phi)$, αφού $R(r) = \sigma\tau\alpha\theta$.

Παρατηρούμε πως η διαφορά δύο γειτονικών ιδιοτιμών είναι

$$E_\ell - E_{\ell-1} = \frac{[\ell(\ell+1) - (\ell-1)\ell]\hbar^2}{2ma^2} = \ell\,\frac{\hbar^2}{I} = \ell\,\varepsilon, \; \varepsilon = \frac{\hbar^2}{I}.$$



Το φάσμα εκπομπής και απορρόφησης είναι



A4. Να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές και οι εκφυλισμοί της Χαμιλτονιανής

$$H = \frac{1}{2I_1}\ell_x^2 + \frac{1}{2I_2}\ell_y^2 + \frac{1}{2I_3}\ell_z^2$$

όταν: (i) $I_1 = I_2 = I_3$, (ii) $I_1 = I_2 \neq I_3$.

Απάντηση:

(i) $H = \dfrac{\vec{\ell}^2}{2I_1}$, $E_\ell = \dfrac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I_1}$, $d_\ell = 2\ell + 1$.

(ii) $H = \dfrac{\vec{\ell}^2}{2I_1} + \left(\dfrac{1}{2I_3} - \dfrac{1}{2I_1}\right)\ell_z^2$, $E_{\ell,m} = \dfrac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I_1} + \left(\dfrac{1}{2I_3} - \dfrac{1}{2I_1}\right)\hbar^2 m^2$, $d_{\ell,m} = 1$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

➤ **A5.** Η 3-διάστατη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrodinger στο σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό $V(r)$ είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\left[V(r)+\frac{\vec{\ell}^2}{2mr^2}\right]\psi=E\psi$$

όπου όπως είδαμε η $\vec{\ell}^2$ αφορά τις γωνίες θ,ϕ.

(i) Γράφοντας $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$ για κάποια λύση να αποδείξετε πως

$$\ell^2 Y=\hbar^2\lambda Y\,,\quad \lambda=\sigma\tau\alpha\theta,$$

$$-\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\lambda+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)=0\,.$$

(ii) Να δείξετε ότι οι λύσεις για την εξίσωση της $Y(\theta,\phi)$ μπορεί να εκφρασθούν ως $\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ όπου ο $\Phi(\phi)$ είναι της μορφής $e^{\pm im\phi}$. Γιατί ο m λαμβάνεται ακέραιες τιμές ;

(iii) Να δείξετε ότι η $e^{im\phi}$ είναι ιδιοσυνάρτηση της ℓ_z και να βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή της.

(iv) Να μελετήσετε την θεωρία για την λύση της συναφούς εξίσωσης Legendre που δίνει τις ιδιοτιμές του $\vec{\ell}^2$ στην μορφή $\hbar^2\lambda=\hbar^2\ell(\ell+1)$ με $\ell=0,1,2,3,\cdots$. Να υπολογίσετε τον όρο του φυγόκεντρου φράγματος σε MeV όταν $\ell=1$, r=1 fermi με m την μάζα που αντιστοιχεί σε ένα σωμάτιο α της πυρηνικής φυσικής (4 amu).

Δίνονται: οι σταθερές $c^2=931.5\frac{MeV}{amu}$, $\hbar c=197 MeV\ fermi$ ενώ το αποτέλεσμα είναι περίπου ~10 MeV.

➤ **A6.** (i) Να δείξετε ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\cos\theta$, $\sin\theta\, e^{i\phi}$, $\sin\theta\, e^{-i\phi}$ είναι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\vec{\ell}^2$ και ℓ_z και να βρείτε τις αντίστοιχες ιδιοτιμές.

(ii) Να τις κανονικοποιήσετε στην επιφάνεια της μοναδιαίας σφαίρας ώστε αν μια κυματοσυνάρτηση είναι η ψ από την σχέση $A^2\int d\phi\sin\theta d\theta|\psi|^2=1$ να υπολογίσετε την σταθερά κανονικοποίησης A με το ολοκλήρωμα στα κατάλληλα όρια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(iii) Να δείξετε ότι η $\sin^{\ell}\theta\, e^{i\ell\phi}$ είναι μια ιδιοσυνάρτηση των $\vec{\ell}^2$ και ℓ_z. Να βρείτε τις αντίστοιχες ιδιοτιμές.

A7. Στην κατάσταση μηδενικής στροφορμής $\ell = 0$ η εξίσωση Schrödinger για *ελεύθερο σωμάτιο* είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = E\psi .$$

(i) Να δείξετε ότι οι $\dfrac{e^{\pm ikr}}{r}$, $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ είναι λύσεις. Να υπολογίσετε για αυτές το *ακτινικό ρεύμα πιθανότητας*

$$j_r = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial r} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial r}\right).$$

Να εξηγήσετε την σημασία του όρου $1/r^2$.

(ii) Οι λύσεις ελεύθερου σωματίου όταν $\ell \neq 0$ είναι πιο πολύπλοκες γιατί στο δυναμικό πρέπει να συμπεριληφθεί και ο όρος του φυγόκεντρου φράγματος $\vec{\ell}^2/2mr^2$. Οι πεπερασμένες λύσεις για $r = 0$ είναι οι συναρτήσεις Bessel $j_\ell(kr)$ με $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Από τις οριακές συνθήκες (π.χ. όταν υπάρχει τοίχος στο $r = a$ τότε $j_\ell(ka) = 0$) παίρνουμε τα αντίστοιχα k ή τις E που προκύπτουν (στην πυρηνική φυσική αυτό λέγεται *μοντέλο των φλοιών*).

A8. Η κυματοσυνάρτηση σωματίου μάζας m δέσμιου σε μια κατάσταση με $\ell = 0$ *ακτινικού πηγαδιού βάθους* V *και ακτίνας* a (δηλαδή $V(r) = -V,\ r \le a,\quad V(r) = 0,\ r > a$) ικανοποιεί την εξίσωση

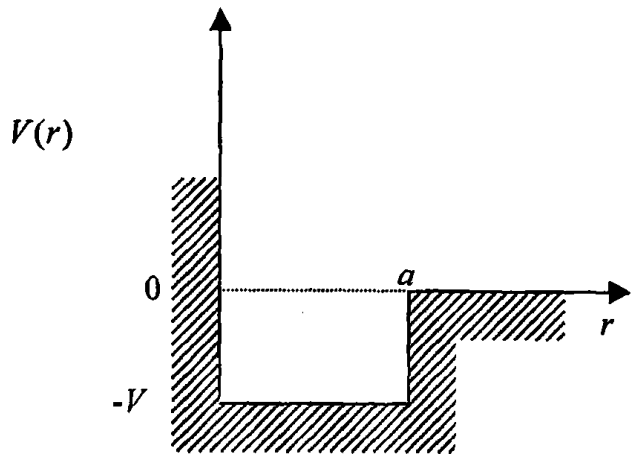
$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) - V\psi = -E\psi,\quad r \le a, V = \sigma\tau\alpha\theta.,$$

και

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = -E\psi,\quad r \ge a$$

όπου E είναι η *ενέργεια δέσμευσης του σωματίου* (η συνηθισμένη E με μείον).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



(i) Να ελεγχθούν οι λύσεις της μορφής

$$\psi = \frac{A}{r}\sin kr, \quad r \le a$$

$$\psi = \frac{B}{r}e^{-br}, \quad r > a$$

όπου $\hbar^2 k^2 = 2m(V-E)$, $\hbar^2 b^2 = 2mE$. Γιατί η λύση για $r \le a$ δεν έχει την μορφή $\frac{C}{r}\cos kr$;

(ii) Εφαρμόζοντας τις οριακές συνθήκες στο $r = a$ να δείξετε ότι $k\cot ka = -b$ (εφαρμόστε τις οριακές συνθήκες στην $r\psi(r)$ αντί της $\psi(r)$ που είναι ισοδύναμη και ευκολότερη). Η εξίσωση αυτή είναι η συνθήκη ιδιοτιμών για την E. Λύνεται γραφικά στο διάγραμμα $b-k$ όπου οι εξισώσεις $b^2 + k^2 = 2mV/\hbar^2$ και $k\cot ka = -b$ δίνουν έναν κύκλο ακτίνας $\left(2mV/\hbar^2\right)^{1/2}$ και την καμπύλη $b = -k\cot ka$, αντίστοιχα. Το σημείο τομής τους είναι μια δυνατή ιδιοτιμή της E. Να δείξετε πως $E<<V$ σημαίνει πως το V έχει μια τιμή κοντά στην $V_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$. Να δώσετε την εξήγηση με την αρχή της αβεβαιότητας για την τάξη μεγέθους αυτής της δύναμης που δεσμεύει ένα σωμάτιο. (Το ερώτημα (ii) είναι προαιρετικό).

➤ **A9.** Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης υδρογονοειδούς ατόμου με πυρηνικό φορτίο Ze έχει την μορφή

$$\psi = A\exp(-\beta r),\ A, \beta = \text{σταθ.}$$

και r την απόσταση μεταξύ ηλεκτρονίου και του πυρήνα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(i) Να υπολογίσετε τις σταθερές A, β .

(ii) Να βρείτε την ενέργεια E και τις μέσες τιμές της κινητικής και δυναμικής ενέργειας.

(iii) Να υπολογίσετε την μέση τιμή και την πιο πιθανή τιμή της r .

Δίνονται: το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty dr\, r^n e^{-\mu r} = \frac{n!}{\mu^{n+1}}, n = 0,1,2,\cdots$ (ΠΑΡ. Α) με τον Λαπλασιανό τελεστή $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$ όταν δρα σε συνάρτηση που εξαρτάται αποκλειστικά από την r .

Απαντήση: (i) $A = \sqrt{\beta^3/\pi}, \beta = Z/a, a = \hbar^2/me^2$,

(ii) $E = -Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} = -Z^2 E_0$, οι μέσες τιμές της δυναμικής και κινητικής ενέργειας είναι $2E, -E$,

(iii) $\langle r \rangle = \frac{3a}{2Z}$ και $\frac{a}{Z}$, αντίστοιχα.

➤ **Α10.** Να δείξετε ότι η κυματοσυνάρτηση

$$\psi = A\, z \exp(-r/2a),\ A, a = \text{σταθ.}$$

είναι μια στάσιμη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου και να βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή της ενέργειας. Να ελεγχθεί αν η ψ είναι ιδιοσυνάρτηση των τελεστών της στροφορμής $\vec{\ell}^2, \ell_x, \ell_y, \ell_z$ και να υπολογισθούν οι αντίστοιχες ιδιοτιμές όπου υπάρχουν. Σε ποιές τιμές των κβαντικών αριθμών n, ℓ, m αντιστοιχεί η ψ; Επιπλέον να βρείτε την τιμής της ακτίνας r όπου μεγιστοποιείται η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας $|y_{n,\ell}(r)|^2$ στην κατάσταση αυτή και να ερμηνευθεί το αποτέλεσμα με το μοντέλο του Bohr.

Απαντήση:

$E = -\frac{me^4}{8\hbar^2} = E_2$, $n = 2, \ell = 1, m = 0$ αφού $\vec{\ell}^2\psi = 2\hbar^2\psi$, $\ell_z\psi = 0$ ώστε η 2p: $\psi_{2,1,0}(\vec{r}) = \frac{y_{2,1}(r)}{r} Y_2^1(\theta,\phi)$. Η τιμή στο μέγιστο είναι $r = 4a$, η ακτίνα της τροχιάς του Bohr για n=2.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

A11. (i) Να υπολογισθούν οι ακτινικές πυκνότητες πιθανότητας μόνο στην μέγιστη τιμή $\ell = n-1$ όπου $|y_{n,n-1}(r)|^2 \propto |r^n e^{-r/an}|^2$. Να δείξετε ότι οι κατανομές έχουν μέγιστα ακριβώς στις ακτίνες των τροχιών του ατόμου του Bohr (Κεφ. 1.4, Κεφ. 1, A1) με $r_n = an^2$, $n = 1,2,\cdots$, $a = \hbar^2/me^2$.

(ii) Να υπολογισθούν οι μέσες τιμές $\langle r\rangle, \langle r^2\rangle, \langle(\Delta r)^2\rangle$.

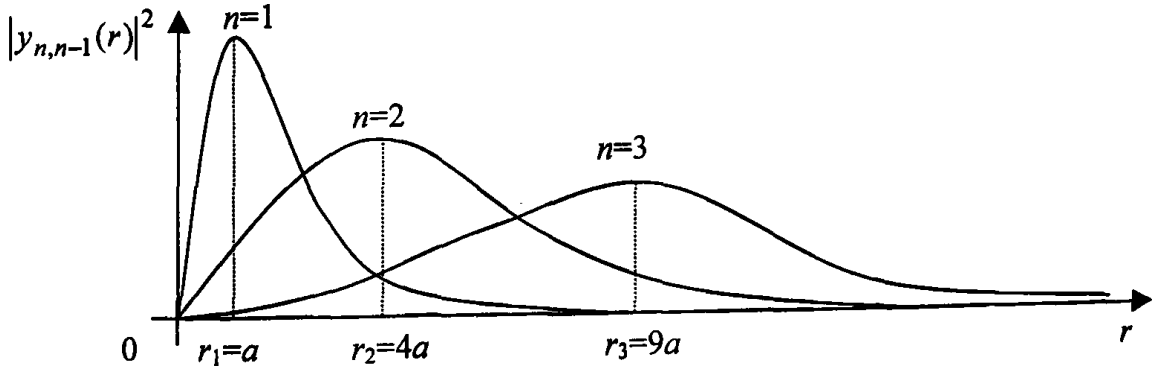
(iii) Να υπολογισθούν οι $y_{1,0}(r), \psi_{1,0,0}$ στην $1s$ κατάσταση.

Λύση:

(i) Το πολυώνυμο Laguerre[7] $F_{n,n-1}(r) \sim r^n$ στην περίπτωση που ο ℓ έχει την μέγιστη τιμή $\ell = n-1$ αρχίζει και τερματίζει στην ίδια δύναμη n ώστε $y_{n,n-1}(r) = A\, e^{-r/an}\, F_{n,n-1}(r)$, με την σταθερά A να έχει διαστάσεις $a^{-1/2}$ ενώ η F είναι αδιάστατη *αρκεί το r να διαιρεθεί με το μήκος a* (a είναι η ακτίνα Bohr). Η σταθερά A προκύπτει από την κανονικοποίηση της ακτινικής πιθανότητας

$$\int_0^\infty dr\,|y_{n,n-1}(r)|^2 = A^2 \int_0^\infty dr\, \frac{r^{2n}}{a^{2n}}\, e^{-2r/an} = 1$$

$$\Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{(2/n)^{2n+1}}{(2n)!}}\,\frac{1}{\sqrt{a}}.$$



[7] Από το Κεφ. 5.3.3: $F_{n,\ell} \sim r^{\ell+1} + a_1 r^{\ell+2} + \cdots + a_{n-\ell} r^n$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Οι ακτινικές πυκνότητες πιθανότητας για $n = 1,2,3$ με $\ell = n-1$ φαίνονται στο σχήμα και έχουν ένα μόνο μέγιστο. Όταν ο κβαντικός αριθμός ℓ είναι $\ell = 0, 1, 2, \cdots, n-1$ στην ακτινική πυκνότητα πιθανότητας παρατηρούμε $n, n-1, n-2, \cdots, 1$ μέγιστα, αντιστοίχως. Τα ακρότατα υπολογίζονται αν ληφθεί η παράγωγος της πυκνότητας πιθανότητας $|y_{n,n-1}(r)|^2$ ως προς r και τεθεί ίση με το μηδέν. Παρατηρούμε όταν $\ell = n-1$ τα μέγιστα πιθανότητας συμβαίνουν σε τιμές που αντιστοιχούν στις τροχιές του Bohr, αφού

$$\frac{d}{dr}\left(r^{2n}\, e^{-2r/an}\right) = 0 \Leftrightarrow \frac{2n}{r} = \frac{2}{an} \Leftrightarrow r_n = a\, n^2,\ \ n = 1, 2, \cdots,\ \ a = \hbar^2/me^2 .$$

Επιπλέον μπορεί να δειχθεί ότι η διασπορά της κάθε καμπύλης είναι $\sim n^{3/2}$.

(ii) Οι μέσες τιμές υπολογίζονται από τα αντίστοιχα ολοκληρώματα (ΠΑΡ. Α) με την *ακτινική πυκνότητα πιθανότητας* $|y_{n,n-1}(r)|^2 = \left(\frac{2}{n}\right)^{2n+1} \frac{1}{(2n)!} \frac{r^{2n}}{a^{2n+1}}\, e^{-2r/an}$, ώστε

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr\, r\, |y_{n,n-1}(r)|^2 = n^2 a + \frac{n}{2} a$$

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty dr\, r^2\, |y_{n,n-1}(r)|^2 = n^2 a^2 (2n+1)(2n+2)/4$$

$$\langle (\Delta r)^2 \rangle = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = (2n+1) n^2 a^2/4 .$$

Π.χ. για n=1 με αντικατάσταση έχουμε

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a,\ \langle r^2 \rangle = 3a^2,\ \langle (\Delta r)^2 \rangle = \frac{3}{4} a^2 .$$

Επίσης, οι μέσες τιμές

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{an^2},\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{a^2 n^3 (n-1/2)} .$$

(iii) Από την θεωρία $F_{1,0} \sim r^{0+1} \sim r$ που διαιρείται με την a χωρίς να χρειάζεται καθόλου αντικατάσταση στην (5.102), ενώ από την κανονικοποίηση $\int_0^\infty dr\, |y_{1,0}(r)|^2 = 1$ και το γνωστό (ΠΑΡ. Α) ολοκλήρωμα $\int_0^\infty dr\, x^k\, e^{-\gamma x} = \frac{k!}{\gamma^{k+1}}$ προκύπτει $A = \frac{2}{\sqrt{a}}$, με

$$y_{1,0}(r) = \frac{2}{a\sqrt{a}} r\, e^{-r/a},\ \ Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$\psi_{1s} = \psi_{1,0,0} = R_{1,0}(r) Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{y_{1,0}(r)}{r} Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{a^3\pi}} e^{-r/a},\ \ a = \hbar^2/me^2.$$

➤ **A12.** (i) Ποιοι κβαντικοί αριθμοί περιγράφουν μια κατάσταση του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου; Ποια είναι η φυσική σημασία τους;

(ii) Να υπολογίσετε το μήκος κύματος λ της γραμμής στο φάσμα του υδρογόνου που αντιστοιχεί στην μετάβαση από τον κύριο κβαντικό αριθμό n=3 στον n=2. Σε τι χρώμα αντιστοιχεί το εκπεμπόμενο φως;

Απάντηση: κόκκινο με $\lambda \approx 6580$Å.

(iii) Το *positronium* είναι ένα θεωρητικό 'άτομο' αντίστοιχο με αυτό του υδρογόνου όπου υπάρχει το γνωστό ηλεκτρόνιο αλλά αντί του πρωτονίου του πυρήνα εκεί είναι ένα ποζιτρόνιο πάλι θετικού φορτίου αλλά με μάζα *ίση* με αυτή του ηλεκτρονίου. Σύμφωνα με την άσκηση 2 να συγκρίνετε τις ενεργειακές στάθμες του positronium με αυτές του υδρογόνου. Ποιο είναι το μήκος κύματος λ της μετάβασης $2p \to 1s$ στο positronium και ποιο στο υδρογόνο;

Απάντηση: Η ανηγμένη μάζα (5.75) για το *positronium* είναι $\mu = \frac{m^2}{2m} = \frac{m}{2}$

ώστε $E_n \to E_n/2$, $\lambda_{2\to1} = \hbar 2\pi c/\Delta E_{2\to1} \approx 2426A$, $\Delta E_{2\to1} = -13.6eV\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2}\right)\frac{1}{2}$

$= 5.1$ eV ενώ *στο υδρογόνο* είναι $\Delta E_{2\to1} = -13.6eV\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2}\right) = 10.2$ eV .

(iv) Να σχεδιάσετε τις κατανομές πιθανότητας (την *ακτινική* και την *γωνιακή*) για το άτομο του υδρογόνου με ένα ηλεκτρόνιο στην $1s$ και στην κάθε μια από τις $2p$ καταστάσεις. Να δείξετε ότι το άθροισμα των κατανομών για τις τρεις $2p$ καταστάσεις δίνει την ισοτροπική ολική πυκνότητα πιθανότητας $|y(r)|^2$.

(v) Να βρείτε την αναμενόμενη ή μέση τιμή $\langle r \rangle$ στην $2p$ κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου και να συγκρίνετε το αποτέλεσμα με τον τύπο για την ακτίνα της κυκλικής τροχιάς στο άτομο του Bohr n=2, όπου $r_n = an^2$, $n = 1, 2, \cdots$ και $a = \hbar^2/me^2$ την ακτίνα Bohr, με $2p$: n=2, $\ell = 1$. **Απάντηση**: Η μέση τιμή είναι $\langle r \rangle = 5a$ ενώ $r_2 = 4a$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

➤ **A13.** (i) Να δείξετε ότι η $\psi(\theta,\phi) = \sin\theta\cos\phi$ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\vec{\ell}^2$ αλλά όχι του ℓ_z. Να κανονικοποιήσετε την ψ στην επιφάνεια της μοναδιαίας σφαίρας. Ποια είναι η $<\ell_z>$ σε αυτή την κατάσταση ;

Απάντηση: η ιδιοτιμή του $\vec{\ell}^2$ είναι $2\hbar^2$, όπως αναμένεται αφού η ψ είναι στην μορφή γνωστής σφαιρικής αρμονικής με $\ell = 1$. Η μέση τιμή $\langle \ell_z \rangle = 0$.

(ii) Να δείξετε ότι η κανονικοποιημένη ψ γράφεται $\left(Y_1^{+1}(\theta,\phi) + Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)/\sqrt{2}$ όπου $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ είναι οι κανονικοποιημένες λύσεις του γωνιακού μέρους της εξίσωσης Schrodinger (τα πρόσημα των σφαιρικών αρμονικών Y είναι απλώς θέμα ευκολίας).

(iii) Η ψ είναι γραμμικός συνδυασμός (υπέρθεση) δύο κυματοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές τιμές της ℓ_z, άρα η ψ δεν είναι ιδιοσυνάρτηση της ℓ_z. Να εξηγήσετε όμως ποιες είναι οι πιθανότητες ώστε σε σύστημα που χαρακτηρίζεται από την ψ η μέτρηση του $\vec{\ell}^2$ και του ℓ_z να δώσει $\ell = 1$ και $m = +1, 0, -1$. Από τις πιθανότητες να υπολογίσετε με αυτό τον τρόπο την μέση τιμή $<\ell_z>$.

(iv) Να ερμηνεύσετε το φαινομενικά *'παράδοξο'* οι λύσεις

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}\, Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

για το άτομο του υδρογόνου με n τον κύριο, ℓ τον τροχιακό και m τον μαγνητικό κβαντικό αριθμό να σχετίζονται με τον z – άξονα ενώ το δυναμικό είναι σφαιρικά συμμετρικό.

Απάντηση: Η γωνιακή εξάρτηση των $\psi_{n\ell m}$ υπάρχει στις σφαιρικές αρμονικές Y_ℓ^m που όπως φαίνεται στα πολικά διαγράμματα *δεν είναι σφαιρικά συμμετρικές*, εκτός όταν $\ell = 0$. Η μη σφαιρικά συμμετρικές $\psi_{n\ell m}$ για $\ell \neq 0$ αντιπροσωπεύουν την κατάσταση του ατόμου μόνο παρουσία εξωτερικής δύναμης, π.χ. λόγω μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ που εφαρμόζεται από πριν στο σύστημα και αποτελεί τον φυσικό ορισμό του z – άξονα. Η κατάσταση του ατόμου απουσία αυτής της εξωτερικής δύναμης είναι σφαιρικά συμμετρική και αναπαρίσταται είτε από την σφαιρικά συμμετρική κατάσταση $\ell = 0$ (σελ. 208) είτε από τον γραμμικό συνδυασμό μη συμμετρικών σφαιρικών αρμονικών που πάλι δίνει σφαιρικά συμμετρική κατάσταση. Με άλλα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

λόγια ο z άξονας εμφανίζεται επειδή αυθαίρετα επιλέγουμε να μετρήσουμε την συνιστώσα ℓ_z.

Στο *παράδειγμα* με $n=2, \ell=1$ το άτομο είναι σε μια σφαιρικά συμμετρική κατάσταση. Όταν όμως διέλθει από μια συσκευή Stern-Gerlach που μετράει την $z-$συνιστώσα της στροφορμής ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός $m=+1,0,-1$ αναλύεται σε τρεις συνιστώσες, με γωνιακή στροφορμή $+\hbar, 0, -\hbar$ στον $z-$άξονα, στην κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ της συσκευής. Επομένως οι καταστάσεις του ατόμου ψ_{211}, ψ_{210}, ψ_{21-1} που θα προκύψουν μετά την μέτρηση παύουν να είναι σφαιρικά συμμετρικές. Όταν ένας μεγάλος αριθμός ατόμων διέλθει από την συσκευή αυτά αναμένεται να κατανεμηθούν ισοδύναμα στις τρεις καταστάσεις ώστε η μέση τιμή της συνιστώσας κατά μήκος του $\vec{B}$ να είναι μηδέν. Αυτό συμβαίνει για οποιονδήποτε άξονα και δηλώνει πως στο αρχικό σύστημα από φυσική άποψη δεν υπήρχε *πριν* την μέτρηση συγκεκριμένος άξονας. Αρχικά η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi = c_{+1}\,\psi_{21+1} + c_0\,\psi_{210} + c_{-1}\,\psi_{21-1}$$

με συνιστώσες

$$|c_{-1}|^2 = |c_0|^2 = |c_{+1}|^2 = \frac{1}{3}$$

συγκεκριμένου μέτρου αλλά απροσδιόριστης φάσης. Μόνο *μετά* την μέτρηση θα απαλλαγούμε από αυτή την αυθαιρεσία και το σύστημα θα βρεθεί σε μια από τις τρεις συνιστώσες. Στο παράδειγμα αυτό παρατηρούμε πως το τετράγωνο της αρχικής κατάστασης

$$\begin{aligned}
|\psi|^2 &= \frac{1}{3}|R_{21}(r)|^2\left\{|Y_1^{+1}|^2 + |Y_1^0|^2 + |Y_1^{-1}|^2\right\} \\
&= \frac{1}{3}|R_{21}(r)|^2\left(\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta + \frac{3}{4\pi}\cos^2\theta + \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta\right) \\
&= \frac{1}{4\pi}|R_{21}(r)|^2
\end{aligned}$$

έχει την απαιτούμενη σφαιρική συμμετρία. Η γενική ιδιότητα των σφαιρικών αρμονικών

$$\sum_{m=-\ell}^{m=+\ell} |Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2 = \frac{2\ell+1}{4\pi},$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

δηλώνει πως μια μέτρηση του τετραγώνου της κατάστασης ενός συστήματος χωρίς τον καθορισμό του κβαντικού αριθμού m αποτελεί μια σφαιρικά συμμετρική συνάρτηση.

A14. Το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου είναι σε μια στάσιμη κατάσταση ενέργειας $-0.5444eV$ και περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi_{n\ell m} = A\,R(r)\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

Να υπολογίσετε τους τρεις κβαντικούς αριθμούς αυτής της κατάστασης.

Δίνονται:

$$E_n = -\frac{13.6eV}{n^2},\quad \vec{\ell}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right],\quad \ell_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Απάντηση: $n = 5, \ell = 2, m = 2$.

A15. Να λύσετε την ακτινική εξίσωση ως προς $y(r) = r\,R(r)$ για την κίνηση ηλεκτρονίου σε πεδίο Coulomb και να υπολογίσετε τη μορφή του $R(r)$ όταν (i) οι αποστάσεις r είναι μεγάλες ($r \to \infty$), (ii) όταν είναι μικρές ($r \to 0$).

Απάντηση: (i) $\lim_{r\to\infty} R(r) = \frac{B}{r}e^{-\gamma r}, \gamma^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ (ii) $\lim_{r\to 0} R(r) \propto r^{\ell}$.

A16. Το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου είναι στην κατάσταση $\psi(r) = A\,(1+ar)e^{\alpha r}$, A, a, α=σταθ. Να υπολογίσετε[8] τις a, α, A και την E.

Απάντηση: $a = \alpha = -\frac{me^2}{2\hbar^2}$, $E = -\frac{me^4}{8\hbar^2}$, $A = \frac{1}{2}(2\pi a^3)^{-1/2}$, a η ακτίνα Bohr.

A17. Ηλεκτρόνιο υπό την επίδραση δυναμικού Coulomb ενός πρωτονίου είναι στην κατάσταση που περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{3}\left[2\psi_{100}(r) + 2\psi_{211}(r) - \psi_{210}(r)\right]$$

(i) Ποια είναι η μέση τιμή της ενέργειας ;

[8] Το Ελληνικό α και το Λατινικό άλφα a είναι βεβαίως διαφορετικά.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

(ii) Ποια είναι η μέση τιμή του $\vec{\ell}^2$;

(iii) Ποια είναι η μέση τιμή του ℓ_z;

(iv) Ποια είναι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\vec{r},t)$ όταν $\Psi(\vec{r},0)=\psi(\vec{r})$;

Απάντηση: $\langle E\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{1}{9}(4E_1+5E_2) = \frac{5.25}{9}E_1 = -7.93eV$,

$$<\vec{\ell}^2> = \frac{10}{9}\hbar^2, \langle\ell_z\rangle = \frac{4\hbar}{9},$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{3}\left(2e^{-i\omega_1 t}\psi_{100} + 2e^{-i\omega_2 t}\psi_{211} - e^{-i\omega_2 t}\psi_{210}\right), \quad \omega_1 = \frac{E_1}{\hbar}, \quad \omega_2 = \frac{E_2}{\hbar}.$$

A18. Οι γεννήτορες L_n, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ μιας απειροδιάστατης *άλγεβρας Lie*[9] ικανοποιούν την συνθήκη $L_{-n} = L_n^*$ και χαρακτηρίζονται από τον μεταθέτη

$$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}m\left(m^2-1\right)\delta_{n,-m}, \quad c>0, L_0 = \ell_z.$$

Όταν $E>0$ με χαμηλότερη ιδιοτιμή του $L_0 = \ell_z$ την λ αντίστοιχης ιδιοσυνάρτησης $|\lambda\rangle$, να δείξετε:

(i) Ο $L_{n<0}$ είναι τελεστής δημιουργίας και ο $L_{n>0}$ είναι τελεστής καταστροφής.

(ii) Από την συνθήκη κανονικοποίησης $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$ να υπολογισθεί η $|\psi\rangle = L_m|\lambda\rangle$, για $m<0$. Υπάρχουν (και ποιοι) περιορισμοί στις σταθερές c, λ;

Λύση:

(i) Από την σχέση μετάθεσης για $n \neq 0$

για $m = 0$: $\quad L_0L_n - L_nL_0 = -nL_n$,

με δράση στην $|\lambda\rangle$

$$L_0(L_n|\lambda\rangle) = L_nL_0|\lambda\rangle - nL_n|\lambda\rangle$$
$$= (\lambda - n)(L_n|\lambda\rangle), \quad n \neq 0.$$

Επομένως, ο $L_{n<0}$ *είναι τελεστής δημιουργίας* αφού οι $L_{n<0}|\lambda\rangle$ είναι ιδιοσυναρτήσεις με ιδιοτιμές $\lambda + (-n)$

[9] Η άσκηση αφορά τις σύμμορφες θεωρίες πεδίου.

$$L_0(L_n|\lambda\rangle) = (\lambda + (-n))(L_n|\lambda\rangle), \quad n < 0$$

και ο $L_{n>0}$ *είναι τελεστής καταστροφής* αφού οι $L_{n>0}|\lambda\rangle$ είναι ιδιοσυναρτήσεις με ιδιοτιμές $\lambda - n$

$$L_0(L_n|\lambda\rangle) = (\lambda - n)(L_n|\lambda\rangle), \qquad n > 0.$$

(ii) Όταν $|n\rangle = L_n|\lambda\rangle$ με $n < 0$ από την παραπάνω

$$L_0|n\rangle = (\lambda + |n|)|n\rangle \quad n = -1, -2, -3, \cdots$$

ενώ από την

$$L_m L_0 - L_0 L_m = mL_m + \frac{c}{12} m\left(m^2 - 1\right)\delta_{m,0}$$

έχουμε για $m < 0$

$$\begin{aligned} L_0(L_m|n\rangle) &= L_m L_0|n\rangle - mL_m|n\rangle \\ &= (\lambda + |n| - m)(L_m|n\rangle). \end{aligned}$$

Από την κανονικοποίηση $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$, την $\langle\psi| = \langle\lambda|L_m^* = \langle\lambda|L_{-m}$, την $L_{-m}|\lambda\rangle = 0$ με $m < 0$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\lambda|L_{-m}L_m|\lambda\rangle = \langle\lambda|[L_{-m}, L_m]|\lambda\rangle = 1$$

$$\Leftrightarrow -\langle\lambda|\left(2mL_{-m-m} + \frac{c}{12}m\left(m^2 - 1\right)\right)|\lambda\rangle = 1$$

$$\Leftrightarrow 2\lambda + \frac{c}{12}\left(m^2 - 1\right) \geq 0.$$

Θέτουμε $M = |m| > 0$. Για M=1: $\lambda > 0$, ενώ για M>1: $c \geq 0$ ή $2\lambda + \frac{c}{12}\left(M^2 - 1\right) \geq 0 \Leftrightarrow \lambda = -\frac{c}{24}\left(M^2 - 1\right)$ που για $2, 3, \cdots, M$ δίνει τις τιμές

$$c = -8\lambda, -3\lambda, \cdots, -\frac{24\lambda}{M^2 - 1}.$$

A19. Για καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου που αφορούν κύματα *s*-τύπου μηδενικής γωνιακής στροφορμής ($\ell = 0$) η $\psi(\vec{r})$ εξαρτάται μόνο από την ακτίνα r και όχι από τις θ, ϕ (σφαιρικά συμμετρικές λύσεις ψ) με την εξίσωση Schrödinger να γράφεται

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right]\psi = E\psi.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(i) Να δείξετε με την αντικατάσταση $r \to ar$, $a = \hbar^2/me^2$ η ακτίνα του Bohr, και $E \to \frac{me^4}{2\hbar^2}E$, $\frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6eV$, η τρισδιάστατη εξίσωση λαμβάνει την μορφή[10]

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) = -\left(E + \frac{2}{r}\right) r\psi .$$

Με την αντικατάσταση $r\,\psi(r) = f(r)$ γίνεται $f''(r) = -\left(E + \frac{2}{r}\right) f(r)$ ενώ από την επιπλέον αντικατάσταση $f(r) = e^{-\alpha r}\, g(r)$ προκύπτει η $g''(r) - 2\alpha\, g'(r) + \left(E + \frac{2}{r} + \alpha^2\right) g(r) = 0$. Επειδή το α είναι μια ελεύθερη παράμετρος θέτουμε $\alpha^2 = -E$ ώστε καταλήγουμε στην διαφορική εξίσωση

$$g''(r) - 2\alpha\, g'(r) + \frac{2}{r} g(r) = 0 .$$

Να γράψετε την λύση της διαφορικής εξίσωσης με την δυναμοσειρά $g(r) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k\, r^k$, b_k είναι οι σταθεροί συντελεστές, να την παραγωγίσετε δύο φορές και αφού εξισώσετε τους όμοιους όρους να δείξετε την αναδρομική σχέση

$$b_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} b_k \text{, για } \forall k > 1 .$$

Στο ασυμπτωτικό όριο $r >>$: $b_{k+1} \approx \frac{2\alpha}{k} b_k \approx \frac{(2\alpha)^k}{k!}$ ώστε $g(r) \sim e^{2\alpha r}$ και $f(r) \sim e^{-\alpha r + 2\alpha r} \sim e^{\alpha r}$ που απειρίζονται, επομένως δεν αποτελούν λύση δέσμιας κατάστασης. Όμως, αν για κάποιον ακέραιο n ισχύει $\alpha = \frac{1}{n} \Leftrightarrow b_{n+1} = 0$ προκύπτει ένα πεπερασμένο πολυώνυμο $g(r)$, ενώ ο όρος $e^{-\alpha r}$ αναμένεται να μηδενίσει την $f(r) = e^{-\alpha r}\, g(r)$ στο όριο. Επομένως οι δέσμιες καταστάσεις είναι αποδεκτές λύσεις με

[10] Οι μονάδες μέτρησης της απόστασης r είναι οι 'ακτίνες Bohr $a \approx 0.528\,\mathring{A}$ και της ενέργειας E τα Rydberg $\approx 13.6eV$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\alpha = \frac{1}{n}, \quad E_n = -\alpha^2 = -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots,$$

και με την αποκατάσταση των μονάδων οδηγούν στις γνωστές αρνητικές τιμές της ενέργειας[11] για το άτομο του υδρογόνου $E_n = -\left(me^4/2\hbar^2\right)n^{-2}$.

(ii) Γενικά σε έναν *N-διάστατο χώρο*, αντί τρισδιάστατο με N=3, η εξίσωση Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου έχει την μορφή

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r}\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right]\psi = E\psi \ ,$$

ενώ στο *όριο μεγάλου* N, όπου δεν υπάρχει διαφορά μεταξύ των όρων $N, N-1$, είναι ισοδύναμη με την

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N}{r}\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right]\psi = E\psi .$$

Να δειχθεί ότι στο *όριο μεγάλου* N ο *μετασχηματισμός* $H \to r^{N/2} H r^{-N/2}$ (ισοδύναμος με $\psi \to r^{-N/2}\psi$) δίνει $d/dr \to d/dr - N/2r$ και $d^2/dr^2 \to d^2/dr^2 - (N/r)(d/dr) + N^2/4r^2 + N/2r^2$ (να αποδειχθούν θέτοντας μια βοηθητική ψ) και η Χαμιλτονιανή, χωρίς όρους ~N αφού οι ~N^2 υπερισχύουν, γίνεται

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{N^2}{4r^2}\right) - \frac{e^2}{r}, \quad N \to \infty \ .$$

Αν εφαρμοσθεί η κλιμάκωση $r \to N^2 r$ τότε

$$H = \frac{1}{N^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2mN^2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{8mr^2} - \frac{e^2}{r}\right] = \frac{1}{N^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{eff}}\frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}\right]$$

και εκτός από τον συνολικό παράγοντα $1/N^2$ που καθορίζει την συνολική χωροχρονική κλίμακα προκύπτει η Χαμιλτονιανή σωματίου ενεργού μάζας $m_{eff} = mN^2$ που κινείται στο ενεργό δυναμικό $V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{8mr^2} - \frac{e^2}{r}$. Στο όριο

[11] Οι ενέργειες είναι αρνητικές αφού στο δυναμικό του ατόμου του υδρογόνου το μηδέν της ενέργειας είναι στο όριο $r = \infty$ απόστασης ηλεκτρονίου-πρωτονίου. Για κοντινές αποστάσεις η ενέργεια είναι μικρότερη και επομένως αρνητική.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

μεγάλου-N η ενεργός μάζα είναι τόσο μεγάλη που το σωμάτιο απλώς κάθεται στον πυθμένα του δυναμικού (κλασσική λύση) με την θεμελιώδη (βασική) κατάσταση απλώς το ελάχιστο του V_{eff} από την $\frac{\partial V_{eff}}{\partial r} = 0$.[12,13] Το αποτέλεσμα για το ελάχιστο είναι $r = a/4 = (\hbar^2/me^2)(1/4)$ με τιμή $V_{eff}(a/4)$ που ισοδυναμεί με την ενέργεια της βασικής στάθμης στο όριο *μεγάλου-N*

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{4}{N^2},\ N \to \infty.$$

Παρατηρούμε πως ο τύπος για $N = 3$ (τρισδιάστατος χώρος), αν και το 3 είναι μακριά από το όριο $N \to \infty$, δίνει την προσέγγιση $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{4}{9}$ ενώ το ακριβές αποτέλεσμα είναι $E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$. Οι διορθώσεις υπολογίζονται με το ανάπτυγμα *μεγάλου-N* και δίνουν την σειρά $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{4}{N^2}\left(1 + \frac{2}{N} + \frac{3}{N^2} + \cdots\right)$ που είναι συμπτωματικά ή ίδια με την τιμή του ακριβούς αποτελέσματος από την διαγωνοποίηση[14] $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{4}{(N-1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{4}{N^2}\left(1 + \frac{2}{N} + \frac{3}{N^2} + \cdots\right)$. Στις τρεις διαστάσεις N=3 δίνει $E = E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$.

---

[12] Οι υψηλότερες στάθμες προκύπτουν από το λεγόμενο ανάπτυγμα *μεγάλου-N* με την τετραγωνική προσέγγιση του ενεργού δυναμικού κοντά στο ελάχιστο ενώ οι μη αρμονικοί όροι συμπεριλαμβάνονται με θεωρία διαταραχών (Κεφ. 7).

[13] Αντίστοιχοι υπολογισμοί μπορεί να γίνουν για *s*-τύπου καταστάσεις και για το *άτομο του Ηλίου* δύο ηλεκτρονίων $(Z = 2)$ με συντεταγμένες r_{1i}, r_{2i}, που περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\left(\frac{d^2}{dr_{1i}^{\ 2}} + \frac{d^2}{dr_{2i}^{\ 2}}\right) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|},$$

με r_1, r_2 είναι οι αποστάσεις των δύο ηλεκτρονίων από τον πυρήνα.

[14] Από την παράγωγο ως προς x της γεωμετρικής σειράς $1 + x + x^2 + x^3 + \cdots = \frac{1}{1-x}$, $|x| < 1$, με την αντικατάσταση $x = \frac{1}{N}$ προκύπτει η σειρά: $1 + \frac{2}{N} + \frac{3}{N^2} + \cdots = \frac{1}{(1-1/N)^2} = \left(\frac{N}{N-1}\right)^2$, $N > 1$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΠΕΔΙΟ ΚΑΙ ΣΠΙΝ

'Ο Pauli στον παράδεισο απαιτεί από τον θεό να του εξηγήσει την σταθερά λεπτής υφής $\alpha = e^2/\hbar c$. Εκείνος πάει στον πίνακα, γράφει, γράφει, ... και κουνάει με αμηχανία το κεφάλι του'

Ανέκδοτο

Η Χαμιλτονιανή ενός ηλεκτρονίου φορτίου e $(e<0)$ και μάζας m σε δυναμικό $V(\vec{r})$, παρουσία μαγνητικού πεδίου γίνεται

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + V(\vec{r}), \tag{6.1}$$

όπου το μαγνητικό πεδίο $B(\vec{r})$ καθορίζεται από το *διανυσματικό δυναμικό* $\vec{A}(\vec{r})$ με την σχέση

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \tag{6.2}$$

Οι αντίστοιχοι τελεστές $\vec{p}$, $\vec{A}$ δεν μετατίθενται ενώ το ανάπτυγμα

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \vec{p}^2 - \frac{e}{c}\left(\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{p}\right) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2 \tag{6.3}$$

είναι ερμιτειανού τύπου για να είναι η H ερμιτειανή. Το νέο διανυσματικό δυναμικό που ορίζεται από τον *μετασχηματισμό βαθμίδας* (*gauge*)

$$\tilde{\vec{A}} = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r}) \tag{6.4}$$

δεν αλλάζει το πεδίο $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \tilde{\vec{A}} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, επειδή $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r}) = 0$ για οποιαδήποτε $\Lambda(\vec{r})$. Παρατηρούμε πως οι επιλογές της συνάρτησης διανύσματος θέσης $\Lambda(\vec{r})$ καθορίζουν *διαφορετικές βαθμίδες* με διαφορετικά διανυσματικά δυναμικά $\vec{A}$. Το γεγονός ότι το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}$ *δεν είναι μοναδικό* στην πράξη δεν επηρεάζει αφού τα αποτελέσματα πρέπει τελικά να εξαρτώνται από το πεδίο $\vec{B}$ και τα διαφορετικά $\vec{A}$ που συνδέονται με μετασχηματισμούς βαθμίδας δίνουν το ίδιο $\vec{B}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

- **Παράδειγμα 1:** Ένα φορτισμένο σωμάτιο σε συγκεκριμένο ομογενές μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\vec{e}_z$ στον $z-$άξονα μπορεί να περιγραφεί από τα *διαφορετικά διανυσματικά δυναμικά*

$$(1) \qquad \vec{A} = (A_x, A_y, A_z) = (-By/2, Bx/2, 0) = -\vec{r} \times \vec{B}/2 \qquad (6.5)$$

$$(2) \qquad \vec{A} = (A_x, A_y, A_z) = (-By, 0, 0) \ , \qquad (6.6)$$

$$(3) \qquad \vec{A} = (A_x, A_y, A_z) = (0, Bx, 0) \ , \qquad (6.7)$$

κλπ. Η επιλογή (6.6) προκύπτει από την (6.5) με τον μετασχηματισμό βαθμίδας $\vec{A} + \vec{\nabla}(-xyB/2)$ όπου $\Lambda(\vec{r}) = -xyB/2$, η επιλογή (6.7) προκύπτει από την (6.5) με τον μετασχηματισμό βαθμίδας $\vec{A} + \vec{\nabla}(xyB/2)$ όπου $\Lambda(\vec{r}) = +xyB/2$, κλπ. Και οι τρεις μορφές του $\vec{A}$ δίνουν προφανώς το *ίδιο* $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = B\vec{e}_z$.

Η *χρονικά* εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger για ***ελεύθερο σωμάτιο*** $(V = 0)$ ***παρουσία*** μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \qquad (6.8)$$

με τον μετασχηματισμό βαθμίδας $\vec{A} \to \tilde{\vec{A}} = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})$ αλλάζει στην

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)^2 \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t) \qquad (6.9)$$

που μπορεί να γίνει ακριβώς ίδια με την αρχική αρκεί η κυματοσυνάρτηση να συνοδεύεται από την αλλαγή φάσης

$$\Psi(\vec{r},t) \to \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\Psi(\vec{r},t) \, . \qquad (6.10)$$

- *Το μαγνητικό πεδίο παραμένει το ίδιο ενώ η φάση μιας κυματοσυνάρτησης εξαρτάται από την επιλογή της βαθμίδας.* Επομένως, η αντικατάσταση του διανυσματικού δυναμικού και της κυματοσυνάρτησης $\vec{A}, \Psi$ από

$$\begin{aligned} \tilde{\vec{A}} &= \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r},t) \\ \tilde{\Psi}(\vec{r},t) &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\Psi(\vec{r},t) \end{aligned} \qquad (6.11)$$

διατηρεί αναλλοίωτη την μορφή της εξίσωσης Schrodinger.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Απόδειξη:

Πρέπει πρώτα να επιβεβαιωθεί ο μεταθέτης

$$[\vec{p}, f(\vec{r})] = -i\hbar\vec{\nabla}f(\vec{r}), \quad \forall f(\vec{r}). \tag{6.12}$$

Με εφαρμογή του αποτελέσματος (6.12) υπολογίζεται και ο

$$\left[\vec{p}, e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\right] = \vec{p}\, e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} - e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\,\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} \tag{6.13}$$

ώστε

$$\vec{p}\, e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\, e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\,\vec{p} \tag{6.14}$$

από την οποία με πολλαπλασιασμό με $e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}$ προκύπτει ο *μετασχηματισμός ομοιότητας*

$$e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} = \vec{p} \tag{6.15}$$

και παρομοίως

$$e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}. \tag{6.16}$$

Η διπλή εφαρμογή του μετασχηματισμού ομοιότητας δίνει

$$e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)^2 e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} = \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \tag{6.17}$$

ή

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)^2 = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}. \tag{6.18}$$

Επομένως, η μετασχηματισμένη εξίσωση

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}\right)^2 \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t) \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})\right)^2 \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t) \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t)\, e^{-i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})} \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)
\end{aligned} \tag{6.19}$$

επανέρχεται στην αρχική αρκεί η κυματοσυνάρτηση να αλλάξει στην

$$\tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\,\Psi(\vec{r},t). \tag{6.20}$$

Η *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger* $H\psi = E\psi$ ***παρουσία μαγνητικού πεδίου*** $\vec{B}$ ***στο χρονικά ανεξάρτητο δυναμικό*** $V(\vec{r})$, από την αντικατάσταση $\Psi(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r})$ γράφεται

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{2mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \frac{ie\hbar}{2mc}\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}), \quad (6.21)$$

με διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}(\vec{r})$. Η αντικατάσταση $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\psi = \vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi$ συμπτύσσει τον δεύτερο και τον τρίτο όρο σε έναν ενώ το 2 φεύγει από τον παρονομαστή. Είναι επιτρεπτή όταν ικανοποιείται η βολική συνθήκη $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$ που υλοποιείται στην περίπτωση *σταθερού και ομογενούς μαγνητικού πεδίου* $\vec{B}$ με την επιλογή[1] βαθμίδας (6.5)

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B} = (-By/2, Bx/2, 0) \quad . \quad (6.22)$$

Η (6.21) γράφεται

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \quad (6.23)$$

και αφού $(\vec{r}\times\vec{B})\cdot\vec{\nabla} = -\vec{B}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})$ ο *δεύτερος όρος* της (6.23) μπορεί να γραφεί

$$\begin{aligned}\frac{ie\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} &= -\frac{ie\hbar}{2mc}(\vec{r}\times\vec{B})\cdot\vec{\nabla} = \frac{ie\hbar}{2mc}\vec{B}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla}) \\ &= -\frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot(\vec{r}\times\vec{p}) = -\frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{\ell}\end{aligned} \quad (6.24)$$

Ο *τρίτος όρος* της (6.23) όταν το $\vec{B}$ καθορίζει τον z – άξονα λαμβάνει την μορφή

$$\begin{aligned}\frac{e^2\vec{A}^2}{2mc^2} &= \frac{e^2}{8mc^2}(\vec{r}\times\vec{B})^2 = \frac{e^2}{8mc^2}\left(r^2B^2 - (\vec{r}\cdot\vec{B})^2\right) \\ &= \frac{e^2B^2}{8mc^2}\left((x^2+y^2+z^2) - z^2\right) \\ &= \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2) \\ &= \frac{1}{2}m\omega_L^2(x^2+y^2)\end{aligned} \quad (6.25)$$

[1] Η επιλογή της βαθμίδας είναι ελεύθερη.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

του δυναμικού ενός διδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με γωνιακή συχνότητα *Larmor* $\omega_L = eB/2mc$. Οι όροι που υπολογίσαμε έχουν τυπικό μέγεθος ανάλογο του B και σε ατομικά συστήματα γίνονται εμφανείς μόνο σε υπέρμετρα ισχυρά πεδία. Πολύ μεγάλα πεδία, της τάξης $\sim 10^{12}$ *Gauss*, που αλλάζουν την δομή των ατόμων ίσως να υπάρχουν μόνο στην επιφάνεια αστέρων νετρονίων. Επίσης, ο αρμονικός όρος (6.25) είναι σημαντικός στην κίνηση του ηλεκτρονίου σε σύγχνοτρον. Συμπεραίνουμε, λοιπόν, στο χρονικά ανεξάρτητο δυναμικό $V(\vec{r})$ παρουσία μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ η *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger* γίνεται

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) - \frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{\ell} + \frac{1}{2}m\omega_L^2(x^2+y^2)\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}). \qquad (6.26)$$

Η (6.26) θα επιλυθεί για τις περιπτώσεις κεντρικού δυναμικού, όπως στο άτομο του υδρογόνου, και φυσικά για το ελεύθερο σωμάτιο όπου V=0. Στην διδιάστατη περίπτωση θα αναφερθούμε στο κβαντικό φαινόμενο Hall όπου κβαντικά φαινόμενα εκδηλώνονται στο *μακροσκοπικό επίπεδο* και επιτρέπουν τον υπολογισμό της σταθεράς $\hbar$ με ακρίβεια 1 προς 10^8.

6.1. Το φαινόμενο Zeeman

Η εξίσωση Schrödinger για το *άτομο του υδρογόνου*, στο κεντρικό δυναμικό $V(r) = -e^2/r$ με την αντικατάσταση της μάζας του ηλεκτρονίου m_e για να μην μπερδεύεται με τον κβαντικό αριθμό m και αλλάζουμε το πρόσημο του φορτίου e σε $-e$, παρουσία του πεδίου $\vec{B} = B\vec{e}_z$ χωρίς τον αρμονικό όρο $\sim x^2 + y^2$ που είναι ασήμαντος για άτομα ενός ηλεκτρονίου γίνεται

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{eB}{2m_e c}\ell_z\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}). \qquad (6.27)$$

Παρατηρούμε πως η Χαμιλτονιανή του ατόμου του υδρογόνου (Κεφ. 5) αλλάζει μόνο κατά τον όρο που οφείλεται στο πεδίο[2]

---

[2] $H_1 = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{(-e)}{2m_e c}\vec{\ell}\cdot\vec{B}$ με την μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = -\gamma\,\vec{\ell}$ στο πεδίο $\vec{B}$ και τον *γυρομαγνητικό λόγο* $\gamma = \frac{(-e)}{2m_e c}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

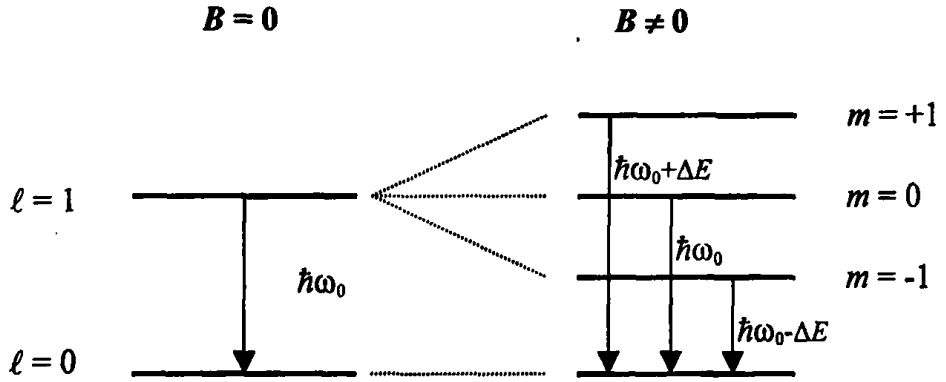
$$H_1 = \frac{eB}{2m_e c}\ell_z = \omega_L \ell_z \tag{6.28}$$

με ℓ_z την συνιστώσα της στροφορμής και $\omega_L = eB/2m_e c$ την συχνότητα Larmor. Επομένως, οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{n\ell m}$ παραμένουν ίδιες με αυτές του ατόμου του υδρογόνου (Κεφ. 5) που είναι ταυτόχρονα ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών της στροφορμής $\vec{\ell}^{\,2}, \ell_z$ με αντίστοιχες ιδιοτιμές

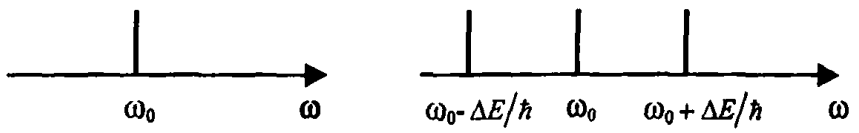
$$E_{n,m} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} + \frac{\hbar eB}{2m_e c}m = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} + \hbar\omega_L m \tag{6.29}$$

αφού $\ell_z = m\hbar$ και $n = 1, 2, \cdots$, $m = -\ell, \cdots .0, \cdots, \ell$ τους γνωστούς κβαντικούς αριθμούς. Παρατηρούμε, λοιπόν, *άρση του εκφυλισμού* στο άτομο του υδρογόνου[3], από E_n σε $E_{n,m}$, που οφείλεται στην παρουσία του μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$.

Π. χ. παρουσία μαγνητικού πεδίου:



με αντίστοιχα φάσματα



Η ενεργειακή διαφορά λόγω του μαγνητικού πεδίου είναι

$$\Delta E = \frac{e\hbar B}{2m_e c} = \mu_B B \tag{6.30}$$

[3]Παρατηρήθηκε για πρώτη φορά το 1896 και ονομάζεται *φαινόμενο Zeeman*. Το πείραμα όμως απαιτεί και την παρουσία του σπιν των ηλεκτρονίων που αγνοείται εδώ. Με το σπιν του ηλεκτρονίου έχουμε το *'ανώμαλο' φαινόμενο Zeeman*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \approx 0.93\times 10^{-20} erg\, Gauss^{-1}$ την *μαγνητόνη του Bohr* που αποτελεί μονάδα μέτρησης μαγνητικών ροπών. Μια αριθμητική εκτίμηση του μεγέθους διαχωρισμού της εκφυλισμένης ενέργειας λόγω ενός μαγνητικού πεδίου $B = 10^4 Gauss$ δίνει μικρές διαφορές $\Delta E = \mu_B B \approx 10^{-16} erg \approx 10^{-4} eV$ που αντιστοιχούν σε μήκη κύματος $\Delta\lambda \approx 5$ Å, αντί των ενεργειακών διαφορών της τάξης eV μεταξύ των σταθμών του ατόμου που αντιστοιχούν σε μήκη κύματος ~5000 Å.

6.2. Στάθμες Landau

Η εξίσωση Schrödinger για *ελεύθερο σωμάτιο* μάζας m και φορτίου $-e$ στο πεδίο $\vec{B} = B\vec{e}_z$ με τον αρμονικό όρο $\sim x^2 + y^2$ αφού $\ell_z = (xp_y - yp_x)$ είναι

$$\left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m} + \omega_L (xp_y - yp_x) + \frac{1}{2} m\omega_L^2 (x^2 + y^2)\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}). \quad (6.31)$$

Επειδή ο πρώτος όρος στην παρένθεση εξαρτάται μόνο από τη z – συντεταγμένη και μετατίθεται με την υπόλοιπη Χαμιλτονιανή (που είναι συνάρτηση μόνο των x, y) μπορούμε να γράψουμε την λύση ως το γινόμενο

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik_z z}\,\psi(x, y) \quad (6.32)$$

με αποτέλεσμα την

$$\left(\frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m} + \omega_L (xp_y - yp_x) + \frac{1}{2} m\omega_L^2 (x^2 + y^2)\right)\psi(x, y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)\psi(x, y) \quad (6.33)$$

όπου k_z είναι η ορμή της κατάστασης στον z – άξονα. Μπορεί να δειχθεί ότι η Χαμιλτονιανή είναι ισοδύναμη με αυτή ενός *μονοδιάστατου* αρμονικού ταλαντωτή

$$H = 2\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_L^2 Q^2\right) \quad (6.34)$$

με ορμή, θέση και μεταθέτη

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - m\omega_L y), \quad Q = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{p_y}{m\omega_L}\right), \quad [Q, P] = i\hbar, \quad (6.35)$$

αντίστοιχα. Επομένως, οι ιδιοτιμές ενέργειας γνωστές ως *στάθμες Landau* είναι

$$E_n(k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\frac{eB}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots, \quad -\infty < k_z < +\infty, \quad (6.36)$$

ενώ οι ιδιοσυναρτήσεις είναι κοινές με αυτές της προβολής της στροφορμής ℓ_z. Το φαινόμενο είναι γνωστό ως *κβάντωση Landau*. Στην διδιάστατη περίπτωση η κβάντωση

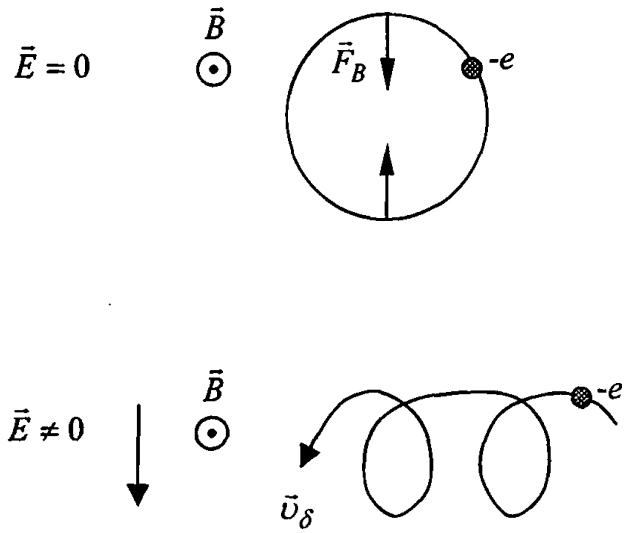
$$E_n = 2\hbar\omega_L\left(n+\frac{1}{2}\right) = \hbar\frac{eB}{mc}\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n = 0,1,2,\cdots, \tag{6.37}$$

εμφανίζεται σε *διδιάστατα* ημιαγώγιμα μεσοσκοπικά συστήματα στο γνωστό ως *κβαντικό φαινόμενο Hall*[4].

6.3. Το κβαντικό φαινόμενο Hall (κβάντωση αντίστασης)

6.3.1. Το κλασσικό φαινόμενο Hall

Η δύναμη Lorentz $F = q\vec{E} + \frac{q}{c}(\vec{\upsilon}\times\vec{B})$ επί κινούμενου φορτίου q παρουσία μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ και ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}$, όταν $\vec{E}=0$ οδηγεί σε *κυκλική κίνηση* ακτίνας $r = \frac{m\upsilon c}{qB}$ με την γωνιακή *συχνότητα κυκλότρου* $\omega_B = \frac{qB}{mc}$ και όταν $\vec{E}\neq 0$ σε *κυκλοειδή κίνηση* με ταχύτητα διαφυγής $\upsilon_\delta = c\frac{\vec{E}\times\vec{B}}{B^2}$, όπως στο σχήμα.



Επομένως, για ροή του ρεύματος j_x προς τα δεξιά (τότε τα αρνητικά φορτία $q=-e$ με e>0, κινούνται αριστερά) αποτέλεσμα της δύναμης Lorentz είναι η συσσώρευση των αρνητικών φορτίων ($q<0$) προς την κατεύθυνση $-y$. Τα ηλεκτρόνια στην

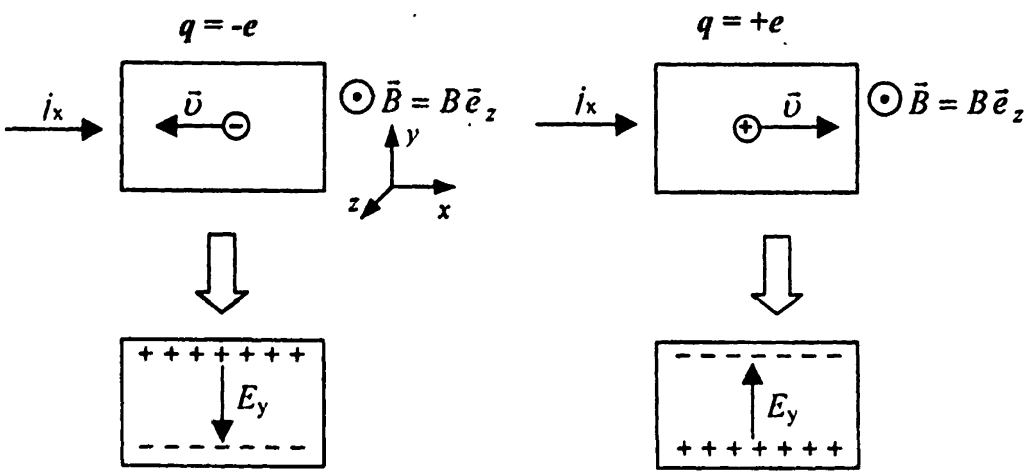
[4] Βραβεία Νόμπελ 1985, 1998.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κάτω άκρη και τα θετικά ιόντα στην πάνω δημιουργούν το *ηλεκτρικό πεδίο Hall* E_y που από την εξίσωση με την δύναμη Lorentz $eE_y = \frac{e}{c}\upsilon B$ έχει μέτρο $E_y = \frac{\upsilon}{c}B$. Άρα, η *αντίσταση Hall* ρ_{xy} που μετράται στην κάθετη διεύθυνση είναι ανάλογη του πεδίου B

$$\rho_{xy} = \frac{E_y}{j_x} = \frac{E_y}{ne\upsilon} = \frac{1}{nec}B = R_H B, \tag{6.38}$$

με R_H τον *συντελεστή Hall* και n την πυκνότητα των ηλεκτρονίων. Όταν οι φορείς του ρεύματος είναι με θετικό πρόσημο π. χ. $q = +e > 0$, το αποτέλεσμα της δύναμης Lorentz είναι η συσσώρευση θετικών φορτίων προς την κατεύθυνση του $-y$ και το πρόσημο του πεδίου Hall αλλάζει[5].

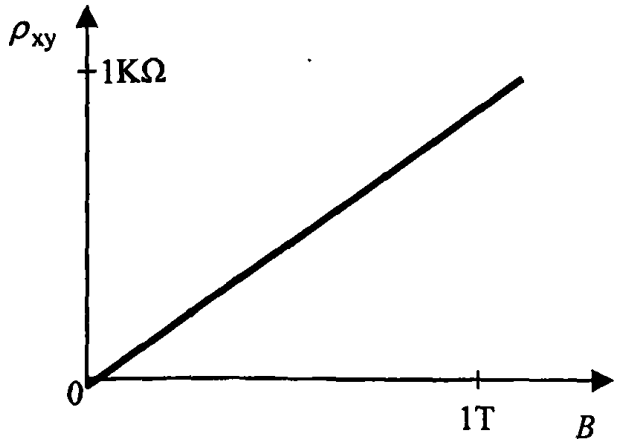


Το πρόσημο των φορέων καθορίζεται από το πρόσημο του συντελεστή Hall: Όταν οι φορείς του ρεύματος είναι αρνητικοί (π. χ. ηλεκτρόνια) ο συντελεστής Hall είναι αρνητικός ενώ για θετικούς φορείς είναι θετικός, αντίστοιχα. Το κλασσικό φαινόμενο Hall όπου $\rho_{xy} \propto B$ παρατηρείται για σχετικώς ασθενή μαγνητικά πεδία με $B < 1$ *Tesla* και διακρίνονται οι θετικοί από τους αρνητικούς φορείς ρεύματος.

[5] Παρατηρούμε πως και στις δύο περιπτώσεις, τα αρνητικά ή θετικά φορτία κινούνται υπό την επίδραση της δύναμης Lorentz στην κατεύθυνση $-y$. Το πρόσημο της δύναμης δεν αλλάζει επειδή ταυτοχρόνως αλλάζουν το πρόσημο του φορτίου e και το πρόσημο της ταχύτητας $\vec{\upsilon}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

Η κλασσική αντίσταση Hall φαίνεται στο σχήμα.

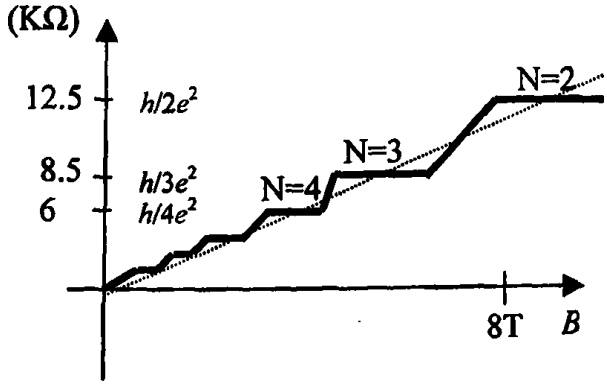


6.3.2. Το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall

Παρατηρείται στις μεσοσκοπικές διατάξεις Si-MOSFET, GaAs-GaAlAs όταν τα μαγνητικά πεδία είναι ισχυρά ($B < 8\ Tesla$) και οι θερμοκρασίες πολύ χαμηλές. Η αντίσταση Hall ρ_{xy} εμφανίζει πλατώ με κβαντισμένες τιμές της αντίστασης Hall

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}\frac{1}{N} = \frac{2\pi\hbar}{e^2}\frac{1}{N}, \quad N = 1, 2, 3, \ldots, \tag{6.39}$$

σε *ακέραιες τιμές* του N. Ο λόγος $h/e^2 = 2\pi\hbar/e^2$ έχει μονάδες αντίστασης και ισούται με $25812.8\,\Omega$. Οι κβαντισμένες τιμές της αντίστασης στο κβαντικό φαινόμενο Hall οφείλονται στις στάθμες Landau. Ο υπολογισμός της κβαντικής σταθεράς $\hbar$ από την (6.39) έχει γίνει με 8 δεκαδικά ψηφία ακρίβεια!



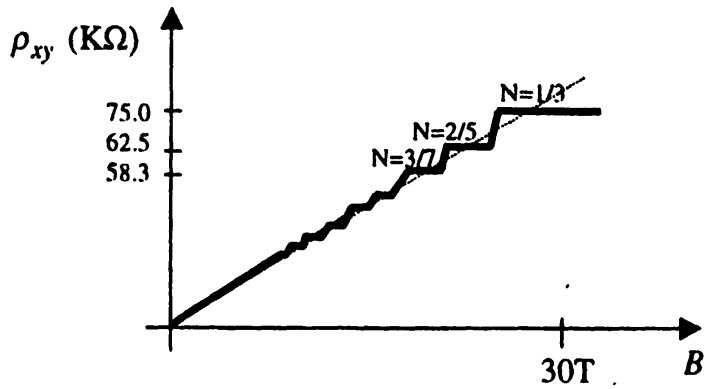
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

6.3.3. Το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall

Παρατηρείται σε πολύ ισχυρά μαγνητικά πεδία ($B < 30\,Tesla$). Η αντίσταση Hall εμφανίζει πλατώ στις κβαντισμένες τιμές

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}\frac{1}{N}, \quad N = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \cdots, \tag{6.40}$$

όπου παρατηρούνται *κλασματικές τιμές* του $N = \dfrac{m}{2m+1}$, $m = 1, 2, 3, \cdots$.



Το κλασματικό φαινόμενο Hall απαιτεί την κατανόηση του προβλήματος ηλεκτρονίων που αλληλεπιδρούν με δυνάμεις Coulomb. Σε μερικές περιπτώσεις αυτό μπορεί να γίνει με οιονεί-σωμάτια κλασματικού φορτίου, τα λεγόμενα *σύνθετα φερμιόνια*. Τότε το κλασματικό φαινόμενο Hall είναι όπως το ακέραιο φαινόμενο Hall, αλλά για σύνθετα φερμιόνια αντί για ηλεκτρόνια.

Η Χαμιλτονιανή φορτίου e σε **διδιάστατο δυναμικό $V(x,y)$ παρουσία μαγνητικού πεδίου**

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + V(x,y) \tag{6.41}$$

προκύπτει από την αντικατάσταση της ορμής $\vec{p}$ από την $\vec{p} - \dfrac{e}{c}\vec{A}$ με το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}$ για το οποίο ισχύει $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$.

❖ Να περιγραφεί η **κίνηση** *ελεύθερου ηλεκτρονίου* ($V = 0$) **στον** *διδιάστατο χώρο* $x - y$ **παρουσία κάθετου μαγνητικού πεδίου** $\vec{B} = B\vec{e}_z$ στη διεύθυνση του z-άξονα, ώστε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(p_y - \frac{e}{c}A_y\right)^2 \tag{6.42}$$

με π_x, π_y τις συνιστώσες της γενικευμένης *κανονικής ορμής* $\vec{\pi} = \vec{p} - \vec{A}$. Με την απλοποίηση $\hbar = m = c = e = 1$ η H λαμβάνει την μορφή

$$H = \frac{1}{2}\left(\pi_x^2 + \pi_y^2\right) \tag{6.43}$$

με συνιστώσες της ορμής $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ και τις A_x, A_y του διανυσματικού δυναμικού $\vec{A}$. Από το εξωτερικό γινόμενο $\vec{\nabla}\times\vec{A} = \vec{B}$ προκύπτει η βασική σχέση που ισχύει σε κάθε επιλογή βαθμίδας

$$\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B. \tag{6.44}$$

❖ Με χρήση γνωστών σχέσεων μετάθεσης, αφού οι A_x, A_y εξαρτώνται και από τις δύο μεταβλητές x, y, να αποδειχθούν οι

$$\left[A_x, p_y\right] = i\frac{\partial A_x}{\partial y}, \quad \left[A_y, p_x\right] = i\frac{\partial A_y}{\partial x} \tag{6.45}$$

ενώ με την (6.44) να δειχθεί ο μεταθέτης

$$\left[\pi_x, \pi_y\right] = iB. \tag{6.46}$$

❖ Αν ορισθούν οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2B}}\left(\pi_y + i\pi_x\right), \quad a = \frac{1}{\sqrt{2B}}\left(\pi_y - i\pi_x\right) \tag{6.47}$$

να υπολογισθεί ο μεταθέτης

$$\left[a, a^+\right] = 1. \tag{6.48}$$

❖ Να δείξετε πως ο αριθμητικός τελεστής $N = a^+a$ μπορεί να γραφεί

$$N = \frac{H}{B} - \frac{1}{2} \Leftrightarrow H = B\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) \tag{6.49}$$

με ιδιοσυναρτήσεις $|n\rangle$ και αντίστοιχες ιδιοτιμές $n = 0, 1, 2, \cdots$. Από την έκφραση της Χαμιλτονιανής H συναρτήσει των a, a^+ να βρείτε τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις της εξετάζοντας αν η H μετατίθεται με τον τελεστή $N = a^+a$. Μετά την αποκατάσταση των μονάδων το πλήρες ενεργειακό

φάσμα των ιδιοτιμών της H παρουσία μαγνητικού πεδίου είναι οι γνωστές *στάθμες Landau*

$$E_n = \hbar \frac{eB}{mc}(n+1/2) = \hbar\omega_B\,(n+1/2), \quad n = 0,1,2,\cdots \quad . \tag{6.50}$$

Παρατηρούμε πως είναι ίδιο με αυτό του απλού αρμονικού ταλαντωτή (Κεφ. 4.4) με *συχνότητα κυκλότρου* $\omega_B = \dfrac{eB}{mc}$. Όταν το μαγνητικό πεδίο γίνει μηδέν το φάσμα του ελεύθερου σωματίου (V=0) είναι συνεχές $E=\hbar^2k^2/2m$.

❖ Στο αντίστοιχο *κλασσικό πρόβλημα* ένα ηλεκτρόνιο παρουσία κάθετου σταθερού πεδίου B διαγράφει κυκλική τροχιά στο επίπεδο $x-y$ με επιλογή των συντεταγμένων του κέντρου της κυκλικής τροχιάς

$$\begin{aligned} X &= \frac{\pi_y}{B} + x \\ Y &= -\frac{\pi_x}{B} + y\,. \end{aligned} \tag{6.51}$$

Να εξετασθεί αν οι αντίστοιχοι τελεστές X, Y μετατίθενται μεταξύ τους και αν ο καθένας χωριστά μετατίθεται με την H. Αφού μετάθεση δύο ερμιτειανών τελεστών σημαίνει ότι τα φυσικά μεγέθη στα οποία αντιστοιχούν λαμβάνουν τιμές ταυτόχρονα με ακρίβεια (δεν υπεισέρχεται η αρχή της αβεβαιότητας) να εξηγήσετε τι συμβαίνει με την τοποθέτηση του κύκλου στο επίπεδο. Είναι εκφυλισμένες οι ενεργειακές στάθμες Landau $E_n, n = 0,1,2,\cdots$ και πως εξαρτάται ο εκφυλισμός τους από το πεδίο B ;

Απάντηση: Ο μεταθέτης είναι $[X,Y] = \dfrac{1}{iB}$ ώστε οι X, Y δεν μπορεί να μετρηθούν ταυτόχρονα με αποτέλεσμα αβεβαιότητα στην τοποθέτηση της κυκλικής τροχιάς στο επίπεδο (ΠΑΡ. Γ). Ο εκφυλισμός της κάθε κβαντισμένης ενεργειακής στάθμης, αν αποκατασταθούν οι μονάδες, είναι

$$E_n = \hbar\omega_B\,(n+1/2), \quad n = 0,1,2,\cdots, \quad \omega_B = \frac{eB}{mc}, \tag{6.52}$$

ανάλογος του $\omega_B \propto B$ που αντιστοιχεί στον αριθμό των δυνατών κυκλικών τροχιών για να καλυφθεί το διδιάστατο επίπεδο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

6.4. Το φαινόμενο Aharonov-Bohm (κβάντωση μαγνητικής ροής)

Είδαμε πως *η απολύτως συγκεκριμένη παρουσία του μαγνητικού πεδίου* $\vec{B}$ *εκφράζεται με διαφορετικά διανυσματικά δυναμικά* $\vec{A} = \vec{\nabla} \times \vec{B}$, στις διαφορετικές βαθμίδες $\vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})$ με επιλογές της πραγματικής συνάρτησης $\Lambda(\vec{r})$, που βεβαίως περιγράφουν την ίδια φυσική πραγματικότητα. Οι διαφορετικές βαθμίδες (για το ίδιο $\vec{B}$ διαφορετικά $\vec{A}$) αντανακλώνται στην κβαντική κυματοσυνάρτηση που όπως είδαμε *εξαρτάται από την επιλογή της βαθμίδας*. Όταν η βαθμίδα αλλάζει πηγαίνοντας $\vec{A} \to \tilde{\vec{A}} = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})$ αρκεί μόνο η απλή αλλαγή (6.11) στην κυματοσυνάρτηση, η παλιά πολλαπλασιάζεται με μια *φάση* που εξαρτάται από την πραγματική συνάρτηση $\Lambda(\vec{r})$, ώστε

$$\Psi(\vec{r},t) \to \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{r})}\Psi(\vec{r},t). \tag{6.53}$$

Θα δούμε πως αυτή η επιπλέον φάση που αποκτά η Ψ λόγω αλλαγής βαθμίδας έχει συνέπειες!

Ένας μετασχηματισμός βαθμίδας με $\Lambda(\vec{r})$ δίνει την νέα εξίσωση Schrödinger για το ελεύθερο σωμάτιο

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}\right)^2 \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t). \tag{6.54}$$

Αν όμως *το διανυσματικό δυναμικό επιλεγεί με την συνάρτηση* $\Lambda(\vec{r}) = -f(\vec{r})$ έτσι ώστε το νέο *διανυσματικό δυναμικό να είναι ακριβώς μηδέν*

$$\tilde{\vec{A}} = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r}) = \vec{A} - \vec{\nabla}f(\vec{r}) = 0, \tag{6.55}$$

συμβαίνουν δύο πράγματα:

Πρώτον: η συνάρτηση $f(\vec{r})$ υπολογίζεται από την συνθήκη που ικανοποιεί

$$\begin{aligned} &\vec{A} = \vec{\nabla}f(\vec{r}) \\ &\Rightarrow f(\vec{r}) = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}'\, \vec{A}(\vec{r}') \end{aligned} \tag{6.56}$$

με το *επικαμπύλιο ολοκλήρωμα* του διανυσματικού δυναμικού από ένα αυθαίρετο σημείο αναφοράς $\vec{r}_0$ στο $\vec{r}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Δεύτερον: παρατηρούμε πως αυτή η *ειδική επιλογή βαθμίδας* $\Lambda(\vec{r}) = -f(\vec{r})$ μπορεί να εφαρμοσθεί σε μια *περιοχή μηδενικού πεδίου* $\vec{B} = 0$, αφού το μαγνητικό πεδίο μηδενίζεται από το εξωτερικό γινόμενο $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} f(\vec{r}) = 0$.

Επομένως, η *αρχική εξίσωση* Schrödinger *ελεύθερου σωματίου παρουσία του διανυσματικού δυναμικού* $\vec{A}$ είναι

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \tag{6.57}$$

ενώ η *μετασχηματισμένη εξίσωση* (6.54), επειδή για το νέο διανυσματικό δυναμικό σε αυτή την ελεύθερη επιλογή (αρκεί να δίνει το ίδιο $\vec{B}$) ισχύει ακριβώς $\tilde{\vec{A}} = 0$, έχει *την μορφή ελεύθερου σωματίου χωρίς διανυσματικό δυναμικό*

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\tilde{\Psi}(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(\vec{r},t). \tag{6.58}$$

Με μια όμως διαφορά! Η 'πληρωμή' για την επιλογή βαθμίδας είναι η απόκτηση μιας φάσης στην μετασχηματισμένη κυματοσυνάρτηση σύμφωνα με

$$\tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{-i\frac{e}{\hbar c}f(\vec{r})}\Psi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}')}\Psi(\vec{r},t) \tag{6.59}$$

που εξαρτάται από την διαδρομή στο επικαμπύλιο ολοκλήρωμα. Επομένως:

Η κυματοσυνάρτηση Ψ παρουσία διανυσματικού δυναμικού $\vec{A} \neq 0$ γράφεται συναρτήσει της κυματοσυνάρτησης χωρίς διανυσματικό δυναμικό ($\tilde{\vec{A}} = 0$) πολλαπλασιασμένη με έναν παράγοντα φάσης

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}')}\tilde{\Psi}(\vec{r},t), \tag{6.60}$$

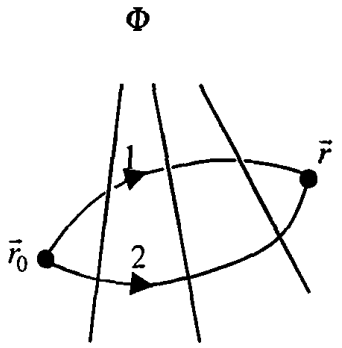
ενώ το μαγνητικό πεδίο είναι μηδενικό και στις δύο περιπτώσεις.

Ας συνοψίσουμε λοιπόν αυτήν την μάλλον πολύπλοκη (;) κβαντική πραγματικότητα: Με τον μετασχηματισμό βαθμίδας $\Lambda(\vec{r}) = -f(\vec{r})$ οι $\Psi, \tilde{\Psi}$ που αντιπροσωπεύουν την κυματοσυνάρτηση *πριν* τον μετασχηματισμό (χωρίς πεδίο $\vec{B} = 0$ αλλά παρουσία διανυσματικού δυναμικού $\vec{A} \neq 0$) και *μετά* (μηδενικό μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = 0$ και μηδενικό διανυσματικό δυναμικό $\tilde{\vec{A}} = 0$), διαφέρουν

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κατά έναν παράγοντα φάσης! Με άλλα λόγια, η κυματοσυνάρτηση 'βλέπει' τον μετασχηματισμό βαθμίδας και αποκτά μια φάση, έστω κι αν αυτός έχει επιλεγεί έτσι ώστε να δίνει μηδενικό μαγνητικό πεδίο![6] Επομένως, όταν $\vec{A} \neq 0$ η κυματοσυνάρτηση αποκτά την επιπλέον φάση παρά το γεγονός ότι $\vec{B} = 0$. Το θέμα σίγουρα αξίζει να συζητηθεί περαιτέρω.

- Στο σχήμα φαίνονται δύο διαδρομές 1 και 2 που ξεκινούν και καταλήγουν στα ίδια σημεία ενώ *περικλείουν μαγνητική ροή* Φ.



Τα αντίστοιχα ολοκληρώματα με χρήση του θεωρήματος Stokes έχουν διαφορά

$$\begin{aligned}
&\int_1 d\vec{r}\,'\,\vec{A}(\vec{r}\,') - \int_2 d\vec{r}\,'\,\vec{A}(\vec{r}\,') = \\
&= \oint d\vec{r}\,'\,\vec{A}(\vec{r}\,') \\
&= \iint_S \left(\vec{\nabla}' \times \vec{A}(\vec{r}\,')\right) \cdot d\vec{S}' \\
&= \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi
\end{aligned} \tag{6.61}$$

ακριβώς *ίση με την μαγνητική ροή Φ που διέρχεται από την επιφάνεια* που περικλείουν οι δυο διαδρομές. Παρατηρείστε πως για να μην εξαρτάται το ολοκλήρωμα από την διαδρομή πρέπει η ροή δια μέσου του βρόγχου να είναι μηδενική Φ=0. Επομένως, όταν δύο διαφορετικές διαδρομές 1 και 2

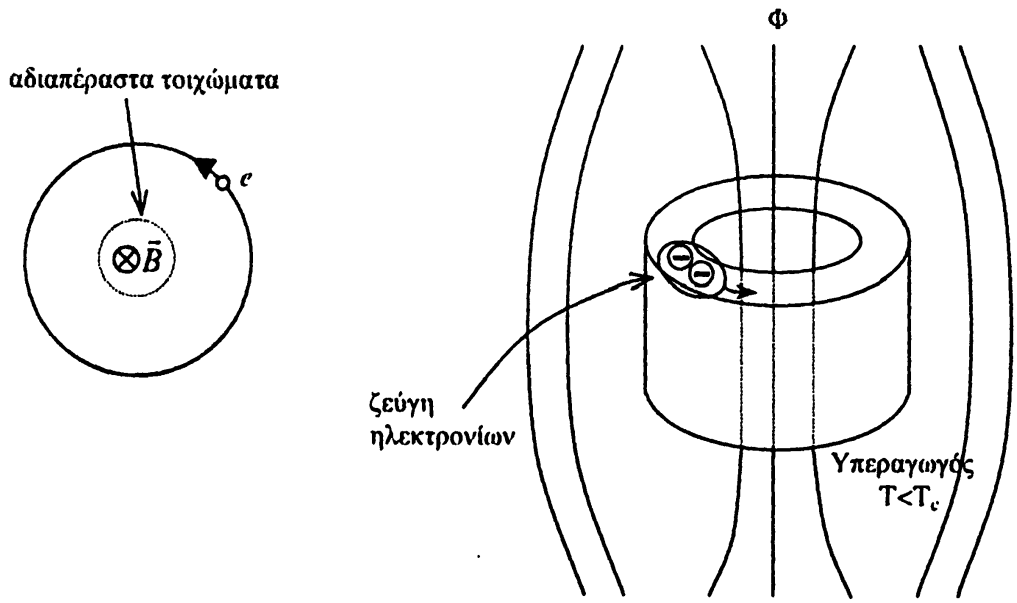
[6] Στην κβαντική το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}$ φαίνεται να είναι πιο σημαντικό, αφού υπεισέρχεται στην φάση της Ψ, από ότι το ίδιο το μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$.

περικλείουν μη μηδενική ροή Φ οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις διαφέρουν κατά έναν παράγοντα φάσης που εξαρτάται από την εγκλωβισμένη ροή Φ!

Ένα ηλεκτρόνιο σε μια περιοχή *μηδενικού* $\vec{B}$ *όταν περικλείει μια περιοχή μη μηδενικής ροής* Φ με $\vec{B} \neq 0$, *παρά το γεγονός ότι δεν διασχίζει την περιοχή* $\vec{B} \neq 0$, *μόλις συμπληρώσει μια πλήρη περιστροφή γύρω της η κυματοσυνάρτηση αποκτά τον παράγοντα φάσης*

$$e^{i\frac{e}{\hbar c}\oint d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}')} = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi} = e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}}, \quad \Phi_0 = hc/e, \tag{6.62}$$

που είναι ανάλογος της εγκλωβισμένης μαγνητικής ροής $\Phi = \iint \vec{B}\cdot d\vec{S}$.



Η μοναδικότητα της Ψ σε περιστροφές κατά 2π απαιτεί $\frac{e}{\hbar c}\Phi = 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} = n\,2\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ που γράφεται

$$\Phi = n\,\Phi_0\,, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{6.63}$$

με $\Phi_0 = hc/e$ το κβάντο της ροής και $\hbar = h/2\pi$, συνεπάγεται την *κβάντωση της εγκλωβισμένης μαγνητικής ροής*. Παρατηρούμε, λοιπόν, πως είναι αδύνατον να διακρίνουμε τις ροές Φ, $\Phi + n\Phi_0$. Ένα παράδειγμα αποτελεί η κίνηση των ηλεκτρονίων σε ένα υπεραγώγιμο δακτύλιο που περιβάλλει μια μαγνητική ροή. Στην υπεραγωγιμότητα η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κίνηση των ηλεκτρονίων γίνεται με μηδενική αντίσταση ενώ οι υπεραγωγοί λόγω του φαινομένου Meisner δεν επιτρέπουν τις δυναμικές γραμμές εντός τους. Η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται (δυστυχώς) σε πολύ μικρές θερμοκρασίες $T < T_c$, κοντά στο απόλυτο μηδέν και στα σχετικά πειράματα η κβάντωση της μαγνητικής ροής αντί της (6.63) δίνει

$$\Phi = n\frac{\Phi_0}{2} \quad . \tag{6.64}$$

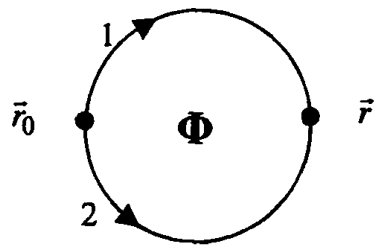
Το αποτέλεσμα (6.64) αφού $\Phi_0/2 = hc/(2e)$ ισοδυναμεί με την παρουσία *ζευγών από ηλεκτρόνια φορτίου* $2e$ (τα γνωστά ζεύγη Cooper). Αυτό είναι συνεπές με την κατανόηση του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας όπου η κίνηση των ζευγών ηλεκτρονίων γίνεται χωρίς αντίσταση.

Άσκηση 1. Να μελετηθεί η ελεύθερη κίνηση σωματίου μάζας m, φορτίου e σε κύκλο ακτίνας b, όταν μακρύ σωληνοειδές ακτίνας $a < b$ τοποθετείται κατά μήκος του άξονα και μεταφέρει μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$ που είναι υπεύθυνο για μαγνητική ροή Φ εντός του κύκλου. Το διανυσματικό δυναμικό στην επιλογή της συνθήκης βαθμίδας $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$ είναι

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}\vec{\phi}, \quad r > a \tag{6.65}$$

με $\Phi = (\pi a^2)B$ την εγκλωβισμένη μαγνητική ροή. Να υπολογισθεί η διαφορά των επικαμπύλιων ολοκληρωμάτων στις δύο διαδρομές του σχήματος $\int_1 d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}') - \int_2 d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}')$, με την αντικατάσταση $d\vec{r} = r\,\hat{\phi}\,d\phi$.

Λύση:



Η Χαμιλτονιανή είναι

$$H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + \frac{2i\hbar e}{2mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} \tag{6.66}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και αφού η ροή είναι στο επίπεδο $x-y$ στις σφαιρικές συντεταγμένες έχουμε $r=b, \theta=\pi/2$. Επομένως, η Λαπλασιανή είναι $\vec{\nabla}=\frac{\vec{\phi}}{b}\frac{\partial}{\partial\phi}$, το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}=\frac{\Phi}{2\pi b}\vec{\phi}$ και η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση ψ εξαρτάται μόνο από την αζιμουθιακή γωνία ϕ. Επομένως αν αντικαταστήσουμε

$$\vec{\nabla}=\frac{\vec{\phi}}{b}\frac{\partial}{\partial\phi},\quad \vec{A}^2=\left(\frac{\Phi}{2\pi b}\right)^2,\quad \vec{A}\cdot\vec{\nabla}=\frac{\Phi}{2\pi b^2}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.67}$$

η εξίσωση Schrödinger $H\psi=E\psi$ για την $\psi(\phi)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mb^2}\frac{d^2}{d\phi^2}+\frac{1}{2m}\left(\frac{e\Phi}{2\pi cb}\right)^2+i\frac{\hbar e\Phi}{2m\pi cb^2}\frac{d}{d\phi}\right]\psi(\phi)=E\psi(\phi) \tag{6.68}$$

έχει την μορφή μιας γραμμικής διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2}-2i\beta\frac{d\psi}{d\phi}+\varepsilon\psi=0, \tag{6.69}$$

με σταθερούς συντελεστές

$$\beta\equiv\frac{e\Phi}{2\pi c\hbar},\quad \varepsilon=\frac{2mb^2E}{\hbar^2}-\beta^2. \tag{6.70}$$

Η λύση της είναι της μορφής

$$\psi=Ae^{i\lambda\phi}, \tag{6.71}$$

με

$$\lambda=\beta\pm\sqrt{\beta^2+\varepsilon}=\beta\pm\frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE}. \tag{6.72}$$

Από την συνέχεια $\psi(\phi)=\psi(\phi+2\pi)$ ο λ είναι ακέραιος

$$\lambda=\beta\pm\frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE}=n \tag{6.73}$$

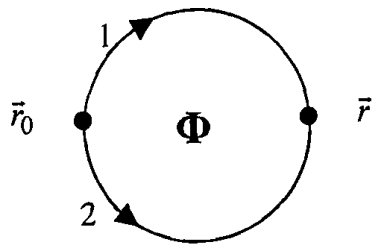
και οι *ιδιοτιμές ενέργειας*

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2mb^2}\left(n-\frac{e\Phi}{2\pi c\hbar}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2mb^2}\left(n-\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2, \tag{6.74}$$

με $\Phi_0=\frac{hc}{e}$, $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η διαφορά των ολοκληρωμάτων στις δύο διαδρομές που περικλείουν την ροή Φ είναι



$$\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}') = \int_1 d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}') - \int_2 d\vec{r}'\,\vec{A}(\vec{r}') = \frac{\Phi}{2\pi}\int\left(r\hat{\phi}\,d\phi\right)\left(\frac{\hat{\phi}}{r}\right)$$
$$= \frac{\Phi}{2\pi}\left(\int_0^{\pi} d\phi - \int_{-\pi}^{0} d\phi\right) = \frac{\Phi}{2\pi}(\pi-(-\pi)) = \Phi \tag{6.75}$$

ώστε $\frac{e}{\hbar c}\Phi = 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$.

Σχόλια:

- Οι ιδιοτιμές για κυκλική κίνηση σε κύκλο ακτίνας b χωρίς την παρουσία μαγνητικής ροής δίνονται από την (6.74) για Φ=0

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2}n^2\ ,\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{6.76}$$

και είναι διπλά εκφυλισμένες[7]. Παρατηρούμε πως ο διπλός εκφυλισμός αίρεται στην κίνηση φορτίου με την παρουσία μαγνητικής ροής Φ λόγω του σωληνοειδούς σε κυκλικό δακτύλιο ακτίνας b. Στην (6.74) για $e > 0$ οι θετικές τιμές του n αντιστοιχούν σε κίνηση στην κατεύθυνση του ρεύματος ενώ οι αρνητικές τιμές του n κίνηση αντίθετης κατεύθυνσης.

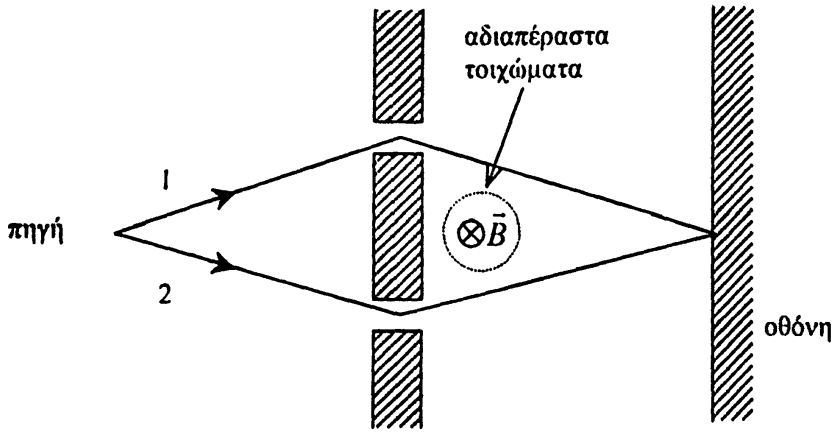
- Το πιο σημαντικό όμως στον υπολογισμό είναι η εμφάνιση μέσω της ροής Φ κατά κάποιον τρόπο του ίδιου του μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ στον τύπο για τις ιδιοτιμές της ενέργειας, *παρά το γεγονός ότι εκεί όπου κινείται το σωμάτιο το πεδίο είναι μηδενικό* $B = 0$!

- Η εξάρτηση της φάσης της κυματοσυνάρτησης από την ροή Φ διαπιστώνεται και σε ένα πείραμα *κβαντικής συμβολής* με δύο σχισμές όπου η τροχιά του ηλεκτρονίου περικλείει μια περιοχή με $\vec{B} \neq 0$ ροής Φ,

[7] Μοιάζουν με αυτές του απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού πλάτους $\underline{b}$ (Κεφ. 2, Α1) αλλά χωρίς το π^2.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ τα ηλεκτρόνια δεν αισθάνονται το $\vec{B}$ λόγω αδιαπέραστων τοιχωμάτων γύρω του.



Η υπέρθεση των δύο κυματοσυναρτήσεων για τις διαδρομές 1 και 2 δίνεται από τον γραμμικό συνδυασμό

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2, \tag{6.77}$$

με πλάτη και αντίστοιχες φάσεις $\Psi_1 = |\Psi_1| e^{i\varphi_1}$, $\Psi_2 = |\Psi_2| e^{i\varphi_2}$ που γράφεται

$$\Psi = e^{i\frac{e}{\hbar c}\int_1 d\vec{r}\,\vec{A}(\vec{r}\,')}\Psi_1 + e^{i\frac{e}{\hbar c}\int_2 d\vec{r}\,\vec{A}(\vec{r}\,')}\Psi_2 = \left(e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi}\Psi_1 + \Psi_2\right)e^{i\frac{e}{\hbar c}\int_2 d\vec{r}\,\vec{A}(\vec{r}\,')} \tag{6.78}$$

αφού η μαγνητική ροή που περικλείεται εντός των δύο διαδρομών είναι

$$\Phi = \int_1 d\vec{r}\,\vec{A}(\vec{r}) - \int_2 d\vec{r}\,\vec{A}(\vec{r}). \tag{6.79}$$

Άρα η πυκνότητα πιθανότητας να παρατηρηθεί το σωμάτιο στην οθόνη

$$P = |\Psi|^2 = \left|e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi}\Psi_1 + \Psi_2\right|^2$$

$$= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1^*\,\Psi_2\, e^{-i\left(\varphi_1-\varphi_2+\frac{e}{\hbar c}\Phi\right)} + \Psi_2^*\,\Psi_1 e^{+i\left(\varphi_1-\varphi_2+\frac{e}{\hbar c}\Phi\right)}$$

$$= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1||\Psi_2|\cos\left(\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{e}{\hbar c}\Phi\right) \tag{6.80}$$

εξαρτάται από την Φ που αν μεταβληθεί η εικόνα συμβολής αλλάζει (Κεφ.1).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΚΡΗΤΗΣ

Παράδειγμα. Στην περίπτωση ίσων πλατών στις δύο δέσμες

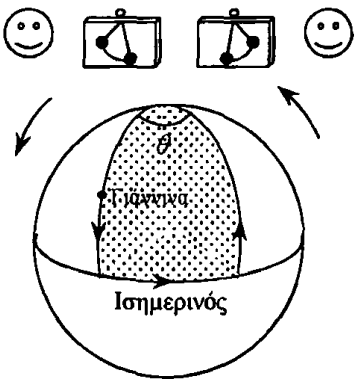
$$|\Psi_1| = |\Psi_2| = \frac{|\Psi_0|}{2} \tag{6.81}$$

η πυκνότητα πιθανότητας λαμβάνει την απλούστερη μορφή

$$P = |\Psi|^2 = \frac{1}{4}\left(|\Psi_0|^2 + |\Psi_0|^2 + 2|\Psi_0||\Psi_0|\cos\left(\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{e}{\hbar c}\Phi\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}|\Psi_0|^2\left(1 + \cos\left(\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{e}{\hbar c}\Phi\right)\right) \tag{6.82}$$

$$= |\Psi_0|^2 \cos^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{e}{\hbar c}\Phi}{2}\right).$$



R = ακτίνα Γης
A = εμβαδόν διαδρομής
Ω = στερεά γωνία

$$\theta = \frac{A}{R^2} = \Omega$$

Το φαινόμενο που περιγράψαμε όπου το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}$ επιδρά στην κβαντική συμπεριφορά φορτισμένου σωματίου που δεν συναντά το μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$ είναι γνωστό ως *φαινόμενο Aharonov-Bohm* και διαπιστώθηκε θεωρητικά το 1959. Επιβεβαιώθηκε πειραματικά αργότερα. Στην κβαντική φυσική τέτοια μαθηματικά φαινόμενα δεν είναι καθόλου ασυνήθιστα και βοηθούν στην γνώση κυρίως με την δημιουργία αναλογιών σε διαφορετικά ερευνητικά πεδία. Στις *αδιαβατικές διαδικασίες* που χαρακτηρίζονται από την σταδιακή (αργή) αλλαγή των εξωτερικών συνθηκών εμφανίζεται η γεωμετρική *φάση του Berry*. Φανταστείτε ένα κουτί που περιέχει ένα απλό εκκρεμές που το μετακινούμε αργά σε μια κλειστή καμπύλη από τον βόρειο πόλο στον ισημερινό, ανατολικά επί του ισημερινού, και πάλι πίσω στον πόλο ώστε να διαγράψουμε μια στερεά γωνία στην σφαίρα. Η γωνία αλλαγής στο επίπεδο ταλάντωσης του εκκρεμούς είναι η φάση του Berry που ισούται ακριβώς με την στερεά γωνία που διαγράψαμε μετακινώντας το κουτί (με το εκκρεμές μέσα). Το φαινόμενο Aharonov-Bohm αποτελεί ένα παράδειγμα της γεωμετρικής φάσης του Berry παρουσία μαγνητικού πεδίου.

6.5. Αναπαράσταση με μήτρες-διαγωνοποίηση σε διακριτό χώρο

Είδαμε στο Κεφ. 3.2.2. πως στις συναρτήσεις αντιστοιχούν διανύσματα και στους διαφορικούς τελεστές μήτρες. Το χωρικά εξαρτημένο μέρος μιας κυματοσυνάρτησης ψ μπορεί να αναπτυχθεί στην N – διάστατη *ορθοκανονική και πλήρη βάση* $|n\rangle$, $n = 1, 2, \cdots, N$, με $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ όπου το *ket* είναι

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \tag{6.83}$$

και *bra*

$$\langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle n| \tag{6.84}$$

με μιγαδικούς συντελεστές $c_n = \langle n|\psi\rangle$, $c_n^* = \langle n|\psi\rangle^* = \langle\psi|n\rangle$, όπως οι συνιστώσες ενός διανύσματος. Από τις $|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle|n\rangle$, $\langle\psi| = \sum_n \langle n|\psi\rangle^* \langle n|$ και την συνθήκη κανονικοποίησης $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle = 1 \tag{6.85}$$

απ' όπου προκύπτει η *σχέση πληρότητας*

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| \tag{6.86}$$

με 1 τον *ταυτοτικό τελεστή*, ή τελεστή μονάδα.

Το εσωτερικό μιας άλλης κυματοσυνάρτηση $|\varphi\rangle = \sum_n d_n |n\rangle, \langle\varphi| = \sum_n d_n^* \langle n|$ με την $|\psi\rangle$ είναι

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\psi\rangle &= \sum_n d_n^* \langle n| \sum_m c_m |m\rangle \\
&= \sum_{n,m} d_n^* c_m \langle n|m\rangle \\
&= \sum_{n,m} d_n^* c_m \delta_{n,m} \\
&= \sum_n d_n^* c_n
\end{aligned} \tag{6.87}$$

παρόμοιο με το εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος *γραμμής* (μήτρα $1 \times N$)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle\varphi| = \sum_n d_n^* \langle n| = (d_1^*, d_2^*, \cdots, d_N^*) \tag{6.88}$$

με το διάνυσμα *στήλης* (μήτρα $N \times 1$)

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} . \tag{6.89}$$

Το αποτέλεσμα του εσωτερικού γινομένου (6.87)

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (d_1^*, d_2^*, \cdots, d_N^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \sum_n d_n^* c_n \tag{6.90}$$

είναι αριθμός αφού η μήτρα έχει διαστάσεις $(1 \times N)(N \times 1) = 1 \times 1$. Αντίθετα το εσωτερικό γινόμενο

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix} (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_N^*)$$

$$= \begin{pmatrix} d_1 c_1^* & d_1 c_2^* & d_1 c_3^* & \cdots & d_1 c_N^* \\ d_2 c_1^* & d_2 c_2^* & d_2 c_3^* & \cdots & d_2 c_N^* \\ d_3 c_1^* & d_3 c_2^* & d_3 c_3^* & \cdots & d_3 c_N^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ d_N c_1^* & d_N c_2^* & d_N c_3^* & \cdots & d_N c_N^* \end{pmatrix} \tag{6.91}$$

έχει διαστάσεις $(N \times 1)(1 \times N) = N \times N$ μήτρας. Στην κανονικοποιημένη βάση ο ταυτοτικός τελεστής είναι

$$1 = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} . \tag{6.92}$$

Η παραπάνω μορφή των διανυσμάτων γραμμής ή στήλης τύπου *bra* και *ket* προκύπτει αν δεχθούμε τα διανύσματα της *ορθοκανονικής βάσης*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \cdots, |N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{6.93}$$

με το διάνυσμα $|n\rangle$ να έχει μονάδα στην n-οστη γραμμή και μηδέν αλλού (παρατηρείστε πως είναι ορθοκανονικά).

Στην *περιγραφή του Schrödinger* ο τελεστής του Hamilton H παρουσία δυναμικού $V(\vec{r})$ στην συνηθισμένη αναπαράσταση θέσης έχει την διαφορική μορφή $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ και η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση ιδιοτιμών $H\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})$ ανάγεται στην *διαφορική εξίσωση Schrödinger*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{6.94}$$

Όταν αυτή επιλυθεί μας δίνει τις ιδιοτιμές E_n και τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(\vec{r})$, με τον n να αριθμεί το σύνολο των *κβαντικών αριθμών* (πχ. στο άτομο του υδρογόνου οι ιδιοσυναρτήσεις αριθμούνται από τους κβαντικούς αριθμούς n, ℓ, m).

Στην *περιγραφή του Heisenberg* κάθε τελεστής αντιστοιχεί σε μια μήτρα. Παρατηρείστε ότι το γινόμενο δύο μητρών AB δεν είναι αναγκαστικά ίσο με BA, όπως ακριβώς ο μεταθέτης δύο τελεστών $[A,B] = AB - BA$ δεν είναι υποχρεωτικά μηδέν, αντίθετα με ό,τι συμβαίνει για αριθμούς. Από τον ορισμό του ταυτοτικού τελεστή $\sum_l |l\rangle\langle l| = \sum_m |m\rangle\langle m| = 1$ πολλαπλασιάζοντας με αυτόν από αριστερά και δεξιά προκύπτει η *'μητρική' μορφή* του H

$$\begin{aligned} H &= \sum_l |l\rangle\langle l|\, H \sum_m |m\rangle\langle m| \\ &= \sum_{l,m} |l\rangle\, \langle l|H|m\rangle\, \langle m| \\ &= \sum_{l,m} H_{lm} |l\rangle\langle m| \quad . \end{aligned} \tag{6.95}$$

Τα στοιχεία της μήτρας $H_{lm} = \langle l|H|m\rangle$ αντιστοιχούν στην l γραμμή και στην m στήλη ενώ ο Χαμιλτονιανός τελεστής H έχει την μορφή της $N \times N$ μήτρας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$H=\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \cdots & H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & \cdots & H_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3} & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle & \langle 1|H|3\rangle & \cdots & \langle 1|H|N\rangle \\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle & \langle 2|H|3\rangle & \ldots & \langle 2|H|N\rangle \\ \langle 3|H|1\rangle & \langle 3|H|2\rangle & \langle 3|H|3\rangle & \cdots & \langle 3|H|N\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle N|H|1\rangle & \langle N|H|2\rangle & \langle N|H|3\rangle & \cdots & \langle N|H|N\rangle \end{pmatrix} \tag{6.96}$$

Η εύρεση ιδιοτιμών-ιδιοσυναρτήσεων προκύπτει από *διαγωνοποίηση* της H με κατευθείαν επίλυση της εξίσωσης ιδιοτιμών $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, ιδιοτιμής E και αντίστοιχης ιδιοσυνάρτησης (ιδιοδιανύσματος)

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} . \tag{6.97}$$

Με αντικατάσταση στην εξίσωση ιδιοτιμών προκύπτει το γραμμικό και ομογενές σύστημα N εξισώσεων

$$\begin{pmatrix} H_{11}-E & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22}-E & H_{23} & \cdots & H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33}-E & \cdots & H_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3} & \cdots & H_{NN}-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}=0 \tag{6.98}$$

ενώ από την συνθήκη μηδενισμού της ορίζουσας $\det(H-EI)=0$ της $N\times N$ μήτρας $H-EI$ οι ιδιοτιμές $E=E_1, E_2, E_3, \cdots, E_N$ δίνονται από τις ρίζες του $N-$βαθμού πολυωνύμου ως προς E. Στη συνέχεια για κάθε ιδιοτιμή E το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα $|\psi\rangle$ ευρίσκεται με επίλυση του συστήματος (6.98) των γραμμικών εξισώσεων ως προς $c_1, c_2, c_3, \cdots, c_N$. Επομένως, η *διαγωνοποίηση* της μήτρας H αποτελεί ένα εναλλακτικό τρόπο επίλυσης της διαφορικής εξίσωσης Schrödinger.

Σχόλια:

- Η Χαμιλτονιανή H που συνήθως δεν είναι διαγώνια μεταπίπτει σε διαγώνια μορφή στην βάση των ιδιοδιανυσμάτων. Αν στην αρχική ορθοκανονική βάση $\{\,|n\rangle, n=1, 2, \cdots, N\,\}$ η μήτρα είναι

$$H=\sum_{l,m} H_{lm}|l\rangle\langle m| = \sum_{l,m}|l\rangle\,\langle l|H|m\rangle\,\langle m| \tag{6.99}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με στοιχεία μήτρας $H_{l,m} = \langle l|H|m\rangle$, $\forall l,m = 1, 2, \cdots, N$ στην νέα ορθοκανονική *βάση των ιδιοσυναρτήσεων* $\{\,|j\rangle, j = 1, 2, \cdots, N\,\}$

$$|j\rangle = |\psi_j\rangle = \sum_n c_n^{(j)} |n\rangle, \quad j = 1, 2, \cdots, N \tag{6.100}$$

με αντίστοιχες ιδιοτιμές E_j, από την εξίσωση ιδιοτιμών $H|j\rangle = E_j|j\rangle$ γράφεται

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j,j'} |j\rangle \langle j|H|j'\rangle \langle j'| \\ &= \sum_{j,j'} E_j\, |j\rangle \langle j|j'\rangle \langle j'| \\ &= \sum_{j,j'} E_j\, |j\rangle\, \delta_{j,j'}\, \langle j'| \\ &= \sum_j E_j\, |j\rangle \langle j| \end{aligned} \tag{6.101}$$

που έχει την *διαγώνια μορφή*

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & & & & \\ & E_2 & & & \\ & & E_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & E_N \end{pmatrix} \tag{6.102}$$

με τις ιδιοτιμές E_j κατα μήκος της κύριας διαγωνίου.

- Η διαγωνοποίηση αντιστοιχεί σε μια *αλλαγή βάσης*, από την $\{\,|n\rangle, n = 1, 2, \cdots, N\,\}$ πάμε στην $\{\,|j\rangle, j = 1, 2, \cdots, N\,\}$, στην οποία εκφράζεται η Χαμιλτονιανή μήτρα. Στην αρχική βάση η μήτρα είχε στοιχεία $H_{l,m} = \langle l|H|m\rangle$ ενώ στην νέα βάση μόνο τα διαγώνια στοιχεία $H_{j,j} = \langle j|H|j\rangle = E_j$ επιβιώνουν (για τα μή διαγώνια στοιχεία ισχύει $H_{j,j'} = \langle j|H|j'\rangle = 0$, $j \neq j'$). Παρατηρούμε πως μια οποιαδήποτε αλλαγή βάσης δίνει νέα μορφή στην μήτρα H. Η διαγωνοποίηση σημαίνει την συγκεκριμένη αλλαγή

$$|j\rangle = \sum_n c_n^{(j)} |n\rangle, \quad j = 1, 2, \cdots, N \tag{6.103}$$

με την οποία επιτυγχάνεται η εύρεση *μιας συγκεκριμένης βάσης* στην οποία η μήτρα είναι διαγώνια. Τα τετράγωνα των πλατών $\left|c_n^{(j)}\right|^2$ δίνουν την πιθανότητα της συνεισφοράς των διανυσμάτων της αρχικής βάσης $|n\rangle$, $n = 1, 2, \cdots, N$ στις ιδιοσυναρτήσεις $|j\rangle$ και ισχύει η κανονικοποίηση

$$\sum_n \left|c_n^{(j)}\right|^2 = 1, \quad \text{για} \quad \forall\, j = 1, 2, \cdots, N. \tag{6.104}$$

- Αν κατασκευασθεί η *μοναδιαία* μήτρα

$$U = \begin{pmatrix} c_1^{(1)} & c_1^{(2)} & c_1^{(3)} & \cdots & c_1^{(N)} \\ c_2^{(1)} & c_2^{(2)} & c_2^{(3)} & \cdots & c_2^{(N)} \\ c_3^{(1)} & c_3^{(2)} & c_3^{(3)} & \cdots & c_3^{(N)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_N^{(1)} & c_N^{(2)} & c_N^{(3)} & \cdots & c_N^{(N)} \end{pmatrix} \tag{6.105}$$

με στοιχεία της j – στήλης το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα

$$|j\rangle = \begin{pmatrix} c_1^{(j)} \\ c_2^{(j)} \\ c_3^{(j)} \\ \vdots \\ c_N^{(j)} \end{pmatrix} \tag{6.106}$$

το γινόμενο μητρών

$$U^{-1}\, H\, U = \begin{pmatrix} E_1 & & & & \\ & E_2 & & & \\ & & E_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & E_N \end{pmatrix} \tag{6.107}$$

είναι η διαγώνια μήτρα. Για την αντίστροφη μήτρα U^{-1} και την ερμειτιανή συζυγή U^+ ισχύουν όπως και για οποιαδήποτε μοναδιαία μήτρα U οι σχέσεις

$$\det(U) = 1, \quad U = U^{-1}, \quad U^+ = U^{-1} \tag{6.108}$$

ενώ στην αλλαγή βάσης $|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$, $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ διατηρείται το εσωτερικό γινόμενο $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi'|\psi'\rangle$. Ο μετασχηματισμός $U^{-1}\, H\, U$ που διαγωνοποιεί την μήτρα H είναι γνωστός ως *μοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός.*

- (i) Η μήτρα που προκύπτει από έναν μοναδιαίο μετασχηματισμό παραμένει ερμειτιανή ενώ (ii) οποιοσδήποτε μετασχηματισμός ομοιότητας $S^{-1} A\, S$ διατηρεί το ίχνος μιας μήτρας A.

Απόδειξη: (i) $\left(U^{-1} A\, U\right)^+ = \left(U^+ A\, U\right)^+ = U^+ A \left(U^+\right)^+ = U^{-1} A\, U$.

(ii)

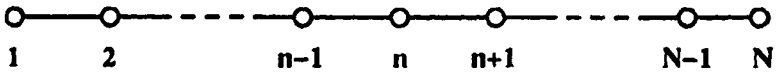
$$Tr\left(S^{-1} A\, S\right) = \sum_n \left(S^{-1} A\, S\right)_{n,n} = \sum_n \left(\sum_{i,j} \left(S^{-1}\right)_{n,i} A_{i,j}\, S_{j,n} \right)_{n,n}$$

$$= \sum_{i,j} \left(\sum_n S_{j,n} \left(S^{-1}\right)_{n,i} \right) A_{i,j} = \sum_{i,j} \delta_{i,j}\, A_{i,j} = Tr(A). \tag{6.109}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

6.5.1. Διακριτή περιγραφή

Η κβαντική περιγραφή της κίνησης ενός ηλεκτρονίου π.χ. στην μία διάσταση $d=1$, όπως στο παράδειγμα του απειρόβαθου πηγαδιού με οριακές συνθήκες 'σκληρού τοίχου' όπου η ψ μηδενίζεται στα άκρα, μπορεί αντί συνεχούς τιμής της θέσης x να γίνει στην διακριτή βάση των πλεγματικών θέσεων $|n\rangle$, $n=1,2,3,\cdots,N$. Στον μονοδιάστατο διακριτό χώρο η περιγραφή υλοποιείται με μια αλυσίδα (πλέγμα) απόστασης μονάδα μεταξύ των γειτονικών θέσεων[8].



Η Χαμιλτονιανή

$$H=\sum_{n=1}^{N}V_n|n\rangle\langle n|+\sum_{n=1}^{N}\left(|n\rangle\langle n+1|+|n+1\rangle\langle n|\right) \tag{6.110}$$

εκφράζεται στην *ορθοκανονική βάση των θέσεων* $\langle n|n'\rangle=\delta_{n,n'}$ με μια *τριδιαγώνια μήτρα*. Ο πρώτος όρος της (6.110) αφορά την *δυναμική ενέργεια* με τις τιμές του δυναμικού στην $n-$οστή θέση στα διαγώνια στοιχεία $H_{nn}=\langle n|H|n\rangle=V_n$. Ο δεύτερος όρος της (6.110) αφορά την *κινητική ενέργεια*, επειδή το ηλεκτρόνιο μπορεί να μεταφερθεί στους κοντινότερους γείτονες $n\to n\pm 1$, οπότε η σύνδεση μιας πλεγματικής θέσης με την γειτονική της στις παραπλεύρους της κυρίας διαγωνίου γίνεται με τα μη διαγώνια στοιχεία μήτρας $H_{n,n\pm 1}=\langle n|H|n\pm 1\rangle=1$.

Η H στην βάση των θέσεων $\{|n\rangle,\ n=1,2,3,\cdots,N\}$ έχει την μορφή

$$H=\begin{pmatrix} V_1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & V_2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & V_3 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & V_4 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & V_N \end{pmatrix}, \tag{6.111}$$

[8] Η κβαντική περιγραφή της κίνησης των ηλεκτρονίων γενικεύεται και σε διακριτά πλέγματα χώρου d – διαστάσεων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με διαγώνια στοιχεία

$$
\begin{aligned}
H_{n,n} &= \langle n|H|n\rangle = \langle n|\sum_{n'=1}^{N} V_{n'}|n'\rangle\langle n'|n\rangle + \langle n|\sum_{n'=1}^{N}(|n'\rangle\langle n'+1| + |n'+1\rangle\langle n'|)|n\rangle \\
&= \sum_{n'=1}^{N} V_{n'}\langle n|n'\rangle\langle n'|n\rangle + \sum_{n'=1}^{N}(\langle n|n'\rangle\langle n'+1|n\rangle + \langle n|n'+1\rangle\langle n'|n\rangle) \\
&= \sum_{n'=1}^{N} V_{n'}\delta_{n,n'} + \sum_{n'=1}^{N}\left(\delta_{n,n'}\,\delta_{n,n'+1} + \delta_{n,n'+1}\,\delta_{n,n'}\right) \\
&= V_n
\end{aligned}
\tag{6.112}
$$

και μη διαγώνια

$$
\begin{aligned}
H_{n,m} &= \langle n|H|m\rangle = \langle n|\sum_{n'=1}^{N} V_{n'}|n'\rangle\langle n'|m\rangle + \langle n|\sum_{n'=1}^{N}(|n'\rangle\langle n'+1| + |n'+1\rangle\langle n'|)|m\rangle \\
&= \sum_{n'=1}^{N} V_{n'}\langle n|n'\rangle\langle n'|m\rangle + \sum_{n'=1}^{N}(\langle n|n'\rangle\langle n'+1|m\rangle + \langle n|n'+1\rangle\langle n'|m\rangle) \\
&= \sum_{n'=1}^{N} V_{n'}\delta_{n,n'}\,\delta_{n',m} + \sum_{n'=1}^{N}\left(\delta_{n,n'}\,\delta_{m,n'+1} + \delta_{n,n'+1}\,\delta_{m,n'}\right) \\
&= V_n\,\delta_{n,m} + \left(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}\right).
\end{aligned}
\tag{6.113}
$$

Η διαγωνοποίηση της H δίνει τις *ιδιοτιμές ενέργειας* E_j και τις *ιδιοσυναρτήσεις* $|j\rangle = \sum c_n^{(j)}|n\rangle$ με $c_n^{(j)}$ το πλάτος πιθανότητας εύρεσης του σωματίου ενέργειας E_j στην θέση n. Σε παραπάνω $d > 1$ διαστάσεις η μήτρα έχει πιο πολύπλοκη μη τριδιαγώνια μορφή με $2d+1$ μη μηδενικά στοιχεία ανά γραμμή ή στήλη. Η αντικατάσταση της Χαμιλτονιανής μήτρας H στην εξίσωση ιδιοτιμών $H|j\rangle = E_j|j\rangle$ την μετατρέπει σε μια διακριτή *εξίσωση διαφορών* που στην μονοδιάστατη περίπτωση δίνει

$$
c_{n-1} + c_{n+1} + V_n c_n = E c_n, \quad n = 1,2,3,\cdots,N,\ c_0 = 0,\ c_1 = 0 \tag{6.114}
$$

με E την ενέργεια του συστήματος και c_n τα πλάτη πιθανότητας στην θέση n.

Περιοδική αλυσίδα: Στην περίπτωση *ίδιου δυναμικού* $V_n = V_0, \forall n$ αν υποθέσουμε ότι $c_n \sim \exp(ikn)$ η εξίσωση γράφεται

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$e^{ik(n-1)} + e^{ik(n+1)} + V_0 e^{ikn} = E e^{ikn}$$

$$\Rightarrow e^{-ik} + e^{+ik} + V_0 = E \tag{6.115}$$

$$\Rightarrow E = V_0 + 2\cos k \quad ,$$

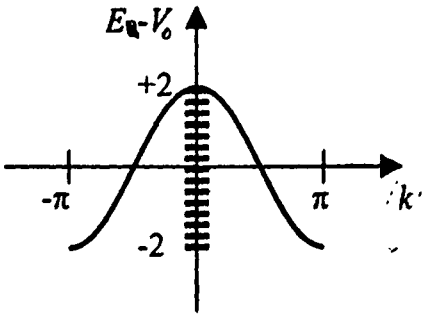
με γενική λύση για τις *ιδιοτιμές της ενέργειας*

$$E(k) = V_0 + 2\cos k, \quad k \in [-\pi, +\pi] \tag{6.116}$$

και αντίστοιχες *ιδιοσυναρτήσεις*

$$\psi_k \sim \sum_n e^{ikn} |n\rangle, \tag{6.117}$$

ενώ το διάστημα $k \in [-\pi, +\pi]$ λέγεται πρώτη ζώνη Brillouin.



Διαγωνοποίηση πεπερασμένου N με οριακές συνθήκες 'σκληρού τοίχου': Η μήτρα H έχει την *τριδιαγώνια* $N \times N$ μορφή που είδαμε

$$H = \begin{pmatrix} V_0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & V_0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & V_0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & V_0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & V_0 \end{pmatrix} \tag{6.118}$$

και διαγωνοποιείται με την αντικατάσταση $c_n \sim \sin kn$ από την οριακή συνθήκη με $c_{N+1} \sim \sin k(N+1) = 0 \Leftrightarrow k(N+1) = \pi j,\ j = 1, 2, \cdots, N$. Τα αποτελέσματα για τις *ιδιοτιμές ενέργειας* είναι

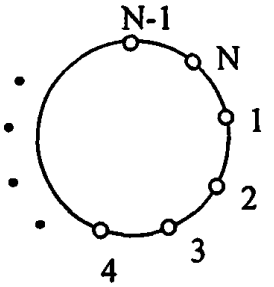
$$E_j = V_0 + 2\cos\frac{\pi j}{N+1}, \quad j = 1, 2, \cdots, N \tag{6.119}$$

και τις αντίστοιχες κανονικοποιημένες *ιδιοσυναρτήσεις* (στάσιμα κύματα)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$|j\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n^{(j)} |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{n=1}^{N} \sin\frac{\pi j n}{N+1} |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \begin{pmatrix} \sin\frac{\pi j}{N+1}1 \\ \sin\frac{\pi j}{N+1}2 \\ \sin\frac{\pi j}{N+1}3 \\ \vdots \\ \sin\frac{\pi j}{N+1}N \end{pmatrix} \quad j = 1,2,\cdots,N. \tag{6.120}$$

Διαγωνοποίηση πεπερασμένου N με περιοδικές οριακές συνθήκες:



Η μήτρα έχει την $N \times N$ μορφή

$$H = \begin{pmatrix} V_0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & V_0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & V_0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & V_0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & V_0 \end{pmatrix} \tag{6.121}$$

και από τις *περιοδικές οριακές συνθήκες* $|n+N\rangle = |N\rangle$ υπάρχουν τα επιπλέον στοιχεία $\langle 1|H|N\rangle = \langle N|H|1\rangle = 1$ που συνδέουν την πρώτη με την $N-$οστή θέση. Από την συνθήκη $c_0 = c_N$ έχουμε $c_0 = c_N \Rightarrow 1 = e^{ikN} \Rightarrow kN = 2\pi j$, ώστε

$$k = \frac{2\pi j}{N}, \quad j = 1,2,\cdots,N. \tag{6.122}$$

Επομένως οι N *ιδιοτιμές* είναι

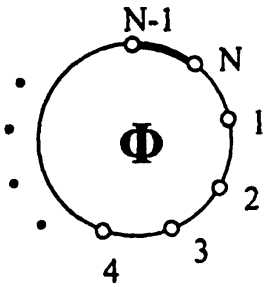
$$E_j = V_0 + 2\cos\frac{2\pi j}{N}, \quad j = 1,2,\cdots,N \tag{6.123}$$

και οι αντίστοιχες *κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις* (τρέχοντα κύματα)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$|j\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n^{(j)}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{i\frac{2\pi j}{N}n}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi j}{N}1} \\ e^{i\frac{2\pi j}{N}2} \\ e^{i\frac{2\pi j}{N}3} \\ \vdots \\ e^{i\frac{2\pi j}{N}N} \end{pmatrix} \quad j = 1,2,\cdots,N. \quad (6.124)$$

Διαγωνοποίηση με εγκλωβισμένη ροή Φ: Από το φαινόμενο Aharonov-Bohm (Κεφ. 6.4) σε μια πλήρη περιστροφή η φάση της κυματοσυνάρτησης αλλάζει κατά $2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$ με $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ το κβάντο της μαγνητικής ροής.



Τα αποτελέσματα στην διακριτή περίπτωσης είναι παρόμοια με αυτά της Άσκησης 2. Η μορφή της $N \times N$ μήτρας με την ροή στον δεσμό N,N-1 είναι

$$H = \begin{pmatrix} V_0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}} \\ 1 & V_0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & V_0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & V_0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ e^{-i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}} & 0 & 0 & 0 & 1 & V_0 \end{pmatrix} \quad (6.125)$$

και διαγωνοποιείται όπως με τις *περιοδικές οριακές συνθήκες* από την συνθήκη

$$c_{n+N} = e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}}c_n \Leftrightarrow e^{ikN} = e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}} \Leftrightarrow kN = 2\pi j + 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}, \text{ ώστε}$$

$$k = \frac{2\pi\left(j + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}, \quad j = 1,2,\cdots,N. \quad (6.126)$$

Επομένως οι *ιδιοτιμές* είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$E_j = V_0 + 2\cos\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}, \quad j = 1,2,\cdots,N \tag{6.125}$$

και οι αντίστοιχες *κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις*

$$|j\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n^{(j)}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{i\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}n}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}1} \\ e^{i\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}2} \\ e^{i\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}3} \\ \vdots \\ e^{i\frac{2\pi\left(j+\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{N}N} \end{pmatrix} \quad j = 1,2,\cdots,N. \tag{6.128}$$

Σχόλια:

- Τα αποτελέσματα μπορεί να συγκριθούν με αυτά στο συνεχές που είδαμε στην Άσκηση 2 με περιοδικές οριακές συνθήκες. Παρατηρούμε πως με οριακές συνθήκες 'σκληρού τοίχου' (στάσιμα κύματα) απουσιάζει ο εκφυλισμός στις ενέργειες (6.119) με μία ενέργεια στο άνω άκρο $E_N = V_0 + 2$. Ενώ για περιοδικές οριακές συνθήκες (τρέχοντα κύματα) υπάρχει *διπλός εκφυλισμός* στις ενέργειες (6.123). Όταν ο N είναι *άρτιος*: $E_j = E_{N-j}$, $j = 1,2,\cdots,N/2-1$ με $E_{N/2} = V_0 - 2$, $E_N = V_0 + 2$ ενώ αντίστοιχα όταν ο N είναι *περιττός*: $E_j = E_{N-j}$, $j = 1,2,\cdots,(N-1)/2$ με $E_N = V_0 + 2$.
- Η γενική λύση για $3-$διάστατα κυβικά πλέγματα είναι η λεγόμενη *δομή ζώνης* με *ιδιοτιμές*

$$E(\vec{k}) = V_0 + 2\left(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z\right), \quad k_{x,y,z} \in [-\pi,+\pi] \tag{6.129}$$

και *ιδιοσυναρτήσεις*

$$\psi_{\vec{k}} \sim \sum_{n} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n}|\vec{r}\rangle_n \tag{6.130}$$

□ Να γραφεί η Χαμιλτονιανή με το άθροισμα

$$H = V_0 1 + A + A^+ \tag{6.131}$$

που ορίζει τις μήτρες

$$A = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n+1|, \quad A^+ = \sum_{n=1}^{N} |n+1\rangle\langle n| \quad . \tag{6.132}$$

Να δείξετε ότι

$$A|n\rangle = |n-1\rangle, \quad A^+|n\rangle = |n+1\rangle \tag{6.133}$$

$$AA^+ = A^+A = 1 \tag{6.134}$$

και οι μήτρες H, A, A^+ έχουν τις ίδιες ιδιοσυναρτήσεις. Να κατασκευασθεί η $N \times N$ μήτρα για τον τελεστή A^+ και να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις με περιοδικές οριακές συνθήκες. Μετά να χρησιμοποιήσετε τα αποτελέσματα για να βρείτε τις τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις της H.

Υπόδειξη: Να δείξετε πρώτα ότι η μήτρα $A - \lambda I$ έχει ορίζουσα $(-1)^N(\lambda^N - 1)$ και να υπολογίσετε τις ρίζες της.

6.6. Σπιν

Η στροφορμή $\vec{\ell}$ που αντιστοιχεί στην κλασσική μορφή $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ από εδώ και στο εξής θα αναφέρεται ως *τροχιακή στροφορμή*, π. χ. στο άτομο του υδρογόνου η τροχιακή στροφορμή σχετίζεται με την κίνηση του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα και περιγράφεται από τις σφαιρικές αρμονικές. Το ηλεκτρόνιο όμως έχει και ***ένα επιπλέον είδος γωνιακής στροφορμής χωρίς καμία απολύτως εξάρτηση από την θέση ή την ορμή.*** Αυτή η *χαρακτηριστική ιδιοστροφορμή* για κάθε σωμάτιο ονομάζεται ***σπιν*** είναι καθαρά κβαντικής υφής και αναπαριστάνεται αποκλειστικά με μήτρες.

Στην κατανόηση του κβαντικού σπιν ίσως διευκολύνει πάλι η *λανθασμένη κλασσική εικόνα* ενός σωματίου σαν μια μικρή σφαίρα που περιστρέφεται ('σπινιάρει'). Όπως στην τροχιακή στροφορμή αντιστοιχούν οι σφαιρικές αρμονικές ιδιοσυναρτήσεις $|\ell, m\rangle$, όπου ℓ είναι ο κβαντικός αριθμός του μέτρου και m της

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

προβολής, στο σπιν $\vec{s}$ αντιστοιχούν[9] οι *ιδιοσυναρτήσεις σπίνορς* $|s,m_s\rangle$ με *εξισώσεις ιδιοτιμών*

$$\begin{aligned} \vec{s}^2|s,m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2|s,m_s\rangle \\ s_z|s,m_s\rangle &= m_s\hbar\,|s,m_s\rangle, \end{aligned} \tag{6.135}$$

για το τετράγωνο του μέτρου $\vec{s}^2$ και την προβολή s_z στον $z-$άξονα. Τα ιδιοδιανύσματα σπιν $|s,m_s\rangle$ που δεν είναι πλέον οι σφαιρικές αρμονικές[10] χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς του σπιν s και της προβολής του σπίν m_s. Επιπλέον, αφού δεν υπάρχει λόγος αποκλεισμού *ημιακέραιων τιμών* οι κβαντικοί αριθμοί του σπιν μπορούν να λάβουν τις τιμές

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots, \qquad m_s = -s, -s+1, \cdots, 0, \cdots, s-1, +s. \tag{6.136}$$

Η ανάγκη εισαγωγής του σπιν φάνηκε αρχικά στην αδυναμία να ερμηνευθούν συγκεκριμένα πειράματα, όπως το *πείραμα Stern-Gerlach* (Σχ.6.1)[11]. Η κυματοσυνάρτηση των σωματίων που είναι συνάρτηση *χώρου και σπιν* εκφράζεται με το γινόμενο

$$\psi(\vec{r},m_s) = \psi(\vec{r})\,\chi(m_s) \quad , \tag{6.137}$$

όπου $\psi(\vec{r})$ η κυματοσυνάρτηση *χώρου*, $\chi(m_s)$ η κυματοσυνάρτηση του *σπιν* ενώ κρατάμε το ίδιο σύμβολο ψ για την *ολική κυματοσυνάρτηση χώρου-σπιν*. Π. χ. οι τιμές προβολής του σπιν στον $z-$άξονα από την (6.135) είναι $-s\hbar, (-s+1)\hbar, \cdots, 0, \cdots, +s\hbar$ με πιθανότητες εμφάνισης

---

[9] Το σπιν είναι ένα είδος στροφορμής χωρίς κλασσικό ανάλογο και εξάρτηση από τον χώρο.

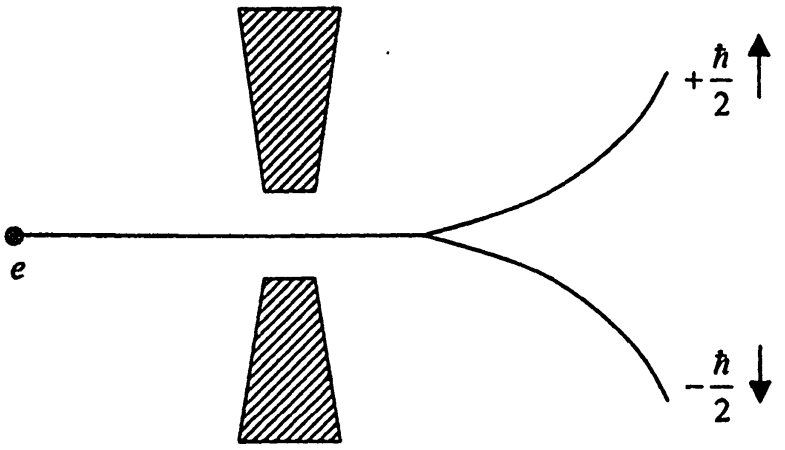
[10] Δεν είναι καν συναρτήσεις των θ, ϕ.

[11] **Πείραμα Stern-Gerlach:** Η μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = \gamma\,\vec{\ell} = \left(-e/2m_e c\right)\vec{\ell}$ για ηλεκτρόνιο μάζας m_e φορτίου $-e$ σε πεδίο $\vec{B} = B\,\vec{e}_z$ δίνει $\mu_z = \left(-e\hbar/2m_e c\right)m$, $m = -\ell, \cdots, +\ell$. Όμως, όταν $\ell = 0$, $m = 0$ στο πείραμα παρατηρούνται, αντί μιάς, δύο κηλίδες. Αυτό συμβαίνει λόγω της παρουσίας του σπιν $s = 1/2$ με $\vec{\mu} = \gamma_s\,\vec{s}$, $\mu_z = g_s\left(-e\hbar/2m_e c\right)m_s$, $m_s = -1/2, +1/2$ και τον παράγοντα Lande $g_s = 2.00232$ πολύ κοντά στην τιμή 2 θεωρητικά *και πειραματικά*.

$$P(m_s) = |\chi(m_s)|^2, \tag{6.138}$$

$m_s = -s, -s+1, \cdots, 0, \cdots s-1, +s$, που αποτελούν μια *διακριτή κατανομή* με την συνθήκη κανονικοποίησης

$$\sum_{m_s=-s}^{+s} P(m_s) = \sum_{m_s=-s}^{+s} |\chi(m_s)|^2 = 1. \tag{6.139}$$



Σχ. 6.1. *Πειραματική συσκευή Stern-Gerlach.*

6.6.1. Αλγεβρική θεωρία του σπιν

Η αλγεβρική θεωρία της ιδιοστροφορμής σπιν $\vec{s}\,(s_x, s_y, s_z)$ είναι παρόμοια με αυτήν της τροχιακής γωνιακής στροφορμής (Κεφ. 5, σελ. 204). Η τιμή του σπιν s που πρωτίστως μας ενδιαφέρει είναι $s = 1/2$, το σπιν των ηλεκτρονίων, πρωτονίων, νετρονίων, κλπ, όπου οι τιμές του κβαντικού αριθμού της προβολής του σπιν προφανώς είναι $m_s = \pm 1/2$. Η άλγεβρα του σπιν $-1/2$ συνοψίζεται στις βασικές *σχέσεις μετάθεσης*

$$[s_x, s_y] = i\hbar s_z, \quad [s_y, s_z] = i\hbar s_x, \quad [s_z, s_x] = i\hbar s_y, \tag{6.140}$$

και τις *εξισώσεις ιδιοτιμών*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\vec{s}^2|1/2,\pm 1/2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|1/2,\pm 1/2\rangle$$
$$s_z|1/2,\pm 1/2\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|1/2,\pm 1/2\rangle. \tag{6.141}$$

ενώ το μέτρο και η προβολή του σπιν-1/2 είναι $|\vec{s}| = \hbar\sqrt{3/4}, s_z = \pm\hbar/2$. Οι αντίστοιχοι τελεστές σπιν εκφράζονται στην ορθοκανονική και πλήρη *βάση των* λεγόμενων *σπίνορς*

$$\chi_+ = |1/2,+1/2\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \chi_- = |1/2,-1/2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{6.142}$$

που αντιστοιχούν σε *σπιν πάνω* $(\uparrow)$ και *σπιν κάτω* $(\downarrow)$ στον $z-$άξονα. Τα διανύσματα $\chi_\pm$ είναι οι *ιδιοσυναρτήσεις* του τελεστή s_z με *ιδιοτιμές* $\pm\hbar/2$. Μια γενική κατάσταση σωματίου σπιν-1/2, περιγράφεται με τον γραμμικό συνδυασμό

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = c_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + c_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}c_+\\c_-\end{pmatrix} \tag{6.143}$$

και αντίστοιχες πιθανότητες προβολής του σπιν στον $z-$άξονα

$$P_\pm = |c_\pm|^2, \quad P_+ + P_- = 1. \tag{6.144}$$

Από την (6.141) υπολογίζονται οι 2×2 *μήτρες* στην βάση των σπίνορς $\{\chi_+,\chi_-\}$ για τους τελεστές σπιν

$$\vec{s}^2\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+, \quad \vec{s}^2\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_-, \quad s_z\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+, \quad s_z\chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_- \tag{6.145}$$

ώστε

$$\vec{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}, \tag{6.146}$$

ενώ από την δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής $s_\pm = s_x \pm i s_y$, με την γενική σχέση $s_\pm|s,m_s\rangle = \sqrt{s(s+1)-m_s(m_s\pm 1)}\ \hbar|s,m_s\pm 1\rangle$ απ' όπου

$$s_+\chi_- = \hbar\ \chi_+, \quad s_-\chi_+ = \hbar\ \chi_-, \quad s_+\chi_+ = s_-\chi_- = 0, \tag{6.147}$$

οι αντίστοιχες μήτρες στην βάση $\{\chi_+,\chi_-\}$ είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

$$s_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6.148}$$

Επιλύουμε για τους s_x, s_y

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-), \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-) \tag{6.149}$$

ώστε

$$s_x\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_-, \quad s_x\chi_- = \frac{\hbar}{2}\chi_+, \quad s_y\chi_+ = -\frac{\hbar}{2i}\chi_-, \quad s_y\chi_- = \frac{\hbar}{2i}\chi_+, \tag{6.150}$$

απ' όπου προκύπτει η μορφή των αντίστοιχων μητρών σπιν στην βάση $\chi_\pm$

$$s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.151}$$

Εναλλακτικά οι μήτρες $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z) = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ γράφονται με τις γνωστές ως *μήτρες σπιν του Pauli*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.152}$$

Οι $\vec{s}^2, s_x, s_y, s_z$ είναι ερμιτειανοί τελεστές, επομένως αναπαριστούν παρατηρήσιμα μεγέθη, όχι όμως οι $s_\pm = s_x \pm i s_y$.

- Είδαμε τις μήτρες s_x, s_y, s_z για τις προβολές του σπιν στους βασικούς άξονες x, y, z. Η τιμή του σπιν s_n σε μια *αυθαίρετη διεύθυνση* με χαρακτηριστικό διάνυσμα $\vec{n}\,(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ *μέτρου μονάδα* αντιστοιχεί στην μήτρα

$$s_n = \vec{s}\cdot\vec{n} = s_x n_x + s_y n_y + s_z n_z = \frac{\hbar}{2}(s_x n_x + s_y n_y + s_z n_z) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} \tag{6.153}$$

και από τις μήτρες $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ του Pauli σε σφαιρικές συντεταγμένες μπορεί να δειχθεί ότι

$$s_n = \frac{\hbar}{2}\sigma_n = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi} \\ \sin\theta\, e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{6.154}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

6.6.2. Προβολές του σπιν

- **Στην $z-$διεύθυνση**: Οι ιδιοτιμές του $s_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, που είναι ήδη διαγώνια μήτρα στην βάση $\chi_\pm$, είναι οι $\pm\frac{\hbar}{2}$ με ιδιοδιανύσματα $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Επομένως, αν το σπιν s_z μετρηθεί στην $z-$διεύθυνση στην γενική κατάσταση

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{6.155}$$

θα ληφθεί η τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_+ = |c_+|^2$ ή η τιμή $-\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_- = |c_-|^2$ και αφού είναι οι μόνες δυνατότητες $P_+ + P_- = 1$.

- **Στην $x-$διεύθυνση**: Αν επιλέξουμε να μετρήσουμε το $s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, ποια είναι τα πιθανά αποτελέσματα και ποιές οι πιθανότητες εμφάνισής τους; Από την μορφή της μήτρας s_x με διαγωνοποίηση

$$\det\begin{pmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \lambda = \pm\frac{\hbar}{2} \tag{6.156}$$

οι πιθανές τιμές του s_x είναι πάλι $\pm\frac{\hbar}{2}$, όπως και του s_z. Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\pm\frac{\hbar}{2}$ υπολογίζονται με τον γνωστό τρόπο $\chi_\pm^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$. Επειδή τα ιδιοδιανύσματα μιας ερμιτειανής μήτρας καλύπτουν τον χώρο μια γενική κυματοσυνάρτηση σπιν

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{6.157}$$

μπορεί να γραφεί στην βάση των $\chi_\pm^{(x)}$ ως εξής

$$\chi = c_+^{(x)}\chi_+^{(x)} + c_-^{(x)}\chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} c_+^{(x)} + c_-^{(x)} \\ c_+^{(x)} - c_-^{(x)} \end{pmatrix}. \tag{6.158}$$

Εξισώνοντας τις (6.157), (6.158) *επιλύουμε* ως προς $c_\pm^{(x)}$

$$\begin{pmatrix} c_+^{(x)} \\ c_-^{(x)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} c_+ + c_- \\ c_+ - c_- \end{pmatrix} \tag{6.159}$$

και η χ στην βάση των ιδιοδιανυσμάτων του s_x γίνεται

$$\chi = \left(\frac{c_+ + c_-}{\sqrt{2}}\right)\chi_+^{(x)} + \left(\frac{c_+ - c_-}{\sqrt{2}}\right)\chi_-^{(x)} . \tag{6.160}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επομένως, όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση χ μια μέτρηση του s_x θα δώσει την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_+^{(x)} = (1/2)|c_+ + c_-|^2$ ή την τιμή $-\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_-^{(x)} = (1/2)|c_+ - c_-|^2$ ενώ $P_+^{(x)} + P_-^{(x)} = 1$.

- **Στην y – διεύθυνση**: Για τον $s_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ οι ιδιοτιμές ευρίσκονται πάλι $\pm\frac{\hbar}{2}$ και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $\chi_\pm^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$. Μια γενική κυματοσυνάρτηση σπιν

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{6.161}$$

μπορεί να γραφεί τώρα στην βάση των $\chi_\pm^{(y)}$

$$\chi = c_+^{(y)}\chi_+^{(y)} + c_-^{(y)}\chi_-^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} c_+^{(y)} + c_-^{(y)} \\ ic_+^{(y)} - ic_-^{(y)} \end{pmatrix}. \tag{6.162}$$

Εξισώνοντας τις δύο μορφές *επιλύουμε* ως προς $c_\pm^{(y)}$

$$\begin{pmatrix} c_+^{(y)} \\ c_-^{(y)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} c_+ - ic_- \\ c_+ + ic_- \end{pmatrix} \tag{6.163}$$

και η χ γράφεται

$$\chi = \left(\frac{c_+ - ic_-}{\sqrt{2}}\right)\chi_+^{(y)} + \left(\frac{c_+ + ic_-}{\sqrt{2}}\right)\chi_-^{(y)} . \tag{6.164}$$

Επομένως, μιά μέτρηση του s_y θα δώσει την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_+^{(y)} = (1/2)|c_+ - ic_-|^2$ ή την $-\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_-^{(y)} = (1/2)|c_+ + ic_-|^2$ ενώ $P_+^{(y)} + P_-^{(y)} = 1$.

- **Στην αυθαίρετη n – διεύθυνση**: Για τον $s_n = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi} \\ \sin\theta\, e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$ που είναι ερμιτειανή μήτρα άρα η προβολή του σπιν στην διεύθυνση που ορίζει είναι μετρήσιμη με ιδιοτιμές πάλι $\pm\frac{\hbar}{2}$ και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $\chi_+^{(n)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi} \end{pmatrix}$, $\chi_-^{(n)} = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi} \end{pmatrix}$. Μια γενική κυματοσυνάρτηση σπιν

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{6.165}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μπορεί να γραφεί στην βάση των $\chi_{\pm}^{(n)}$

$$\chi = c_{+}^{(n)}\chi_{+}^{(n)} + c_{-}^{(n)}\chi_{-}^{(n)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, c_{+}^{(n)} + \sin\frac{\theta}{2}\, c_{-}^{(n)} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi}\, c_{+}^{(n)} - \cos\frac{\theta}{2} e^{i\phi}\, c_{-}^{(n)} \end{pmatrix}. \qquad (6.166)$$

Εξισώνοντας τις δύο μορφές *επιλύουμε* ως προς $c_{\pm}^{(n)}$

$$\begin{pmatrix} c_{+}^{(n)} \\ c_{-}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, c_{+} + \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\phi}\, c_{-} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, c_{+} - \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi}\, c_{-} \end{pmatrix} \qquad (6.167)$$

και στην βάση αυτή γράφεται

$$\chi = \left(\cos\frac{\theta}{2} c_{+} + \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\phi} c_{-}\right)\chi_{+}^{(n)} + \left(\sin\frac{\theta}{2} c_{+} - \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi} c_{-}\right)\chi_{-}^{(n)} \quad .(6.168)$$

Μια μέτρηση του s_n στην αυθαίρετη διεύθυνση $\vec{n}$ θα δώσει την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_{+}^{(n)} = \left|\cos\frac{\theta}{2} c_{+} + \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\phi}\, c_{-}\right|^2$ ή την τιμή $-\frac{\hbar}{2}$ με πιθανότητα $P_{-}^{(n)} = \left|\sin\frac{\theta}{2}\, c_{+} - \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi}\, c_{-}\right|^2$ ενώ $P_{+}^{(n)} + P_{-}^{(n)} = 1$. [12]

Σχόλια:

- Οι ιδιοσυναρτήσεις των s_x, s_y, s_z, s_n περιγράφουν καταστάσεις με *συγκεκριμένες προβολές του σπιν* $+\hbar/2$ ή $+\hbar/2$ στις x, y, z, n διευθύνσεις, αντίστοιχα. Μια κυματοσυνάρτηση σπιν στην βάση των σπίνορς $\chi_{\pm}$

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \qquad (6.168)$$

σημαίνει πιθανότητες $P_{\pm} = |c_{\pm}|^2$ *οι τιμές του σπίν να είναι* $\pm\hbar/2$ *στην* $z-$*διεύθυνση*, με $c_{+} = \alpha$, $c_{-} = \beta$. Έστω ότι μας ζητείται η πιθανότητα σε μια μέτρηση, π.χ. στην $x-$διεύθυνση, να πάρουμε τις τιμές $\pm\hbar/2$:

  - Αναπτύσουμε την δοθείσα χ στις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή προβολής του σπιν *στην διεύθυνση που επιθυμούμε*, εδώ για την s_x οι ιδιοσυναρτήσεις είναι $\chi_{\pm}^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ με

[12] Τα αποτελέσματα για την $x-$διεύθυνση προκύπτουν από την αντικατάσταση $\theta = \pi/2$, $\phi = 0$, για την $y-$διεύθυνση από την $\theta = \pi/2$, $\phi = \pi/2$ και για την $z-$διεύθυνση από την $\theta = 0$, $\phi = 0$. Να το επιβεβαιώσετε κάνοντας τους αντίστοιχους υπολογισμούς.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = c_+^{(x)} \chi_+^{(x)} + c_-^{(x)} \chi_-^{(x)} = c_+^{(x)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + c_-^{(x)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.169)$$

- Υπολογίζουμε τα πλάτη πιθανότητας $c_\pm^{(x)}$ *επιλύοντας* την (6.169)

$$\begin{pmatrix} c_+^{(x)} \\ c_-^{(x)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{pmatrix}. \quad (6.170)$$

  και επομένως προσδιορίζουμε τις αντίστοιχες πιθανότητες $P_\pm^{(x)} = \left|c_\pm^{(x)}\right|^2 = (1/2)|\alpha \pm \beta|^2$ λήψης των ιδιοτιμών $\pm\hbar/2$ αντίστοιχα της μέτρησης στην επιθυμητή διεύθυνση.
- Από τις πιθανότητες υπολογίζουμε μέσες τιμές, αβεβαιότητες, κλπ.

Παράδειγμα 1. Αν η κατάσταση είναι

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

σε μέτρηση σπιν στον $z-$άξονα η πιθανότητα να ληφθεί η τιμή $+\hbar/2$ είναι $|\alpha|^2 = 1/3$ ενώ η τιμή $-\hbar/2$ έχει πιθανότητα $|\beta|^2 = 2/3$. Αν όμως μετρηθεί η s_x υπολογίζονται οι αντίστοιχες πιθανότητες και το αποτέλεσμα είναι $(1/2)|\alpha + \beta|^2 = 5/6$ και $(1/2)|\alpha - \beta|^2 = 1/6$, αντίστοιχα.

Παράδειγμα 2. Η κατάσταση

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_+$$

δίνει απολύτως καθορισμένη τιμή στην $z-$συνιστώσα του σπιν ίση με $+\hbar/2$ (η τιμή $+\hbar/2$ έχει πιθανότητα ένα και η τιμή $-\hbar/2$ έχει μηδενική πιθανότητα). Στην ίδια κατάσταση χ για την $x-$συνιστώσα του σπιν οι πιθανότητες των $\pm\hbar/2$ είναι ίδιες και όπως προκύπτει από υπολογισμό ίσες με $1/2$ και για τις δύο κατευθύνσεις (50% η κάθε μία).

- *Η μέση τιμή και η διασπορά τιμών υπολογίζονται* σε οποιαδήποτε διεύθυνση x, y, z, n. Στην δοθείσα κατάσταση $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ η *μέση τιμή*, π.χ. στην διεύθυνση n, είναι αμέσως

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle s_n\rangle = \langle\chi|s_n|\chi\rangle = \begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi}\\ \sin\theta\, e^{+i\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

ή ισοδύναμα

$$\langle s_n\rangle = \left(+\frac{\hbar}{2}\right)P_+^{(n)} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)P_-^{(n)}$$

με

$$P_+^{(n)} = \left|\alpha\cos\frac{\theta}{2} + \beta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\right|^2,\ P_-^{(n)} = \left|\alpha\sin\frac{\theta}{2} - \beta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\right|^2$$

τις αντίστοιχες πιθανότητες[13]. Η *διασπορά* ή αβεβαιότητα στο τετράγωνο υπολογίζεται από

$$(\Delta s_n)^2 = \left\langle (s_n - \langle s_n\rangle)^2\right\rangle = \langle s_n^2\rangle - \langle s_n\rangle^2$$

αφού βρούμε πρώτα και την μέση τιμή του τετραγώνου

$$\langle s_n^2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 P_+^{(n)} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2 P_-^{(n)}.$$

Παράδειγμα 3. Η μέση τιμή $\langle s_n\rangle$ σε μια κατάσταση χ με καθορισμένη προβολή του $\vec{s}$ ίση με $+\hbar/2$ στον $z-$άξονα υπολογίζεται ως εξής:

Πρώτος τρόπος: Η αρχική κατάσταση είναι η

$$\chi = \chi_+ = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$$

και ο κατευθείαν υπολογισμός για την μέση τιμή

$$\langle s_n\rangle = \langle\chi|s_n|\chi\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi}\\ \sin\theta\, e^{+i\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta.$$

Άλλος τρόπος:

$$\langle s_n\rangle = \left(+\frac{\hbar}{2}\right)P_+^{(n)} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)P_-^{(n)} = \hbar P_+ - \frac{\hbar}{2}$$

όπου

$$P_+^{(n)}(\theta) = \cos^2\frac{\theta}{2},\ P_-^{(n)}(\theta) = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

και από την τριγωνομετρική ταυτότητα $\cos\theta = 2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1$ η μέση τιμή είναι

[13] Προφανώς, οι πιθανότητες είναι θετικοί αριθμοί μεταξύ 0 και 1 αφού $|z|^2 = z^* z$.

$$\langle s_n \rangle = \hbar P_+^{(n)} - \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}\left(2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1\right) = \frac{\hbar}{2}\cos\theta .$$

Η μέση τιμή του τετραγώνου αντίστοιχα

$$\langle s_n^2 \rangle = \left(+\frac{\hbar}{2}\right)^2 P_+^{(n)} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2 P_-^{(n)} = \frac{\hbar^2}{4}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\hbar^2}{4}$$

δίνει την διασπορά

$$(\Delta s_n)^2 = \langle s_n^2 \rangle - \langle s_n \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4}\cos^2\theta = \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\theta .$$

- Η κατάσταση σπιν χ του συστήματος μπορεί να *δίνεται έμμεσα*, π. χ. να ειπωθεί πως η χ είναι ιδιοσυνάρτηση σπιν με τιμή του s_y, ίση με $+\hbar/2$. Τότε χωρίς δισταγμό ανατρέχουμε στις προηγούμενες σχέσεις, ή υπολογίζουμε κατευθείαν με διαγωνοποίηση της s_x, την ιδιοσυνάρτηση $\chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$ και γράφουμε την κατάσταση σπιν του συστήματος

$$\chi = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$

με $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}, \beta = \frac{i}{\sqrt{2}}$. Στην συνέχεια μπορούμε να αναπτύξουμε την χ σε οποιαδήποτε διεύθυνση επιθυμούμε και να υπολογίσουμε τις πιθανότητες για τιμές του σπιν $\pm\hbar/2$ σε αυτήν την διεύθυνση συναρτήσει των α, β [14].

- Ένα σύστημα σπιν δείχνει όλα τα *παράδοξα της κβαντικής μέτρησης*. Έστω ότι η κατάσταση σπιν είναι η $\chi = \chi_+$ που είναι η ιδιοσυνάρτηση της s_z στον z – άξονα ιδιοτιμής $+\hbar/2$. Στο ερώτημα ποια είναι η τιμή της προβολής της γωνιακής στροφορμής σπιν σε μια μέτρηση στον z – άξονα απαντούμε χωρίς δισταγμό αφού με απόλυτη βεβαιότητα είναι ίση με $+\hbar/2$. Στον x – άξονα

[14] Θα παρατηρήσατε από όλη την προηγούμενη συζήτηση ότι οι ιδιοσυναρτήσεις εκφράζονται σχεδόν πάντα στην βάση των σπίνορς $\chi_\pm$ όπου η μήτρα s_z είναι διαγώνια, ενώ οι μήτρες διαγωνοποιούνται σε οποιαδήποτε άλλη (x, y, n) διεύθυνση.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όμως η τιμή του σπιν είναι απροσδιόριστη και είναι $+\hbar/2$ με πιθανότητα 50% και $-\hbar/2$ με πιθανότητα 50%. Ο καθορισμός της τιμής της προβολής του σπιν ταυτοχρόνως στους άξονες z, x είναι αδύνατη γιατί παραβιάζει την αρχή της αβεβαιότητας που δεν επιτρέπει ταυτόχρονη γνώση των s_z, s_x. Άν όμως στην εκτέλεση ενός *νέου πειράματος* ληφθεί μια συγκεκριμένη τιμή στον $x-$άξονα, πχ. η $+\hbar/2$, μπορεί να σχηματισθεί η εντύπωση πως γνωρίζουμε ταυτόχρονα με ακρίβεια και τις δύο προβολές s_z, s_x. Βεβαίως, αυτό δεν είναι δυνατόν να συμβεί αφού τώρα η κατάσταση του συστήματος μετά την μέτρηση $+\hbar/2$ στον $x-$άξονα είναι η $\chi = \chi_+^{(x)}$ και οι τιμές της γωνιακής στροφορμής σπιν σε μια μέτρηση στον $z-$άξονα (να το διαπιστώσετε με πράξεις) θα δώσουν $+\hbar/2$ με πιθανότητα 50% και $-\hbar/2$ με πιθανότητα 50%. Επομένως, η γνώση της s_x καθιστά ανέφικτη την γνώση της s_z και τα πειράματα μέτρησης του σπιν στον $z-$άξονα δίνουν κατά μέσο όρο μισές φορές $+\hbar/2$ και μισές φορές $-\hbar/2$.[15]

6.6.3. Ηλεκτρόνιο σε σταθερό και ομογενές μαγνητικό πεδίο -Περιφορά Larmor

Η μαγνητική διπολική ροπή $\vec{\mu}$ είναι ανάλογη του σπιν $\vec{s}$

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{s} \tag{6.171}$$

με σταθερά αναλογίας τον *γυρομαγνητικό λόγο* γ. Η Χαμιλτονιανή ορίζεται από την ενέργεια του μαγνητικού διπόλου σπιν-1/2 στο πεδίο $\vec{B}$

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma\, \vec{B} \cdot \vec{s} \tag{6.172}$$

που όταν είναι στην $z-$διεύθυνση $\vec{B} = B\vec{e}_z$

---

[15] Τα παραπάνω μπορεί να καταπλήσσουν τον αδαή στην κβαντική θεωρία, μην ξεχνάτε όμως πως παρόμοια φαινόμενα συμβαίνουν και στην πραγματική ζωή. Ας υποτεθεί πως έχουμε στην κατοχή μας ένα λαχείο. *Πριν* ανακοινωθούν τα αποτελέσματα ούτε χάνουμε ούτε κερδίζουμε αλλά έχουμε κάποιες, πεπερασμένες βεβαίως, πιθανότητες να συμβεί το ένα ή το άλλο ενδεχόμενο. *Μετά* όμως την ανακοίνωση των αποτελεσμάτων αναγκαστικά συμβαίνει το ένα ή το άλλο ενδεχόμενο (χάνουμε ή κερδίζουμε, με το πρώτο δυστυχώς πολύ πιο πιθανό στα λαχεία). Αυτό σημαίνει απόλυτη βεβαιότητα μετά την ανακοίνωση, δηλαδή οι πιθανότητες για τα δύο ενδεχόμενα γίνονται πλέον μηδέν ή ένα.

$$H = -\gamma\, B s_z = -\gamma B \frac{\hbar}{2}\sigma_z = -\gamma B \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.173}$$

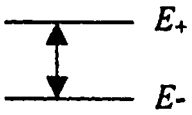
ή στην αυθαίρετη διεύθυνση $\vec{B} = B\vec{n}$

$$H = -\gamma\, B s_n = -\gamma B \frac{\hbar}{2}\sigma_n = -\gamma B \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi} \\ \sin\theta\, e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} . \tag{6.174}$$

Η H διαγωνοποιείται εύκολα (είναι ήδη διαγώνια για $\vec{B} = B\vec{e}_z$) με ιδιοτιμές $E_\pm = \mp\gamma B\hbar/2$ στις δύο περιπτώσεις και αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $\chi_\pm$, *προφανώς ίδιες με αυτές των* s_z, s_n αντιστοίχως, που είδαμε προηγουμένως. Χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη αναμένεται αυτή με το σπιν παράλληλο στο πεδίο, όπως συμβαίνει και κλασσικά.

Όμως, με τον ορισμό του γυρομαγνητικού λόγου $\gamma = -g_s\, e/2mc$, τον παράγοντα Lande g_s ίσο με 2 και την συχνότητα *κυκλότρου* (ή μετάπτωσης) $\omega_B = eB/mc = -\gamma B$ η Χαμιλτονιανή για ηλεκτρόνιο μάζας m, π.χ. στην $n-$διεύθυνση, μπορεί να λάβει την πιο εύχρηστη μορφή

$$H = \frac{\hbar\omega_B}{2} s_n = \frac{\hbar\omega_B}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\phi} \\ \sin\theta\, e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{6.175}$$



με ιδιοτιμές $E_\pm = \pm\hbar\omega_B/2$ και ιδιοσυναρτήσεις $\chi_\pm^{(n)}$ που αντιστοιχούν σε τιμές σπιν $s_n = \pm\hbar/2$ στην $n-$διεύθυνση. Παρομοίως, σε οποιαδήποτε διεύθυνση, π. χ. στην x η Χαμιλτονιανή του σπιν θα είναι $H = (\hbar\omega_B/2)s_x$, κλπ.

Η λύση της *χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης Schrodinger*

$$i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt} = H\chi(t) \tag{6.176}$$

με $\vec{B} = B\vec{e}_z$ μπορεί να γραφεί συναρτήσει των λύσεων του χρονικά ανεξάρτητου προβλήματος $E_\pm = \pm\hbar\omega_B/2 = \mp\gamma B\hbar/2$ με τις $\chi_\pm$

$$\chi(t) = \alpha\, \chi_+\, e^{-iE_+t/\hbar} + \beta\, \chi_-\, e^{-iE_-t/\hbar} = \begin{pmatrix} \alpha\, e^{+\gamma Bt/2} \\ \beta\, e^{-\gamma Bt/2} \end{pmatrix} . \tag{6.177}$$

Οι σταθερές α, β υπολογίζονται από την αρχική συνθήκη $t = 0$

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \tag{6.178}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

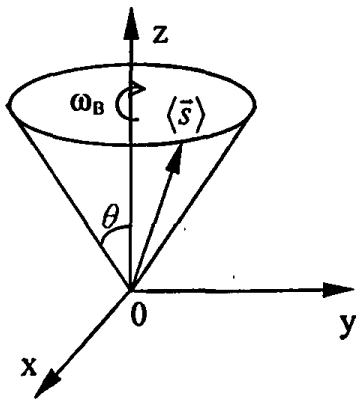
Αν αντικαταστήσουμε τις σταθερές α, β με

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}, \quad \beta = \sin\frac{\theta}{2} \tag{6.179}$$

$(|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$ υπολογίζονται (να γίνουν οι υπολογισμοί) οι μέσες τιμές του σπιν στις τρεις κατευθύνσεις

$$\begin{aligned}
\langle s_x \rangle &= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\,\cos\gamma Bt = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\,\cos\omega_B t \\
\langle s_y \rangle &= -\frac{\hbar}{2}\sin\theta\,\sin\gamma Bt = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\,\sin\omega_B t \\
\langle s_z \rangle &= \frac{\hbar}{2}\cos\theta \quad .
\end{aligned} \tag{6.180}$$

Επομένως, η μέση τιμή $\langle \vec{s} \rangle$ περιστρέφεται γύρω από το πεδίο $\vec{B}$ με την συχνότητα $\omega_B = eB/mc = -\gamma B$, όπως και κλασσικά. Αυτό δεν αποτελεί έκπληξη γιατί ήδη γνωρίζουμε πως οι κλασσικοί νόμοι σύμφωνα με το θεώρημα του Ehrenfest παραμένουν ισχυροί και στην κβαντική αλλά μόνο για τις μέσες τιμές.



Άσκηση 1. Να δείξετε ότι το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας (2.31) παρουσία του διανυσματικού δυναμικού $\vec{A}$ τροποποιείται στο

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\Psi - \Psi\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)^*\Psi^*\right)$$

που ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας (2.44)

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) + \frac{\partial P(\vec{r},t)}{\partial t} = 0, \quad P = \Psi^*\Psi.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ.

➤ **Α1.** (i) Όταν N=2 να δείξετε ότι η επιλογή $|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ αποτελεί μια πλήρη και ορθοκανονική βάση, αφού σχηματίσετε τα εσωτερικά γινόμενα $\langle n|n\rangle, \langle n|m\rangle, n,m = 1, 2$ και δείξετε επίσης $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$, $\sum_{n=1,2}|n\rangle\langle n| = 1$.

(ii) Στην ίδια βάση να δείξετε ότι ο τελεστής $H = \sum_{l,m} H_{lm}|l\rangle\langle m|$ λαμβάνει την μορφή $H = \begin{pmatrix}H_{11} & H_{12}\\ H_{21} & H_{22}\end{pmatrix}$ με στοιχεία μήτρας $H_{lm} = \langle l|H|m\rangle$, $l,m = 1,2$.

(iii) Να δείξετε ότι για τα $N\times 1$ τάξης διανύσματα $H|m\rangle$, $m = 1,2$ ισχύει $H|m\rangle = \sum_{l=1,2} H_{lm}|m\rangle$ αφού θυμηθείτε ότι $\sum_{l=1,2}|l\rangle\langle l| = 1$.

➤ **Α2.** Η μήτρα H είναι *ερμιτειανή* $H = H^+$ όταν τα διαγώνια στοιχεία της $H_{nn} = H^*_{nn}$ είναι πραγματικοί αριθμοί ($\in \Re$) και τα συμμετρικά ως προς την κύρια διαγώνιο στοιχεία μιγαδικά συζυγή $H_{mn} = H^*_{nm}$. Από τον ορισμό για ένα τελεστή A του ερμιτειανού συζυγή A^+

$$\langle\varphi|\, A|\psi\rangle = \langle\psi|\, A^+|\varphi\rangle^*$$

αν αντί των $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ χρησιμοποιηθούν οι $|n\rangle, |m\rangle$

$$\langle n|\, A|m\rangle = \langle m|\, A^+|n\rangle^*$$

για μια *ερμιτειανή μήτρα* η $A = A^+$ οδηγεί στην ισότητα των στοιχείων μήτρας

$$A_{nm} = A^*_{mn}.$$

Δεν πρέπει να ξεχνάμε πως οι ερμιτειανοί τελεστές είναι αυτοί που κυρίως μας ενδιαφέρουν γιατί αντιπροσωπεύουν φυσικά μεγέθη με πραγματικές ($\in \Re$) ιδιοτιμές και ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις. Οι τελεστές που αντιστοιχούν στις μήτρες $\begin{pmatrix}2 & i\\ -i & 3\end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix}1 & 3\\ 3 & i\end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix}2 & i\\ i & 2\end{pmatrix}$ είναι ερμιτειανοί ή όχι;

A3. Να λύσετε την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger όταν $\vec{B} = B \cdot \vec{e}_x$ (προσοχή: στον $x-$άξονα) με το σπιν για $t=0$ να έχει προβολή στον $z-$άξονα $s_z = +1/2$, που σημαίνει πως η αρχική ($t=0$) κατάσταση είναι $\chi(0) = \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Να βρείτε την $\chi(t)$ την χρονική στιγμή t και την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο με σπιν πάνω ($+\hbar/2$) ή κάτω ($-\hbar/2$) στον $z-$ άξονα;

Λύση:

Η εξίσωση είναι

$$i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt} = H\chi(t)$$

με

$$H = \frac{\hbar\omega_B}{2}\sigma_x = \frac{\hbar\omega_B}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Για την χρονικά εξαρτημένη κατάσταση

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}$$

έχουμε

$$i\hbar\begin{pmatrix} \dot{c}_+(t) \\ \dot{c}_-(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_B}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{matrix} i\dot{c}_+(t) = \dfrac{\omega_B}{2}c_-(t) \\ i\dot{c}_-(t) = \dfrac{\omega_B}{2}c_+(t) \end{matrix}$$

$$\Leftrightarrow \ddot{c}_\pm(t) + \left(\frac{\omega_B}{2}\right)^2 c_\pm(t) = 0$$

με γενική λύση

$$c_\pm(t) = A_\pm \cos\frac{\omega_B t}{2} + B_\pm \sin\frac{\omega_B t}{2} .$$

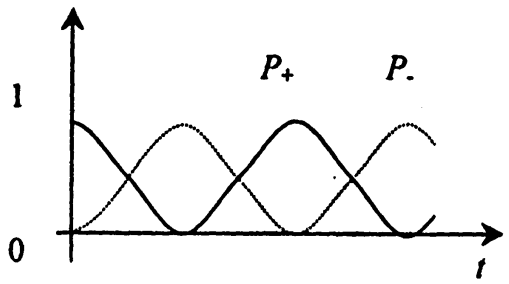
Από την αρχική συνθήκη $\chi(0) = \begin{pmatrix} c_+(0) \\ c_-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ισχύουν οι $c_+(0) = 1$, $c_-(0) = 0$, $\dot{c}_+(0) = 0$ και με αντικατάσταση παραπάνω $\dot{c}_-(0) = -i\omega_B/2$, ώστε τελικά

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$c_+(t) = \cos\frac{\omega_B t}{2} \Leftrightarrow P_+(t) = \cos^2\frac{\omega_B t}{2}$$

$$c_-(t) = -i\sin\frac{\omega_B t}{2} \Leftrightarrow P_-(t) = \sin^2\frac{\omega_B t}{2}$$

Η χρονική εξέλιξη των πιθανοτήτων $P_\pm(t) = |c_\pm(t)|^2$ με το σπιν να είναι πάνω ή κάτω στον z – άξονα φαίνεται στο σχήμα.



A4. Να αποδείξετε τις παρακάτω ταυτότητες για τις μήτρες σπιν (6.152) του Pauli σ_i, $i = x, y, z$, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

(i) $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ και κυκλικά

(ii) $\det \sigma_i = -1$

(iii) $Tr\sigma_i = 0$

(iv) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$

(v) $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$ και κυκλικά

(vi) $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ και κυκλικά

(vii) $\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = \sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z = 0$

(viii) $(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}) = (\vec{a}\cdot\vec{b})1 + i(\vec{a}\times\vec{b})\cdot\vec{\sigma}$, $\forall\, \vec{a}, \vec{b}$.

A5. (i) Αν η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση σπιν είναι

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}\, e^{i\phi}/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle + \sqrt{3}\, e^{i\phi}|\downarrow\rangle\right)$$

να υπολογισθούν οι πιθανότητες $P_\pm^{(x)}, P_\pm^{(y)}, P_\pm^{(z)}$ ώστε μετρήσεις του σπιν στις x, y, z διευθύνσεις να δώσουν τιμές $\pm\hbar/2$, αντίστοιχα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(ii) Να υπολογίσετε στην $|\chi\rangle$ τις μέσες τιμές $\langle s_x\rangle, \langle s_y\rangle, \langle s_z\rangle$ και $\langle s_x^2\rangle, \langle s_y^2\rangle, \langle s_z^2\rangle$ και να επιβεβαιώσετε την σχέση του Heisenberg (ΠΑΡ. Γ)

$$\Delta s_x \Delta s_y \geq \frac{1}{2}\left|\langle [s_x, s_y]\rangle\right|.$$

Δίνονται: $$\langle s_x\rangle = \langle\chi|s_x|\chi\rangle = P_+^{(x)}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) + P_-^{(x)}\left(-\frac{\hbar}{2}\right),$$

$$\langle s_x^2\rangle = \langle\chi|s_x^2|\chi\rangle = P_+^{(x)}\left(+\frac{\hbar}{2}\right)^2 + P_-^{(x)}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2,$$

$$\Delta s_x = \langle s_x^2\rangle - \langle s_x\rangle^2, \quad \langle [s_x, s_y]\rangle = i\hbar\langle s_z\rangle, \; e^{\pm i\phi} = \cos\phi \pm i\sin\phi.$$

Απάντηση[16]: $P_\pm^{(x)} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{4}\cos\phi, \quad P_\pm^{(y)} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{4}\sin\phi, \quad P_+^{(z)} = \frac{1}{4}, \; P_+^{(z)} = \frac{3}{4}$

$$\langle s_x\rangle = \frac{\sqrt{3}}{4}\hbar\cos\phi, \langle s_x^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \langle s_y\rangle = \frac{\sqrt{3}}{4}\hbar\sin\phi, \langle s_y^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \langle s_z\rangle = -\frac{1}{4}\hbar, \langle s_z^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\Delta s_x = \langle s_x^2\rangle - \langle s_x\rangle^2 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 - \frac{3}{4}\cos^2\phi},$$

$$\Delta s_y = \langle s_y^2\rangle - \langle s_y\rangle^2 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 - \frac{3}{4}\sin^2\phi},$$

$$\Delta s_z = \langle s_z^2\rangle - \langle s_z\rangle^2 = \frac{\hbar}{4}\sqrt{3}.$$

$$\Delta s_x \Delta s_y \geq \frac{1}{2}\left|\langle [s_x, s_y]\rangle\right| \Leftrightarrow \Delta s_x \Delta s_y \geq \frac{1}{2}\left|\langle i\hbar s_z\rangle\right|$$

$$\Leftrightarrow \Delta s_x \Delta s_y \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle s_z\rangle\right| \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{4}\sqrt{1 - \frac{3}{4}\cos^2\phi}\sqrt{1 - \frac{3}{4}\sin^2\phi} \geq \frac{\hbar^2}{8}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{4}\sqrt{1 - \frac{3}{4}(\cos^2\phi + \sin^2\phi) + \frac{9}{16}\cos^2\phi\sin^2\phi} \geq \frac{\hbar^2}{8}$$

$$\Leftrightarrow \cos^2\phi\sin^2\phi \geq 0.$$

[16] Σε αρκετά γραπτά φοιτητών έχω δει και μιγαδική πιθανότητα!!! Δεν πρέπει να ξεχνάμε πως η *πιθανότητα δίνεται από το μέτρο*, π.χ. μιγαδικού αριθμού, είναι πάντα θετικός αριθμός και μάλιστα μεταξύ μηδέν και ένα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

ΠΟΛΛΑ ΣΩΜΑΤΙΑ - ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

'...φοβάμαι μήπως με τα μάταια μαθηματικά σου καταστρέψεις τις ωραίες ιδέες του Heisenberg'
W. Pauli στον M. Born

Το πρόβλημα των *πολλών σωματίων* είναι κεντρικού ενδιαφέροντος στην κβαντική φυσική. Στην κλασσική φυσική δύο σωμάτια επιλύονται με ένα ολοκλήρωμα που περιλαμβάνει το δυναμικό αλληλεπίδρασης, ενώ για τρία σωμάτια όπως είναι γνωστό από τον Poincare (1890) οι κλασσικές τροχιές είναι ασταθείς με χαοτική συμπεριφορά. Στην κβαντική, δεν επιλύεται ούτε καν το πρόβλημα δύο σωματίων, παρά σε ελάχιστες περιπτώσεις. Όταν ο αριθμός των σωματίων είναι της τάξης $\sim 10^{24}$ προφανώς οι δυσκολίες γίνονται ανυπέρβλητες. Ένα χρήσιμο εργαλείο στην περίπτωση αυτή είναι η προσεγγιστική μέθοδος της *θεωρίας διαταραχών*, όπου επιλύουμε ξεχωριστά, π. χ. το πρόβλημα δύο σωματίων και εισάγουμε την λιγότερο σημαντική αλληλεπίδραση ενός τρίτου σωματίου, κλπ. Συχνά στην μέθοδο αυτή δεν αρκούν μερικοί όροι αλλά άθροιση όλων των όρων ή μέρους κάθε όρου μέχρι το άπειρο. Αρχικά θα αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα της σύνθεσης στροφορμών πολλών σωματίων που στην κβαντική δεν γίνεται με απλή άθροιση των διανυσμάτων, αφού τα κβαντικά διανύσματα υπακούουν σε διαφορετικούς νόμους. Θα εξετάσουμε την περίπτωση δύο σωματίων και όταν είναι εφικτό τα αποτελέσματα θα γενικευθούν για N-σωμάτια. Η *συμμετρική* ή *αντισυμμετρική* μορφή της κυματοσυνάρτησης πολλών σωματίων επιτρέπει την διάκριση των σωματίων σε *μποζόνια* και *φερμιόνια* που υπακούουν συγκεκριμένους στατιστικούς κανόνες.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

7.1. Σύνθεση στροφορμών

7.1.1. Ιδιοτιμές του $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Αν δύο σωμάτια έχουν στροφορμές $\vec{J}_1, \vec{J}_2$, είτε τροχιακού τύπου $\vec{\ell}$ είτε σπιν $\vec{s}$, με μεγέθη και προβολές

$$\begin{aligned} \vec{J}_1^{\,2} &= j_1(j_1+1)\hbar^2, \ \vec{J}_2^{\,2} = j_2(j_2+1)\hbar^2 \\ J_{1z} &= m_1\hbar, \ J_{2z} = m_2\hbar \end{aligned} \tag{7.1}$$

που καθορίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς j_1, j_2, m_1, m_2 αντίστοιχα, ποιές είναι οι δυνατές τιμές των κβαντικών αριθμών j , m που χαρακτηρίζουν το μέγεθος και την προβολή της *ολικής στροφορμής* $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ με

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= j(j+1)\hbar^2 \\ J_z &= m\hbar; \end{aligned} \tag{7.2}$$

Απάντηση: Επειδή $[J_{1z}, J_{2z}] = 0$ οι *z – συνιστώσες της προβολής της στροφορμής προστίθενται*[1] $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ με αποτέλεσμα οι *ιδιοτιμές της προβολής* του αθροίσματος J_z να καθορίζονται απλώς από το *άθροισμα* των κβαντικών αριθμών με $m = m_1 + m_2$, με $m_{1(2)} = -j_{1(2)}, \cdots, +j_{1(2)}$. Έτσι αναμένεται να προκύψουν $(2j_1+1)(2j_2+1)$ *τιμές για το* m, όσες ακριβώς είναι τα ζεύγη (m_1, m_2). Αρκεί μια μικρή διερεύνηση για να βρεθούν όλες *οι τιμές του* j *που καλύπτουν τα δυνατά* $m = -j, \cdots, +j$. Το αποτέλεσμα είναι ο τύπος

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|, \tag{7.3}$$

---

[1] Επειδή οι J_{1z}, J_{2z} μετατίθενται, αφού δρουν σε μεταβλητές διαφορετικών σωματίων, η ιδιοτιμή του αθροίσματος των z – προβολών $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ είναι ίση με το άθροισμα των ιδιοτιμών $m\hbar = (m_1 + m_2)\hbar$ αφού

$$\begin{aligned} J_z\ \psi_1\psi_2 &= (J_{1z} + J_{2z})\psi_1\psi_2 = (J_{1z}\psi_1)\psi_2 + \psi_1(J_{2z}\psi_2) \\ &= (m_1\hbar\psi_1)\psi_2 + \psi_1(m_2\hbar\psi_2) = (m_1 + m_2)\hbar\psi_1\psi_2 = m\hbar\ \psi_1\psi_2 \ , \end{aligned}$$

με τον J_{1z} να δρα αποκλειστικά στην ιδιοσυνάρτηση ψ_1 και τον J_{2z} στην ψ_2, αντίστοιχα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

δηλαδή όλοι οι ακέραιοι αριθμοί από την τιμή $j_{\max} = j_1 + j_2$ μέχρι την τιμή $j_{\min} = |j_1 - j_2|$ με βήμα μονάδα. Παρατηρούμε πως όταν $j_1 \le j_2$ έχουμε $2j_1 + 1$ τιμές του j.[2]

Παράδειγμα 1. Όταν $j_1 = 1$, $j_2 = 2$ οι δυνατές τιμές του κβαντικού αριθμού j για το μέγεθος της ολικής στροφορμής προκύπτουν από το διάγραμμα

$m_1 \backslash m_2$	+2	+1	0	−1	−2
+1	3	2	1	0	−1
0	2	1	0	−1	−2
−1	1	0	−1		−3
		$j=1$		$j=2$	$j=3$

με $m_1 = +1, 0, -1$, $m_2 = +2, +1, 0, -1, -2$, απ' όπου

$$j = 1+2,\ 1+2-1,\ 1+2-2 = 3, 2, 1 \tag{7.4}$$

σε πλήρη συμφωνία με τον τύπο (7.3).

Παράδειγμα 2. Για δύο σπιν με $s_1 = s_2 = 1/2$, $m_{1s} = \pm\frac{1}{2}$, $m_{2s} = \pm\frac{1}{2}$, ο κβαντικός αριθμός s που χαρακτηρίζει το μέγεθος του ολικού σπιν $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ λαμβάνει τις τιμές

$m_1 \backslash m_2$	+1/2	−1/2
+1/2	1	0
−1/2	0	−1
	$s=0$	$s=1$

[2] Στο *κλασσικό όριο* η σύνθεση των στροφορμών

$$|\vec{J}_1| = \sqrt{j_1(j_1+1)}\,\hbar \to j_1\hbar \le |\vec{J}_2| = \sqrt{j_2(j_2+1)}\,\hbar \to j_2\hbar$$

για *παράλληλα* διανύσματα είναι $|\vec{J}| = |\vec{J}_1| + |\vec{J}_2| \Leftrightarrow j_1 + j_2 = j_{\max}$ και για *αντιπαράλληλα* διανύσματα $|\vec{J}| = |\vec{J}_2| - |\vec{J}_1| \Leftrightarrow j_2 - j_1 = j_{\min}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$s = 1/2 + 1/2,\ |1/2 - 1/2| = 1, 0\,. \tag{7.5}$$

Επομένως το ολικό σπιν $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ δύο ηλεκτρονίων[1], αποτελείται από μιά *τριπλή* κατάσταση με $s = 1,\ m = +1,\ 0, -1$ και μια *απλή* κατάσταση $s = 0,\ m = 0$.

Οι ιδιοσυναρτήσεις $|s_1, m_1\rangle$ για το σπιν 1 συμβολίζονται από τα σπίνορς

$$\chi_+(1) = |1/2, +1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle,\quad \chi_-(1) = |1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\ , \tag{7.6}$$

και οι $|s_2, m_2\rangle$ για το σπιν 2 με

$$\chi_+(2) = |1/2, +1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle,\quad \chi_-(2) = |1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\ . \tag{7.7}$$

Οι *ιδιοσυναρτήσεις* $|s, m\rangle$ για το $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ μπορεί να υπολογισθούν από τις εξισώσεις για τους τελεστές $\vec{s}_1^{\,2}, s_{1z}, s_{1\pm} = s_{1x} \pm i s_{1y}$ *του πρώτου σπίν* (1) με $s_1 = 1/2, m_1 = \pm 1/2$

$$\vec{s}_1^{\,2}|s_1, m_1\rangle = s_1(s_1+1)\hbar^2|s_1, m_1\rangle = (1/2)(1/2+1)\hbar^2|s_1, m_1\rangle$$

$$s_{1z}|s_1, m_1\rangle = m_1\hbar\,|s_1, m_1\rangle\,, \tag{7.8}$$

$$s_{1\pm}|s_1, m_1\rangle = \sqrt{s_1(s_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)}\ \hbar|s_1, m_1 \pm 1\rangle\ ,$$

και αντίστοιχα για *το δεύτερο σπίν* (2). Οι αντίστοιχοι τελεστές για το σπιν 1 εκφράζονται κατά τα γνωστά με τις 2×2 μήτρες στα σπίνορς $\chi_\pm(1)$

$$\vec{s}_1^{\,2} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad s_{1z} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.9}$$

και αντίστοιχα για το σπιν 2 στα σπίνορς $\chi_\pm(2)$

$$\vec{s}_2^{\,2} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad s_{2z} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\ . \tag{7.10}$$

[1] π.χ. στην βασική στάθμη του ατόμου του υδρογόνου όπου για το μέτρο της τροχιακής στροφορμής ο κβαντικός αριθμός είναι $\ell = 0$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επομένως, το σύστημα των δύο σπιν-1/2 σωματίων έχει συνολικά 4 δυνατότητες διευθέτησης

$$\uparrow\uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow\uparrow \quad \downarrow\downarrow \tag{7.11}$$

με ιδιοτιμές $m\hbar$ για την $z-$προβολή $s_z = s_{1z} + s_{2z}$ του ολικού σπιν $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$+\hbar \quad 0 \quad 0 \quad -\hbar \tag{7.12}$$

με αντίστοιχες τιμές του κβαντικού αριθμού της προβολής $m = m_1 + m_2$

$$+1 \quad 0 \quad 0 \quad -1 \quad . \tag{7.13}$$

Παρατηρούμε πως οι τιμές $m = +1,\ 0, -1$ προκύπτουν από την *τριπλή κατάσταση* με $s = 1$ ενώ η δεύτερη εμφάνιση της $m = 0$ από την *απλή κατάσταση* με $s = 0$.

❖ Να υπολογισθούν οι ιδιοσυναρτήσεις της *τριπλής κατάστασης* $|s,m\rangle = |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$:

1) Η κατάσταση

$$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = |1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle = \chi_+(1)\,\chi_+(2) \tag{7.14}$$

προκύπτει εύκολα αφού μόνο ο συνδυασμός $m_1 = m_2 = 1/2$ δίνει την τιμή $m = 1$.

2) Από την δράση του τελεστή $s_- = s_{1-} + s_{2-} = s_x - is_y$ στην κατάσταση $|\uparrow\uparrow\rangle$ από την ταυτότητα $s_-|s,m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m-1)}\ \hbar|s,m-1\rangle$

$$s_-|11\rangle = \sqrt{2-0}\,\hbar|10\rangle,$$

$$\begin{aligned} s_-|1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle &= (s_{1-} + s_{2-})|1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle \\ &= \sqrt{1}\,\hbar(|1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle + |1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle) \end{aligned} \tag{7.15}$$

ώστε μετά την κανονικοποίηση προκύπτει ο γραμμικός συνδυασμός

$$\begin{aligned} |10\rangle &= (1/\sqrt{2})\,(|1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle + |1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle) \\ &= \frac{(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)}{\sqrt{2}} = \frac{(\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2))}{\sqrt{2}} \end{aligned} \tag{7.16}$$

3) Μια ακόμη δράση του $s_- = s_{1-} + s_{2-}$ στην $|10\rangle$ δίνει την

$$|1-1\rangle = |1/2,-1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = \chi_-(1)\,\chi_-(2). \tag{7.17}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επομένως, η *τριπλή κατάσταση* είναι

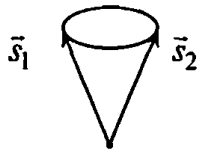
$$
\begin{aligned}
&s=1,\ m=+1: && |1\,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = \chi_+(1)\,\chi_+(2) \\
&s=1,\ m=0: && |1\,0\rangle = \frac{(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)}{\sqrt{2}} = \frac{(\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2))}{\sqrt{2}} \qquad (7.18) \\
&s=1,\ m=-1: && |1\,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = \chi_-(1)\,\chi_-(2).
\end{aligned}
$$

❖ Η ιδιοσυνάρτηση της *απλής κατάστασης* είναι η ορθογώνια με την $|10\rangle$ ($s=1, m=0$):

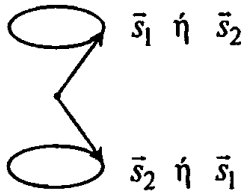
$$
s=0,\ m=0: \quad |0\,0\rangle = \frac{(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)}{\sqrt{2}} = \frac{(\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2))}{\sqrt{2}}. \qquad (7.19)
$$

ΤΡΙΠΛΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ:

$s=1, m=+1: \quad |1\,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$



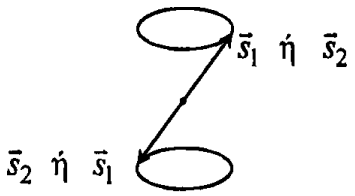
$s=1,\ m=0: \quad |1\,0\rangle = \dfrac{(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)}{\sqrt{2}}$



$s=1, m=-1: \quad |1\,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle.$

ΑΠΛΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ:

$s=0,\ m=0: \quad |0\,0\rangle = \dfrac{(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)}{\sqrt{2}}$



❖ Οι καταστάσεις φαίνονται στο σχήμα. Η τριπλή κατάσταση (7.18) δεν αλλάζει πρόσημο στην εναλλαγή των δύο σπιν $1 \leftrightarrow 2$ (*συμμετρική*) ενώ η απλή κατάσταση (7.19) αλλάζει πρόσημο (*αντισυμμετρική*).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΠΑΤΡΩΝ

❖ Μιά συνηθισμένη αλλά βεβαίως (πάλι) λανθασμένη κλασσική εικόνα θεωρεί τα σπιν στην *τριπλή κατάσταση ως 'παράλληλα'* και στην *απλή κατάσταση ως 'αντιπαράλληλα'*. Τα κβαντικά σπιν όμως έχουν μη μηδενική γωνία ακόμη και όταν είναι 'παράλληλα'.

❖ Ισχύει η ταυτότητα

$$\begin{aligned}
\vec{s}^{\,2} &= (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)^2 = \vec{s}_1^{\,2} + \vec{s}_2^{\,2} + 2\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \\
&= \frac{3}{4}\hbar^2 1 + \frac{3}{4}\hbar^2 1 + 2\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \\
&= \frac{3}{2}\hbar^2 1 + 2\left(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z}\right) \\
&= \frac{3}{2}\hbar^2 1 + s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+} + 2\,s_{1z}s_{2z} \quad .
\end{aligned} \tag{7.20}$$

❖ Οι *ιδιοτιμές* των τελεστών *ολικού σπιν* $\vec{s}^{\,2} = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)^2$ και της *προβολής* $s_z\ s_{1z} + s_{2z}$ στην *τριπλή κατάσταση* $|1\,1\rangle, |1\,0\rangle, |1\,-1\rangle$ *και στην απλή κατάσταση* $|0\,0\rangle$, υπολογίζονται ως εξής:

Από την μορφή των μητρών σπιν s_x, s_y, s_z στην βάση των σπίνορς $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ η δράση του τελεστή $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ στην κατάσταση $|1\,1\rangle$ δίνει

$$\begin{aligned}
\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 |1\,1\rangle &= \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 |\uparrow\uparrow\rangle \\
&= (s_{1x}|\uparrow\rangle)(s_{2x}|\uparrow\rangle) + (s_{1y}|\uparrow\rangle)(s_{2y}|\uparrow\rangle) + (s_{1z}|\uparrow\rangle)(s_{2z}|\uparrow\rangle) \\
&= \left(\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right)\left(\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right) + \left(\frac{i\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right)\left(\frac{i\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right) + \left(\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle\right)\left(\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle - \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle + \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{4}|1\,1\rangle
\end{aligned} \tag{7.21}$$

και από τις (7.20), (7.21) υπολογίζεται η ιδιοτιμή του $\vec{s}^{\,2}$ στην $|1\,1\rangle$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\begin{aligned}\vec{s}^2|1\,1\rangle &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 1 + 2\,\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2\right)|1\,1\rangle \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\,\frac{\hbar^2}{4}\right)|1\,1\rangle \\ &= 2\hbar^2|1\,1\rangle \quad .\end{aligned} \tag{7.22}$$

Η δράση του $\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$ στην $|1\,0\rangle$ δίνει το ίδιο αποτέλεσμα αφού

$$\begin{aligned}\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2|\uparrow\downarrow\rangle &= (s_{1x}|\uparrow\rangle)(s_{2x}|\downarrow\rangle) + (s_{1y}|\uparrow\rangle)(s_{2y}|\downarrow\rangle) + (s_{1z}|\uparrow\rangle)(s_{2z}|\downarrow\rangle) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right)\left(\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle\right) + \left(\frac{i\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right)\left(\frac{-i\hbar}{2}|\uparrow\rangle\right) + \left(\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle\right)\left(\frac{-\hbar}{2}|\downarrow\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(2|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle),\end{aligned} \tag{7.23}$$

κλπ, ενώ με παρόμοιο τρόπο υπολογίζεται η δράση του $\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$ στην $|1-1\rangle$. Το τελευταίο αποτέλεσμα επιτρέπει τον υπολογισμό της ιδιοτιμής του $\vec{s}^2$ για την *απλή κατάσταση* αφού

$$\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle \tag{7.24}$$

ώστε

$$\begin{aligned}\vec{s}^2|0\,0\rangle &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 I + 2\,\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2\right)|0\,0\rangle \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 - 2\frac{3\hbar^2}{4}\right)|0\,0\rangle \\ &= 0|0\,0\rangle.\end{aligned} \tag{7.25}$$

Επιβεβαιώνεται ότι οι τρείς καταστάσεις της *τριπλής* είναι *ιδιοσυναρτήσεις* του τελεστή $\vec{s}^2$ με την ίδια ιδιοτιμή $1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$, όπως απαιτείται αφού $s=1$, ενώ η *απλή* κατάσταση είναι *ιδιοσυνάρτηση* του τελεστή $\vec{s}^2$ με ιδιοτιμή 0 αφού $s=0$. Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές του τελεστή της προβολής s_z στην τριπλή και απλή κατάσταση είναι βεβαίως $+\hbar, 0, -\hbar$ και 0, αντίστοιχα. Με τον υπολογισμό αυτό γιά το άθροισμα $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ δύο σπιν με $s_1 = s_2 = 1/2$ επαληθεύεται η γενική αντιμετώπιση. Ο κβαντικός αριθμός που χαρακτηρίζει το μέγεθος του ολικού σπιν γιά την *τριπλή* είναι $s=1$ με $m = 1, 0, -1$ και για την *απλή* $s=0$ με $m=0$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

7.1.2. Ιδιοσυναρτήσεις του $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Οι ιδιοσυναρτήσεις του αθροίσματος στροφορμών υπολογίζονται γενικότερα με τους *συντελεστές Clebsh-Gordon*. Από τις εξισώσεις ιδιοτιμών

$$\vec{J}_1^{\,2}|j_1m_1\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1m_1\rangle, \quad J_{1z}|j_1m_1\rangle = m_1\hbar|j_1m_1\rangle \tag{7.26}$$

$$\vec{J}_2^{\,2}|j_2m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_2m_2\rangle, \quad J_{2z}|j_2m_2\rangle = m_2\hbar|j_2m_2\rangle \tag{7.27}$$

η κατάσταση γινόμενου $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη τιμή $m\hbar = m_1\hbar + m_2\hbar$ προβολής της στροφορμής $J_Z = J_{1Z} + J_{2Z}$ αφού

$$\begin{aligned} J_Z|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle &= (J_{1Z}|j_1m_1\rangle)|j_2m_2\rangle + |j_1m_1\rangle(J_{2Z}|j_2m_2\rangle) \\ &= (m_1\hbar + m_2\hbar)|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle \\ &= m\hbar|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle \end{aligned} \quad , \tag{7.28}$$

με $m \doteq m_1 + m_2$. Το ίδιο ισχύει και για τον γραμμικό συνδυασμό

$$\psi = \sum_{\substack{m_1,m_2 \\ (m_1+m_2=m)}} c_{m_1m_2}|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle \tag{7.29}$$

και επειδή οι $z-$συνιστώσες προστίθενται οι σύνθετες καταστάσεις που συνεισφέρουν είναι αυτές με $m_1 + m_2 = m$. Παρατηρούμε πως η ψ από την (7.29) είναι ταυτόχρονα ιδιοσυνάρτηση των $J_Z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ (αφού $j_1, j_2 =$σταθ) και με κατάλληλη επιλογή των συντελεστών $c_{m_1m_2}$ είναι ιδιοσυνάρτηση και του $\vec{J}^2$. Επειδή οι τελεστές $\vec{J}^2, J_Z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ *μετατίθενται* η κοινή ιδιοσυνάρτηση ψ μπορεί να γραφεί ως $|j\,m\,j_1j_2\rangle$ και αφού j_1, j_2 = σταθ. αρκεί ο συμβολισμός $|jm\rangle$ με

$$|jm\rangle = \sum_{\substack{m_1,m_2 \\ (m_1+m_2=m)}} c^{jm}_{m_1m_2}|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle \tag{7.30}$$

με καθορισμένο μέγεθος της στροφορμής $\vec{J}$ (από τον j) και προβολής (από τον m). Οι συντελεστές $c_{m_1m_2}$ στο ανάπτυγμα (7.30) λέγονται *συντελεστές Clebsh-Gordon.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 1. (i) Να δείξετε στην περίπτωση δύο σωματίων ίδιου σπιν με $s_1 = s_2 = 1/2$ από τον τύπο (7.30) ότι οι συντελεστές Clebsh-Gordon $c_{m_1 m_2}$ στην *τριπλή κατάσταση* είναι

$$c^{1,1}_{1/2,1/2} = 1,$$

$$c^{1,0}_{1/2,1/2} = 1/\sqrt{2},\ c^{1,0}_{1/2,-1/2} = 1/\sqrt{2},$$

$$c^{1,-1}_{-1/2,-1/2} = 1$$

και στην *απλή κατάσταση*

$$c^{0,0}_{1/2,1/2} = -1/\sqrt{2},\ c^{0,0}_{1/2,-1/2} = 1/\sqrt{2}.$$

Έτσι, οι $\chi_+(1)\chi_+(2)$, $\chi_+(1)\chi_-(2)$, $\chi_-(1)\chi_+(2)$, $\chi_-(1)\chi_-(2)$ καταλήγουν σε τρείς καταστάσεις (*τριπλή* ολικού σπιν 1 με συνιστώσες $s_z : +\hbar,\ 0, -\hbar$) και μία (*απλή* ολικού σπιν 0 με συνιστώσα $s_z :\ 0$).

(ii) Να θεωρήσετε την σύζευξη 2 καταστάσεων με στροφορμές $j_1 = j_2 = 1$. Αφού η κάθε μία έχει 3 καταστάσεις τα δυνατά γινόμενα των κυματοσυναρτήσεων είναι συνολικά 9. Να δείξετε ότι η σύζευξη των δύο στροφορμών δίνει τρείς καταστάσεις με $j = 2, 1, 0$. Πόσες αντιστοιχούν σε κάθε j και πόσες είναι συνολικά; Παρατηρείστε πως το συμπέρασμα σας ισχύει για $\forall\ j_1, j_2$. Επίσης το γινόμενο των δύο ιδιοσυναρτήσεων είναι ακριβής ιδιοσυνάρτηση του αθροίσματος για τιμές του m που αντιστοιχούν σε ένα μόνο συνδυασμό (m_1, m_2) με $m_1 + m_2 = m$. Στις άλλες περιπτώσεις όπου περισσότεροι του ενός συνδυασμοί δίνουν το ίδιο $m_1 + m_2 = m$ υπάρχει πάντα ένας γραμμικός συνδυασμός των γινομένων.

<u>**Απάντηση**</u>: **(ii)** 5+3+1.

Άσκηση 2. Στην *max* τιμή $j = j_1 + j_2$ αντιστοιχεί $m = m_1 + m_2$ με $m_1 = j_1, m_2 = j_2$ που προέρχεται από τον *μοναδικό* συνδυασμό (m_1, m_2) ώστε

$$|jj\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle,\ \ j_1 + j_2 = j.$$

Μειώνοντας την προβολή σπιν που χαρακτηρίζεται από τον m κατά μια μονάδα με επαναληπτική δράση του τελεστή καταστροφής

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$J_- = J_x - iJ_y = J_{1-} + J_{2-}$$

έχουμε

$$J_-|jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\ \hbar\ |j\ m-1\rangle$$

(αντίστοιχες σχέσεις ισχύουν για τους J_{1-}, J_{2-}). Να δείξετε δρώντας με τον J_- στην $|j\ j\rangle$ ότι

$$|j\ j-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j}}\,|j_1 j_1 - 1\rangle|j_2\ j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j}}\,|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2 - 1\rangle.$$

Για άλλες τιμές του j πρέπει πρώτα να φτιαχθεί η $|j\ j\rangle$ και μετά με την δράση του J_- φτιάχνουμε τις $|jm\rangle$, $m = +j, \ldots, -j$. Όταν ο j έχει τιμές διαφορετικές της μέγιστης αυτό δεν είναι τόσο εύκολο.

7.2. Πολλά (N) σωμάτια και η αρχή του Pauli

Τα κλασσικά σωμάτια είναι *διακρίσιμα* όχι όμως και στην κβαντική φυσική που είναι *μη διακρίσιμα* (*ταυτοτικά*). Η *απαγορευτική αρχή του Pauli* αποτελεί συνέπεια της μη διακρισιμότητας των κβαντικών σωματίων. Αν *αγνοήσουμε το σπιν* η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματίου 1 στην θέση $\vec{r}_1$ και του σωματίου 2 στην θέση $\vec{r}_2$ είναι

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2. \tag{7.31}$$

Παρατηρούμε πως για *ταυτοτικά σωμάτια* το αποτέλεσμα προφανώς δεν εξαρτάται από την εναλλαγή $1 \leftrightarrow 2$ ώστε

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) & \text{συμμετρική} \\ \\ \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) & \text{αντισυμμετρική}. \end{cases} \tag{7.32}$$

Επομένως η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(1,2)$ δύο σωματίων στην εναλλαγή των μεταβλητών $1 \leftrightarrow 2$ είναι είτε *συμμετρική* (+) είτε *αντισυμμετρική* (−) με

$$\psi(2,1) = \pm\,\psi(1,2) \quad . \tag{7.33}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Τα συστήματα ταυτοσήμων σωματίων όταν έχουν *ακέραιο* σπιν περιγράφονται από *συμμετρικές* κυματοσυναρτήσεις και *ημιακέραιο* σπιν από *αντισυμμετρικές* κυματοσυναρτήσεις. Τα σωμάτια με ακέραιο σπιν ονομάζονται *μποζόνια* ενώ τα σωμάτια ημιακεραίου σπιν *φερμιόνια*.

7.2.1. Μποζόνια και φερμιόνια

Αρχικά εξετάζουμε N=2 **κβαντικά σωμάτια** χωρίς σπιν. Στην εναλλαγή $1 \leftrightarrow 2$ η κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi(1,2) = \pm\psi(2,1) \quad \begin{cases} + \text{ μποζόνια} & (\text{συμμετρική}) \\ - \text{ φερμιόνια} & (\text{αντισυμμετρική}) \end{cases}. \tag{7.34}$$

Άσκηση 3. (i) Να καταγραφούν οι κυματοσυναρτήσεις $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi(1,2)$ και οι αντίστοιχες ενέργειες E με τον εκφυλισμό τους για δύο σωμάτια (N=2) χωρίς σπιν που δεν αλληλεπιδρούν, όπου το καθένα μπορεί να καταλάβει μία από δύο μονοσωματιακές καταστάσεις $\psi_\alpha(\vec{r})$, $\psi_\beta(\vec{r})$ με ενέργειες $\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta$, όταν τα σωμάτια είναι: *διακρίσιμα, μποζόνια ή φερμιόνια.*

(ii) Να ορισθούν οι κυματοσυναρτήσεις των δύο σωματίων; Ποιό συμπέρασμα προκύπτει για τις συμμετρικές ψ_S και τις αντισυμμετρικές ψ_A

$$\begin{aligned} \psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\right] \\ \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{\alpha\beta} - \psi_{\beta\alpha}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\right] \end{aligned} \tag{7.35}$$

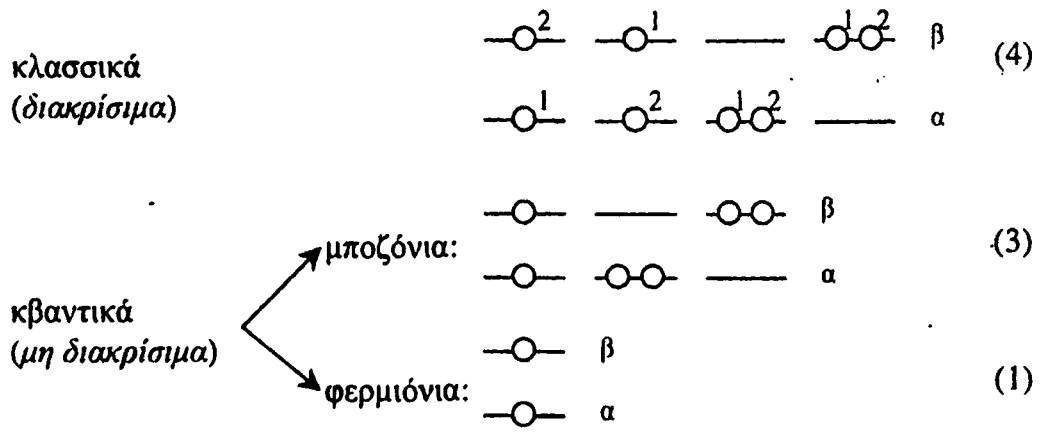
στην εναλλαγή των σωματίων $1 \leftrightarrow 2$. Τι είδους σωμάτια περιγράφει η κάθε μία απο αυτές; Τι συμπεραίνετε για τις πυκνότητες πιθανότητας $\psi_S^*\psi_S$, $\psi_A^*\psi_A$ στην εναλλαγή $1 \leftrightarrow 2$.

(iii) Τι θα συμβεί στο (ii) όταν $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$, εξάγοντας γενικό συμπέρασμα για μποζόνια και φερμιόνια και να διατυπώσετε την αρχή του Pauli.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Λύση:

(i)



Στα ταυτοτικά κβαντικά σωμάτια αν οι κβαντικοί αριθμοί του σωματίου 1 είναι α και του 2 είναι β (στην πράξη α και β είναι σύνολα κβαντικών αριθμών που περιγράφουν την κατάσταση των σωματίων 1, 2) η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι το γινόμενο

$$\psi_{\alpha\beta}(1,2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$$

με αντίστοιχη ιδιοτιμή

$$E = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta \ ,$$

όπου $\varepsilon_{\alpha(\beta)}$ είναι η ενέργεια της μονοσωματιακής κατάστασης $\alpha(\beta)$. Η παρουσία ταυτοτικών σωματίων σημαίνει πως η

$$\psi_{\beta\alpha}(1,2) = \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)$$

είναι επίσης κυματοσυνάρτηση του συστήματος με την *ίδια* ιδιοτιμή $E = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$. Επομένως στην $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$ αντιστοιχούν οι $\psi_{\alpha\beta}$, $\psi_{\beta\alpha}$ και το σύστημα παρουσιάζει *διπλό εκφυλισμο λόγω της συμμετρίας ανταλλαγής* $1 \leftrightarrow 2$ των σωματίων. Οι εκφυλισμοί φαίνονται παραπάνω στο σχήμα στις περιπτώσεις όπου τα σωμάτια είναι διακρίσιμα, μποζόνια και φερμιόνια (4, 3 και 1, αντίστοιχα).

(ii) Επιθυμούμε *αποδεκτές λύσεις* για τα ταυτοτικά σωμάτια με ταυτόχρονη *διατήρηση της πυκνότητας πιθανότητας* στην εναλλαγή $1 \leftrightarrow 2$ (για αυτόν τον λόγο οι $\psi_{\alpha\beta}$, $\psi_{\beta\alpha}$ δεν είναι αποδεκτές για ταυτοτικά σωμάτια). Όμως, οι συμμετρικές και αντισυμμετρικές κυματοσυναρτήσεις (7.35) για μποζόνια και φερμιόνια δίνουν πυκνότητες πιθανότητας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\psi_S^*\psi_S = \frac{1}{2}\left(\psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\beta\alpha}\right) + \frac{1}{2}\left(\psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\beta\alpha}\right)$$

$$\psi_A^*\psi_A = \frac{1}{2}\left(\psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\beta\alpha}\right) - \frac{1}{2}\left(\psi_{\beta\alpha}^*\psi_{\alpha\beta} + \psi_{\alpha\beta}^*\psi_{\beta\alpha}\right)$$

αναλλοίωτες στην εναλλαγή $1 \leftrightarrow 2$, όπως αρμόζει για μη διακρίσιμα κβαντικά σωμάτια όπου δεν έχει σημασία ποιό είναι στην κατάσταση α και ποιό στην β. Οι $\psi_{\alpha\beta}, \psi_{\beta\alpha}$ είναι εκφυλισμένες, όπως και οι γραμμικοί τους συνδυασμοί ψ_S, ψ_A που είναι επίσης εκφυλισμένες.

(iii) Όταν $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ η ψ_A μηδενίζεται γεγονός που οδηγεί στην απαγορευτική αρχή του Pauli.

7.2.2. Η απαγορευτική αρχή του Pauli

Για αυθαίρετο αριθμό N σωματίων ***χωρίς σπιν*** έχουμε *για **μποζόνια** την συμμετρική κυματοσυνάρτηση*

$$\psi_S(1,2,\cdots,N) = \sqrt{\frac{n_\alpha!n_\beta!n_\gamma!\cdots n_\nu!}{N!}} \sum_{(P)} \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\cdots\psi_\nu(N) \qquad (7.36)$$

με το άθροισμα στις δυνατές μεταθέσεις (P) των α, β, γ, ... αριθμών εμφάνισης $n_\alpha, n_\beta, n_\gamma, \cdots$ και *για **φερμιόνια*** όπου $n_\alpha, n_\beta, n_\gamma, \cdots = 0$ *ή* 1 *την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση* στην μορφή της *ορίζουσας Slater*

$$\psi_A(1,2,\cdots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \cdots & \psi_\alpha(N) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & & \psi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_\nu(1) & \psi_\nu(2) & \cdots & \psi_\nu(N) \end{vmatrix}. \qquad (7.37)$$

Παρατηρούμε πως για φερμιόνια $\alpha = \beta$ οδηγεί σε μηδενισμό της ορίζουσας και $\psi_A = 0$ που ισοδυναμεί με την απαγορευτική αρχή του Pauli.

Παράδειγμα 1. *Τα φερμιόνια δεν πάνε κοντά* αφού

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r} : \psi_A(\vec{r}, \vec{r}) = -\psi_A(\vec{r}, \vec{r}) \Rightarrow \psi_A(\vec{r}, \vec{r}) = 0.$$

Τα μποζόνια μπορούν να πάνε κοντά αφού

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r} : \psi_S(\vec{r},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_\alpha(\vec{r})\psi_\beta(\vec{r}) + \psi_\alpha(\vec{r})\psi_\beta(\vec{r})\right) \neq 0 .$$

Για αυθαίρετο αριθμό N σωματίων *με σπιν* οι κυματοσυναρτήσεις γράφονται

$$\psi_{\text{ολική}} = \psi_{\text{χώρου}}\, \chi_{\text{σπιν}}$$

και η $\psi_{\text{ολική}}$ πρέπει να είναι *συμμετρική για μποζόνια* και *αντισυμμετρική για φερμιόνια*. Π. χ. για *δύο ηλεκτρόνια (φερμιόνια) σπιν-1/2* η $\psi_{\text{ολική}}$ πρέπει να είναι *αντισυμμετρική* ώστε

	$\chi_{\text{σπιν}}$	$\psi_{\text{χώρου}}$	$\psi_{\text{ολική}}$
s=1	S	A	A
s=0	A	S	A

Αρχή του Pauli: Δύο φερμιόνια με 'παράλληλα' σπιν έχουν μηδενική πιθανότητα να έχουν την ίδια κυματοσυνάρτηση χώρου $\psi_\alpha = \psi_\beta$ αφού η χωρική κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ πρέπει να είναι *αντισυμμετρική* και $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2) - \psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2)) = 0$. Επομένως, οι κβαντικοί αριθμοί δύο *φερμιονίων* με παράλληλα σπιν είναι αδύνατον να συμπίπτουν.

Άσκηση 4. Στην περίπτωση όπου οι κβαντικοί αριθμοί είναι ίσοι $j_1 = j_2 = j$ υιοθετώντας τον συμβολισμό JM για τους κβαντικούς αριθμούς που χαρακτηρίζουν το άθροισμα να δείξετε ότι $\psi_{JM}(2,1) = (-1)^{2j-J}\psi_{JM}(1,2)$ όπου η

$$\psi_{JM}(1,2) = \sum_{m_1,m_2} c^{JM}_{m_1 m_2}\psi_{jm_1}(1)\,\psi_{jm_2}(2)$$

είναι *συμμετρική* ως προς την εναλλαγή των μεταβλητών των δύο σωματίων ή *αντισυμμετρική*, δηλαδή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\psi_{JM}(1,2) = \pm\psi_{JM}(2,1) \ .$$

Απάντηση: Στην περίπτωση αυτή $J = 2j, 2j-1, \cdots, 0$ από τον (7.3) και επειδή η κατάσταση μέγιστου J είναι πάντα συμμετρική, είναι γνωστό η ισοτιμία της είναι $(-1)^J = (-1)^{2j} = +1$, η επόμενη είναι αντισυμμετρική $(-1)^{2j-1} = -1$, κλπ, ο δείκτης γράφεται $(-1)^{2j-J}$, $J = 2j, 2j-1, \cdots, 0$.

Άσκηση 5. (i) Είδαμε πως στην περίπτωση δύο σωματίων σπιν-1/2 ο κβαντικός αριθμός s του ολικού σπιν είναι είτε $s=1$ (τριπλή κατάσταση με $m=+1, 0, 1$) είτε $s=0$ (απλή κατάσταση με $m=0$). Να δείξετε ότι οι καταστάσεις της τριπλής $|1\,1\rangle, |0\,0\rangle, |1\,-1\rangle$ είναι *συμμετρικές* ως προς την εναλλαγή σωματίων ενώ η απλή $|0\,0\rangle$ είναι *αντισυμμετρική*.

(ii) Η πλήρης κυματοσυνάρτηση *χώρου και σπιν* δίνεται από το γινόμενο

$$\psi_{\text{ολική}} = \psi_{\text{χώρου}}\ \chi_{\text{σπιν}}$$

και επιβάλλεται να είναι *συμμετρική γιά μποζόνια* ακέραιου σπίν και *αντισυμμετρική γιά φερμιόνια* ημιακέραιου σπιν. Επομένως, η *χωρική κυματοσυνάρτηση* $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ δύο φερμιονίων *είναι αντισυμμετρική για 'παράλληλα' σπιν και συμμετρική για 'αντιπαράλληλα' σπιν* ενώ *ενώ η χωρική κυματοσυνάρτηση* $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ δύο μποζονίων *είναι συμμετρική για 'παράλληλα' σπιν και αντισυμμετρική γιά 'αντιπαράλληλα' σπιν.* Αυτό συμβαίνει επειδή στην εναλλαγή των μεταβλητών η ολική κυματοσυνάρτηση, που είναι το γινόμενο, πρέπει να είναι υποχρεωτικά *συμμετρική γιά μποζόνια* και *αντισυμμετρική γιά φερμιόνια.* Να εξηγήσετε τι συμβαίνει σε αυτές τις δύο περιπτώσεις όταν δύο φερμιόνια έρχονται πολύ κοντά. Πότε 'έλκονται' και πότε 'απωθούνται'; Ποιάς αρχής είναι απόρροια η παρατηρούμενη συσχέτιση της χωρικής κίνησης και πως εκδηλώνεται; **Σημείωση:** οι *δυνάμεις ανταλλαγής* που δεν έχουν σχέση με τις δυνάμεις Coulomb είναι υπεύθυνες για την σταθερότητα των πυρήνων. Η φορά των δυνάμεων ανταλλαγής εξαρτάται από τον προσανατολισμό του σπιν (με $\psi_S \neq 0, \psi_A \approx 0$).

Δύο φερμιόνια με 'παράλληλα' σπιν: $\psi_{\text{χώρου}}$ = αντισυμμετρική

Δύο φερμιόνια με 'αντιπαράλληλα' σπιν: $\psi_{\text{χώρου}}$ = συμμετρική

Δύο μποζόνια με 'παράλληλα' σπιν: $\psi_{\chi\acute{\omega}\rho o\upsilon}$ = συμμετρική

Δύο μποζόνια με 'αντιπαράλληλα' σπιν: $\psi_{\chi\acute{\omega}\rho o\upsilon}$ = αντισυμμετρική

Άσκηση 6. Δώστε μερικά παραδείγματα φερμιονίων και μποζονίων. Ποια είναι η βασική τους διαφορά; Γράψτε μια τυπική κυματοσυνάρτηση για δύο φερμιόνια και μία για δύο μποζόνια, υποθέτοντας πως δεν αλληλεπιδρούν.

Λύση: **Φερμιόνια είναι** τα ηλεκτρόνια και τα πρωτόνια σπιν-$1/2$, όπως και τα νετρόνια ή οι πυρήνες με περιττό αριθμό φερμιονίων. **Μποζόνια είναι** το φωτόνιο (με σπιν 1) και το σωμάτιο α (με σπιν 0) ή ακόμη πυρήνες με άρτιο αριθμό φερμιονίων καθώς και άλλα σωμάτια όπως το π-μεσόνιο με σπιν 0. Η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση δύο φερμιονίων γράφεται με την ορίζουσα του Slater, χρονικά εξαρτημένης μορφής

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \Psi_\alpha(\vec{r}_1,t) & \Psi_\beta(\vec{r}_1,t) \\ \Psi_\alpha(\vec{r}_2,t) & \Psi_\beta(\vec{r}_2,t) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \psi_\alpha(\vec{r}_1) & \psi_\beta(\vec{r}_1) \\ \psi_\alpha(\vec{r}_2) & \psi_\beta(\vec{r}_2) \end{pmatrix} e^{-i(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)t/\hbar}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) - \psi_\beta(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2)\right) e^{-i(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)t/\hbar},$$

όπου οι δείκτες α, β αναφέρονται στους κβαντικούς αριθμούς χώρου και σπιν. Η χρονικά εξαρτημένη κυματοσυνάρτηση δύο *μποζονίων είναι συμμετρική* της μορφής

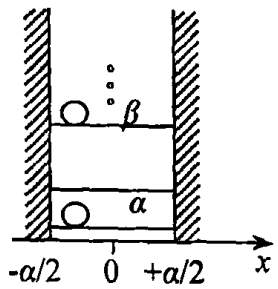
$$\Psi_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_\alpha(\vec{r}_1)\psi_\beta(\vec{r}_2) + \psi_\beta(\vec{r}_1)\psi_\alpha(\vec{r}_2)\right) e^{-i(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)t/\hbar}.$$

Άσκηση 7. Δύο ταυτοτικά κβαντικά σωμάτια κινούνται στην μία διάσταση σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με το ένα στη βασική στάθμη και το άλλο στην αμέσως υψηλότερη αλλά *της ίδιας ισοτιμίας*. Αν το εύρος του πηγαδιού είναι a και η μάζα των σωματίων m να γράψετε τις χρονικά εξαρτημένες Ψ_S, Ψ_A και να αποδείξετε ότι είναι εκφυλισμένες. Να υπολογίσετε τις πυκνότητες πιθανότητας στις δύο περιπτώσεις. Να υπολογίσετε γιά τις δύο περιπτώσεις την πιθανότητα να βρεθούν τα δύο σωμάτια ταυτόχρονα σε απόσταση $< a/4$ από το κέντρο του κουτιού. Συγκρίνετε τις πιθανότητες και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

σχολιάστε το αποτέλεσμα.

Υπόδειξη:



$$\Psi_\alpha(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi x}{a}e^{-iE_\alpha t/\hbar}\ ,\ E_\alpha=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\Psi_\beta(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{3\pi x}{a}e^{-iE_\beta t/\hbar}\ ,\ E_\beta=9E_\alpha.$$

$$\Psi_S=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{a}\left[\cos\frac{\pi x_1}{a}\cos\frac{3\pi x_2}{a}+\cos\frac{\pi x_2}{a}\cos\frac{3\pi x_1}{a}\right]e^{-i(E_\alpha+E_\beta)t/\hbar}$$

$$\Psi_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{a}\left[\cos\frac{\pi x_1}{a}\cos\frac{3\pi x_2}{a}-\cos\frac{\pi x_2}{a}\cos\frac{3\pi x_1}{a}\right]e^{-i(E_\alpha+E_\beta)t/\hbar}$$

με ίδια $E=E_\alpha+E_\beta$. Από την $P_S(x_1,x_2)=|\Psi_S(x_1,x_2,t)|^2$, κ.λ.π υπολογίζονται οι ανεξάρτητες του χρόνου πιθανότητες

$$P_{S,A}(-a/4<x_1,x_2<a/4)=\int_{-a/4}^{a/4}dx_1\int_{-a/4}^{a/4}dx_2\ P_{S,A}(x_1,x_2)$$

και μετά από πράξεις

$$P_S=\frac{1}{4}\left(1+\frac{2}{\pi}\right)\left(1-\frac{2}{3\pi}\right)+\frac{1}{\pi^2}\approx 0.424$$
$$P_A=\frac{1}{4}\left(1+\frac{2}{\pi}\right)\left(1-\frac{2}{3\pi}\right)-\frac{1}{\pi^2}\approx 0.221$$

Παρατηρούμε πως στην συμμετρική κατάσταση τα δύο σωμάτια τείνουν να πλησιάσουν μεταξύ τους, ενώ στην αντισυμμετρική η πιθανότητα είναι μικρότερη και το ένα αποφεύγει το άλλο. Δίνονται τα ολοκληρώματα

$$\int_{-a/4}^{a/4}dx\cos^2\frac{\pi x}{a}=\frac{a}{4}\left(1+\frac{2}{\pi}\right),\quad \int_{-a/4}^{a/4}dx\cos^2\frac{3\pi x}{a}=\frac{a}{4}\left(1-\frac{2}{3\pi}\right),$$

$$\int_{-a/4}^{a/4}dx\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{3\pi x}{a}=\frac{a}{2\pi}\ .$$

Άσκηση 8. Δύο ηλεκτρόνια περιγράφονται από την Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης

$$H=\alpha\,\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Να βρείτε τις ιδιοτιμές ενέργειας και την τάξη εκφυλισμού τους.

Λύση :

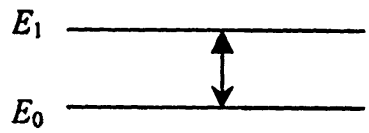
$$H = \alpha\, \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{\alpha}{2}(\vec{s}^{\,2} - \vec{s}_1^{\,2} - \vec{s}_2^{\,2}) \quad , \quad \vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$$

και οι ιδιοτιμές της H είναι

$$E = \frac{\alpha\hbar^2}{2}(s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)),\ s_1 = s_2 = 1/2 \Rightarrow s = s_1 + s_2, |s_1 - s_2| = 1, 0.$$

Άρα

$$E_s = \frac{\alpha\,\hbar^2}{2}\left(s\,(s+1) - \frac{3}{2}\right). \Rightarrow \begin{cases} E_1 = +\dfrac{\alpha\,\hbar^2}{4} & \text{(τριπλή)} \\ E_0 = -3\dfrac{\alpha\,\hbar^2}{4} & \text{(απλή)} \end{cases}$$



Άσκηση 9. Στο άτομο του υδρογόνου προστίθεται ο όρος $V' = \dfrac{2\alpha}{\hbar^2}\,\vec{\ell}\cdot\vec{s}$ που περιγράφει *σκέδαση σπιν-στροφορμής* με $\vec{\ell}$ την τροχιακή στροφορμή και $\vec{s}$ το σπιν. Να υπολογίσετε το ενεργειακό φάσμα όταν $\alpha \neq 0$.

Λύση:

Η Χαμιλτονιανή είναι

$$H = H_0 + \frac{2\alpha}{\hbar^2}\vec{\ell}\cdot\vec{s} \quad , \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad \text{με} \quad E_n^{(0)} = -\frac{13\cdot 6}{n^2}eV.$$

Ισχύει

$$(\vec{\ell} + \vec{s})^2 = \vec{\ell}^{\,2} + \vec{s}^{\,2} + 2\vec{\ell}\cdot\vec{s} = \vec{j}^{\,2} \Rightarrow \vec{\ell}\cdot\vec{s} = \frac{1}{2}(\vec{j}^{\,2} - \vec{s}^{\,2} - \vec{\ell}^{\,2})$$

άρα $V' = \dfrac{\alpha}{\hbar^2}(\vec{j}^{\,2} - \vec{s}^{\,2} - \vec{\ell}^{\,2})$ με ιδιοτιμές

$$\mathrm{E}_{j\ell} = \alpha\left[j(j+1) - \frac{3}{4} - \ell(\ell+1)\right]$$

$$E_{n\ell j} = E_n^{(0)} + E_{j\ell} = -\frac{13.6}{n^2}eV + \alpha\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right].$$

Παρατηρούμε πως λόγω του όρου V' η $E_n^{(0)}$ γίνεται $E_{n\ell j}$ και αίρονται ο περιστροφικός και ο δυναμικός εκφυλισμός.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 10. (i) **Μποζόνια:**

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής a, a^+ για **μποζόνια υπακούουν σχέσεις μετάθεσης**

$$[a,a]=[a^+,a^+]=0,\quad [a,a^+]=1,$$

με **ορισμό του μεταθέτη** για τους τελεστές a, b

$$[a,b]=ab-ba.$$

Στο παράδειγμα του αρμονικού ταλαντωτή με ιδιοσυναρτήσεις τις $|n\rangle$, $n=0,1,2,\cdots$ έχουμε

$$a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle,\ a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές του αρθμητικού τελεστή $N=a^+a$ και επιπλέον τις μέσες τιμές θέσης, ορμής και το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x\,\Delta p$ στην κατάσταση $|n\rangle$.

(ii) **Φερμιόνια:**

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής a, a^+ για **φερμιόνια υπακούουν σχέσεις αντιμετάθεσης**

$$\{a,a\}=\{a^+,a^+\}=0,\quad \{a,a^+\}=1,$$

με **ορισμό του αντιμεταθέτη**

$$\{a,b\}=ab+ba$$

(+ για φερμιόνια ενώ στα μποζόνια ισχύουν σχέσεις μετάθεσης με μεταθέτη $[a,b]=ab-ba$ με −). Να δείξετε πως για τον αριθμητικό τελεστή $N=a^+a$ ισχύει $N(N-1)=0$ και να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις του N (οι ιδιοτιμές είναι 0 ή 1 με ιδιοσυναρτήσεις $|0\rangle,|1\rangle$). Αν οι τελεστές δράσουν στις ιδιοσυναρτήσεις $|0\rangle,|1\rangle$ που για φερμιόνια αποτελούν ένα σύστημα δύο καταστάσεων $|0\rangle,|1\rangle$ με

$$a|0\rangle=0,\ a^+|1\rangle=0$$

να βρείτε τις 2×2 μήτρες που αντιστοιχούν στους τελεστές a, $i(a^+-a)$. Ποιος από αυτούς τους τελεστές παριστάνει ένα φυσικό μέγεθος; Να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

.3. Θεωρία διαταραχών

.3.1. Μη εκφυλισμένη

Στόχος μας είναι η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger

$$H\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{7.38}$$

ε τον υπολογισμό των ιδιοτιμών E_n και των ιδιοσυναρτήσεων $|n\rangle$. Αυτό μπορεί να γίνει *ροσεγγιστικά με την θεωρία διαταραχών (ΘΔ)* όταν

$$H = H_0 + V' = H_0 + \lambda V, \tag{7.39}$$

που H_0 είναι το '*αδιατάρακτο*' μέρος της Χαμιλτονιανής H που πρέπει να επιλύεται κριβώς

$$H_0\,|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\,|n^{(0)}\rangle \tag{7.40}$$

ε (μη εκφυλισμένες) ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$ και ορθοκανονικές ιδιοσυναρτήσεις $|n^{(0)}\rangle$. Έτσι, :αν η *διαταραχή* V' *είναι μικρή* ($\lambda << 1$), μπορεί να αρκεσθούμε στους πρώτους όρους των 'απτυγμάτων που δίνουν τις E_n, $|n\rangle$ σε δυνάμεις του λ

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda\, E_n^{(1)} + \lambda^2\, E_n^{(2)} + \ldots \tag{7.41}$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda\,|n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|n^{(2)}\rangle + \ldots \tag{7.42}$$

αν $\lambda = 0$ προφανώς $E_n = E_n^{(0)}$, $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle$ ενώ οι παραπάνω όροι τάξης $\lambda, \lambda^2, \cdots$ είναι *ρθώσεις πρώτης, δεύτερης, κλπ τάξης* λόγω της διαταραχής V'. Άρα, η θεωρία ταραχών επιτρέπει την εύρεση προσεγγιστικών λύσεων στο πλήρες ('*διαταραγμένο*') ;βλημα χτίζοντας πάνω στις γνωστές λύσεις της '*αδιατάρακτης*' Χαμιλτονιανής.

Αν αντικαταστήσουμε τα αναπτύγματα (7.41,7.42) ως προς λ στην εξίσωση ırödinger $H\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$ παίρνουμε

$$\begin{aligned}&(H_0 + \lambda V)\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda\,|n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|n^{(2)}\rangle + \ldots\right)\\ &= \left(E_n^{(0)} + \lambda\, E_n^{(1)} + \lambda^2\, E_n^{(2)} + \ldots\right)\left[|n^{(0)}\rangle + \lambda\,|n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|n^{(2)}\rangle + \ldots\right]\end{aligned} \tag{7.43}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και συλλέγοντας όρους ίδιας τάξης ως προς λ

$$H_0\left|n^{(0)}\right\rangle+\lambda\left(H_0\left|n^{(1)}\right\rangle+V\left|n^{(0)}\right\rangle\right)+\lambda^2\left(H_0\left|n^{(2)}\right\rangle+V\left|n^{(1)}\right\rangle\right)+O(\lambda^3)$$

$$=E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle+\lambda\left(E_n^{(0)}\left|n^{(1)}\right\rangle+E_n^{(1)}\left|n^{(0)}\right\rangle\right)$$

$$+\lambda^2\left(E_n^{(0)}\left|n^{(2)}\right\rangle+E_n^{(1)}\left|n^{(1)}\right\rangle+E_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle\right)+O(\lambda^3)\ , \qquad (7.44)$$

όπου $O(\lambda^3)$ σημαίνει όρους τάξης λ^3 και μεγαλύτερης. Εξισώνοντας τις διαφορετικέ δυνάμεις του λ προκύπτουν οι

$$H_0\left|n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle$$

$$H_0\left|n^{(1)}\right\rangle+V\left|n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(1)}\right\rangle+E_n^{(1)}\left|n^{(0)}\right\rangle$$

$$H_0\left|n^{(2)}\right\rangle+V\left|n^{(1)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(2)}\right\rangle+E_n^{(1)}\left|n^{(1)}\right\rangle+E_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \qquad (7.45$$

. . . . . .

και από την επίλυση των (7.45) έχουμε τους διαδοχικούς όρους της θεωρίας διαταραχών *μηδενικής τάξης*, *πρώτης τάξης*, *δεύτερης τάξης*, κλπ.

ΘΔ μηδενικής τάξης:

Από την πρώτη εξίσωση (7.45) στην τάξη λ^0 δεν προκύπτει τίποτα καινούργιο κα οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις είναι αυτές της '*αδιατάρακτης*' Χαμιλτονιανής

$$H_0\left|n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \begin{matrix} E_n=E_n^{(0)} \\ |n\rangle=\left|n^{(0)}\right\rangle \end{matrix}\ . \qquad (7.46$$

ΘΔ πρώτης τάξης:

Από την δεύτερη εξίσωση στην τάξη λ^1

$$H_0\left|n^{(1)}\right\rangle+V\left|n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(1)}\right\rangle+E_n^{(1)}\left|n^{(0)}\right\rangle$$

$$\Rightarrow \qquad (E_n^{(0)}-H_0)\left|n^{(1)}\right\rangle=-\left(E_n^{(1)}-V\right)\left|n^{(0)}\right\rangle. \qquad (7.4$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

εξίσωση αυτή επιλύεται απουσία εκφυλισμού των $|n^{(0)}\rangle$ αρκεί η $|n^{(1)}\rangle$ να αναπτυχθεί την ορθοκανονική και πλήρη βάση των ιδιοσυναρτήσεων της H_0

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_m c_m |m^{(0)}\rangle \tag{7.48}$$

στε

$$\sum_m c_m \left(E_n^{(0)} - H_0\right)|m^{(0)}\rangle = -\left(E_n^{(1)} - V\right)|n^{(0)}\rangle \tag{7.49}$$

μβάνοντας υπ' όψιν πως $H_0\,|m^{(0)}\rangle = E_m^{(0)}\,|m^{(0)}\rangle$

$$\sum_m c_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)|m^{(0)}\rangle = -\left(E_n^{(1)} - V\right)|n^{(0)}\rangle. \tag{7.50}$$

πολλαπλασιάσουμε με το *bra* $\langle n^{(0)}|$ και χρησιμοποιήσουμε την ορθοκανονικότητα των $^{(0)}\rangle$

$$\sum_m c_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = -E_n^{(1)}\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_m c_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\delta_{n,m} = -E_n^{(1)} + \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow 0 = -E_n^{(1)} + \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \tag{7.51}$$

ι, στην *θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης* οι ιδιοτιμές από την (7.41)

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda\, E_n^{(1)} \\ &= E_n^{(0)} + \lambda\, \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \\ &= E_n^{(0)} + \langle n^{(0)}|V'|n^{(0)}\rangle \\ &= E_n^{(0)} + V'_{n^{(0)}n^{(0)}} \end{aligned} \tag{7.52}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αλλάζουν κατά *το στοιχείο μήτρας της διαταραχής* $V'_{n^{(0)}n^{(0)}}$ *υπολογισμένου στις αδιατάρακτε ιδιοσυναρτήσεις* $|n^{(0)}\rangle$, δηλαδή η διόρθωση δίνεται από το ολοκλήρωμα της διαταραχής V' στις καταστάσεις που επιθυμούμε

$$V'_{n^{(0)}n^{(0)}} = \langle n^{(0)}|V'|n^{(0)}\rangle = \int d^3\vec{r}\, \psi^*_{n^{(0)}}(\vec{r})\, V'(\vec{r})\, \psi_{n^{(0)}}(\vec{r}) \,. \tag{7.53}$$

Με άλλα λόγια:

Η διόρθωση πρώτης τάξης στην ενέργεια της 'αδιατάρακτης' κατάστασης δίνεται από τη μέση ή αναμενόμενη τιμή της διαταραχής σε αυτήν.

Οι ιδιοσυναρτήσεις πως αλλάζουν σε πρώτη τάξη ΘΔ; Η εξίσωση πρώτης τάξη θέτοντας n' αντί του m

$$\sum_{n'} c_{n'}\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right)|n'^{(0)}\rangle = -\left(E_n^{(1)} - V\right)|n^{(0)}\rangle \tag{7.54}$$

αν πολλαπλασιασθεί με το *bra* $\langle m^{(0)}|$ με $m \neq n$, δίνει

$$\sum_{n'} c_{n'}\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right)\langle m^{(0)}|n'^{(0)}\rangle = -E_n^{(1)}\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{n'} c_{n'}\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right)\delta_{m,n} = \langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow c_m\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) = \langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow c_m = \frac{\langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \;, \; m \neq n \,. \tag{7.55}$$

Επομένως,

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_m c_m |m^{(0)}\rangle$$

$$= c_n|n^{(0)}\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|m^{(0)}\rangle \tag{7.56}$$

όπου στο άθροισμα $\sum$ δεν συμπεριλαμβάνεται ο όρος $m = n$. Ο συντελεστής c υπολογίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης της

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\left|n^{(0)}\right\rangle + \lambda \left|n^{(1)}\right\rangle \tag{7.57}$$

που είναι η ιδιοσυνάρτηση $|n\rangle$ στην πρώτη προσέγγιση, με όρους τάξης μέχρι λ,

$$1 = \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left(\left\langle n^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle + \left\langle n^{(1)} \middle| n^{(0)} \right\rangle \right)$$

$$= 1 + \lambda \left(\left| c_n{}^2 \right| + \left| c_n{}^2 \right| \right) \Rightarrow c_n = 0 \quad . \tag{7.58}$$

Όταν οι 'αδιατάρακτες' ενέργειες είναι μη εκφυλισμένες έχουμε

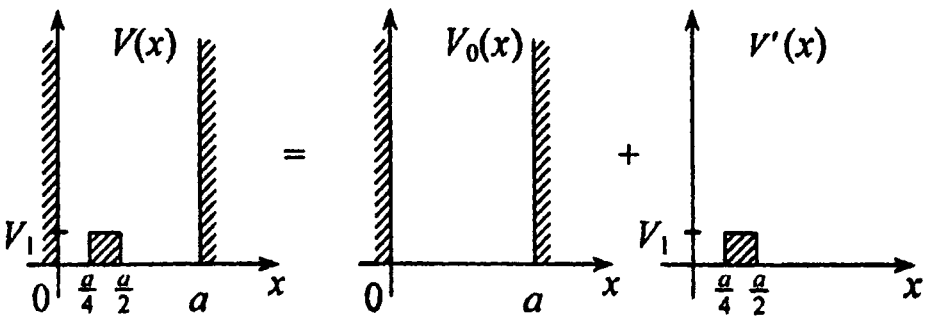
$$\left|n^{(1)}\right\rangle = \sum_{m(\neq n)} \frac{\left\langle m^{(0)} \middle| V \middle| n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle. \tag{7.59}$$

Επομένως, οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις *στην πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών* (7.41) είναι

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \left\langle n^{(0)} \middle| V' \middle| n^{(0)} \right\rangle \\ |n\rangle &= \left|n^{(0)}\right\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\left\langle m^{(0)} \middle| V' \middle| n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle, \end{aligned} \tag{7.60}$$

όπου $H = H_0 + V'$ με $H_0 \left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|n^{(0)}\right\rangle$. Αν η Χαμιλτονιανή H γράφεται ως $H = H_0 + V'$ όταν η V' είναι μικρή σε σχέση με την H_0 μπορούμε να περιορισθούμε στις παραπάνω εκφράσεις για τις $E_n, |n>$ στην θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης .

Παράδειγμα 1. Στο δυναμικό $V(x) = V_0(x) + V'(x)$ του σχήματος



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου $V_0(x)$ είναι το αδιατάρακτο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού στο $[0,a]$ και $V'(x)$ ένα μικρό συγκριτικά *δυναμικό φράγματος* V_1 στον πυθμένα του, η εξίσωση Schrödinger γράφεται $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ με Χαμιλτονιανή $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) + V'(x) = H_0 + V'(x)$. Με όρους μέχρι και πρώτης τάξης στην ΘΔ οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις γίνονται από την (7.60)

$$E_n = E_n^{(0)} + V'_{nn} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 + V_1\int_{a/4}^{a/2} dx\left(\frac{2}{a}\right)\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} + \sum_{m(\neq n)}\frac{V'_{mn}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n^2-m^2\right)}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi x}{a}$$

με

$$V'_{mn} = \frac{2V_1}{a}\int_{a/4}^{a/2} dx\,\sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad m,n = 1, 2, 3, \ldots,$$

όπου για το 'αδιατάρακτο' πρόβλημα ισχύει

$$\left|n^{(0)}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\ E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2,\ n = 1, 2, \ldots.$$

Με την ταυτότητα $\sin^2\alpha = (1-\cos 2\alpha)/2$ επιλύουμε το ολοκλήρωμα για το V'_{mn}:

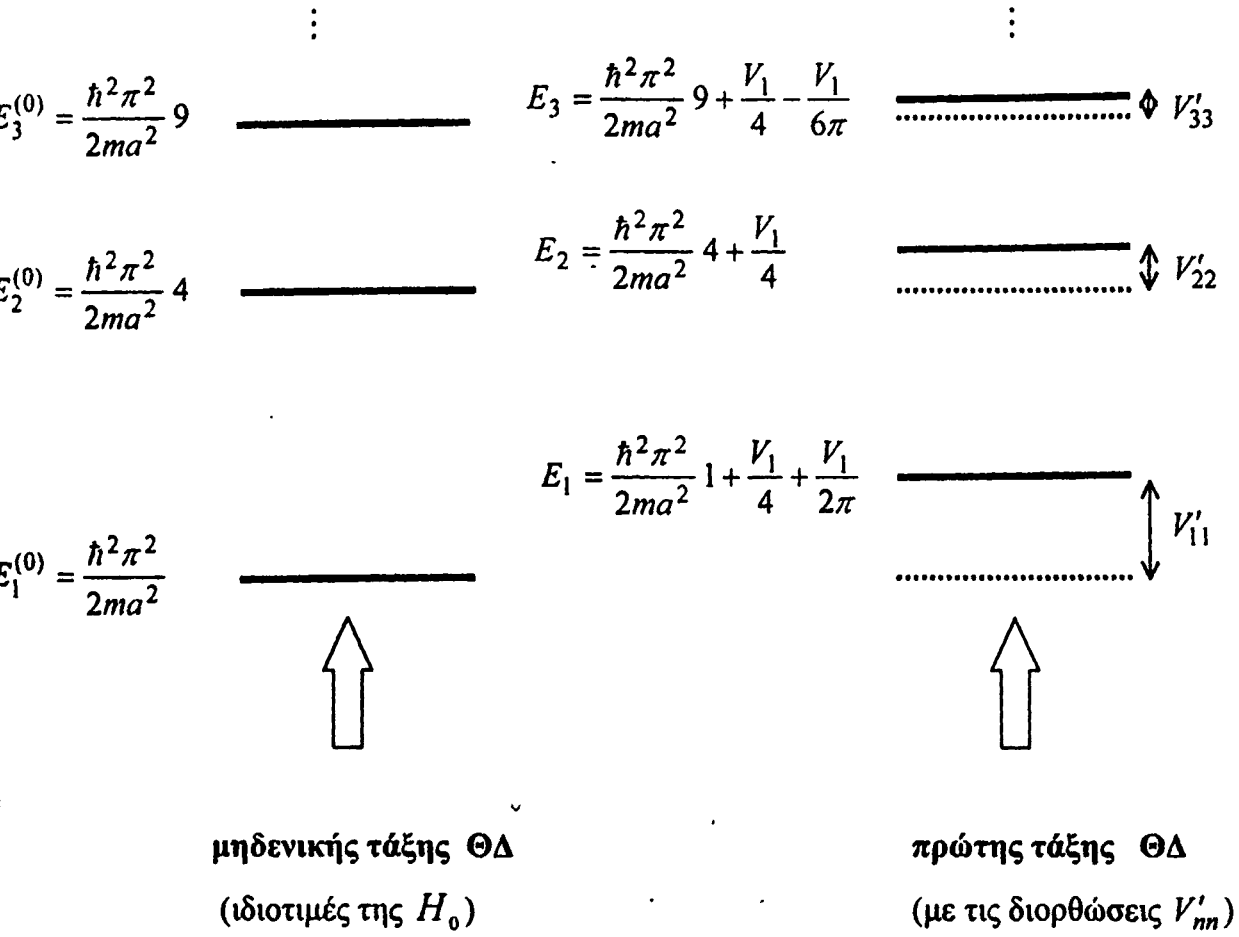
$$\begin{aligned}
\frac{2V_1}{a}\int_{a/4}^{a/2} dx\,\sin^2\frac{n\pi x}{a} &= \frac{2V_1}{a}\left(\int_{a/4}^{a/2} dx\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\right)\\
&= \frac{2V_1}{a}\left(\frac{a/2-a/4}{2} - \frac{a}{4n\pi}\int_{n\pi/2}^{n\pi} dy\,\cos y\right)\\
&= \frac{2V_1}{a}\left(\frac{a}{8} - \frac{a}{4n\pi}\sin y\Big|_{n\pi/2}^{n\pi}\right)\\
&= \frac{V_1}{4} + \frac{V_1}{2n\pi}\sin\frac{n\pi}{2},\ n = 1,2,3,\cdots
\end{aligned}$$

και οι ιδιοτιμές ενέργειας *στην πρώτη τάξη* γίνονται

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 + \left(\frac{V_1}{4} + \frac{V_1}{2n\pi}\sin\frac{n\pi}{2}\right)\ ,\ n = 1, 2, 3, \cdots.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Οι μηδενικής και πρώτης τάξης τιμές της ΘΔ φαίνονται στο σχήμα για $n = 1, 2, 3$.



Παρατηρούμε πως οι ενεργειακές στάθμες του απειρόβαθου πηγαδιού, που στην ιδενική τάξη περιγράφονται από την H_0, στην πρώτη τάξη μετατοπίζονται κατά V'_{nn}, την ση τιμή της διαταραχής σε αυτή, δηλαδή γίνονται $E_n^{(0)} + V'_{nn}$. Όταν $|V'_{nn}| <<$ διαφέρουν ο από τις $E_n^{(0)}$ με αποτέλεσμα συχνά να αρκούμεθα στην πρώτη τάξη ΘΔ. Οι ισυναρτήσεις $|n^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ αλλάζουν επίσης με διόρθωση πρώτης τάξης στην ι. Εδώ θα επιλύσουμε και αυτό το πρόβλημα. Με αντικατάσταση στην (7.60) έχουμε

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} + \sum_{m(\neq n)} \frac{\frac{2V_1}{a}\int_{a/4}^{a/2} dx \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n^2 - m^2)} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi x}{a}$$

λοκλήρωμα με την ταυτότητα $\sin\alpha\sin\beta = [\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)]/2$ γράφεται

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$V'_{mn} = \frac{2V_1}{a}\int_{a/4}^{a/2} dx \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a} = \frac{V_1}{a}\int_{a/4}^{a/2} dx\left[\cos\frac{(m-n)\pi x}{a} - \cos\frac{(m+n)\pi x}{a}\right]$$

$$= \frac{V_1}{\pi(m-n)}\left[\sin\frac{(m-n)\pi a/2}{a} - \sin\frac{(m-n)\pi a/4}{a}\right]$$

$$-\frac{V_1}{\pi(m+n)}\left[\sin\frac{(m+n)\pi a/2}{a} - \sin\frac{(m+n)\pi a/4}{a}\right]$$

και η βασική $(n=1)$ στάθμη γίνεται

$$|1\rangle = \left|1^{(0)}\right\rangle + \frac{V'_{21}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1^2-2^2\right)}\left|2^{(0)}\right\rangle + \frac{V'_{31}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1^2-3^2\right)}\left|3^{(0)}\right\rangle + \cdots$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\sin\frac{\pi x}{a} - \frac{2ma^2}{3\hbar^2\pi^2}\frac{V_1}{\pi}\left(1-\frac{\sqrt{2}}{2}+\frac{1}{3}+\frac{\sqrt{2}}{6}\right)\sin\frac{2\pi x}{a}\right.$$

$$\left. -\frac{2ma^2}{8\hbar^2\pi^2}\left(-\frac{V_1}{2\pi}\right)\sin\frac{3\pi x}{a} - \frac{V_1}{\pi}\left(-\frac{1}{3}-\frac{\sqrt{2}}{6}-\frac{1}{5}-\frac{\sqrt{2}}{10}\right)\sin\frac{4\pi x}{a} + \cdots\right]$$

Παρατηρούμε πως στην διόρθωση της βασικής στάθμης που εξετάζουμε συνεισφέρουν *όλ οι κυματοσυναρτήσεις του 'αδιατάρακτου' προβλήματος (μίξη)*, αλλά η σημαντικότε συνεισφορά είναι από αυτές που οι ιδιοτιμές τους είναι κοντά στην $|n=1\rangle$ που μ ενδιαφέρει.

Οι παραπάνω τάξεις στην θεωρία διαταραχών υπολογίζονται όλο και πιο δύσκο όσο η τάξη μεγαλώνει. Το αποτέλεσμα *δεύτερης τάξης* ΘΔ για τις ιδιοτιμές ενέργειας είναι

$$E_n = E_n^{(0)} + V'_{nn} + \sum_{m(\neq n)} \frac{|V'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad . \tag{7.6}$$

Παράδειγμα 2. Έγινε νομίζω κατανοητό σε προηγούμενα κεφάλαια πως η λύση τ εξίσωσης Schrödinger είναι ισοδύναμη με την διαγωνοποίηση της αντίστοιχ Χαμιλτονιανής μήτρας που γράφεται σε μια βάση. Με την ΘΔ θα βρούμε τις ιδιοτιμές ι ιδιοσυναρτήσεις της μήτρας

$$H = \begin{pmatrix} -0.03 & 5.01 \\ 5.01 & -0.05 \end{pmatrix} \quad .$$

Όμως το πρόβλημα αυτό λύνεται ακριβώς αφού γνωρίζουμε να διαγωνοποιούμε 2× μήτρες! Τι χρειάζονται, λοιπόν, οι προσεγγιστικές λύσεις της θεωρίας διαταραχών; Σε αυτ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ην περίπτωση τίποτα. Απλώς θα ελέγξουμε την ακρίβεια της ΘΔ σε διαφορετικές τάξεις. Θα λύσουμε πρώτα το πρόβλημα ακριβώς και μετά θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της ΘΔ με την ακριβή λύση.

Ακριβής λύση: Η διαγωνοποίηση που γίνεται εύκολα (π. χ. με υπολογιστή τσέπης) δίνει τις ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις

$$E_1 = -5.05001, \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0.70640 \\ -0.70781 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = 4.97001, \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0.70781 \\ 0.70640 \end{pmatrix} .$$

ΘΔ: Για την εφαρμογή της ΘΔ διευκολύνει να γράψουμε την H ως εξής

$$H = H_0 + V' \ ,$$

που

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 5 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}$$

αι

$$V' = \begin{pmatrix} -0.03 & 0.01 \\ 0.01 & -0.05 \end{pmatrix} .$$

τιλέξαμε αυτόν τον μάλλον προφανή τρόπο αφενός η H_0 που διαγωνοποιείται εύκολα να ει το κύριο βάρος και αφετέρου η V' να είναι μικρή ώστε ακόμη και η πρώτης τάξης ΘΔ δώσει καλά αποτελέσματα βελτιώνοντας την γνωστή λύση μηδενικής τάξης του διατάρακτου' προβλήματος.

μηδενικής τάξης ΘΔ: Οι ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις της H_0 είναι

$$E_1^{(0)} = -5, \qquad |1^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.7071067 \\ -0.7071067 \end{pmatrix}$$

$$E_1^{(0)} = +5, \qquad |2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.7071067 \\ 0.7071067 \end{pmatrix}$$

ίμη και αυτά τα αποτελέσματα στην *μηδενική τάξη* της ΘΔ για τις ιδιοτιμές ενέργειας και ιδιοσυναρτήσεις βλέπουμε πως προσεγγίζουν αρκετά καλά την ακριβή λύση. Αυτό

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συμβαίνει λόγω της πολύ μικρής διαταραχής V'. Η πρώτη τάξη της ΘΔ αναμένεται να βελτιώσει περαιτέρω τα αποτελέσματα.

Πρώτης τάξης ΘΔ: Θα χρειασθούμε στοιχεία μήτρας της V' σχηματίζοντας τα γινόμενα, π.χ.

$$\left\langle 1^{(0)}\middle|V'\middle|1^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)\begin{pmatrix}-0.03 & 0.01\\ 0.01 & -0.05\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix} = -0.05.$$

Άρα, οι ιδιοτιμές αλλάζουν και η E_1 *γίνεται*

$$E_1 = E_1^{(0)} + \left\langle 1^{(0)}\middle|V'\middle|1^{(0)}\right\rangle$$

$$= -5 - 0.05 = -5.05$$

που συγκρίνεται ευνοϊκά με το ακριβές αποτέλεσμα $E_1 = -5.05001$. Για την στάθμη E_2 αντίστοιχα

$$E_2 = E_2^{(0)} + \left\langle 2^{(0)}\middle|V'\middle|2^{(0)}\right\rangle$$

$$= 5 - 0.03 = 4.97$$

που συγκρίνεται επίσης πολύ ευνοϊκά με το ακριβές αποτέλεσμα $E_2 = 4.97001$. Τ ιδιοδιανύσματα στην πρώτη τάξη γίνονται

$$|1\rangle = \left|1^{(0)}\right\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{V'_{m1}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}}\left|m^{(0)}\right\rangle$$

$$= \left|1^{(0)}\right\rangle + \frac{V'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}\left|2^{(0)}\right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix} - \frac{10^{-3}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0.70640\\ -0.70781\end{pmatrix}$$

και

$$|2\rangle = \left|2^{(0)}\right\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{V'_{m2}}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}}\left|m^{(0)}\right\rangle$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \left|2^{(0)}\right\rangle + \frac{V'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}\left|1^{(0)}\right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \frac{10^{-3}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0.70781\\0.70640\end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα πρώτης τάξης για τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα, σε αυτήν την ακρίβεια, δεν διαφέρουν καθόλου από τα ακριβή αποτελέσματα! Αυτό προφανώς οφείλεται στην πολύ μικρή διαταραχή.

Άσκηση 1. Σωμάτιο μάζας m στο δυναμικό $V_0(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω διαταράσσεται από ομογενές ηλεκτρικό πεδίο $\mathcal{E}$ ώστε $V'(x) = e\mathcal{E}x$. Να θεωρήσετε το V' ως διαταραχή και να δείξετε ότι η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης του αρμονικού ταλαντωτή $\hbar\omega/2$ δεν αλλάζει στην πρώτη τάξη της ΘΔ. Συμβαίνει το ίδιο και για τις άλλες στάθμες; Τι συμβαίνει στην 2η τάξη ΘΔ; Σε αυτό το πρόβλημα να δώσετε και την ακριβή λύση.

Δίνονται: $\langle n|x|m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n+1}{2}}$ όταν $m = n+1$, $\langle n|x|m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n}{2}}$ όταν $m = n-1$ και $\langle n|x|m\rangle = 0$ στις άλλες περιπτώσεις, ενώ $E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Συνοπτική λύση: Ο τύπος στην ΘΔ μέχρι *δεύτερης τάξη* είναι για τις ιδιοτιμές

$$E_n = E_n^{(0)} + \left\langle n^{(0)}\middle|V'\middle|n^{(0)}\right\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V'\middle|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \cdots$$

ιε τα στοιχεία μήτρας στις 'αδιατάρακτες' καταστάσεις $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \cdots$ (θα παραλείπεται ο υπέρθεμα που χαρακτηρίζει τις 'αδιατάρακτες' καταστάσεις) είναι

$$\langle n|x|n\rangle = 0, \qquad \langle n+1|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n+1}{2}}, \qquad \langle n-1|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n}{2}}$$

στε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) + 0 + e^2\mathcal{E}^2 \frac{\hbar}{m\omega}\left[\frac{\frac{n+1}{2}}{-\hbar\omega} + \frac{\frac{n}{2}}{\hbar\omega}\right] + \cdots$$

$$= \hbar\omega(n+1/2) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} + \cdots, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Το πρόβλημα αυτό όμως επιδέχεται *πλήρη λύση* αν το δυναμικό γραφεί

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + e\mathcal{E}x$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + 2\frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}x + \frac{e^2\mathcal{E}^2}{(m\omega^2)^2}\right) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left(x + \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad .$$

Στο φυσικό σύστημα που εξετάζουμε συμβαίνει μια απλή χωρική μετατόπιση που δεν μεταβάλλει βεβαίως τις ενεργειακές στάθμες αλλά τις μετατοπίζει παρουσία του ηλεκτρικού πεδίου $\mathcal{E}$ κατά την ενέργεια Stark $\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$, που είναι ίδια για $\forall n$. Επομέμως, η ακριβής λύση είναι(σε όλες τις τάξεις της ΘΔ)

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Παρατηρούμε πως όροι υψηλότερης τάξης από δύο μηδενίζονται και *η ΘΔ μέχρι την δεύτερη τάξη μας έδωσε το ακριβές αποτέλεσμα*!

Άσκηση 2. Αν σε ένα μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή στο γνωστό δυναμικό $V_0(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ προστεθούν οι *μη αρμονικοί όροι* $V'(x) = ax^3 + bx^4$ να βρείτε πως θα αλλάξει η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης όταν το $V'(x)$ θεωρηθεί ως διαταραχή.

Συνοπτική λύση: Η ενέργεια $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+1/2)$ της στάθμης $|n\rangle, n = 0, 1, 2, \cdots$ στην πρώτης τάξη της ΘΔ θα αλλάξει στην

$$E_n = E_n^{(0)} + a\langle n|x^3|n\rangle + b\langle n|x^4|n\rangle + \cdots.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η δύναμη x^3 θα δώσει μηδέν λόγω της περιττής συνάρτησης που ολοκληρώνεται με στοιχεία μήτρας, ενώ από το Κεφ.4.4

$$\langle n-2|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{n(n-1)}$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\langle n+2|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{(n+1)(n+2)}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

οστε

$$\begin{aligned}
\langle n|x^4|n\rangle &= \sum_k \langle n|x^2|k\rangle\langle k|x^2|n\rangle \\
&= \sum_k |\langle k|x^2|n\rangle|^2 \\
&= |\langle n|x^2|n-2\rangle|^2 + |\langle n|x^2|n\rangle|^2 + |\langle n|x^2|n+2\rangle|^2 \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left[(2n+1)^2 + (n-1)n + (n+1)(n+2)\right] \\
&= \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left(2n^2+2n+1\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots
\end{aligned}$$

ρα μόνο ο μη αρμονικός όρος bx^4 δίνει διόρθωση σε *πρώτη τάξη* όπου η ενέργεια γίνεται

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) + b\frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left(2n^2+2n+1\right) + \cdots, n = 0, 1, 2, 3, \cdots.$$

όρος ax^3 δίνει διόρθωση *δεύτερης τάξης* στην ΘΔ με αντίστοιχο όρο

$$\frac{a^2}{\hbar\omega}\sum_{n'}\frac{\langle n|x^3|n'\rangle\langle n'|x^3|n\rangle}{(n-n')}$$

ι από τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία

$$\langle n|x^3|n-1\rangle = \langle n|x^2|n\rangle\langle n|x|n-1\rangle + \langle n|x^2|n-2\rangle\langle n-2|x|n-1\rangle = 3\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}$$

$$\langle n|x^3|n-3\rangle = \langle n|x^2|n-2\rangle\langle n-2|x|n-3\rangle = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8}}$$

$$\langle n|x^3|n+1\rangle = \langle n+1|x^3|n\rangle = 3\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{\left(\frac{n+1}{2}\right)^3}$$

$$\langle n|x^3|n+3\rangle = \langle n+3|x^3|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8}}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

η διόρθωση δεύτερης τάξης γίνεται

$$-\frac{15}{4}\hbar^2\frac{a^2}{m^3\omega^4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right).$$

Ο bx^4 σε δεύτερη τάξη δίνει διόρθωση $\sim\hbar^3$. Παρατηρούμε πως οι μη αρμονικές διορθώσεις στην ενέργεια του ταλαντωτή αποτελούν ένα *ανάπτυγμα σε δυνάμεις της σταθεράς του Planck* $\hbar$.

Άσκηση 3. Να λύσετε πρώτα ακριβώς και μετά με θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης την επίδραση του δυναμικού $V'=\begin{pmatrix}\varepsilon & \varepsilon\\ \varepsilon & \varepsilon\end{pmatrix}$ στην $H_0=\begin{pmatrix}\alpha & 0\\ 0 & \beta\end{pmatrix}$. Η H_0 είναι ήδη διαγώνια με ιδιοτιμές α,β και θέλουμε να δούμε πως αλλάζει τις ιδιοτιμές η διαταραχή V'.

Συνοπτική λύση: Στην μηδενική τάξη στο σύστημα δύο καταστάσεων είναι

$$E_1^{(0)}=\alpha,\quad \left|1^{(0)}\right\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$E_2^{(0)}=\beta,\quad \left|2^{(0)}\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

και στην ΘΔ αναμένονται να αλλάξουν, π. χ. η ενέργεια της στάθμης $|1\rangle$ στην

$$\begin{aligned}E_1&=E_1^{(0)}+\left\langle 1^{(0)}\middle|V'\middle|1^{(0)}\right\rangle+\frac{\left|\left\langle 2^{(0)}\middle|V'\middle|1^{(0)}\right\rangle\right|^2}{\alpha-\beta}+\cdots\\&=\alpha+(1\quad 0)\begin{pmatrix}\varepsilon & \varepsilon\\ \varepsilon & \varepsilon\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{\varepsilon^2}{\alpha-\beta}+\cdots\\&=\alpha+\varepsilon+\frac{\varepsilon^2}{\alpha-\beta}+\cdots\end{aligned}$$

και της στάθμης $|2\rangle$ στην

$$E_2=\beta+\varepsilon-\frac{\varepsilon^2}{\alpha-\beta}+\cdots$$

Μετά από διαγωνοποίηση *η πλήρης λύση* (ισοδύναμη με ΘΔ σε όλες τις τάξεις) είναι

$$E_{1,2}=\frac{\alpha+\beta}{2}+\varepsilon\pm\sqrt{\frac{(\alpha-\beta)^2}{4}+\varepsilon^2}\ .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 4. Η Χαμιλτονιανή ενός συστήματος δύο καταστάσεων είναι $H = \begin{pmatrix} \alpha + \beta\varepsilon & \gamma\varepsilon \\ \gamma\varepsilon & \delta \end{pmatrix}$ όπου $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon \in \Re$. Να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές με θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης ως προς ε (i) όταν $\alpha \neq \delta$ και (ii) $\alpha = \delta$. Να βρείτε και τα ακριβή αποτελέσματα και με ανάπτυγμα σε δυνάμεις του ε να παρατηρήσετε πως ο όρος πρώτης τάξης συμπίπτει με αυτόν της θεωρίας διαταραχών.

Συνοπτική λύση: Η ΘΔ όταν $\alpha \neq \delta$:

$$E_1 = E_1^{(0)} + V'_{11} + \frac{|V'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \cdots$$

$$= \alpha + (1 \quad 0)\varepsilon\begin{pmatrix} \beta & \gamma \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon^2\left|(0 \quad 1)\begin{pmatrix} \beta & \gamma \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2}{\alpha - \delta} + \cdots$$

$$\Leftrightarrow E_1 = \alpha + \beta\varepsilon + \frac{\gamma^2}{\alpha - \delta}\varepsilon^2 + \cdots$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + V'_{22} + \frac{|V'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \cdots$$

$$\Leftrightarrow \quad E_2 = \delta - \frac{\gamma^2}{\alpha - \delta}\varepsilon^2 + \cdots \ .$$

Η πλήρης λύση μετά από διαγωνοποίηση (ακριβής σε όλες τις τάξεις) είναι

$$E_{1,2} = \frac{\alpha + \delta}{2} + \frac{\beta}{2}\varepsilon \pm \frac{(\alpha - \delta)}{2}\sqrt{1 + 2\frac{\beta}{\alpha - \delta}\varepsilon + \frac{\beta^2 + 4\gamma^2}{(\alpha - \delta)^2}\varepsilon^2}$$

και με το ανάπτυγμα $\sqrt{1 + x} = 1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{8} + \cdots$ προκύπτουν οι παραπάνω διορθώσεις της ΘΔ.

Η εκφυλισμένη ΘΔ (Κεφ. 7.3.2) με $\alpha = \delta$ μετά από διαγωνοποίηση της 2×2 πίνακας δίνει το αποτέλεσμα

$$E_{1,2} = \alpha + \left(\frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\frac{\beta^2 + 4\gamma^2}{4}}\right)\varepsilon$$

σε όλες τις τάξεις της ΘΔ.

3.2. Εκφυλισμένη

Η ΘΔ που είδαμε δεν ισχύει όταν οι ιδιοτιμές της αδιατάρακτης Χαμιλτονιανής H_0 ήταν εκφυλισμένες (στους τύπους που έχουμε βρει οι παρονομαστές μπορεί να γίνουν μηδέν

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κλπ). Όταν r ιδιοτιμές της H_0 είναι ίδιες (π.χ. ίσες με E_0) που σημαίνει την ύπαρξη εκφυλισμού, ο ευκολότερος τρόπος να προχωρήσουμε είναι να διαγωνοποιήσουμε την $r \times r$ μήτρα αγνοώντας την ανάμιξη των r ιδιοσυναρτήσεων με άλλες ιδιοσυναρτήσεις της H_0. Επομένως, στον χώρο των r εκφυλισμένων ιδιοσυναρτήσεων αρκεί να διαγωνοποιηθεί η

$$H_0 + V$$

όπως θα δούμε στο επόμενο βασικό παράδειγμα της Άσκησης 5.

Άσκηση 5. Στο πρόβλημα δύο ελευθέρων σωματίων (αγνοούμε στο σπιν) η Χαμιλτονιανή

$$H_0 = H_1 + H_2$$

έχει ιδιοτιμές $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$ στην οποία αντιστοιχούν οι διπλά εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις $\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$, $\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)$ (*εκφυλισμός ανταλλαγής*).

Ας θεωρήσουμε τώρα και *την αλληλεπίδραση των δύο σωματίων* με δυναμικό της μορφής $V(|x_1 - x_2|)$. Θα εργασθούμε στον υποχώρο 2×2 των διπλά εκφυλισμένων καταστάσεων

$$|\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2)\rangle, \quad |\psi_\alpha(2)\,\psi_\beta(1)\rangle$$

όπου η 'αδιατάρακτη' Χαμιλτονιανή γράφεται

$$H_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta & 0 \\ 0 & \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta \end{pmatrix}$$

και η αλληλεπίδραση

$$V = \begin{pmatrix} J & K \\ K & J \end{pmatrix}$$

θεωρείται ως διαταραχή, με

$$J = \iint dx_1 dx_2\, \psi_\alpha^*(x_1)\psi_\beta^*(x_2)\, V(|x_1 - x_2|)\, \psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) \qquad \longleftarrow \textbf{Coulomb}$$

το ολοκλήρωμα αλληλεπίδρασης των πυκνοτήτων $\psi_\alpha^*(x_1)\psi_\alpha(x_1)$ και $\psi_\beta^*(x_2)\psi_\beta(x_2)$, όπου το 1 είναι στην κατάσταση α και το 2 στην β (τύπου Coulomb), και

$$K = \iint dx_1 dx_2\, \psi_\alpha^*(x_1)\psi_\beta^*(x_2)\, V(|x_1 - x_2|)\, \psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1) \qquad \longleftarrow \textbf{Ανταλλαγής}$$

το ολοκλήρωμα αλληλεπίδρασης των $\psi_\alpha^*(x_1)\psi_\alpha(x_2)$ και $\psi_\beta^*(x_2)\psi_\beta(x_1)$ όπου τα σωμάτια 1 και 2 είναι στην μικτή κατάσταση που περιλαμβάνει τις καταστάσεις α και β (τύπου ανταλλαγής).

Η H_0 είναι ήδη διαγώνια, η V διαγωνοποιείται εύκολα (do it!) και μετά την διαγωνοποιήση οι ιδιοτιμές της $H = H_0 + V$ είναι

$$E_\pm = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta + J \pm K.$$

Οι αδιατάρακτες κυματοσυναρτήσεις $\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2)$, $\psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1)$ που πριν είχαν την ίδια ιδιοτιμή $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$ τώρα αλλάζουν ενέργεια κατά τον όρο $J \pm K$ ενώ οι ιδιοσυναρτήσεις γίνονται οι γνωστές

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) \pm \psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1)\right)$$

όπου ψ_+ είναι η συμμετρική ψ_s και ψ_- η αντισυμμετρική ψ_A. Αυτό το αποτέλεσμα είναι σε συμφωνία με την θεωρία ταυτοτικών (μη διακρίσιμων) σωματίων.

Αν στο ίδιο πρόβλημα *λάβουμε υπ' όψιν και το σπιν* των σωματίων (π.χ δύο e με $s_1 = s_2 = 1/2$) οι $\psi_\pm$ θα πρέπει να πολλαπλασιασθούν με τις ιδιοσυναρτήσεις του σπιν. Όμως είναι γνωστό από το Κεφ. 7.1 δύο σωμάτια σπιν-1/2 έχουν μια *συμμετρική* $\chi_{\tau\rho\iota\pi\lambda\acute{\eta}}$ και μια *αντισυμμετρική* $\chi_{\alpha\pi\lambda\acute{\eta}}$ κυματοσυνάρτηση με σπιν 1 και 0, αντίστοιχα. Για να διατηρηθεί ο αντισυμμετρικός χαρακτήρας της ολικής κυματοσυνάρτησης χώρου και σπιν όπως είδαμε πρέπει να θεωρήσουμε τους συνδυασμούς

$$\psi_+\, \chi_{\alpha\pi\lambda\acute{\eta}}, \quad \psi_-\, \chi_{\tau\rho\iota\pi\lambda\acute{\eta}}$$

η ψ_+ είναι συμμετρική και η ψ_- αντισυμμετρική) με *αντισυμμετρικά γινόμενα* αφού τα e είναι φερμιόνια. Να γραφούν αυτές οι ολικές κυματοσυναρτήσεις.

7.3.3. Χρονικά εξαρτημένη

Η εξίσωση Schrödinger στο *χρονικά εξαρτημένο δυναμικό* $V(\vec{r},t)$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r},t), \quad H = H_0 + V(\vec{r},t), \tag{7.62}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου $H_0 \neq H_0(t)$ με $H_0 \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$, επιδέχεται την *γενική λύση*

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(\vec{r}) \tag{7.63}$$

με $|c_n(t)|^2$ τις *χρονικά εξαρτημένες* πιθανότητες να βρεθεί το σύστημα στις στάσιμες καταστάσεις ψ_n ενέργειας E_n.

➢ Όταν $V(\vec{r},t) = 0$ η (7.62) έχει γενική λύση

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(0)\, e^{-iE_n t/\hbar}\, \psi_n(\vec{r}) \tag{7.64}$$

με *χρονικά ανεξάρτητες* πιθανότητες $|c_n(0)|^2$ εύρεσης του συστήματος στις καταστάσεις ψ_n ενέργειας E_n (Κεφ.4: Άσκηση 3).

Από την (7.62) τα χρονικά εξαρτημένα πλάτη $c_n(t)$ υπακούουν στην εξίσωση

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m V_{nm}\, c_m(t)\, e^{-i\omega_{mn} t/\hbar}, \quad V_{nm} = \langle n|V|m\rangle, \ \hbar\omega_{mn} = E_m - E_n \tag{7.65}$$

που αν αντί των $c_n(t)$ χρησιμοποιήσουμε τα $a_n(t) = c_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}$ γράφεται

$$i\hbar \frac{da_n(t)}{dt} = E_n a_n(t) + \sum_m V_{nm}\, a_m(t), \quad V_{nm} = \langle n|V|m\rangle \tag{7.66}$$

με γενική λύση

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n a_n(t)\, \psi_n(\vec{r}) \quad . \tag{7.67}$$

Παρατηρούμε πως το χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(\vec{r},t)$ εισάγει ενός είδους σύζευξη μεταξύ των αρχικών στάσιμων καταστάσεων $\psi_n(\vec{r})$ με τις χρονικά εξαρτημένες πυκνότητες πιθανότητας $|a_n(t)|^2 = |c_n(t)|^2$ να ταλαντώνονται στις στάσιμες καταστάσεις.

Θα επιλύσουμε την εξίσωση (7.62) *με θεωρία διαταραχών* υποθέτοντας ότι *το χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(\vec{r},t)$ είναι 'μικρό'* για να θεωρηθεί ως διαταραχή. Έστω ότι το 'αδιατάρακτο' πρόβλημα αφορά ένα σωμάτιο στην κατάσταση ψ, με τις *αρχικές συνθήκες* (για t=0):

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$c_\ell(0) = 1,\ c_{n\neq\ell}(0) = 0 \quad . \tag{7.68}$$

Χωρίς την παρουσία του χρονικά εξαρτημένου δυναμικού το σύστημα θα παρέμενε στην αρχική κατάσταση $|\ell\rangle$ για πάντα.

Η θεωρία διαταραχών προβλέπει:

0ης τάξης ΘΔ: $c_\ell(t) = 1,\ c_{n\neq\ell}(t) = 0$ (παραμένει στην $|\ell\rangle$ για $\forall t$) (7.69)

1ης τάξης ΘΔ: Αν αντικατασταθούν οι λύσεις μηδενικής τάξης στο δεξί μέλος της (7.65) έχουμε

$$n = \ell: \qquad i\hbar\frac{dc_\ell(t)}{dt} = V_{\ell\ell}\, c_\ell(t) \quad \Leftrightarrow \quad c_\ell(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, V_{\ell\ell}(t') \tag{7.70}$$

$$n \neq \ell: \qquad i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = V_{n\ell}\, c_\ell(t)\, e^{-i\omega_{\ell n}t} \quad \Leftrightarrow \quad c_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, V_{n\ell}(t')\, e^{-i\omega_{\ell n}t'} \tag{7.71}$$

με πεπερασμένες πιθανότητες $|c_{n\neq\ell}(t)|^2$ για μεταβάσεις $\ell \to n$.

Η (7.65) είναι $i\hbar\dfrac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m V_{nm}(t)\, e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} c_m(t)$ και για $t = 0$ το σύστημα είναι στην κατάσταση $|1\rangle$ με $c_1(0) = 1$, $c_n(0) = 0$, $\forall\, n \neq 1$ ενώ $V_{nm}(t) = 0$ για $t < 0$. Στο δεξί μέλος αντικαθιστούμε το ίδιο με την αρχική συνθήκη αποτέλεσμα 0κής τάξης $c_1(t) = 1$ ώστε όταν τα στοιχεία μήτρας V_{nm} είναι μικρά σε πρώτη τάξη ως προς V

$$i\hbar\frac{dc_1(t)}{dt} = V_{11}(t) \tag{7.72}$$

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = V_{n1}(t)\, e^{-i(E_1 - E_n)t/\hbar}\ , \quad \forall n \neq 1. \tag{7.73}$$

Άσκηση 6. Στο σταθερό (χρονικά ανεξάρτητο) δυναμικό διαταραχής

$$V(\vec{r},t) = V(\vec{r}), \quad t \geq 0$$
$$V(\vec{r},t) = 0, \quad t < 0$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που εισάγεται την χρονική στιγμή t=0 με τις αρχικές συνθήκες $c_1(0)=1,\ c_n(0)=0$, $\forall\, n\neq 1$, ενώ $V_{nm}(t)=0$ για $t<0$ *και διακόπτεται αργότερα την χρονική στιγμή* t να δείξετε ότι σε τάξη V

$$c_1(t)=1-\frac{i}{\hbar}V_{11}t$$
$$c_2(t)=\frac{V_{21}}{E_1-E_2}\left[e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}-1\right],$$

με $V_{nm}=\langle n|V|m\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d^3\vec{r}\ \psi_n^*(\vec{r})V(\vec{r})\psi_m(\vec{r})$ όπου $\psi_n(\vec{r})$ είναι οι *στάσιμες λύσεις* για $t=0$. Να δειχθεί ότι η πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην E_2 την χρονική στιγμή t είναι $|c_2(t)|^2=\dfrac{|V_{21}|^2}{\hbar^2}\dfrac{\sin^2\left[\dfrac{(E_1-E_2)t}{2\hbar}\right]}{\left[\dfrac{E_1-E_2}{2\hbar}\right]^2}$.

Λύση:

Με την αντικατάσταση του αποτελέσματος 0κης τάξης (7.69) στο δεξί μέλος

$$i\hbar\frac{dc_1(t)}{dt}=V_{11}c_1(t)\Rightarrow c_1(t)=-\frac{i}{\hbar}V_{11}t+c_1(0)=1-\frac{i}{\hbar}V_{11}t$$

$$i\hbar\frac{dc_2(t)}{dt}=V_{21}\,c_1(t)\,e^{-i\omega_{12}t}\Rightarrow c_2(t)=\frac{V_{21}}{i\hbar}\int_0^t dt'\,e^{-i\omega_{12}t'}=\frac{V_{21}}{i\hbar}\left(-\frac{1}{i\omega_{12}}\right)e^{-i\omega_{12}t}\Big|_0^t=$$

$$\Rightarrow c_2(t)=\frac{V_{21}}{E_1-E_2}\left[e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}-1\right].$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση 2 την χρονική στιγμή t

$$|c_2(t)|^2=\frac{|V_{21}|^2}{(E_1-E_2)^2}\left|e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}-1\right|^2$$

υπολογίζεται με

$$\begin{aligned}\left|e^{-i\omega_{12}t/\hbar}-1\right|^2&=(\cos\omega_{12}t-1)^2+\sin^2\omega_{12}t\\&=2(1-\cos\omega_{12}t)\\&=2\left(1-\left(1-2\sin^2\frac{\omega_{12}t}{2}\right)\right)\\&=4\sin^2\frac{\omega_{12}t}{2}.\end{aligned}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άρα,

$$|c_2(t)|^2 = \frac{|V_{21}|^2}{\omega_{12}^2} 4\sin^2\left[\frac{\omega_{12}t}{2}\right]$$

$$= \frac{|V_{21}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left[\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar}\right]}{\left[\frac{E_1 - E_2}{2\hbar}\right]^2}.$$

Άσκηση 7. Στο ταλαντωτικής υφής χρονικά εξαρτημένο δυναμικό διαταραχής του τύπου $V(\vec{r},t)=V(\vec{r})\, e^{\pm i\omega t}$ κυκλικής συχνότητας ω, που εισάγεται για $t = 0$ πάλι με τις αρχικές συνθήκες $c_1(0) = 1$, $c_{n\neq 1}(0) = 0$, να δείξετε ότι η πιθανότητα $|c_2(t)|^2$ μετάβασης στην $|2\rangle$ προκύπτει από την

$$c_2(t) = \frac{V_{21}}{E_1 - E_2 \mp \hbar\omega}\left[e^{-i(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega)t/\hbar} - 1\right],$$

και είναι μέγιστη όταν $E_2 = E_1 \mp \hbar\omega$. Να ερμηνεύσετε τις συνθήκες $E_2 = E_1 \pm \hbar\omega$ σε σχέση με την εκπομπή και απορρόφηση κβάντου ενέργειας $\hbar\omega$.

Λύση:

Από την εξίσωση

$$i\hbar\frac{dc_2(t)}{dt} = V_{21}\, e^{-i(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega)t/\hbar}$$

$$\Rightarrow c_2(t) = \frac{V_{21}}{E_1 - E_2 \mp \hbar\omega}\left[e^{-i(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega)t/\hbar} - 1\right]$$

$$\Rightarrow |c_2(t)|^2 = \frac{|V_{21}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega)t/2\hbar]}{[(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega)/2\hbar]^2}$$

που μεγιστοποιείται όταν $E_2 = E_1 \mp \hbar\omega$.

Η πιθανότητα μιας μετάβασης $\ell \to n$ λόγω του χρονικά εξαρτημένου δυναμικού $V(\vec{r},t)=V(\vec{r})\, e^{\pm i\omega t}$ είναι

$$|c_n(t)|^2 = \frac{|V_{n\ell}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(E_\ell - E_n \mp \hbar\omega)t/2\hbar]}{[(E_\ell - E_n \mp \hbar\omega)/2\hbar]^2}.$$

Από την αναπαράσταση της συνάρτησης δέλτα του Κεφ. 3.3. στο όριο $1/t \to 0$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

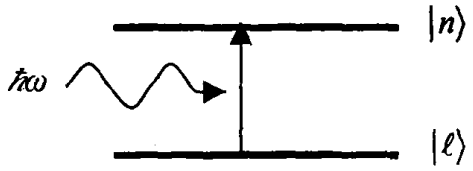
$$\frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2} = \pi t\, \delta(\alpha) \quad \text{και} \quad \delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x)$$

$$\Leftrightarrow |c_n(t)|^2 = \frac{2\pi t}{\hbar}|V_{n\ell}|^2\, \delta(E_\ell - E_n \pm \hbar\omega)$$

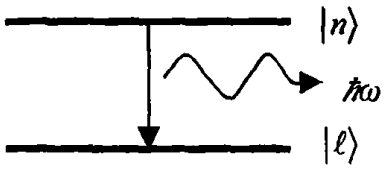
ο *ρυθμός μετάβασης* $R(\ell \to n)$ δίνεται από τον γνωστό ως *χρυσό κανόνα*

$$R(\ell \to n) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{n\ell}|^2\, \delta(E_\ell - E_n \pm \hbar\omega).$$

Απορρόφηση: το σύστημα στη κατάσταση E_ℓ λαμβάνει από το V ποσότητα ενέργειας $\hbar\omega$ και καταλήγει στην διεγερμένη κατάσταση $E_n = E_\ell + \hbar\omega$:



Εξαναγκασμένη εκπομπή: το σύστημα είναι στην διεγερμένη κατάσταση E_n δίνει στο V ποσότητα ενέργειας $\hbar\omega$ και καταλήγει στην βασική στάθμη E_ℓ:



Σχόλια:

- Το πρόβλημα του *μαγνητικού συντονισμού NMR* αφορά σπιν σε σταθερό πεδίο $\vec{B}_0 = B_0\, \vec{e}_z$ υπό την επίδραση *χρονικά μεταβαλλόμενου μαγνητικού πεδίου* $\vec{B}_1(t) = B_1(\cos\omega t\ \vec{e}_x + \sin\omega t\ \vec{e}_y)$. Η Χαμιλτονιανή H είναι

$$H = H_0 + H_1,\ H_0 = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix},\ H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon e^{-i\omega t} \\ \varepsilon e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix},$$

με ιδιοτιμές

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega_0}{2}\ \mu\varepsilon\ \ \omega_0 = \frac{eB_0}{mc},\ \text{και}\ \ \varepsilon = \frac{\hbar\omega_1}{2}\ \mu\varepsilon\ \ \omega_1 = \frac{eB_1}{mc}.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Από την διαγωνοποίηση της H

$$i\hbar\frac{d\chi}{dt} = H\chi \Rightarrow i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_+(t)\\ \dot{c}_-(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}E_+ & \varepsilon e^{-i\omega t}\\ \varepsilon e^{i\omega t} & E_-\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix},$$

με αρχικές συνθήκες έστω $c_+(0)=0$, $c_-(0)=1$ δηλαδή το σύστημα στην κατάσταση σπίνορ $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$, υπολογίζεται η πιθανότητα $P_+^{\max} = \dfrac{\omega_1^2}{(\omega-\omega_0)^2+\omega_1^2}$ που όταν $\omega=\omega_0$ γίνεται μονάδα και δίνει τον *συντονισμό NMR* .

- Είδαμε πως η πιθανότητα $|c_2(t)|^2$ ταλαντώνεται με τον χρόνο, συχνά όμως αντί της E_2 υπάρχουν *πολλές τελικές ενέργειες*, π.χ. E_j. Το χρονικά εξαρτημένο δυναμικό V που εισάγεται για $t=0$ και παύει για $t=T$ δίνει πιθανότητα μετάβασης σε αυτές $(i\to j)$ που εκτιμάται από *τον χρυσό κανόνα Fermi* $\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ij}|^2\rho(E_j)$, όπου $\rho(E_j)$ η πυκνότητα καταστάσεων στις E_j. (Feynmann: *Lecture Notes in Physics*, Τομ. III, ΚΕΦ 9.5,9.6).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ

'μόνο ένας κβαντικός υπολογιστής μπορεί να προσομοιώσει αποτελεσματικά τα κβαντικά συστήματα'

R. Feynman

Ο εικοστός αιώνας χαρακτηρίζεται από την κβαντική θεωρία αλλά παράλληλα γίνεται φανερό πως στην λίστα των χρήσιμων φυσικών πηγών, όπως η δύναμη, η ενέργεια, τα υλικά, κλπ. μπορεί να προστεθεί και η έννοια της *πληροφορίας*. Την τελευταία πεντηκονταετία παρατηρούμε πολύπλοκη επεξεργασία πληροφορίας έξω από τον ανθρώπινο εγκέφαλο με την ραγδαία ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών και του διαδικτύου. Το βασικό ερώτημα που θα τεθεί σε αυτό το κεφάλαιο είναι αν *μπορεί η κβαντική να συνδυασθεί με την θεωρία της πληροφορίας*; με άλλα λόγια, θα εξετασθεί η έννοια της *κβαντικής πληροφορίας* και η δυνατότητα ύπαρξης *κβαντικών υπολογιστών*.

Το ερώτημα διατυπώθηκε για πρώτη φορά το 1982 από τον Feynman που διαπίστωσε πως ένα κβαντικό πρόβλημα μπορεί να προσομοιωθεί αποτελεσματικά *μόνο* από ένα άλλο κβαντικό σύστημα. Λίγο αργότερα, το 1985, ο Deutsch διατύπωσε τους κανόνες με τους οποίους θα λειτουργούσε μια υπολογιστική μηχανή που βασίζεται στην κβαντική. Το θέμα παρέμεινε μέχρι πρόσφατα στο επίπεδο μιας περιέργειας ακαδημαϊκού τύπου. Σήμερα όμως υπάρχει ένα διαρκώς αυξανόμενο ενδιαφέρον για την δημιουργία υπολογιστών που θα λειτουργούν αποκλειστικά με τους 'παράλογους' κανόνες της κβαντικής. Έχουν μάλιστα προταθεί ορισμένοι *κβαντικοί αλγόριθμοι* που θα μπορούσαν να τρέξουν αποδοτικά σε '*κβαντικές μηχανές*', που βεβαίως δεν είναι εφικτές προς το παρόν, με φοβερή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αποτελεσματικότητα σε σχέση με τους συνηθισμένους (κλασσικούς) υπολογιστές. Η βασική ιδέα είναι η εκμετάλλευση θεμελιωδών ιδιοτήτων της κβαντικής θεωρίας που ξεκινάει με την χρήση ως κβαντικής υπολογιστικής μηχανής του ίδιου του ατόμου ή ενός κβαντικού συστήματος δύο καταστάσεων.

Πρέπει να τονισθεί, *αφενός*, πως η πληροφορία δεν είναι ανεξάρτητη έννοια από το φυσικό σύστημα που την επεξεργάζεται. Με άλλα λόγια ο υπολογιστής είναι κι αυτός μέρος της φυσικής διαδικασίας ενός συστήματος που εξελίσσεται στον χρόνο. Οι συνηθισμένοι υπολογιστές μας έκαναν να πιστεύουμε πως αντιμετωπίζουν όλοι με παρόμοιο τρόπο τα προβλήματα, δηλαδή με την αποθήκευση και επεξεργασία των δεδομένων μέχρις ότου οδηγηθούμε στο αποτέλεσμα του υπολογισμού (*είσοδος-υπολογισμός-έξοδος*). Είναι όμως αναπόφευκτο *και οι υπολογιστικές μηχανές να υπόκεινται στους νόμους της φυσικής*, π.χ. είναι γνωστό (*αρχή του Landauer*) πως στην διαγραφή ενός bit πληροφορίας δίνουν θερμότητα $k_B \ln 2$, με k_B την σταθερά Boltzmann. Ο Landauer πρότεινε την δυνατότητα να γίνουν πράξεις με αντιστρεπτό τρόπο, χωρίς απόδοση θερμότητας, που βασίζονται στους μοναδιαίους μετασχηματισμούς της κβαντικής. Με αυτό τον τρόπο έθεσε τις βάσεις λειτουργίας των κβαντικών υπολογιστών.

Αφετέρου, η συνεχής μείωση με λιθογραφικές τεχνικές των διαστάσεων των τρανζίστορ[1] επιτρέπουν σήμερα να τοποθετήσουμε σε έναν επίπεδο (διδιάστατο) μικροεπεξεργαστή πυριτίου $\sim 10^8$ bits ανά cm^2 και να έχουμε δίσκους με μνήμη $\sim 10^{11}$ bits. Το ερώτημα που προκύπτει από αυτή την συνεχή σμίκρυνση, που βεβαίως οδηγεί και στην συνεχή μείωση του κόστους των υπολογιστών, είναι: *μέχρι πόσο μικρό μπορούμε να φτάσουμε*; Με άλλα λόγια, *μπορεί να αντικατασταθούν οι κβαντικές διατάξεις στους συμβατικούς υπολογιστές, όπως το τρανζίστορ, ακόμη κι από άτομα*; Αν η απάντηση είναι καταφατική αντί της συνεχούς σμίκρυνσης των συμβατικών υπολογιστών μπορούμε να αρχίσουμε ανάποδα, κατασκευάζοντας υπολογιστές από το ίδιο το άτομο *με την αναπόφευκτη παρουσία των κβαντικών κανόνων*, μετά με δύο άτομα, τρία άτομα, κλπ. Στην περίπτωση αυτή θα έχουμε πλέον έναν κβαντικό υπολογιστή με δυνατότητες που υπερέχουν κατά πολύ, ποιοτικά και ποσοτικά, από τους συμβατικούς υπολογιστές.

[1] Όπως είδαμε και οι συνηθισμένοι υπολογιστές βεβαίως βασίζονται σε κβαντικές διατάξεις πολλών ηλεκτρονίων όπως το τρανζίστορ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Όμως, πριν δούμε το *qubit=quantum+bit* που είναι η βασική μονάδα πληροφορίας στους κβαντικούς υπολογιστές *να υπενθυμίσουμε στον αναγνώστη την έννοια του bit στην κλασσική θεωρία πληροφορίας*. Το bit δεν είναι παρά ένα φυσικό σύστημα που μπορεί να τοποθετηθεί σε μία από δύο διαφορετικές καταστάσεις και να αναπαρασταθεί με μία από δύο λογικές τιμές, π.χ. με τους αριθμούς 0 ή 1:

κλασσικό bit = ναι ή όχι,

= αληθές ή ψευδές,

= μηδέν (0) ή ένα (1),

κλπ.

Μερικά παραδείγματα bits:

1) Το δυναμικό ανάμεσα στα επίπεδα ενός πυκνωτή που είναι *φορτισμένος ή αφόρτιστος*.
2) Οι δύο πολώσεις, *οριζόντια και κατακόρυφη*, του φωτός.
3) Οι δύο καταστάσεις, βασική και πρώτη διεγερμένη, ενός ατόμου.

Το bit είναι η βασική μονάδα του υπολογιστή[2] ενώ η *πληροφορία σε bit* δίνεται από το *μήκος* ενός αριθμού γραμμένου σε δυαδική γραφή: π.χ. ο αριθμός 23 στον συνηθισμένο δεκαδικό τρόπο γραφής περιέχει 5-bits πληροφορίας αφού αν γραφεί σε *δυαδική μορφή* αντιστοιχεί στον πενταψήφιο δυαδικό αριθμό 10111, με

$$1\times 2^4 + 0\times 2^3 + 1\times 2^2 + 1\times 2^1 + 1\times 2^0 = 23. \qquad (8.1)$$

Η πληροφορία σε bits δίνεται από το *μήκος* L ενός αριθμού N γραμμένου σε δυαδική μορφή (με 0 και 1) ή ισοδύναμα σε οποιονδήποτε τρόπο γραφής είναι ίση με $L = \log_2 N$, όπου ο λογάριθμος είναι στην βάση 2.

Οι υπολογιστές χρησιμοποιούν την απλούστερη δυνατή δυαδική γλώσσα, επεξεργάζονται μόνο 0 ή 1, για ευκολία ενώ είναι προφανές πως ο,τιδήποτε μπορεί να

[2] 1 byte=8 bits, 1 Kbyte= 2^{10}=1024 bytes, 1 Mbyte=1024^2 bytes, 1 Gbyte=1024^3 bytes.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μεταφρασθεί σε αυτήν την γλώσσα και να αποτελέσει πλέον θέμα ενός αποδοτικού υπολογισμού[3].

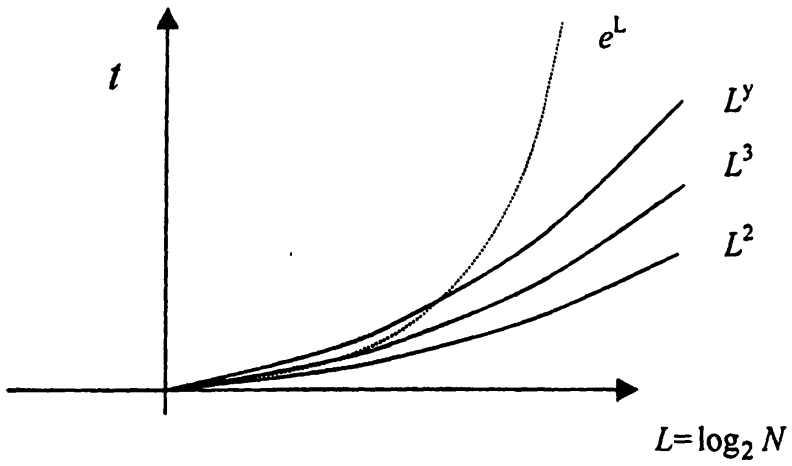
Η έννοια της *πολυπλοκότητας* αντιμετωπίζει το εξής βασικό ερώτημα: *Πόσο αποτελεσματικά μπορούμε να επιλύσουμε ένα πρόβλημα μεγέθους L bits το οποίο είναι επιλύσιμο;* Το ερώτημα ίσως να φαίνεται απλοϊκό από πρώτη άποψη. Αφού ένα πρόβλημα είναι επιλύσιμο γιατί να μην επιλύεται, αφού πλέον ανάγεται σε θέμα χωρητικότητας της *μνήμης* και υπολογιστικού *χρόνου* που μια ισχυρή υπολογιστική μηχανή αναμένεται να τα αντιμετωπίσει αποτελεσματικά. Λάθος! Το γεγονός ότι ένα πρόβλημα είναι επιλύσιμο δεν σημαίνει πως επιλύεται κιόλας και με αυτό εννοούμε επίλυση σε λογικό χρόνο υπολογισμού με λογικές απαιτήσεις μνήμης. Για να επιλύεται ένα πρόβλημα πρέπει ο αλγόριθμος επίλυσης να απαιτεί πολυωνυμικό χρόνο υπολογισμού σε σχέση με το μέγεθος L του προβλήματος, π.χ. χρόνο τάξης L^y με το y μια δύναμη, οπότε χαρακτηρίζεται ως P πρόβλημα και αντιμετωπίζεται αποδοτικά από τις συμβατικές υπολογιστικές μηχανές. Δυστυχώς όμως πολύ λίγα από τα προβλήματα που μας ενδιαφέρουν λύνονται σε πολυωνυμικό χρόνο. Όπως είναι γνωστό στους φυσικούς που προσπάθησαν να λύσουν αριθμητικά ένα κβαντικό πρόβλημα στις περισσότερες περιπτώσεις ο χρόνος επίλυσης αυξάνει εκθετικά (ή και ακόμη πιο γρήγορα) με το μέγεθος L. Αυτού του είδους τα προβλήματα ανήκουν στην οικογένεια NP τύπου[4] όταν παρά τον μη πολυωνυμικό χρόνο επίλυσης η ορθότητα μιας λύσης που θα μας δοθεί μπορεί να ελεγχθεί αποδοτικά σε πολυωνυμικό χρόνο. Από την οικογένεια των NP τα πιο δύσκολα ανήκουν στην κατηγορία προβλημάτων που αναφέρονται ως NP-*πλήρη*. Αν ένα από αυτά επιλυθεί σε πολυωνυμικό χρόνο το ίδιο θα συμβεί και με τα υπόλοιπα. Έχει δεχθεί αυστηρά πως πολλά προβλήματα είναι NP-*πλήρη*. Αναμένεται, λοιπόν, να είναι είτε *όλα* επιλύσιμα σε πολυωνυμικό χρόνο (P=NP) είτε *κανένα* από αυτά ($P \neq NP$), με το δεύτερο πιο πιθανό[5]. Στο Σχ. 8.1. φαίνεται η διαφορά του χρόνου επίλυσης σε P και NP-πλήρη προβλήματα.

---

[3] Ο A. Turing το 1935 εισήγαγε την έννοια της *συμπαντικής μηχανής Turing* με την οποία έθεσε τα θεμέλια της μοντέρνας επιστήμης της πληροφορικής. Η *θέση των Church-Turing* είναι πως μια μηχανή Turing που υλοποιείται με μια κατάλληλη φυσική διάταξη μπορεί να υπολογίσει με πεπερασμένο τρόπο κάθε υπολογίσιμη συνάρτηση. Η δυνατότητα αναπαράστασης με 0 και 1 δίνει την δυνατότητα ερμηνείας της ανθρώπινης σκέψης ως πολύπλοκης υπολογιστικής διαδικασίας σε έναν ασυνήθιστο υπερυπολογιστή, τον εγκέφαλο. Όμως, δεν είναι όλα υπολογίσιμα, αλλά και όταν είναι οι υπολογισμοί δεν είναι 'εφικτοί' τις περισσότερες φορές.

[4] NP=Non-deterministic polynomial.

[5] Υπολογιστές με βάση το DNA έχουν επιτρέψει λύση NP-πλήρων προβλημάτων, όπου ο αριθμός των μορίων αυξάνει εκθετικά με το μέγεθος, σε πολυωνυμικό χρόνο.



Σχ.8.1. *Ο χρόνος επίλυσης σε σχέση με το μέγεθος L ενός προβλήματος. Τα προβλήματα με εκθετικές απαιτήσεις χρόνου τελικά θα υπερκεράσουν τις πολυωνυμικές απαιτήσεις χρόνου, οποιουδήποτε βαθμού.*

Να γίνουμε όμως πιό σαφείς παραθέτοντας δύο παραδείγματα προβλημάτων με *πολυωνυμικές* και *εκθετικές* απαιτήσεις χρόνου επίλυσης σε σχέση με το μέγεθός τους. Στο παράδειγμα *πολλαπλασιασμού* δύο αριθμών με υπολογιστική μηχανή τον ίδιο τον εγκέφαλό μας, π.χ. για το γινόμενο δύο ακεραίων

$$127 \times 229 = ? \ , \tag{8.2}$$

εύκολα, σε λιγότερο από ένα λεπτό, όλοι θα καταλήξουμε στο αποτέλεσμα 29083. Αυτό συμβαίνει γιατί ο πολλαπλασιασμός είναι ένα P πρόβλημα και έχουμε μάθει αποδοτικούς τρόπους (αλγόριθμους) να πολλαπλασιάζουμε αριθμούς. Όμως, μπορούμε να βρούμε τους πρώτους παράγοντες του 29083 σε μια διαδικασία *παραγοντοποίησης*; Το πρόβλημα

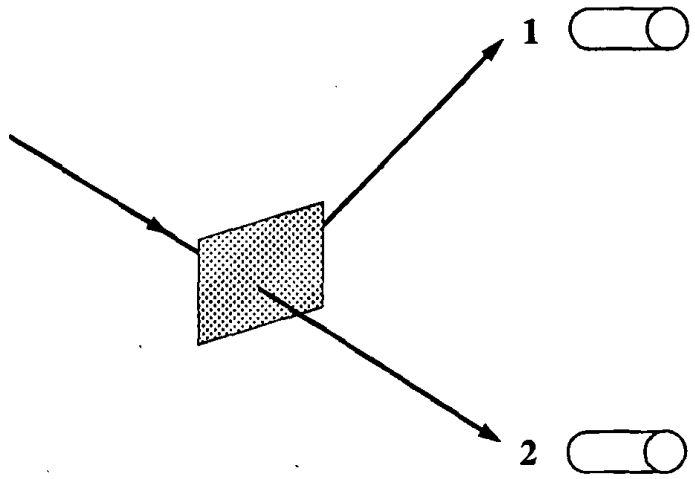
$$? \times ? = 29083 \tag{8.3}$$

είναι NP-*πλήρες* και θα απαιτήσει περίπου μία ώρα για να βρούμε 'με το χέρι' τους πρώτους παράγοντες 127 και 229 που δίνουν το γινόμενο (8.3). Δεν υπάρχουν αποδοτικοί αλγόριθμοι παραγοντοποίησης ενώ τα πράγματα γίνονται ιδιαίτερα δραματικά αν επιχειρήσουμε να παραγοντοποιήσουμε αριθμούς με πολλά ψηφία. Η παραγοντοποίηση του μεγαλύτερου αριθμού N με απαιτήσεις $L = \log_2 N$ bits που έχει παραγοντοποιηθεί έως σήμερα είναι ενός 129-ψήφιου αριθμού που το 1994 απαίτησε για να παραγοντοποιηθεί 8 μήνες περίπου με 1600 υπολογιστές σε όλον τον πλανήτη. Η παραγοντοποίηση ενός 1000-ψήφιου αριθμού είναι απλησίαστο όνειρο αφού απαιτεί χρόνο υπολογισμού $\sim 10^{25}$ χρόνια, πολύ μεγαλύτερο από την ηλικία

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

του σύμπαντος. Συνοψίζοντας, ο χρόνος υπολογισμού στον πολλαπλασιασμό αυξάνει με τον *πολυωνυμικό νόμο* $t \propto O(L^2)$ ενώ στην παραγοντοποίηση με τον *εκθετικό νόμο* $t \propto O\left(e^{(\log L)^{2/3} L^{1/3}}\right)$, όπου το O δηλώνει τάξη μεγέθους. Αυτό εννοούμε όταν λέμε πως ένα πρόβλημα με εκθετικό χρόνο επίλυσης είναι ακατόρθωτο ενώ ο όρος 'αποδοτικός υπολογισμός' είναι συνώνυμος με πολυωνυμικές απαιτήσεις του χρόνου επίλυσης. Θα δούμε πως οι κβαντικοί υπολογιστές, αν κατασκευασθούν, αναμένεται να αντιμετωπίσουν αποδοτικά τα εκθετικά προβλήματα.

8.1. Ένα εκπληκτικό πείραμα κβαντικής συμβολής



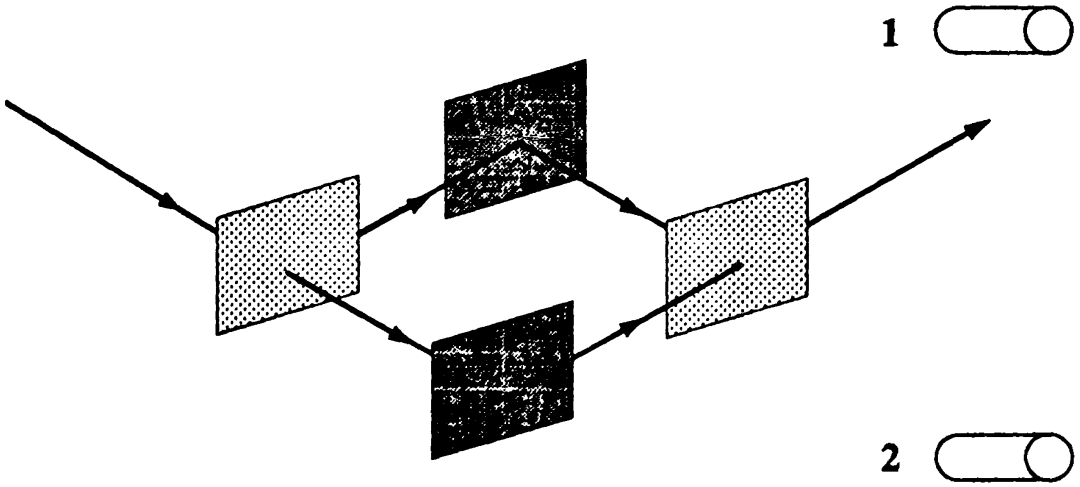
Σχ.8.2. *Ένα φωτόνιο που προσπίπτει σε ημιεπαργυρωμένο καθρέφτη ανιχνεύεται στους φωτοανιχνευτές* 1 *και* 2 *με πιθανότητες* 50% - 50%, *αντίστοιχα. Το φωτόνιο διανύει και τις δύο διαδρομές ταυτοχρόνως.*

Θα περιγράψουμε ένα πείραμα όπου *ένα μόνο φωτόνιο* προσπίπτει σε έναν *ημιεπαργυρωμένο* καθρέφτη όπως στο Σχ. 8.2. Αυτό το είδος καθρέφτη επιτρέπει ακριβώς στο μισό φώς να ανακλασθεί ενώ το άλλο μισό να διέλθει κατευθείαν απέναντι. Το ερώτημα είναι: *που θα βρεθεί ένα φωτόνιο που θα πέσει σε έναν τέτοιο καθρέφτη, στην ανακλώμενη ή στην διερχόμενη δέσμη;* Η λογική απάντηση είναι πως θα βρεθεί με την ίδια πιθανότητα στην ανακλώμενη ή στην διερχόμενη δέσμη, με άλλα λόγια το φωτόνιο θα ακολουθήσει την μία ή την άλλη διαδρομή με τυχαίο τρόπο. Αυτό φαίνεται πράγματι να συμβαίνει αφού αν τοποθετήσουμε δύο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

φωτοανιχνευτές 1 και 2 στις γραμμές της ανακλώμενης και διερχόμενης δέσμης σε επαναλαμβανόμενες καταγραφές φωτονίων διαπιστώνεται πως οι πιθανότητες στην μία ή την άλλη δέσμη είναι 50% - 50%, δηλαδή ίδια πιθανότητα εμφάνισης του φωτονίου στους φωτοανιχνευτές 1 και 2. Ταξιδεύει όμως, πράγματι, το φωτόνιο στην μία ή την άλλη δέσμη με πιθανότητα 50%; Η εκπληκτική απάντηση είναι *όχι* αφού **το φωτόνιο είναι και στις δύο διαδρομές ταυτοχρόνως**, σε προφανή αντίθεση με την κοινή (κλασσική) λογική.

Το πείραμα που περιγράψαμε παραπάνω δεν δείχνει ξεκάθαρα, χωρίς βέβαια καθόλου να αποκλείει, την δυνατότητα ταυτόχρονης εξερεύνησης και των δύο διαδρομών από το φωτόνιο. Αυτό όμως όπως θα δούμε αναντίρρητα συμβαίνει στην πολυπλοκότερη πειραματική κατασκευή που φαίνεται στο Σχ. 8.3. Εδώ, με την βοήθεια και δύο επιπλέον *πλήρως επαργυρωμένων* καθρεφτών που επιτρέπουν μόνο ανάκλαση, οι δύο δέσμες επανασυνδέονται και με την τοποθέτηση ενός ημιεπαργυρωμένου καθρέφτη στο σημείο συνάντησης δίνουν το εξής εκπληκτικό αποτέλεσμα: όταν οι δύο διαδρομές είναι ίσες σε μήκος η πιθανότητα γίνεται 100% το φωτόνιο να φθάσει στον φωτοανιχνευτή 1 και 0% στον φωτοανιχνευτή 2.



Σχ.8.3. *Ένα φωτόνιο που προσπίπτει σε ημιεπαργυρωμένο καθρέφτη, στην συνέχεια σε δύο πλήρως επαργυρωμένους καθρέφτες και πάλι σε μισο-επαργυρωμένο καθρέφτη δεξιά, ανιχνεύεται στους φωτοανιχνευτές 1 και 2 με πιθανότητες 100% και 0%, αντίστοιχα. Είναι τώρα φανερό πως το φωτόνιο διανύει και τις δύο διαδρομές ταυτοχρόνως αφού διακοπή της μιας ή της άλλης δίνει πιθανότητες 50% - 50% ενώ και με τις δύο διαδρομές δυνατές το πείραμα δείχνει πως το φωτόνιο φθάνει με βεβαιότητα μόνο στον ανιχνευτή 1*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αυτό το πειραματικό αποτέλεσμα είναι αδύνατον να ερμηνευθεί με την δυνατότητα το φωτόνιο να ακολουθήσει την μία ή την άλλη διαδρομή με μια πιθανότητα. Μπορούμε να το διαπιστώσουμε εύκολα αφού αν διακοπεί η άνω διαδρομή το αποτέλεσμα στους δύο ανιχνευτές γίνεται 50%-50% ενώ αν διακοπεί η κάτω διαδρομή προκύπτει πάλι το ίδιο αποτέλεσμα 50%-50%. Όμως, με τις δύο διαδρομές δυνατές το φωτόνιο φθάνει με βεβαιότητα (100%) στον ανιχνευτή 1 ενώ δεν φθάνει ποτέ (0%) στον ανιχνευτή 2. Άρα, το φωτόνιο φαίνεται πως βρίσκεται ταυτοχρόνως και στις δύο διαδρομές. Είναι σαν να γνωρίζει πως πρέπει να αποφύγει να φθάσει στον ανιχνευτή 2. Μπορούμε λοιπόν αβίαστα να συμπεράνουμε πως *ένα φωτόνιο διανύει ταυτοχρόνως και τις δύο διαδρομές* σε υπέρθεση ύπαρξης στην ανακλώμενη και στην διερχόμενη δέσμη!

8.2. Τα βασικά στοιχεία του κβαντικού υπολογιστή

8.2.1. Κβαντικό bit ή qubit

Η κβαντική τονίζει πως ένα άτομο μπορεί να υπάρξει στην υπέρθεση, π.χ. δύο ηλεκτρονικών καταστάσεων $|0\rangle, |1\rangle$, οπότε ονομάζεται *qubit*

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle\,, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\,, \tag{8.4}$$

με δυνατότητα κωδικοποίησης του 0 και 1. Επειδή το qubit μπορεί να αποθηκεύσει *ταυτοχρόνως* και το 0 και το 1 η ποσότητα κλασσικής πληροφορίας μιας κβαντικής κατάστασης υπέρθεσης στον διδιάστατο χώρο Hilbert είναι *άπειρη*! Έχουμε ήδη μάθει μέχρι τώρα πως αν γίνει *μια μέτρηση* θα δώσει οπωσδήποτε την $|0\rangle$ ή την $|1\rangle$ με πιθανότητες $|\alpha|^2$ και $|\beta|^2$, αντίστοιχα. Επομένως, με την μέτρηση η υπέρθεση καταστρέφεται και αποκαλύπτεται ένα 1 bit κλασσικής πληροφορίας. Η κβαντική πληροφορία που περιέχεται στην υπέρθεση (8.4) *δεν είναι πλήρως προσβάσιμη* αφού από το γνωστό ως *θεώρημα μη κλωνοποίησης αποκλείεται μέτρηση μιας κβαντικής κατάστασης υπέρθεσης* χωρίς να καταστραφεί η κβαντική πληροφορία που περιέχει λόγω κατάρρευσης στην μία ή την άλλη κατάσταση.

Το απλούστερο κβαντικό σύστημα που μπορεί να υπάρξει σε υπέρθεση δύο καταστάσεων είναι το σπιν-1/2 του ηλεκτρονίου στον *διδιάστατο* μιγαδικό χώρο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Hilbert C_2. Στο Κεφ. 6.6 είδαμε πως μια μέτρηση του σπιν σε οποιονδήποτε άξονα δίνει τις τιμές $\pm\hbar/2$. Επιπλέον, ένα σπιν μπορεί να *μετρηθεί* με μια συσκευή Stern-Gerlach σταθερού μαγνητικού πεδίου στον z-άξονα αλλά και να *αναποδογυρίσει* με την βοήθεια ενός μαγνητικού πεδίου κατάλληλης συχνότητας που ταλαντώνεται. Περισσότερα του ενός σπιν, π.χ. L ηλεκτρόνια σπιν-1/2, περιγράφονται στον μιγαδικό χώρο Hilbert 2^L *– διαστάσεων* $C_2 \otimes C_2 \otimes C_2 \otimes \cdots \otimes C_2$, με L φορές το τανυστικό γινόμενο.

8.2.2. Κβαντικοί καταγραφείς

Είναι προφανής, για σπιν-1/2 ηλεκτρόνια, η *εκθετική αύξηση του χώρου με τον αριθμό των qubits* αφού $L=1$ qubit σημαίνει δυνατότητα 2 καταστάσεων, $L=2$ qubits σημαίνει δυνατότητα $2^2=4$ καταστάσεων, ενώ π.χ. με L=250 qubits υπάρχει δυνατότητα υπέρθεσης $2^{250} \approx \left(2^{3.3}\right)^{250/3.3} \approx 10^{76}$ καταστάσεων στις οποίες μπορεί να αποθηκευθεί *ταυτοχρόνως* ένα πλήθος αριθμών μεγαλύτερο από όλα τα άτομα του σύμπαντος! Ο κβαντικός υπολογισμός βασίζεται σε καταγραφείς που αποθηκεύουν qubits:

- Για $L=1$ qubit ο καταγραφέας *μήκους* 1

$$
\begin{aligned}
&|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \in C_2 , \\
&|0\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
&|1\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},
\end{aligned}
\tag{8.5}
$$

δίνει δυνατότητα ταυτόχρονης καταγραφής των ακεραίων 0 και 1. .

- Για $L=2$ qubits οι καταγραφείς *μήκους 2*

$$|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle + \alpha_2|2\rangle + \alpha_3|3\rangle \in C_2 \otimes C_2 \tag{8.6}$$

με

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$
\begin{aligned}
|0\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}\\
|1\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}\\
|2\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}\\
|3\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{8.7}
$$

μπορούν να αποθηκεύσουν τους ακέραιους 0, 1, 2, 3 ταυτοχρόνως.

- Για αυθαίρετο αριθμό L qubits οι καταγραφείς είναι *μήκους* L αφού

$$|\psi\rangle = \sum_{J=0}^{2^L-1} \alpha_J |J\rangle \in C_2 \otimes C_2 \otimes \cdots \otimes C_2 \tag{8.87}$$

με ακολουθίες μήκους L, π. χ.

$$|J\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\cdots\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle\otimes\cdots\otimes|\downarrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle, \tag{8.9}$$

που μπορούν να αποθηκεύσουν κάθε ακέραιο $J = 0, 1, 2, \cdots, 2^L - 1$, ταυτοχρόνως.

8.2.3. Κβαντικές πύλες

Οι *κβαντικές πύλες* υλοποιούν μοναδιαίους μετασχηματισμούς ($U^{-1} = U^{+}$) στον $2^L \times 2^L$ χώρο Hilbert

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

$$\sum_{J=0}^{2^L-1}\alpha_J|J\rangle \xrightarrow{U} \sum_{J=0}^{2^L-1}\alpha'_J|J\rangle \tag{8.10}$$

με

$$\alpha'_J = \sum_{K=0}^{2^L-1} U_J^K \alpha_K \tag{8.11}$$

και επειδή $UU^+ = 1$ διατηρείται η κανονικοποίηση

$$\sum_{J=0}^{2^L-1}|\alpha_J|^2 = \sum_{J=0}^{2^L-1}|\alpha'_J|^2 = 1. \tag{8.12}$$

Οι μοναδιαίοι μετασχηματισμοί είναι πλήρως *αντιστρεπτοί* και διατηρούν την κβαντική συνέπεια (coherence).

❖ Πύλες *ενός* ***qubit*** έχουμε με τους 2×2 πίνακές στροφών γωνίας θ γύρω από τους x, y, z–άξονες

$$\upsilon_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & i\sin\theta/2 \\ i\sin\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

$$\upsilon_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & \sin\theta/2 \\ -\sin\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix} \tag{8.13}$$

$$\upsilon_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix}$$

και πολλαπλασιασμό με έναν παράγοντα φάσης

$$\upsilon_0(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \tag{8.14}$$

όπου $\upsilon_0(4\pi) = 1$. Ιδιαίτερης σημασίας είναι η *πύλη Hadamard*

$$\upsilon_H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \upsilon_0(\pi)\,\upsilon_z(\pi)\,\upsilon_y(-\pi/2). \tag{8.15}$$

Η δράση της υ_H στις $|0\rangle, |1\rangle$ δίνει καταστάσεις υπέρθεσης, π.χ.

$$\upsilon_H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \tag{8.16}$$

και

$$\upsilon_H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{8.17}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

❖ Πύλες ***δύο qubit*** έχουμε με μήτρες 4×4, όπως η

$$U_{NOT}=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix} \tag{8.18}$$

που αναποδογυρίζει και τα δύο σπιν με

$$U_{NOT}|\uparrow\uparrow\rangle = U_{NOT}|3\rangle = |0\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\ . \tag{8.19}$$

Η πύλη Hadamard

$$\upsilon_H\otimes\upsilon_H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1&1\\1&1\end{pmatrix}\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1&1\\1&1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-1&-1&1\\-1&-1&1&1\\-1&1&-1&1\\1&1&1&1\end{pmatrix} \tag{8.20}$$

αν δράσει στην κατάσταση $|\downarrow\downarrow\rangle$ από την (8.7) δίνει την κατάσταση υπέρθεσης

$$(\upsilon_H\otimes\upsilon_H)|\downarrow\downarrow\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-1&-1&1\\-1&-1&1&1\\-1&1&-1&1\\1&1&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\left(|0\rangle+|1\rangle+|2\rangle+|3\rangle\right). \tag{8.21}$$

Βασική είναι η γνωστή ως '*ελεγχόμενη NOT*' πύλη μήτρας

$$C_{NOT}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix} \tag{8.22}$$

που αναποδογυρίζει το σπιν 2 *τότε και μόνον τότε όταν* το σπιν 1 είναι στην κατάσταση $|1\rangle=|\uparrow\rangle$, με δυνατά αποτελέσματα

$$\begin{aligned}
C_{NOT}|\downarrow\downarrow\rangle &= C_{NOT}|0\rangle = |0\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\\
C_{NOT}|\downarrow\uparrow\rangle &= C_{NOT}|1\rangle = |1\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle\\
C_{NOT}|\uparrow\downarrow\rangle &= C_{NOT}|2\rangle = |3\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle\\
C_{NOT}|\uparrow\uparrow\rangle &= C_{NOT}|3\rangle = |2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle\ .
\end{aligned} \tag{8.23}$$

Η 'ελεγχόμενη NOT' πύλη, γνωστή και ως *πύλη XOR*, φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα για όλες τις πιθανές εισόδους

$$\begin{array}{ll} |\downarrow\rangle \longrightarrow - \longrightarrow |\downarrow\rangle & |\downarrow\rangle \longrightarrow - \longrightarrow |\downarrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \longrightarrow \oplus \longrightarrow |\downarrow\rangle, & |\uparrow\rangle \longrightarrow \oplus \longrightarrow |\uparrow\rangle, \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} |\uparrow\rangle \longrightarrow - \longrightarrow |\uparrow\rangle & |\uparrow\rangle \longrightarrow - \longrightarrow |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \longrightarrow \oplus \longrightarrow |\uparrow\rangle, & |\uparrow\rangle \longrightarrow \oplus \longrightarrow |\downarrow\rangle. \end{array}$$

Με τον συμβολισμό $|0\rangle = |\downarrow\rangle, |1\rangle = |\uparrow\rangle$ αναπαριστάνουμε την πύλη XOR

$$\begin{array}{l} |a\rangle \longrightarrow - \longrightarrow |a\rangle \\ |b\rangle \longrightarrow \oplus \longrightarrow |a \oplus b\rangle = |(a+b) \bmod 2\rangle \end{array} \tag{8.24}$$

όπου $a, b = 0, 1$, ενώ (0+0) mod 2=0, (0+1) mod 2=1, (1+0) mod 2=1 και (1+1) mod 2=0. Ευτυχώς, οι πύλες πολλών qubit μπορούν να αναχθούν στις στροφές ενός-qubit και την πύλη δύο-qubit XOR.

Στους κβαντικούς υπολογιστές αρκούν πύλες ενός-qubit μαζί με την πύλη δύο-qubit XOR. Το σύνολο αυτό είναι *συμπαντικό* και ικανό να δώσει όλες τις δυνατές πύλες (μοναδιαίους μετασχηματισμούς) L qubits του κβαντικού υπολογιστή.

8.3. Ο κβαντικός εναγκαλισμός

Ένα ζεύγος (δύο) qubit είναι *εναγκαλισμένο* όταν η κατάσταση που το περιγράφει *δεν μπορεί να γραφεί ως γινόμενο καταστάσεων για το κάθε qubit ξεχωριστά*. Π.χ. η κατάσταση

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \tag{8.25}$$

δεν είναι εναγκαλισμένη αφού γράφεται ως γινόμενο

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle), \tag{8.26}$$

ενώ *είναι εναγκαλισμένη* η κατάσταση

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |3\rangle) \quad . \tag{8.27}$$

Στην *τριπλή καταστάση* σπιν δύο ηλεκτρονίων (άτομο He)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\begin{array}{lll} & S_z = 1: & |\uparrow\uparrow\rangle \\ S = 1 & S_z = 0: & (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2} \\ & S_z = -1: & |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \tag{8.28}$$

η $(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ είναι εναγκαλισμένη όπως και η *απλή κατάσταση*

$$S = 0 \quad S_z = 0: \qquad (|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2} \ . \tag{8.29}$$

Η (8.29) είναι η (7.19) με αλλαγμένο πρόσημο, αφού στο Κεφ. 8 επιλέξαμε *ανάποδη σειρά* για τα δύο σπιν από ότι στα Κεφ. 6,7, ενώ βεβαίως μια ψ δεν εξαρτάται από το πρόσημο. Παρατηρούμε πως σε μια εναγκαλισμένη κατάσταση η μέτρηση του ενός qubit επηρεάζει και το άλλο, π. χ. στην (8.29) μια μέτρηση του *πρώτου qubit* θα δώσει δύο δυνατά αποτελέσματα: το σπιν κάτω με πιθανότητα 50% στην $|\downarrow\uparrow\rangle$ είτε το σπιν πάνω με πιθανότητα 50% στην $|\uparrow\downarrow\rangle$. Η *συσχέτιση μεταξύ των δύο qubits* είναι προφανής αφού μια μέτρηση του *δεύτερου qubit* αναγκαστικά δίνει πάντα το αντίθετο αποτέλεσμα (στην περίπτωση αυτή) της πρώτης μέτρησης, με το δεύτερο σπιν πάνω ή κάτω με πιθανότητες 50%, αντίστοιχα. Όπως θα φανεί στην συνέχεια μια ιδιαίτερα βολική επιλογή για τους σκοπούς μας είναι οι *εναγκαλισμένες καταστάσεις Bell.*

8.3.1. Εναγκαλισμένες καταστάσεις Bell

Είναι οι εναγκαλισμένες καταστάσεις δύο qubit που προκύπτουν από τις $|J\rangle = |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ με τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$|B_J\rangle = U_{Bell}|J\rangle\,, \quad J = 0, 1, 2, 3\,, \tag{8.30}$$

όπου

$$U_{Bell} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 1 \\ 1 & -i & 0 & 0 \\ -i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i \end{pmatrix} \tag{8.31}$$

και αντίστροφο μετασχηματισμό

$$|J\rangle = \sum_{K=0}^{3} (U_{Bell}^{-1})_J^K \, |B_K\rangle\,, \quad J = 0, 1, 2, 3. \tag{8.32}$$

Οι ορθοκανονικές καταστάσεις Bell $\langle B_I | B_J \rangle = \delta_{I,J}$ είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$|B_0\rangle = \frac{|3\rangle + i|0\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\uparrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|B_1\rangle = \frac{|0\rangle + i|3\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\downarrow\downarrow\rangle + i|\uparrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|B_2\rangle = \frac{|1\rangle - i|2\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \tag{8.33}$$

$$|B_3\rangle = \frac{|2\rangle - i|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - i|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} .$$

Είναι ιδιαίτερα σημαντικό να τονισθεί ότι μπορούμε να πάμε *από μία κατάσταση Bell σε άλλη* με τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$|B_I\rangle \xrightarrow{1\otimes\upsilon_{IJ}} |B_J\rangle \ , \tag{8.34}$$

όπου το πρώτο qubit της κατάστασης Bell λόγω του τελεστή μονάδα παραμένει το ίδιο ενώ *μετασχηματίζεται μόνο το δεύτερο qubit* με τον μετασχηματισμό *ενός* qubit υ_{IJ}. Π.χ. η κατάσταση Bell $|B_0\rangle$ με τους $\upsilon_{00}, \upsilon_{10}, \upsilon_{20}, \upsilon_{30}$, που δεν είναι στοιχεία μήτρας όπως μπορεί να μας παραπλανήσει ο συμβολισμός αλλά οι 2×2 μήτρες

$$\upsilon_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \ \upsilon_{10} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \ \upsilon_{20} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \ \upsilon_{30} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.35}$$

μετασχηματίζεται στις $|B_0\rangle$, $|B_1\rangle$, $|B_2\rangle$, $|B_3\rangle$. Να δειχθεί ότι οι αντίστροφες μήτρες είναι

$$(\upsilon_{00})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \ (\upsilon_{10})^{-1} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \ (\upsilon_{20})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ (\upsilon_{30})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.36}$$

Παράδειγμα 1. Να δείξετε ότι δράση των μητρών $\upsilon_{00}, \upsilon_{10}, \upsilon_{20}, \upsilon_{30}$, στις καταστάσεις ενός qubit $|0\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ δίνει

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\upsilon_{00}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \upsilon_{00}|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$

$$\upsilon_{10}|\uparrow\rangle = i|\uparrow\rangle, \upsilon_{10}|\downarrow\rangle = -i|\downarrow\rangle,$$

$$\upsilon_{20}|\uparrow\rangle = -i|\downarrow\rangle, \upsilon_{20}|\downarrow\rangle = -i|\uparrow\rangle, \tag{8.37}$$

$$\upsilon_{30}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \upsilon_{30}|\downarrow\rangle = -|\uparrow\rangle.$$

Επομένως, η $|B_0\rangle$ με τους μοναδιαίους μετασχηματισμούς $1 \otimes \upsilon_{K0}$, όπου οι μήτρες υ_{K0} δρούν μόνο στο δεύτερο qubit, δίνει τις καταστάσεις Bell $|B_K\rangle$, $K = 0, 1, 2, 3$:

$$(1 \otimes \upsilon_{00})|B_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow(\upsilon_{00}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{00}\downarrow)\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle) = |B_0\rangle \ , \tag{8.38}$$

$$\begin{aligned}(1 \otimes \upsilon_{10})|B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow(\upsilon_{10}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{10}\downarrow)\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|\uparrow\uparrow\rangle + i(-i)|\downarrow\downarrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle + i|\uparrow\uparrow\rangle) = |B_1\rangle \ ,\end{aligned} \tag{8.39}$$

$$\begin{aligned}(1 \otimes \upsilon_{20})|B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow(\upsilon_{20}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{20}\downarrow)\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i|\uparrow\downarrow\rangle + i(-i)|\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\downarrow\rangle) = |B_2\rangle \ ,\end{aligned} \tag{8.40}$$

$$\begin{aligned}(1 \otimes \upsilon_{30})|B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow(\upsilon_{30}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{30}\downarrow)\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + (-i)|\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - i|\downarrow\uparrow\rangle) = |B_3\rangle \ .\end{aligned} \tag{8.41}$$

8.3.2. <u>Πυκνή κωδικοποίηση</u>

Ένα μήνυμα στέλνεται από την Alice στον Bob (*από το* A *στο* B), *που* βρίσκονται σε *απομακρυσμένες θέσεις μεταξύ τους*, όταν μεταφερθεί ένας ικανός αριθμός *απο* bits πληροφορίας. Π. χ. ένας ακέραιος αριθμός $K = 0, 1, 2, \cdots, 2^{2L} - 1$, *μήκους 2L σε δυαδική γραφή*, μεταβιβάζεται πλήρως αν μεταφερθούν ακριβώς *2L* bits πληροφορίας. Μήπως όμως η κβαντική μπορεί να τα καταφέρει καλύτερα; Η απάντηση είναι πως η μεταφορά του ακεραίου K στην κβαντική επιτυγχάνεται

στέλνοντας η Alice στον Bob ακριβώς *τα μισά L qubits πληροφορίας*. Αυτό επιτυγχάνεται με την πυκνή κωδικοποίηση. Πως όμως γίνεται;

Θα επικεντρωθούμε στην περίπτωση που ο ακέραιος K για μεταφορά είναι ένας από τους τέσσερις αριθμούς $K = 0, 1, 2, 3$, οπότε κλασσικά απαιτούνται για να μεταφερθεί τουλάχιστον *2 bits* πληροφορίας 0=00, 1=01, 2=10, 3=11, αφού για τον K χρειάζεται να σταλεί μια δυαδική λέξη μήκους δύο που γράφεται με τους συνδυασμούς των δύο ακεραίων 0 ή 1. Η κβαντική τα καταφέρνει καλύτερα: *αντί για δύο είναι αρκετό να σταλεί μόνο ένα qubit* από το A στο B. Αυτό γίνεται με εκμετάλλευση της κβαντικής ιδιότητας του εναγκαλισμού των ζευγών σπιν διαμέσου μιας άλλης βοηθητικής κατάστασης Bell $|B_J\rangle$. Από την $|B_J\rangle$ οι Alice και Bob λαμβάνουν από ένα εναγκαλισμένο qubit ο καθένας. Η Alice με έναν μοναδιαίο μετασχηματισμό μετασχηματίζει το δικό της qubit και το στέλνει στον Bob που απλώς *μετράει* την κατάσταση Bell και εξάγει αμέσως τον ακέραιο αριθμό K που του έστειλε η Alice. Ακούγεται απλό αλλά ας το δούμε με μια συγκεκριμένη περίπτωση.

Ας υποθέσουμε πως επιθυμούμε την μεταφορά ενός από τους ακεραίους K=0, 1, 2, 3 από το A στο B και η βοηθητική κατάσταση Bell έστω είναι $|B_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle\right)$. Η Alice από την $|B_0\rangle$ λαμβάνει το πρώτο qubit και ο Bob το δεύτερο. Τα δύο αυτά qubit είναι εναγκαλισμένα αφού προέρχονται από την ίδια κατάσταση Bell.

1) Η Alice ανάλογα με τον K=0, 1, 2, 3, *που θέλει να μεταφέρει* εφαρμόζει τον κατάλληλο μοναδιαίο μετασχηματισμό $\upsilon_{00}, \upsilon_{10}, \upsilon_{20}, \upsilon_{30}$ στο δικό της qubit, το δεύτερο από την $|B_0\rangle$,

$$|\psi_K\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow (\upsilon_{K0} \uparrow)\rangle + i|\downarrow (\upsilon_{K0} \downarrow)\rangle. \tag{8.42}$$

Όπως είδαμε στο παράδειγμα 1 με (8.37-41) προκύπτουν οι καταστάσεις Bell όταν K=0

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow (\upsilon_{00} \uparrow)\rangle + i|\downarrow (\upsilon_{00} \downarrow)\rangle = |B_0\rangle, \tag{8.43}$$

όταν K=1

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow (\upsilon_{10} \uparrow)\rangle + i|\downarrow (\upsilon_{10} \downarrow)\rangle = |B_1\rangle, \tag{8.44}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όταν K=2

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow(\upsilon_{20}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{20}\downarrow)\rangle = |B_2\rangle \tag{8.45}$$

και όταν K=3

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow(\upsilon_{30}\uparrow)\rangle + i|\downarrow(\upsilon_{30}\downarrow)\rangle = |B_3\rangle\,. \tag{8.46}$$

2) Η Alice στέλνει το μετασχηματισμένο qubit στον Bob.
3) Ο Bob *μετράει την κατάσταση Bell του εναγκαλισμένου ζεύγους* που αποτελείται από το qubit που έχει και το qubit που του έστειλε η Alice, άρα *εξάγει την* αντίστοιχη $|\psi_K\rangle$ και τον *ακέραιο K*. Επομένως, *η μεταφορά του K από το A στο B* έγινε *με ένα qubit αντί δύο bits.*

8.3.3. Κβαντική τηλεμεταφορά

Ένα qubit δεν μπορεί να αντιγραφεί (*θεώρημα της μη κλωνοποίησης*) αλλά μπορεί να μεταφερθεί (με εκμετάλλευση της ιδιότητας του κβαντικού εναγκαλισμού). Στις ταινίες επιστημονικής φαντασίας η τηλεμεταφορά γίνεται αρχικά με ένα 'σκανάρισμα' του αντικειμένου που θα μεταφερθεί και ακολουθείται από την αποκωδικοποίηση της πληροφορίας στο μακρινό μέρος. Η κβαντική όμως δεν επιτρέπει το ακριβές 'σκανάρισμα' λόγω της αρχής της αβεβαιότητας του Heisenberg, αφού είναι αδύνατη η ταυτόχρονη γνώση της θέσης και της ορμής των σωματίων που αποτελούν ένα σύστημα. Θα επιχειρήσουμε τηλεμεταφορά μιας κβαντικής κατάστασης υπέρθεσης[6] όπου δεν είναι εφικτή η αναπαραγωγή της παρακάμπτοντας την αρχή της αβεβαιότητας με τον εναγκαλισμό, όπως στην πυκνή κωδικοποίηση.

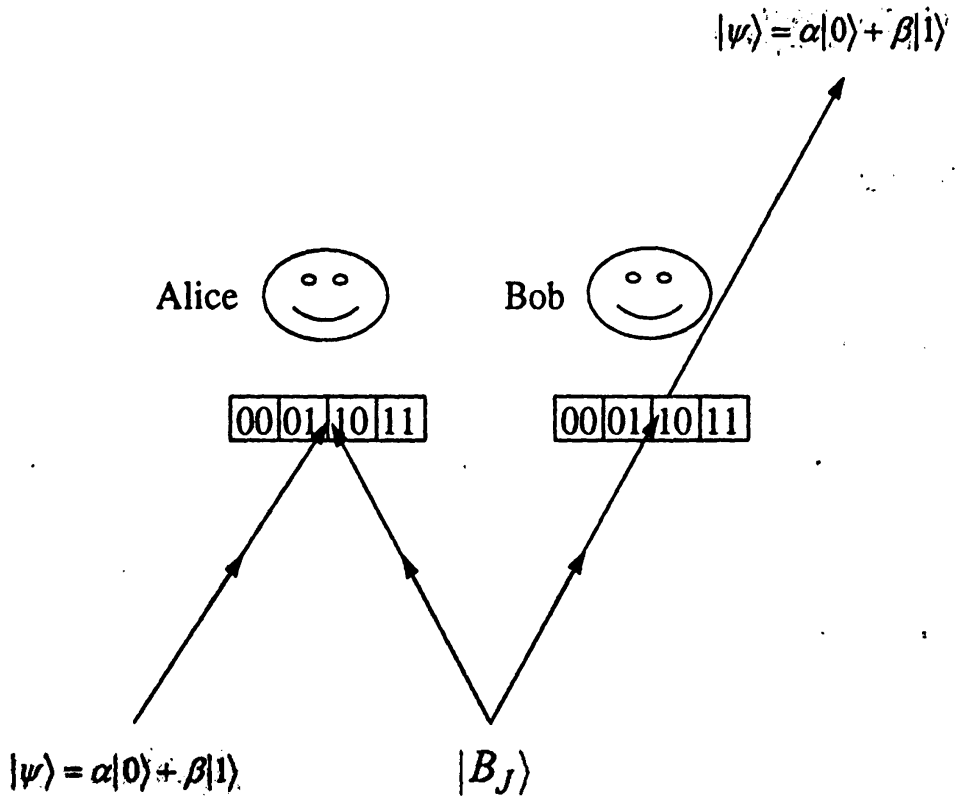
Η κατάσταση $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ θα τηλεμεταφερθεί με κβαντικό τρόπο από το A στο B. Πως γίνεται αυτό; Η Alice και ο Bob λαμβάνουν από ένα εναγκαλισμένο qubit από την βοηθητική κατάσταση Bell έστω την $|B_J\rangle$, η Alice το πρώτο και ο Bob το δεύτερο. Για να ολοκληρωθεί η τηλεμεταφορά *η Alice επιπλέον πρέπει να μεταφέρει δύο bits κλασσικής πληροφορίας στον Bob* που να του δηλώνει ποιόν από τους τέσσερις μετασχηματισμούς να χρησιμοποιήσει (σε ποιο από τα

[6] Η μεταφορά περίπου 10^{30} ατόμων που αποτελούν έναν άνθρωπο είναι προφανώς αδύνατη. Θα έπρεπε πρώτα να επιτευχθεί η τηλεμεταφορά ενός βακτηριδίου, περίπου 10^7 ατόμων. Προς το παρόν όμως τηλεμεταφέρεται μόνο ένα κβαντικό σύστημα δύο καταστάσεων (qubit), αυτό είναι όλο!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τέσσερα κουτάκια αντιστοιχεί η δική της κατάσταση των δύο qubits). Αυτό θα γίνει με κλασσικό τρόπο, π.χ. με το τηλέφωνο, γεγονός που δεν επιτρέπει κβαντική τηλεμεταφορά να γίνει με ταχύτητα μεγαλύτερη του φωτός c.

Έστω η πηγή των εναγκαλισμένων qubits είναι πάλι η βοηθητική κατάσταση Bell $|B_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle)$ και η Alice λαμβάνει από την $|B_0\rangle$ το πρώτο qubit ενώ ο Bob το δεύτερο. Η κατάσταση για μεταφορά $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ μαζί με τα εναγκαλισμένα qubits από την πηγή $|B_0\rangle$ δίνουν την κατάσταση τριών qubits



Σχ.8.4. *Η άγνωστη κατάσταση υπέρθεσης που τώρα την γράφουμε ως* $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ *και περιέχει άπειρη κβαντική πληροφορία θα τηλεμεταφερθεί από την Alice (A) στον Bob (B). Για τον σκοπό αυτό όμως απαιτείται να σταλούν δύο bits κλασσικής πληροφορίας από το A στο B (πιο από τα τέσσερα κουτάκια θα δώσει η μέτρηση της Alice) ώστε ο Bob να εφαρμόσει τον κατάλληλο μετασχηματισμό για να λάβει την* $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. *Αν η* $|\psi\rangle$ *έχει μετρηθεί τότε είναι αρκετή η μετάδοση ενός bit πληροφορίας λόγω κατάρρευσης της κυματοσυνάρτησης στην* $|0\rangle$ *ή την* $|1\rangle$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle \otimes |B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\alpha|\uparrow(\uparrow\uparrow)\rangle + i\alpha|\uparrow(\downarrow\downarrow)\rangle + \beta|\downarrow(\uparrow\uparrow)\rangle + i\beta|\downarrow(\downarrow\downarrow)\rangle\big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\alpha|\uparrow\uparrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle + i\alpha|\uparrow\downarrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle + \beta|\downarrow\uparrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle + i\beta|\downarrow\downarrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle\big)
\end{aligned}
\tag{8.47}
$$

με πρώτο qubit την κατάσταση για μεταφορά ενώ το δεύτερο και τρίτο που προέρχονται από την πηγή και ανήκουν στην Alice και τον Bob, αντίστοιχα. Η συνολική κατάσταση μπορεί να γραφεί

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle \otimes |B_0\rangle = \frac{1}{2}\big(&|B_0\rangle\otimes(\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle) + |B_1\rangle\otimes(-i\alpha|\uparrow\rangle + i\beta|\downarrow\rangle) \\
&+|B_2\rangle\otimes(-\alpha|\downarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle) + |B_3\rangle\otimes(i\alpha|\downarrow\rangle + i\beta|\uparrow\rangle)\big)
\end{aligned}
\tag{8.48}
$$

ή ισοδύναμα

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle \otimes |B_0\rangle = \frac{1}{2}\big(&|B_0\rangle\otimes(\upsilon_{00}^{-1}|\psi\rangle) + |B_1\rangle\otimes(\upsilon_{10}^{-1}|\psi\rangle) \\
&+|B_2\rangle\otimes(\upsilon_{30}^{-1}|\psi\rangle) + |B_3\rangle\otimes(\upsilon_{20}^{-1}|\psi\rangle)\big) \ .
\end{aligned}
\tag{8.49}
$$

Από την (8.49) η κβαντική τηλεμεταφορά της $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ από το A στο B, όσο κι αν απέχουν μεταξύ τους, έχει σχεδόν επιτευχθεί! Ο κβαντικός εναγκαλισμός μας βοήθησε να παρακάμψουμε το θεώρημα μη κλωνοποίησης που απαγορεύει την αναπαραγωγή μιας κατάστασης υπέρθεσης. Ακολουθούν τρία στάδια:

1) Η Alice κάνει μια *μέτρηση* που θα τις δώσει ένα συγκεκριμένο αποτέλεσμα για την κατάσταση Bell των δύο qubits που έχει, αυτό που θα τηλεμεταφερθεί και αυτό που έλαβε από την πηγή. Η μέτρηση της Alice αναγκάζει το qubit του Bob αυτομάτως να καταρρεύσει σε αντίστοιχη κατάσταση, π.χ. αν η Alice πάρει το αποτέλεσμα $|B_2\rangle$ στην (8.49) το qubit του Bob θα δώσει την $\upsilon_{30}^{-1}|\psi\rangle$.
2) Η Alice μεταφέρει στον Bob *με κλασσικό τρόπο* την πληροφορία σε ποιά κατάσταση Bell (σε ποιό K=0, 1, 2, 3) 'κατέρρευσε' κατά την μέτρηση το δικό της εναγκαλισμένο ζεύγος. Η Alice *εξάγει τον ακέραιο* K και τον μεταφέρει στον Bob με δύο bits πληροφορίας.
3) Ο Bob με τον κατάλληλο μοναδιαίο μετασχηματισμό, αφού η δική του κατάσταση είναι η $\upsilon_{K0}^{-1}|\psi\rangle$ σύμφωνα με την πληροφορία που έλαβε για το K με τον κλασσικό τρόπο, εφαρμόζει τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$
\upsilon_{K0}\left(\upsilon_{K0}^{-1}|\psi\rangle\right) = |\psi\rangle \ . \tag{8.50}
$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άρα, η κβαντική τηλεμεταφορά με αυτόν τον τρόπο ολοκληρώθηκε και η κατάσταση $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ πήγε από το A στο B όπως στο Σχ. 8.4. Πρέπει να σημειωθεί πως κανένας από τους δύο δεν επιχειρεί να μετρήσει την κατάσταση υπέρθεσης $|\psi\rangle$ που παραμένει 'άγνωστη' και στους δύο. Μια μέτρηση της $|\psi\rangle$ θα επιφέρει αυτομάτως την κατάρρευσή της στην $|0\rangle$ ή την $|1\rangle$ με μια πιθανότητα. Αν αυτό συμβεί η μεταφορά γίνεται πλέον με τον κλασσικό τρόπο στέλνοντας ένα bit πληροφορίας από το A στο B που γνωστοποιεί αν είναι 0 ή 1.

8.4. Κβαντικοί αλγόριθμοι

Οι βασικοί κβαντικοί αλγόριθμοι είναι του Shor (1994) και του Grover (1996). Ο αλγόριθμος του Shor επιτρέπει να λυθεί το πρόβλημα της παραγοντοποίησης ενός αριθμού N σε πολυωνυμικό αντί για εκθετικό χρόνο, ενώ ο αλγόριθμος του Grover σε έρευνα μιας βάσης δεδομένων βρίσκει ένα από N στοιχεία σε χρόνο ανάλογο του $\sqrt{N}$ αντί του N. Θα περιγράψουμε αυτούς τους κβαντικούς αλγόριθμους που θα μπορούσε να τους υλοποιήσει ένας κβαντικός υπολογιστής.

8.4.1. Αλγόριθμος παραγοντοποίησης του Shor

Η παραγοντοποίηση ενός ακεραίου αριθμού N σε δύο πρώτους παράγοντες p, q, ώστε $N = pq$, είναι ένα πρόβλημα με εκθετικές απαιτήσεις χρόνου στους συνηθισμένους υπολογιστές. Το πρόβλημα με τον κβαντικό αλγόριθμο του Shor (1994) θα μπορούσε να επιλυθεί σε πολυωνυμικό χρόνο. Πριν περιγράψουμε τον αλγόριθμο του Shor είναι αναγκαία η συνοπτική αναφορά σε ένα 'τρικ' της θεωρίας αριθμών που ανάγει το πρόβλημα της παραγοντοποίησης στο ισοδύναμο πρόβλημα *εύρεσης της περιόδου μιας συνάρτησης*.

> Αν επιδώκεται η παραγοντοποίηση του ακεραίου N *πρώτα επιλέγουμε με τυχαίο τρόπο έναν απλό παράγοντα a μικρότερο του N, που δεν είναι πρώτος με τον N* (δεν έχουν κοινούς διαιρέτες). Αν ο a είναι πρώτος με τον N το πρόβλημα επιλύεται εύκολα με τον κλασσικό αλγόριθμο του Ευκλείδη[7] που βρίσκει τον μέγιστο κοινό διαιρέτη του ζεύγους (N,a). Ας επικεντρώσουμε την προσοχή μας στην περιοδική συνάρτηση

[7] Ο κλασσικός *αλγόριθμος του Ευκλείδη* για να βρεθεί ο *μέγιστος κοινός διαιρέτης* n_m των αριθμών (n_0, n_1) με $n_0 \geq n_1$ από τον $n_0 \to n_m$ ακολουθεί τα εξής βήματα:

$$n_0 = d_1 \times n_1 + n_2,\ \ n_1 = d_2 \times n_2 + n_3, \cdots,\ \ n_{m-2} = d_{m-1} \times n_{m-1} + n_m,\ \ n_{m-1} = d_m \times n_m + 0.$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$f(x) = a^x \bmod N \ , \tag{8.51}$$

όπου η $f(x)$ δίνεται από το υπόλοιπο της διαίρεσης του a^x με τον N. Θα δείξουμε πως ***για να παραγοντοποιηθεί ο N αρκεί να υπολογισθεί η περίοδος r της*** $f(x)$, ***ώστε*** $f(x+r) = f(x)$. Αυτό επειδή $a^r = 1 \bmod N$ (ή $a^r \bmod N = 1$) και όταν ο r είναι άρτιος

$$a^r - 1 = 0 \bmod N \Leftrightarrow \left(a^{r/2}+1\right)\left(a^{r/2}-1\right) = 0 \bmod N \ , \tag{8.52}$$

τον αριθμό N παραγοντοποιούν οι μέγιστοι κοινοί διαιρέτες $\left(a^{r/2}-1, N\right)$ και $\left(a^{r/2}+1, N\right)$ που υπολογίζονται σε πολυωνυμικό χρόνο με τον αλγόριθμο του Ευκλείδη.

Παράδειγμα. Έστω ότι επιθυμούμε την παραγοντοποίηση του αριθμού N=91: Επιλέγουμε τον αριθμό a=3 που δεν έχει κοινούς διαιρέτες με τον N και φτιάχνουμε την συνάρτηση $f(x)$

$$\begin{aligned} x &: \ 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ \cdots \\ 3^x &: \ 1,\ 3,\ 9,\ 27,\ 81, 243, 729, 2187,\ \cdots \\ f(x) = 3^x \bmod 91 &: \ 1,\ 3,\ 9,\ 27,\ 81,\ 61,\ 1,\ 3,\ \cdots . \end{aligned} \tag{8.53}$$

Παρατηρούμε πως η περίοδός της ακολουθίας είναι $r = 6$ αφού η $f(x)$ επαναλαμβάνεται μετά από 6 αριθμούς, άρα και οι μέγιστοι κοινοί διαιρέτες που παραγοντοποιούν τον N είναι

$$\left(3^{6/2}-1, 91\right) = (26,91) = 7 \tag{8.54}$$

$$\left(3^{6/2}+1, 91\right) = (28,91) = 13 \quad , \tag{8.55}$$

ώστε οι παράγοντες του 91 είναι 7 και 13 με

$$91 = 7 \times 13 \ . \tag{8.56}$$

Η εύρεση της περιόδου r είναι *ένα πρόβλημα* με εκθετικές απαιτήσεις χρόνου. Ο κβαντικός αλγόριθμος του Shor βρίσκει την περίοδο της συνάρτησης $f(x)$ με όρισμα τις τιμές $x = 0, 1, 2, \cdots, N-1$ με $N = 2^L$, σε πολυωνυμικό χρόνο. Πως όμως το επιτυγχάνει; Η βασική ιδέα είναι ο *διακριτός μετασχηματισμός Fourier*

$$|x\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{y=0}^{2^L-1} e^{2\pi i xy/2^L} |y\rangle \tag{8.57}$$

που επιτρέπει την εύρεση της περιόδου r της $f(x)$ με αποδοτικό τρόπο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

1. **ΕΙΣΟΔΟΣ.** Απαιτούνται δύο καταγραφείς, ο πρώτος με μήκος L qubits, όπου θα γραφούν οι τιμές x και ο δεύτερος χωρίς καθορισμένο αριθμό qubits, όπου θα γραφούν οι αντίστοιχες τιμές της συνάρτησης $f(x)$. Οι δύο καταγραφείς $|x, f(x)\rangle = |x\rangle \otimes |f(x)\rangle$ αρχικά είναι στην κατάσταση

$$|\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\downarrow, \downarrow\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle. \tag{8.58}$$

2. **ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ.** Στον πρώτο καταγραφέα τα σπιν όλων των qubits πολώνονται στην

$$\textbf{κατάσταση υπέρθεσης:} \qquad \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{x=0}^{2^L-1} |x, 0\rangle, \tag{8.59}$$

π.χ. με εφαρμογή της πύλης Hadamard (8.15) σε όλα τα qubits. Στον δεύτερο καταγραφέα υπολογίζεται με τον κατάλληλο μοναδιαίο μετασχηματισμό η $f(x)$ για κάθε τιμή του x, με παράλληλη διαδικασία σε χρόνο που θα έπαιρνε για να υπολογίσουμε κλασσικά την συνάρτηση σε μια μόνο τιμή του x, και καταλήγουμε στην

$$\textbf{εναγκαλισμένη κατάσταση:} \qquad \frac{1}{\sqrt{2^L}} \sum_{x=0}^{2^L-1} |x, a^x \bmod N\rangle. \tag{8.60}$$

Στον δεύτερο καταγραφέα μετρείται η τιμή της $f(x)$, π.χ. δίνει την $f(k)$ με κάποιο k,

$$\textbf{μέτρηση του δεύτερου καταγραφέα:} \qquad \text{έστω } f(k),\ 0 \le k < r. \tag{8.61}$$

Αμέσως μετά την μέτρηση ο *πρώτος* καταγραφέας καταρρέει στην υπέρθεση των καταστάσεων $|k\rangle, |k+r\rangle, |k+2r\rangle, \cdots$, με $0 \le k < r$. Όλες οι καταστάσεις $j = k, k+r, k+2r, \cdots$ (ο αριθμός τους είναι A) δίνουν την $f(k)$ με την κατάσταση

$$\textbf{υπέρθεσης λύσεων:} \qquad \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{j=0}^{A-1} |k + jr\rangle,\ 2^L - r \le k + (A-1)r \le 2^L. \tag{8.62}$$

Χρησιμοποιούμε τον κβαντικό (διακριτό) *μετασχηματισμό Fourier* αυτής στον πρώτο καταγραφέα για να εξάγουμε την περίοδο της συνάρτησης

$$\textbf{μετασχηματισμός Fourier:} \qquad \frac{1}{\sqrt{2^L A}} \sum_{y=0}^{2^L-1} e^{2\pi i\, k y/2^L} \sum_{j=0}^{A-1} e^{2\pi i\, j r y/2^L} |y\rangle. \tag{8.63}$$

Η πιθανότητα του y διαβάζεται από τον τύπο για τις

$$\textbf{πιθανότητες:} \qquad P(y) = \frac{A}{2^L} \left| \frac{1}{A} \sum_{j=0}^{A-1} e^{2\pi i\, j r y/2^L} \right|^2. \tag{8.64}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

3. **ΕΞΟΔΟΣ.** Η κατανομή ευνοεί τις τιμές του y που ο $ry/2^L$ είναι κοντά σε ακέραιο αριθμό. Π. χ. αν ο r είναι διαιρέτης του 2^L, ο $2^L/r$ είναι ακέραιος ίσος με A και το αποτέλεσμα

$$P(y) = \frac{1}{r}\left|\frac{1}{A}\sum_{j=0}^{A-1} e^{2\pi i\, j\, y/A}\right|^2 = \begin{cases} \frac{1}{r}, \text{ όταν } y = A\times \text{ακέραιος} \\ 0, \text{ αλλού} \end{cases} \tag{8.65}$$

μας επιτρέπει την ανάγνωση της περιόδου r από την $P(y)$. Στην πιο ρεαλιστική περίπτωση θα πρέπει να αθροισθεί η γεωμετρική σειρά[8] και *το αποτέλεσμα του κβαντικού μετασχηματισμού Fourier είναι συγκεντρωμένο στα ακέραια πολλαπλάσια του* $2^L/r$. Οι άλλες τιμές του y θα δώσουν καταστροφική συμβολή. Για να εξαχθεί η περίοδος r απαιτούνται αρκετές μετρήσεις του πρώτου καταγραφέα (και με αλλαγή του a). Με τον κβαντικό αλγόριθμο το αποτέλεσμα υψηλού βαθμού εμπιστοσύνης προκύπτει με $t \sim O(L^3)$ σε πολύ μικρότερο αριθμό επαναλήψεων από αυτόν που χρειάζεται ο κλασσικός υπολογιστής όπου $t \propto O\left(e^{(\log L)^{2/3} L^{1/3}}\right)$. Πρέπει να σημειωθεί πως ο κβαντικός υπολογιστής δεν θα δώσει με βεβαιότητα το αποτέλεσμα το οποίο χρειάζεται να επιβεβαιωθεί με πολλαπλασιασμό των παραγόντων.

8.4.2. Αλγόριθμος έρευνας βάσης δεδομένων[9] του Grover

Η εύρεση ενός αντικειμένου ανάμεσα σε N με τον συνηθισμένο τρόπο απαιτεί χρόνο ανάλογο του N, π.χ. η εύρεση ενός ονόματος σε έναν όχι ταξινομημένο κατάλογο N ονομάτων. Με άλλα λόγια πρέπει να ψάξουμε τα ονόματα ένα προς ένα, ακόμη κι αν κάθε φορά που ψάχνουμε ένα όνομα το βάζουμε στην άκρη πάλι χρειάζονται $\sim N/2$ ψαξίματα, ίδιας τάξης με τον N. Μπορούμε μήπως να τα καταφέρουμε καλύτερα με έναν κβαντικό υπολογιστή; Ναι, ο κβαντικός αλγόριθμος του Grover απαιτεί αριθμό τάξης $\sqrt{N}$ από ψαξίματα. Επιπλέον, είναι αδύνατον να υπάρξει άλλος ταχύτερος και ο αλγόριθμος του Grover είναι ο βέλτιστος δυνατός. Πως όμως επιτυγχάνεται η βελτιστοποίηση $N \to \sqrt{N}$;

Αν η *επιθυμητή κατάσταση* γραφεί με το κανονικοποιημένο διάνυσμα στήλης

---

[8] Το άθροισμα γενικότερα υπολογίζεται από την γεωμετρική σειρά $\sum_{j=0}^{A-1} e^{i\theta j} = \frac{e^{iA\theta}-1}{e^{i\theta}-1}$.

[9] 'μιας βελόνας στα άχυρα'!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{8.66}$$

όπου η μονάδα είναι στην συγκεκριμένη γραμμή που υπάρχει το επιθυμητό αντικείμενο εκτελούμε τον παρακάτω κβαντικό αλγόριθμο[10]:

1. **ΕΙΣΟΔΟΣ.** Ως *αρχική κατάσταση υπέρθεσης* $|s\rangle$ σχηματίζεται το διάνυσμα στήλης με N γραμμές

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{8.67}$$

Η επιθυμητή κατάσταση $|b\rangle$ είναι βεβαίως άγνωστη, όμως το εσωτερικό της γινόμενο με την αρχική $|s\rangle$ είναι

$$|\langle s|b\rangle| = \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{8.68}$$

2. **ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ.** Η δράση των *τελεστών ανάκλασης*

$$U_s = 1 - 2|s\rangle\langle s|, \quad U_b = 1 - 2|b\rangle\langle b| \tag{8.69}$$

στις καταστάσεις $|s\rangle, |b\rangle$ δίνει τις κατοπτρικές τους

$$U_s|s\rangle = (1 - 2|s\rangle\langle s|)|s\rangle = -|s\rangle, \quad U_b|b\rangle = (1 - 2|b\rangle\langle b|)|b\rangle = -|b\rangle. \tag{8.70}$$

Ο τελεστής U_b αντιστρέφει το πρόσημο της κυματοσυνάρτησης τότε και μόνον τότε όταν ο καταγραφέας είναι στην επιθυμητή κατάσταση. Είναι το '*μαντείο*' που ρωτάμε κάθε φορά αν η έρευνά μας πέτυχε ή όχι. Ο υπολογισμός γίνεται με επαναλαμβανόμενη δράση του γινομένου τελεστών $-U_s U_b$ που υλοποιείται εύκολα με τις κατάλληλες πύλες ενός qubit και την πύλη XOR δύο qubit. Ας δούμε τι δίνουν οι διαδοχικές εφαρμογές του μοναδιαίου τελεστή:

[10] Υπάρχουν διάφορες μορφές του αλγόριθμου Grover. Εδώ επιλέγεται αυτή που ταιριάζει περισσότερο στις ανάγκες του μαθήματος.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Με μία ερώτηση:

$$\begin{aligned} -U_s\, U_b\, |s\rangle &= -U_s\, (|s\rangle - 2|b\rangle\langle b|s\rangle) \\ &= -U_s\, |s\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} U_s\, |b\rangle \\ &= |s\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|b\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}}|b\rangle\langle b|s\rangle \\ &= |s\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|b\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{2}{\sqrt{N}}|s\rangle \\ &= \frac{2}{\sqrt{N}}|b\rangle + \left(1 - \frac{4}{N}\right)|s\rangle \ . \end{aligned} \tag{8.71}$$

Η λύση που ισοδυναμεί με την εύρεση του αντικειμένου συμβαίνει όταν το πλάτος πιθανότητας πριν την $|b\rangle$ (από $|s\rangle \to |b\rangle$) είναι μονάδα, ενώ μηδενίζεται ταυτόχρονα το πλάτος πιθανότητας πριν την $|s\rangle$, όταν

$$\left|\frac{2}{\sqrt{N}}\right|^2 = 1 \Leftrightarrow N = 4 \ . \tag{8.72}$$

Επομένως, με τον κβαντικό αλγόριθμο μία μόνο ερώτηση είναι αρκετή για να βρεθεί ένα από N=4 αντικείμενα.

Με δύο ερωτήσεις:

$$\begin{aligned} (-U_s\, U_b)^2\, |s\rangle &= -U_s U_b \left(\frac{2}{\sqrt{N}}|b\rangle + \left(1 - \frac{4}{N}\right)|s\rangle\right) \\ &= \frac{4}{\sqrt{N}}\left(1 - \frac{2}{N}\right)|b\rangle + \left(-\frac{4}{N} + \left(1 - \frac{4}{N}\right)^2\right)|s\rangle \ . \end{aligned} \tag{8.73}$$

Η λύση $|s\rangle \to |b\rangle$ έχει πιθανότητα μονάδα, όταν

$$\left|\frac{4}{\sqrt{N}}\left(1 - \frac{2}{N}\right)\right|^2 = 1 \Leftrightarrow N \approx 10.5 \ . \tag{8.74}$$

Επομένως, με δύο ερωτήσεις μπορεί να βρεθεί ένα από $N \approx 10$ αντικείμενα.

Με L ερωτήσεις:

$$(-U_s\, U_b)^L\, |s\rangle = \cdots |b\rangle + \cdots |s\rangle \quad \to 1\,|b\rangle + 0\,|s\rangle \tag{8.75}$$

επαγωγικά καταλήγουμε στην εξίσωση

$$(2L+1)\sin^{-1}\frac{1}{\sqrt{N}} = \frac{\pi}{2} \tag{8.76}$$

που για μεγάλο N, $\sin x \approx x, x \to 0$ και $\sin^{-1} x \approx x, x \to 0$ με $x = 1/\sqrt{N} \to 0$ ενώ $2L+1 \approx L$, $L \to \infty$ έχει λύση

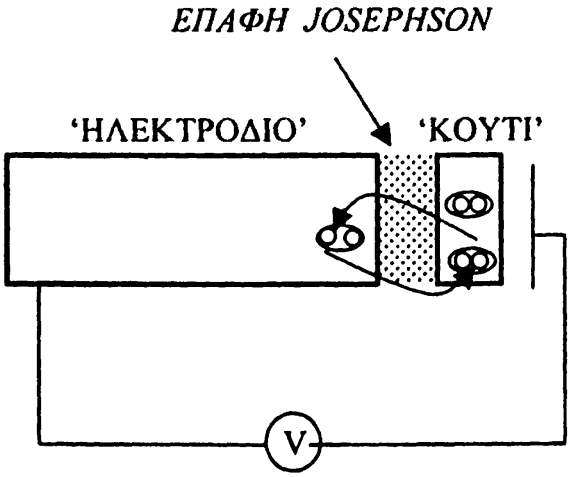
$$L \approx \frac{\pi\sqrt{N}}{4}, \quad N \to \infty \ . \tag{8.77}$$

3. ΕΞΟΔΟΣ. Το αποτέλεσμα ευρίσκεται σε χρόνο $t \propto \sqrt{2^L} \sim \sqrt{N}$ επιτυγχάνοντας καλύτερη απόδοση από την αναμενόμενη $t \propto 2^L \sim N$ ενός κλασσικού αλγόριθμου.

8.5. Υλοποίηση κβαντικών υπολογιστών-Διατάξεις qubit

Ο κβαντικός υπολογιστής απέχει πολύ από το να γίνει απτή πραγματικότητα με τις δυνατότητες της σημερινής τεχνολογίας. Έχει όμως γίνει σημαντική πρόοδος στις γνωστές ως *διατάξεις qubit,* όπου υλοποιείται με φυσικό τρόπο ένα σύνολο από qubits. Οι διατάξεις qubit που βασίζονται στην ανάπτυξη της κβαντικής θεωρίας της πληροφορίας είναι απαραίτητες για την κατασκευή των κβαντικών υπολογιστών ενώ η τεχνολογία κατασκευής πληθώρας τέτοιων συσκευών αναπτύσσεται διαρκώς. Οι βασικότερες από αυτές είναι: δεσμευμένα ιόντα στις λεγόμενες *ιοντικές παγίδες*, φωτόνια σε κοιλότητες, NMR με μόρια, ατέλειες NMR σε στερεό υπόστρωμα, κλπ. Σε όλες τις περιπτώσεις το βασικό εμπόδιο είναι η απειλή της *κβαντικής αποσυνέπειας*, όπου μικρές αλληλεπιδράσεις των qubits με το εξωτερικό περιβάλλον[11] οδηγούν σε μη κβαντική συμπεριφορά χωρίς εναγκαλισμό, κλπ., και επομένως αδυναμία 'λειτουργίας' του κβαντικού υπολογιστή.

ΝΑΝΟ-ΔΙΑΤΑΞΗ QUBIT ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ



Σχ.8.5.*Η διάταξη 'μικρό κουτί ζευγών Cooper' εξασφαλίζει* ***ένα ελεγχόμενο σύστημα δύο καταστάσεων*** *με χρόνους συνέπειας τ της τάξης ns.*

Η ποσότητα 'κλειδί' είναι ο *χρόνος διάρκειας της κβαντικής συνέπειας τ* που ισοδυναμεί με τον χρόνο που το κβαντικό σύστημα διατηρείται στην κατάσταση υπέρθεσης, πριν καταρρεύσει σε μια απλή κατάσταση. Η επιθυμητή δυνατότητα

[11] Αποσυνέπεια μπορεί να έχουμε και από *εσωτερικούς παράγοντες*, π.χ. από τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίων, με τις ταλαντώσεις των ιόντων του πλέγματος (φωνόνια), κλπ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ελέγχου μιας διάταξης πρέπει ταυτοχρόνως να συμβαδίζει με την απαίτηση μεγάλων χρόνων αποσυνέπειας τ. Επειδή όμως χρειαζόμαστε έναν ικανό αριθμό από qubits για την λειτουργία του κβαντικού υπολογιστή ενδεχομένως θα μπορούσε η τεχνολογία των ημιαγωγών να 'ολοκληρώσει' το qubit σε ένα στερεό σώμα, όπως συμβαίνει με τα ολοκληρωμένα κυκλώματα πυριτίου των συνηθισμένων υπολογιστών.

Στα πλαίσια αυτά φαίνεται ιδιαιτέρως υποσχόμενη μια διάταξη όπου ένα *μικρό 'υπεραγώγιμο' κουτί* είναι συνδεδεμένο με ένα *μεγάλο ηλεκτρόδιο* διαμέσου ενός λεπτού μονωτικού οξειδίου πλάτους 1nm (*επαφή Josephson*), καλά απομονωμένο από το εξωτερικό περιβάλλον σε 'ψυγείο' θερμοκρασίας T=30mK. Η διάταξη περιλαμβάνει έναν μεγάλο αριθμό από ζεύγη Cooper όπου σύμφωνα με το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας *τα ηλεκτρόνια είναι δέσμια σε ζεύγη* και περιγράφονται από την ίδια κυματοσυνάρτηση. Η χωρητικότητα του κουτιού είναι τόσο μικρή ώστε η ολική ενέργεια αλλάζει όταν ένα ζεύγος Cooper περνάει με *φαινόμενο σήραγγας* την επαφή Josephson. Το qubit υλοποιείται (Σχ. 8.5) όταν το επιπλέον ζεύγος Cooper είναι στην *κατάσταση υπέρθεσης κουτιού ή ηλεκτρόδιου*, με τις δύο φορτισμένες καταστάσεις να δίνουν τις 0 και 1, αντίστοιχα, που χρειάζονται στην υπέρθεση. Με την εφαρμογή ενός δυναμικού V οι καταστάσεις φορτίου ταλαντώνονται με συχνότητες στην περιοχή μικροκυμάτων. Η διάρκεια κβαντικής συνέπειας σε αυτήν την διάταξη είναι της τάξης $\tau \propto ns$ (νανοδευτερόλεπτα) ενώ δίνεται και η δυνατότητα προετοιμασίας της αρχικής κατάστασης. Ο έλεγχος της χρονικής εξέλιξης γίνεται με χρήση παλμών σε συχνότητες μικροκυμάτων και επιπλέον μπορεί κανείς να διαβάσει την κατάσταση εξόδου. Δυστυχώς, όμως, η μεσοσκοπική διάταξη θα γίνει πρακτικά χρήσιμη μόνο όταν η διάρκεια παραμονής στην κατάσταση υπέρθεσης μεγαλώσει. Μπορεί, όμως, να απαιτηθούν ολόκληρες δεκαετίες μέχρι να επιτευχθεί η παραμονή του συστήματος για αρκετό χρόνο $\tau \propto \mu s$ (μικροδευτερόλεπτα) αντί $\tau \propto ns$ (νανοδευτερόλεπτα) που είναι τώρα, πριν 'καταρρεύσει' στην μία ή την άλλη κατάσταση.

Το ενδιαφέρον για τους κβαντικούς υπολογιστές συνεχώς αυξάνει παγκοσμίως αφού όταν τέτοιοι υπολογιστές κατασκευασθούν αναμένεται πως θα ξεπερνούν τους συμβατικούς υπολογιστές πολλές τάξεις μεγέθους. Επισημαίνεται όμως πως η λειτουργία των κβαντικών υπολογιστών, που είναι πλήρως αντιστρεπτοί και εκμεταλλεύονται τον μαζικό *κβαντικό παραλληλισμό*, δεν έχει επιτευχθεί

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τουλάχιστον μέχρι σήμερα. Μας έδωσε όμως την δυνατότητα να εξερευνήσουμε θεμελιώδη θέματα της κβαντικής φυσικής, όπως τον κβαντικό εναγκαλισμό.

Άσκηση 1. (i) Στον *συμβολισμό Dirac* η κατάσταση $|10\rangle$ γράφεται και $|1\rangle|0\rangle$ ή με το τανυστικό γινόμενο $\otimes$ ως $|1\rangle\otimes|0\rangle$. Αν $|\psi\rangle = (|0\rangle+|1\rangle)/\sqrt{2}$ να υπολογίσετε το $|\psi\rangle^{\otimes 4} = |\psi\rangle\otimes|\psi\rangle\otimes|\psi\rangle\otimes|\psi\rangle$ και να βρείτε πως σχετίζεται με την κατάσταση

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{q}\sum_{x=0}^{q-1}|x\rangle.$$

(ii) Στην *κατάσταση Shor* $\sum_x |x\rangle\,|f(x)\rangle$ όταν $f(x) = a^x \bmod N$ με $a = 6$, $N = 91$, $q = 512$ τι συμβαίνει όταν η μέτρηση του πρώτου καταγραφέα (αριστερό ket) δίνει $x = 34$; Πως προκύπτουν οι πρώτοι παράγοντες του N από αυτό το αποτέλεσμα;

(iii) Ένα μαύρο κουτί δέχεται ως είσοδο το qubit $\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ και δίνει ως έξοδο την κατάσταση $|\psi_1\rangle = \left(\alpha|0\rangle+\beta\sqrt{1-\gamma}\,|1\rangle\right)\oplus\left(\beta\sqrt{\gamma}\,|1\rangle\right)$ με το τανυστικό άθροισμα $\oplus$ να δηλώνει στην έξοδο είτε

$$\left(\alpha|0\rangle+\beta\sqrt{1-\gamma}\,|1\rangle\right)/\sqrt{p_1} \text{ με πιθανότητα } p_1 = |\alpha|^2+(1-\gamma)|\beta|^2$$

είτε

$$|1\rangle \text{ με πιθανότητα } 1-p_1.$$

Αν ένα δεύτερο μαύρο κουτί με είσοδο ενός qubit δίνει έξοδο $|\psi_2\rangle = \sqrt{\eta}\,(\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle)\oplus\sqrt{1-\eta}\,(\alpha|0\rangle-\beta|1\rangle)$ με $\eta = \left(1+\sqrt{1-\gamma}\right)/2$ μπορεί να επινοηθεί κάποια μέτρηση που να διακρίνει τις εξόδους των δύο μαύρων κουτιών όταν έχουν παρόμοιες εισόδους; Αν όχι, γιατί;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

Ολοκληρώματα εκθετικού τύπου: $(Re(a) > 0)$

$$\int_0^\infty dx\, e^{-ax} = -\frac{1}{a}e^{-ax}\Big|_0^\infty = -\frac{1}{a}e^{-a\cdot\infty} + \frac{1}{a}e^{-a\cdot 0} = \frac{1}{a}$$

$$\int_0^\infty dx\, x\, e^{-ax} = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\int_0^\infty dx\, e^{-ax}\right) = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{1}{a^2}$$

$$\int_0^\infty dx\, x^2\, e^{-ax} = (-1)^2\frac{\partial^2}{\partial a^2}\left(\int_0^\infty dx\, e^{-ax}\right) = \frac{\partial^2}{\partial a^2}\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{2!}{a^3}$$

.....

$$\int_0^\infty dx\, x^n\, e^{-ax} = (-1)^n\frac{\partial^n}{\partial a^n}\left(\int_0^\infty dx\, e^{-ax}\right) = (-1)^n\frac{\partial^n}{\partial a^n}\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n = 0,1,2,...$$

Ολοκληρώματα τύπου Gauss: $(a > 0)$

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

$$\int_0^\infty dx\, e^{-ax^2} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dx\, e^{-ax^2} = \frac{1}{2}\left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr\, re^{-ar^2}\right)^{1/2} = \frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{a}\int_0^\infty ds\, e^{-2s}\right)^{1/2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad s = \frac{ar^2}{2}$$

$$\int_0^\infty dx\, x^2\, e^{-ax^2} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dx\, x^2\, e^{-ax^2} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial a}\left(\int_{-\infty}^\infty dx\, e^{-ax^2}\right) = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial a}\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) = \frac{1}{4a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^\infty dx\, x^4\, e^{-ax^2} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dx\, x^4\, e^{-ax^2} = (-1)^2\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial a^2}\left(\int_{-\infty}^\infty dx\, e^{-ax^2}\right) = (-1)^2\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial a^2}\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) = \frac{1.3}{2(2a)^2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

.....

$$\int_0^\infty dx\, x^{2n}\, e^{-ax^2} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dx\, x^{2n}\, e^{-ax^2} = (-1)^n\frac{1}{2}\frac{\partial^n}{\partial a^n}\left(\int_{-\infty}^\infty dx\, e^{-ax^2}\right) = \frac{1.3...(2n-1)}{2(2a)^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad n = 0,1,2,...$$

$\int_0^\infty dx\, x^{2n+1}\, e^{-ax^2} = \frac{n!}{2a^{n+1}}$ ενώ $\int_{-\infty}^\infty dx\, x^{2n+1}\, e^{-ax^2} = 0$ επειδή η συνάρτηση στο ολοκλήρωμα είναι περιττή.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

Παράδειγμα ορθογωνοποίησης Gram-Schmidt.

Τα μοναδιαία διανύσματα $|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle$ κατά μήκος των τριών ακμών ενός κανονικού τετραέδρου με $\langle x_i | x_i \rangle = 1, i = 1,2,3$ υπακούουν στην συνθήκη

$$\langle x_i | x_j \rangle = \cos\frac{\pi}{3} = \frac{1}{2}, \quad i \neq j. \tag{B.1}$$

Από τα $|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle$ να κατασκευασθούν τα ορθοκανονικά $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$.

Λύση:

- Το *πρώτο* ορθοκανονικό διάνυσμα επιλέγεται

$$|e_1\rangle = |x_1\rangle. \tag{B.2}$$

- Το *δεύτερο* θα προκύψει από το κάθετο στο $|e_1\rangle$ με

$$|x_2'\rangle = |x_2\rangle - \langle e_1 | x_2 \rangle |e_1\rangle, \tag{B.3}$$

όπου $\langle e_1 | x_2 \rangle = \langle x_1 | x_2 \rangle = \frac{1}{2}$ ώστε

$$|x_2'\rangle = |x_2\rangle - \frac{1}{2}|e_1\rangle = |x_2\rangle - \frac{1}{2}|x_1\rangle \tag{B.4}$$

και μετά την κανονικοποίηση

$$\begin{aligned} \langle x_2' | x_2' \rangle &= \left(\langle x_2 | - \frac{1}{2}\langle x_1 | \right)\left(|x_2\rangle - \frac{1}{2}|x_1\rangle \right) \\ &= 1 - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{3}{4} \end{aligned} \tag{B.5}$$

έχουμε

$$|e_2\rangle = |x_2'\rangle / (\sqrt{3}/2) \Rightarrow |e_2\rangle = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(|x_2\rangle - \frac{1}{2}|x_1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(2|x_2\rangle - |x_1\rangle). \tag{B.6}$$

- Το *τρίτο* διάνυσμα θα προκύψει από

$$|x_3'\rangle = |x_3\rangle - \langle e_1 | x_3 \rangle |e_1\rangle - \langle e_2 | x_3 \rangle |e_2\rangle \tag{B.7}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου $\langle e_1|x_3\rangle = \langle x_1|x_3\rangle = \frac{1}{2}$ και $\langle e_2|x_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(2\langle x_2| - \langle x_1|)|x_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2\sqrt{3}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}$ ώστε

$$\begin{aligned} |x_3'\rangle &= |x_3\rangle - \frac{1}{2}|e_1\rangle - \frac{1}{2\sqrt{3}}|e_2\rangle = |x_3\rangle - \frac{1}{2}|x_1\rangle - \frac{1}{3}|x_2\rangle + \frac{1}{6}|x_1\rangle \\ &= |x_3\rangle - \frac{1}{3}|x_1\rangle - \frac{1}{3}|x_2\rangle \end{aligned} \tag{B.8}$$

και μετά την κανονικοποίηση

$$\begin{aligned} \langle x_3'|x_3'\rangle &= \left(\langle x_3| - \frac{1}{3}\langle x_1| - \frac{1}{3}\langle x_2|\right)\left(|x_3\rangle - \frac{1}{3}|x_1\rangle - \frac{1}{3}|x_2\rangle\right) \\ &= 1 - \frac{1}{6} - \frac{1}{6} - \frac{1}{6} + \frac{1}{9} + \frac{1}{18} - \frac{1}{6} + \frac{1}{18} + \frac{1}{9} = \frac{2}{3} \end{aligned} \tag{B.9}$$

έχουμε

$$|e_3\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(|x_3\rangle - \frac{1}{3}|x_2\rangle - \frac{1}{3}|x_1\rangle\right). \tag{B.10}$$

Άρα, το ορθοκανονικό σύνολο γράφεται

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= |x_1\rangle \\ |e_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(2|x_2\rangle - |x_1\rangle) \\ |e_3\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2}\left(|x_3\rangle - \frac{1}{3}|x_2\rangle - \frac{1}{3}|x_1\rangle\right) \end{aligned} \tag{B.11}$$

και αντιστρόφως

$$\begin{aligned} |x_1\rangle &= |e_1\rangle \\ |x_2\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2}|e_2\rangle + \frac{1}{2}|e_1\rangle \\ |x_3\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|e_3\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}}|e_2\rangle + \frac{1}{2}|e_1\rangle \end{aligned} \tag{B.12}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ

Απόδειξη της σχέσης αβεβαιότητας $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$.

Η σχέση αβεβαιότητας $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$ για τα παρατηρήσιμα μεγέθη A,B γράφεται και $\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle|$ επειδή για τις αβεβαιότητες ισχύει γενικά[1] $\Delta A = +\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}$.

Απόδειξη:

- Η ανισότητα Schwarz

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \tag{Γ.1}$$

αποδεικνύεται από την ταυτότητα

$$(\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geq 0, \quad \lambda \in C \tag{Γ.2}$$

που ισχύει για $\forall\lambda \in C$ άρα και για $\lambda = -\langle\beta|\alpha\rangle/\langle\beta|\beta\rangle$

$$\begin{aligned}
&\left(\langle\alpha| - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\right)\left(|\alpha\rangle - \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}|\beta\rangle\right) \\
&= \langle\alpha|\alpha\rangle - -\frac{\langle a|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\alpha\rangle - \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\alpha|\beta\rangle + \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\beta\rangle \geq 0, \\
&\Leftrightarrow \quad \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle - |\langle a|\beta\rangle|^2 \geq 0
\end{aligned} \tag{Γ.3}$$

που είναι η (Γ.1).

- Η μέση τιμή ενός ερμιτειανού τελεστή $A = A^+$ είναι πραγματική ενώ ενός αντι-ερμιτειανού τελεστή $C = -C^+$ είναι φανταστική.

- Από την (Γ.1) με

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= \Delta A|\ \rangle \\
|\beta\rangle &= \Delta B|\ \rangle
\end{aligned} \tag{Γ.4}$$

[1] Γράφουμε και $(\Delta A)^2 = \langle(\Delta A)^2\rangle$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου το κενό τονίζει την δυνατότητα οποιουδήποτε *ket* έχουμε

$$\left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta B)^2 \right\rangle \geq |\langle \Delta A \, \Delta B \rangle|^2 \tag{Γ.5}$$

για τους επίσης ερμιτειανούς $\Delta A = A - \langle A \rangle$, $B = B - \langle B \rangle$. Το δεξί μέλος στην (Γ.5) γράφεται με το άθροισμα *μεταθέτη* και *αντιμεταθέτη*

$$\Delta A \, \Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\} \tag{Γ.6}$$

με τον *μεταθέτη* $[\Delta A, \Delta B] = [A, B]$ που είναι *αντι-ερμιτειανός*

$$[A,B]^+ = (AB - BA)^+ = BA - AB = -[A,B] \tag{Γ.7}$$

και τον *αντιμεταθέτη* $\{\Delta A, \Delta B\} = \{A, B\}$ που είναι *ερμιτειανός*

$$\{A,B\}^+ = (AB + BA)^+ = BA + AB = \{A,B\} \; . \tag{Γ.8}$$

Άρα, σύμφωνα με τα παραπάνω το δεξί μέλος γράφεται

$$|\langle \Delta A \, \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle [A,B] \rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2 \quad , \tag{Γ.9}$$

που αποδεικνύει την αρχική ανισότητα αφού ο δεύτερος όρος με τον αντιμεταθέτη στην (Γ.9) μόνο ισχυρότερη μπορεί να κάνει την ανισότητα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ

Κυματοσυναρτήσεις ατόμου τύπου υδρογόνου με πυρηνικό φορτίο *Ze* για *n*=1, 2, 3:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a}\right)e^{-Zr/2a}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = \frac{\mp1}{8(\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81(3\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(27-18\frac{Zr}{a}+2\frac{Z^2r^2}{a^2}\right)e^{-Zr/3a}$$

$$\psi_{310} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6-\frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\cos\theta$$

$$\psi_{31\pm1} = \frac{\mp1}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6-\frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81(6\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

$$\psi_{32\pm1} = \frac{\mp1}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}\ .$$

Οι αντίστοιχες τροχιακές κυματοσυναρτήσεις είναι

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$\psi_{2s} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a}\right)e^{-Zr/2a}$$

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\cos\theta$$

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\cos\varphi$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\sin\varphi$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\psi_{3s} = \frac{1}{81(3\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(27 - 18\frac{Zr}{a} + 2\frac{Z^2r^2}{a^2}\right)e^{-Zr/3a}$$

$$\psi_{3p_z} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\cos\theta$$

$$\psi_{3p_x} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\varphi$$

$$\psi_{3p_y} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\sin\theta\sin\varphi$$

$$\psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2}r^2e^{-Zr/3a}\sin^2\theta\sin 2\varphi$$

$$\psi_{3d_{xz}} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2}r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$$

$$\psi_{3d_{yz}} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2}r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$$

$$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2}r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos 2\varphi$$

$$\psi_{3d_{z^2}} = \frac{1}{81(6\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2}r^2e^{-Zr/3a}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ε

ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΧΑΟΣ

Ε.1. Εισαγωγή

Το χάος στην κβαντική αποκλείεται λόγω γραμμικότητας της εξίσωσης Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \tag{E.1}$$

που περιγράφει την χρονική εξέλιξη της κβαντικής κατάστασης ενός συστήματος $\Psi(\vec{r},t)$ σε χώρο $\vec{r}$ και χρόνο t παρουσία χρονικά ανεξάρτητου δυναμικού $V(\vec{r})$, όπως προκύπτει από την δράση του Χαμιλτονιανού τελεστή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}). \tag{E.2}$$

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\vec{r},t)$ περιέχει όλη την πληροφορία για κβαντικά σωμάτια αφού περιγράφει τις στατιστικές ιδιότητες από τα παρόμοια συστήματα ενός κβαντικού 'ensemble' με πυκνότητα πιθανότητας να βρεθούν τα σωμάτια με συγκεκριμένες συντεταγμένες θέσης $\vec{r}$ την χρονική στιγμή t το τετράγωνο του μέτρου $P(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$. Στην περίπτωση που στο δυναμικό $V(\vec{r})$ δεν υπάρχει χρονική εξάρτηση αρκεί η λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης

$$H\psi_j(\vec{r}) = E_j\psi_j(\vec{r}) \tag{E.3}$$

για τις ιδιοτιμές ενέργειας E_n και τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(\vec{r})$, που αποτελούν τις στάσιμες καταστάσεις του συστήματος. Η πλήρης λύση της χρονικής εξέλιξης σε πεπερασμένο χρόνο t περιγράφεται από την μορφή κυματοπακέτου με τον γραμμικό συνδυασμό

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_j c_j e^{-iE_jt/\hbar}\psi_j(\vec{r}) \tag{E.4}$$

και c_j τους συντελεστές που δίνουν τα αντίστοιχα πλάτη πιθανότητας να ληφθεί η ιδιοτιμή E_j σε μια μέτρηση.

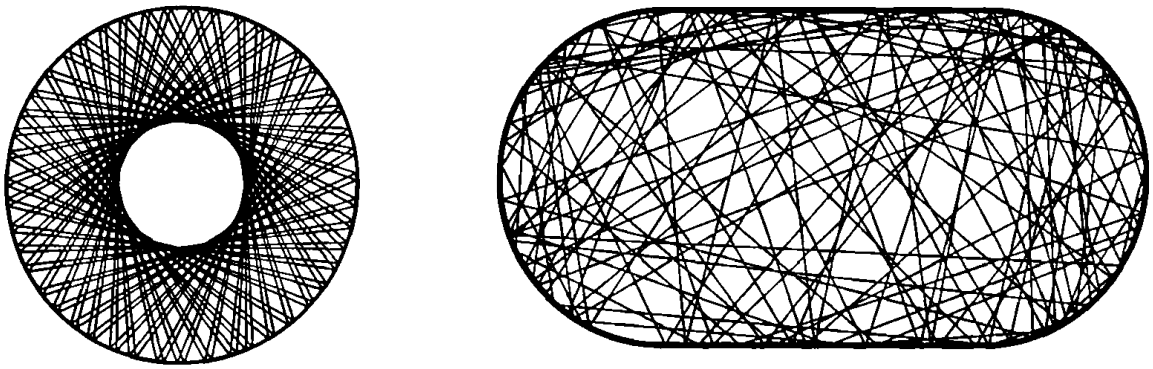
Από τα παραπάνω μπορεί να εξαχθεί το συμπέρασμα πως η κβαντική φυσική χαρακτηρίζεται από γραμμική αιτιοκρατική χρονική εξέλιξη, όπου μια παρούσα κατάσταση του συστήματος $\Psi(\vec{r},t)$ καθορίζει με μοναδικό τρόπο την μελλοντική της. Επομένως, στην

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κίνηση του κυματοπακέτου (Ε.4) αποκλείεται το *κλασσικό χάος*, γνωστό από ιδιότητες ανάμιξης, θετικού εκθέτη Lyapunov, κλπ. Θα αναζητήσουμε όμως κβαντικό χάος αποκλειστικά στο χρονικά ανεξάρτητο πρόβλημα (Ε.3), κυρίως στην στατιστική συμπεριφορά που επιδεικνύουν οι ιδιοτιμές E_j και οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_j(\vec{r})$ της Χαμιλτονιανής H [1,2,3,4,5,6]. Επιπλέον, ανάμεσα από το χάος και την τάξη εμφανίζεται το *κρίσιμο κβαντικό χάος*. Αυτό συμβαίνει σε ενδιάμεσα συστήματα που είναι ψευτοχαοτικά στο κλασσικό όριο καθώς και σε μεσοσκοπικά κβαντικά συστήματα παρουσία τυχαίου δυναμικού στο σημείο της μετάβαση μετάλλου-μονωτή[7,8].

Ε.2. Κβαντικό χάος

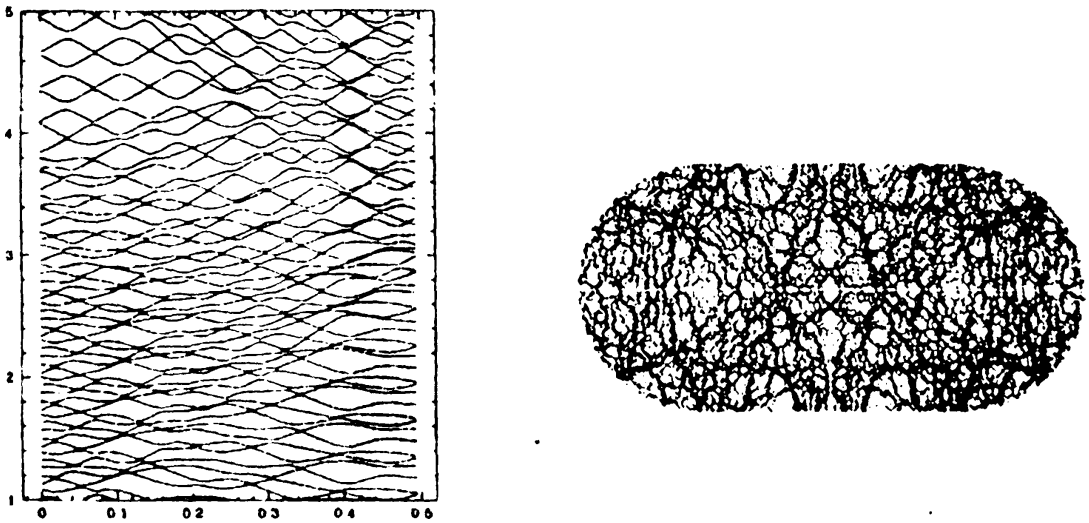
Τα τελευταία χρόνια δίνεται έμφαση στην στατιστική περιγραφή των ιδιοτιμών ενέργειας και των ιδιοσυναρτήσεων σε κβαντικά συστήματα από την (Ε.3), όπως: (i) σωμάτια που είναι περιορισμένα σε δομές *περίεργης γεωμετρίας* (π.χ. διδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού τύπου σταδίου, γνωστό ως κβαντικό μπιλιάρδο σταδίου) (ii) κίνηση παρουσία *τυχαίου δυναμικού*. Το πεδίο έρευνας που αφορά αυτά τα προβλήματα είναι εξαιρετικά δραστήριο και έχει βασικό σκοπό την συμφιλίωση του κβαντικού χάους με την μεσοσκοπική φυσική των άμορφων συστημάτων, όπου τα κβαντικά φαινόμενα είναι έκδηλα [1-6].



Σχ. Ε.1. *Η κλασσική κίνηση στα διδιάστατα μπιλλιάρδα είναι* ***περιοδική*** *όταν το μπιλλιάρδο έχει σχήμα κύκλου και* ***χαοτική*** *όταν έχει σχήμα σταδίου.*

(i) Σε διδιάστατα συστήματα όπως στο Σχ. Ε.1 η κλασσική κίνηση είναι *περιοδική* όταν το σχήμα είναι *κυκλικής μορφής* ενώ είναι *χαοτική* όταν το σχήμα είναι *μορφής σταδίου*. Στην χαοτική περίπτωση, όπου δύο παράλληλες γραμμές μήκος a ενώνονται με δύο ημικύκλια ακτίνας R για να αποτελέσουν σχήμα σταδίου, οι κλασσικές τροχιές αποκλίνουν εκθετικά με διαφορά γωνίας δύο τροχιών $\Delta\theta(t) = e^{\gamma t}\,\Delta\theta(0)$ την χρονική στιγμή t, σε σχέση

με την διαφορά γωνίας $\Delta\theta(0)$ την χρονική στιγμή t=0. Ο *εκθέτης Lyapunov* $\gamma \sim (a/R)^{1/2} > 0$ είναι μη μηδενικός όταν $a \neq 0$ (γεωμετρία σταδίου) ενώ όταν $a = 0$ το σχήμα του σταδίου μεταπίπτει σε αυτό του κύκλου και η κίνηση παύει να είναι χαοτική με εκθέτη $\gamma = 0$.

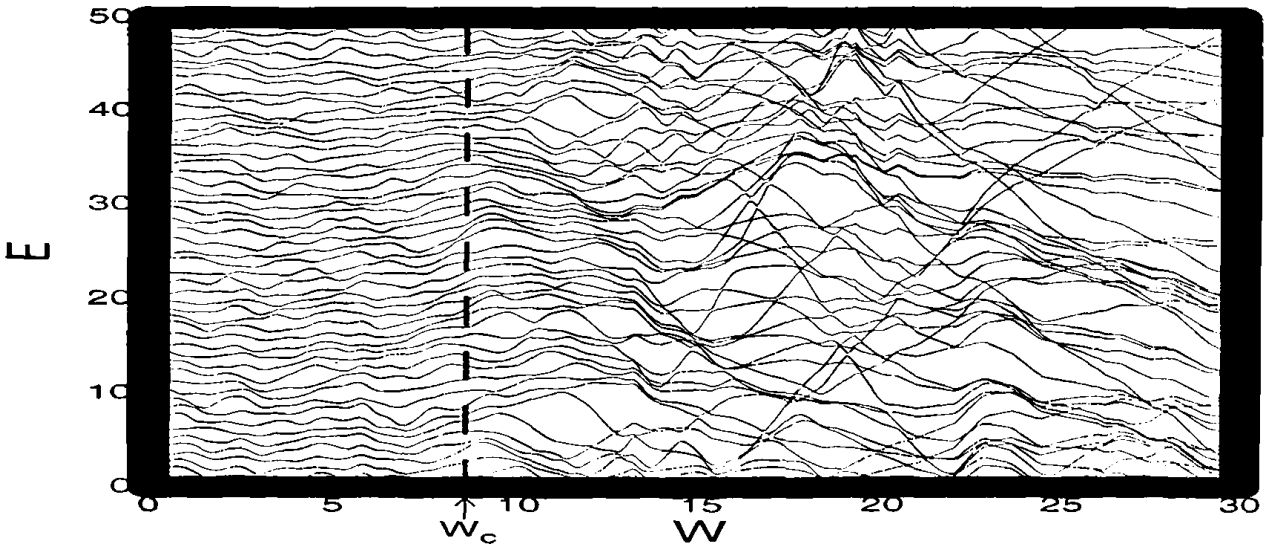


Σχ. Ε.2. *Οι **χαοτικές ενεργειακές στάθμες** (αριστερά) στο μπιλιάρδο σταδίου δείχνουν τα βασικά χαρακτηριστικά του κβαντικού χάους: άπωση γειτονικών σταθμών (οι ιδιοτιμές έρχονται πολύ κοντά αλλά δεν ενώνονται) και φασματική ακαμψία (συνολική κανονικότητα στο φάσμα). Οι **χαοτικές ιδιοσυναρτήσεις** (δεξιά) έχουν κατανομές πιθανότητας με χαρακτηριστικές 'ουλές' που αντιστοιχούν σε υποκείμενες κλασσικές περιοδικές τροχιές.*

Η χρονική εξέλιξη ενός χαοτικού συστήματος στην κλασσική μηχανική είναι *σχεδόν παρόμοια* με το αποτέλεσμα της ρίψης ένός νομίσματος (άλλοτε κορώνα άλλοτε γράμματα), δηλαδή πιθανοκρατική. Στο κβαντικό χάος είναι οι ενεργειακές ιδιοτιμές που κατανέμονται με στατιστικό (εργοδικό) τρόπο και περιγράφονται πιθανοκρατικά. Π. χ. οι ενέργειες που προκύπτουν από την λύση της εξίσωσης Schrödinger σε ένα *διδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι* με πυθμένα μπιλιάρδο τύπου σταδίου δείχνουν μια κανονικότητα που περιγράφεται από την γνωστή ως *στατιστική Wigner*, που χαρακτηρίζεται από άπωση ενεργειακών σταθμών και φασματική ακαμψία (Σχ. Ε.2). Αντιθέτως για κανονικό (μη χαοτικό) μπιλιάρδο κυκλικού σχήματος οι ενέργειες είναι ακανόνιστες (τυχαίες!) με διακυμάνσεις που περιγράφονται από την γνωστή ως *στατιστική Poisson*. Με άλλα λόγια στο χαοτικό φάσμα οι ενέργειες είναι συσχετισμένες, '*επικοινωνούν μεταξύ τους*', ενώ στο κανονικό ενεργειακό φάσμα είναι τυχαίες και '*δεν μιλούν μεταξύ τους*'. Τα χαρακτηριστικά του κβαντικού χάους στις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις φαίνονται στο Σχ. Ε.2.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το κβαντικό χάος είναι άρρηκτα συνδεδεμένο με το αινιγματικό αντικείμενο των μαθηματικών γνωστό ως *συνάρτηση ζήτα* $\zeta(s)$ *του Riemann*. Οι ρίζες της $\zeta(s)$ καθορίζουν τις διακυμάνσεις στην πυκνότητα των *πρώτων αριθμών* 2, 3, 5, 7, ... που διαιρούνται μόνο με το εαυτό τους και την μονάδα. Επιπλέον, η διάσημη *εικασία του Riemann* προβλέπει πως όλες οι μη τετριμμένες ρίζες της $\zeta(s)$ έχουν πραγματικό μέρος 1/2 με $\zeta(1/2+iE_j)=0,\ E_j \in \Re$. Η υπόθεση αυτή έχει επαληθευθεί μόνο αριθμητικά με υπολογισμούς ενός δισεκατομυρίου ριζών περίπου. Η εικασία του Riemann που αφορά τους πρώτους αριθμούς αποδεικνύεται αυτομάτως *αν αποδειχθεί πως τα μιγαδικά μέρη* E_j *είναι οι ενέργειες ενός κβαντικού συστήματος, δηλαδή ιδιοτιμές μιας εξίσωσης* Schrödinger. Αυτό δεν είναι διόλου απίθανο αφού οι E_j στην συνάρτηση $\zeta(s)$ εμφανίζουν όλες τις ιδιότητες των ιδιοτιμών ενός χαοτικού συστήματος, όπως άπωση σταθμών και φασματική ακαμψία.



Σχ. Ε.3. *Οι ενέργειες ενός ηλεκτρονίου σε δυναμικό με τυχαιότητα W. Η μεταλλική φάση* $W < W_c$ *χαρακτηρίζεται από* ***κβαντικό χάος*** *(αριστερά) με εκτεταμένες ιδιοσυναρτήσεις ενώ στην μονωτική φάση* $W > W_c$ *παρατηρείται* ***ολοκληρωσιμότητα*** *με εντοπισμένες ιδιοσυναρτησεις (δεξιά). Το κρίσιμο κβαντικό χάος αφορά το σημείο μετάβασης μετάλλου-μονωτή* $W = W_c$.

(ii) Η κβαντική κίνηση στα άμορφα πλεγματικά συστήματα παρουσία τυχαίου δυναμικού τυχαιότητας W [7,8], π. χ. των ηλεκτρονίων σε μονοδιάστατα πλέγματα χώρου με την διακριτή εξίσωση διαφορών

$$c_{n-1} + c_{n+1} + V_n c_n = E c_n, \quad c_0 = 0, \quad n = 1,2,3,\cdots, \tag{E.5}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου E είναι η ενέργεια του συστήματος και c_n τα πλάτη πιθανότητας στην θέση n από την αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση. Η γραμμική κβαντική απεικόνιση (Ε.5) παρουσία *τυχαίου* (μη περιοδικού) δυναμικού V_n από μια στατιστική κατανομή εύρους W μπορεί να θεωρηθεί ως μια *στοχαστική απεικόνιση* με πλάτη c_n που αυξάνουν ή φθίνουν εκθετικά $|c_n| \approx \exp(\pm|n|/\xi)$ όπου ο ρυθμός εκθετικής μείωσης προσδιορίζεται από τα *μήκη εντοπισμού* ξ. Για τυχαίο δυναμικό οι λύσεις μπορεί να έχουν πεπερασμένο μήκος εντοπισμού ξ που συνεπάγεται το γνωστό φαινόμενο του *εντοπισμού του Anderson* της μεσοσκοπικής φυσικής με τα πλάτη πιθανότητας c_n σημαντικά μόνο σε μια περιοχή του χώρου ακτίνας ίση με το μήκος εντοπισμού ξ και *εκθετικά μικρά* στην υπόλοιπη περιοχή. Στο Σχ. Ε.3. φαίνονται οι ενεργειακές ιδιοτιμές που προκύπτουν από την κίνηση ηλεκτρονίων σε δυναμικό τυχαιότητας W. *Οι ενέργειες είναι συσχετισμένες* με παρουσία κβαντικού χάους στην περιοχή μετάλλου (αριστερά), ασυσχέτιστες για τον μονωτή (δεξιά) και εμφανίζουν κρίσιμο χάος στο ενδιάμεσο σημείο W_c της μετάβασης μετάλλου-μονωτή.

Χάος:

Για μικρή τυχαιότητα ή υψηλές διαστάσεις χώρου οι ιδιοσυναρτήσεις εκτείνονται σε όλο τον διαθέσιμο χώρο (είναι *εκτεταμένες* με $\xi = \infty$) ενώ οι αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας είναι συσχετισμένες και εμφανίζουν φαινόμενα όπως *άπωση* μεταξύ των γειτονικών ενεργειών και φασματική *ακαμψία*. Οι ιδιότητες αυτές συμπίπτουν με την συμπεριφορά των χαρακτηριστικών ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων σε στατιστικά ensembles από *τυχαίες μήτρες* ή υπολογισμούς σε κβαντικά συστήματα που είναι χαοτικά στο κλασσικό όριο, όπως μπιλιάρδα σχήματος σταδίου. Το συμπαντικό αυτό όριο είναι γνωστό ως *στατιστική Wigner* και χαρακτηρίζει κβαντικά συστήματα με χαοτική κλασσική δυναμική. Είναι αυτό που αποκαλούμε *κβαντικό χάος*.

Ολοκληρωσιμότητα:

Στους άμορφους μονωτές μεγάλης τυχαιότητας ή μικρής διάστασης οι καταστάσεις είναι *εκθετικά εντοπισμένες* με πεπερασμένο ξ ενώ το ενεργειακό φάσμα αποτελείται από ενεργειακές στάθμες που εμφανίζουν *έλξη* αντί άπωσης και είναι *τυχαία* κατανεμημένες. Οι ιδιότητες του ενεργειακού φάσματος είναι σχεδόν παρόμοιες με αυτές των τυχαίων αριθμών. Αυτό το όριο χαρακτηρίζει τους μονωτές και τα ολοκληρώσιμα κβαντικά συστήματα

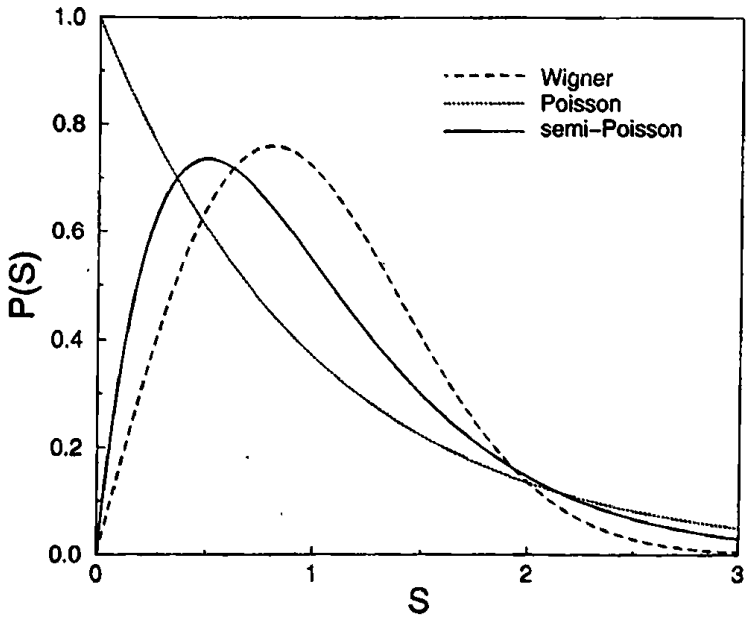
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(μπιλιάρδα κυκλικού τύπου) είναι γνωστό ως η *στατιστική Poisson*. Αυτό είναι το *κανονικό ή ολοκληρώσιμο* όριο.

Κρίσιμο χάος:

Στην ενδιάμεση περίπτωση της μετάβασης μετάλλου-μονωτή υπάρχει ένα νέο όριο κλιμάκωσης για τις διακυμάνσεις στο ενεργειακό φάσμα. Στο όριο αυτό οι ιδιοσυναρτήσεις δεν είναι ούτε εκτεταμένες ούτε εντοπισμένες αλλά εμφανίζουν *πολυμορφοκλασματική* συμπεριφορά που χαρακτηρίζεται από διαστάσεις D_q^{ψ}, $q \in [-\infty,+\infty]$. Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας έχουν πολύπλοκη στατιστική συμπεριφορά με διακυμάνσεις που εξαρτώνται από τις οριακές συνθήκες με εξάρτηση που παραμένει στο θερμοδυναμικό όριο. Η συμπαντική περιγραφή που εμφανίζεται σε αυτή την περίπτωση είναι υβριδικού χαρακτήρα Wigner και Poisson μαζί και την ονομάζουμε *semi-Poisson*. Η semi-Poisson είναι η πιθανή στατιστική που περιγράφει το *κρίσιμο κβαντικό χάος*.

Ε.3. Αναγνώριση του χάους στην κατανομή των ενεργειακών σταθμών



Σχ. Ε.4. *Οι κατανομές $P(S)$ των γειτονικών ενεργειακών σταθμών για κβαντικό χάος (Wigner), ολοκληρωσιμότητα (Poisson) και κρίσιμο κβαντικό χάος (semi-Poisson). Οι Wigner, semi-Poisson δείχνουν άπωση σταθμών $P(S) \propto S$ για μικρό S ενώ η Poisson έλξη με $\exp(-S) \approx 1$ για μικρό S.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το απλούστερο στατιστικό μέτρο που αναδεικνύει την παρουσία ή μη του κβαντικού χάους σε ένα κβαντικό σύστημα είναι η στατιστική κατανομή $P(S)$ των κοντινότερων ενεργειακών σταθμών (ιδιοτιμών ενέργειας) $S_i = E_{i+1} - E_i$. Είναι σημαντικό η κατανομή $P(S)$ να είναι κανονικοποιημένη επιπλέον με μέση τιμή $\langle S \rangle = 1$. Έτσι, μελετώνται με συμπαντικό τρόπο μόνο οι διακυμάνσεις στο ενεργειακό φάσμα χωρίς να επηρεάζονται από την εκάστοτε μέση πυκνότητα καταστάσεων ή το μέγεθος του συστήματος. Από την θεωρία[7-9] τρεις δυνατές κατανομές αντιστοιχούν στα παραπάνω ασυμπτωτικά όρια (Σχ. Ε.4).

Στην περίπτωση *κβαντικού χάους* η κατανομή με άπωση και ακαμψία είναι τύπου

Wigner $$P(S) = \frac{\pi}{2} S \exp(-\frac{\pi}{4} S^2), \qquad (E.6)$$

για τα κανονικά *ολοκληρώσιμα ή κανονικά* συστήματα με τυχαίο φάσμα έχει την μορφή

Poisson $$P(S) = \exp(-S), \qquad (E.7)$$

ενώ την ενδιάμεση περίπτωση του *κρίσιμου κβαντικού χάους* εμφανίζονται και τα δύο είδη, άπωση λόγω του γραμμικού όρου S τύπου Wigner και ο εκθετικός όρος $\exp(-S)$ τύπου Poisson, που περιγράφεται από την

Semi-Poisson $$P(S) = 4S\exp(-2S) \quad . \qquad (E.8)$$

Οι τρεις κατανομές (Ε.6,7,8) περιγράφουν την κίνηση στα ολοκληρώσιμα, χαοτικά και ψευδο-ολοκληρώσιμα μπιλιάρδα και παρουσιάζονται στο Σχ.Ε.4.

Η στατιστική των κβαντικά χαοτικών συστημάτων προσομοιάζει με τις μαθηματικές λύσεις (ιδιοτιμές-ιδιοσυναρτήσεις) που προκύπτουν από την διαγωνοποίηση τυχαίων μητρών. Τα *στατιστικά ensemble από τυχαίες* $N \times N$ *μήτρες* που επιλύονται στο όριο $N \to \infty$ ορίζονται: (i) *ορθογώνια κατηγορία* όπου οι τυχαίες μήτρες είναι πραγματικές, (ii) *μοναδιαία κατηγορία* με μιγαδικές ερμιτειανές (παρουσία μαγνητικού πεδίου) και (iii) *συμπλεκτική κατηγορία* όταν είναι κουατερνιονικού τύπου (παρουσία σκέδασης σπιν-στροφορμής). Οι παραπάνω κατηγορίες συμπαντικότητας χαρακτηρίζονται από τον δείκτη συμπαντικότητας $\beta = 1, 2, 4$, αντίστοιχα, με βαθμό άπωσης για μικρές ενεργειακές αποστάσεις

$$P(S) \sim S^{\beta}, \quad S \to 0 \quad . \qquad (E.9)$$

Είναι ενδιαφέρον να δούμε πως ακόμη και στην περίπτωση μιας 2×2 μήτρας, π. χ. για την ορθογώνια κατηγορία β=1 η *πραγματική συμμετρική μήτρα*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix} \tag{E.10}$$

με τυχαία (πραγματικά) στοιχεία μήτρας H_{11}, H_{12}, H_{22} γκαουσσιανής μορφής, δίνει διαφορά των δύο ιδιοτιμών

$$S = E_2 - E_1 = \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}{}^2}\,. \tag{E.11}$$

Η στατιστική κατανομή της ενεργειακής απόστασης S προκύπτει από το διπλό ολοκλήρωμα

$$P(S) = \iint dxdy\, W(x,y)\, \delta\left(S - \sqrt{x^2 + y^2}\right) \tag{E.12}$$

όπου είναι γνωστές οι κατανομές των τυχαίων μεταβλητών $x = H_{11} - H_{22}$, $y = 2H_{12}$ με επίσης γκαουσσιανή την συνάρτηση δύο μεταβλητών $W(x,y) \sim \exp\left[-\left(x^2 + y^2\right)\right]$. Το ολοκλήρωμα υπολογίζεται εύκολα σε κυκλικές συντεταγμένες $dxdy = r\, drd\theta$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ και μετά από κανονικοποίηση δίνει την κατανομή Wigner (E.6) που χαρακτηρίζει το κβαντικό χάος.

E.4. Κβαντικό χάος και κρίσιμο χάος σε τυχαίο και οιονεί-περιοδικό δυναμικό

Η απλούστερη περίπτωση *σταθερού μονοδιάστατου δυναμικού* $V_n = V_0$, για $\forall n$, συνιστά ένα σύστημα περιοδικότητας μονάδα $V(n) = V(n+1)$ όπου η κβαντική εξίσωση (E.5) λύνεται με επίπεδα κύματα $c_n = e^{i\varphi n}$ και δίνει το συνεχές φάσμα ιδιοτιμών ενέργειας

$$E = V_0 + 2\cos\varphi, \quad \varphi \in [-\pi, \pi] \tag{E.13}$$

που αποτελεί μια συνεχή ενεργειακή ζώνη μεταξύ $V_0 - 2$ και $V_0 + 2$ (Κεφ. 6.5.1).

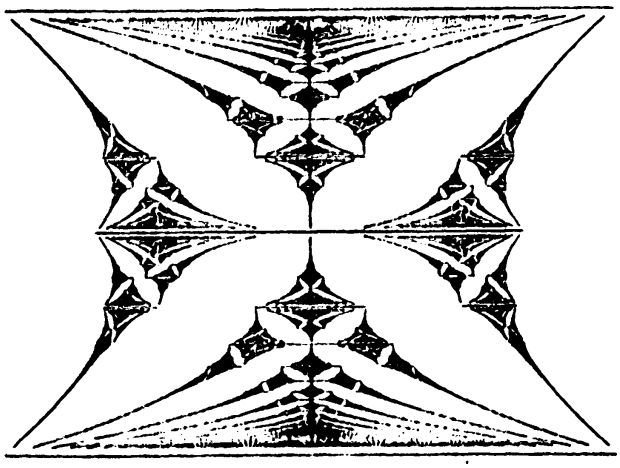
Στην περίπτωση *δυναμικού με περιοδικότητα* N η λύση που ικανοποιεί την $V(n) = V(n+N)$ ανάγεται στην διαγωνοποίηση μιας $N \times N$ μήτρας με τις επιπλέον οριακές συνθήκες $H_{1,N} = H^*_{N,1} = \exp(i\varphi)$ στα στοιχεία που συνδέουν τα δύο άκρα της αλυσίδας και καθορίζονται από την ροή φ που την διαπερνά. Οι διαφορετικές τιμές της φ δίνουν διαφορετικά σύνολα N ιδιοτιμών και συνιστούν N ενεργειακές ζώνες με $N-1$ ενεργειακά χάσματα. Για $\varphi = 0, \pi$ τα οριακά στοιχεία μήτρας $H_{1,N} = H_{N,1} = \pm 1$ αντιστοιχούν σε περιοδικές και αντιπεριοδικές οριακές συνθήκες αντιστοίχως και καθορίζουν τα άκρα των N ενεργειακών ζωνών. Επομένως για την περίπτωση $N-$περιοδικού δυναμικού ο καθορισμός N ενεργειακών ζωνών δίνεται από την διαγωνοποίηση με τα δύο είδη οριακών συνθηκών.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το δυναμικό $V_n = \lambda\cos(2\pi\sigma n + \nu)$ πλάτους λ και φάσης ν όταν ο σ είναι άρρητος αριθμός δεν είναι ούτε περιοδικό ούτε τυχαίο αλλά *οιονεί-περιοδικό δυναμικό*. Η αντίστοιχη μονοδιάστατη εξίσωση

$$c_{n-1} + c_{n+1} + \lambda\cos(2\pi\sigma n + \nu)c_n = E c_n, \quad c_0 = 0, \quad n = 1,2,3,\cdots, \tag{E.14}$$

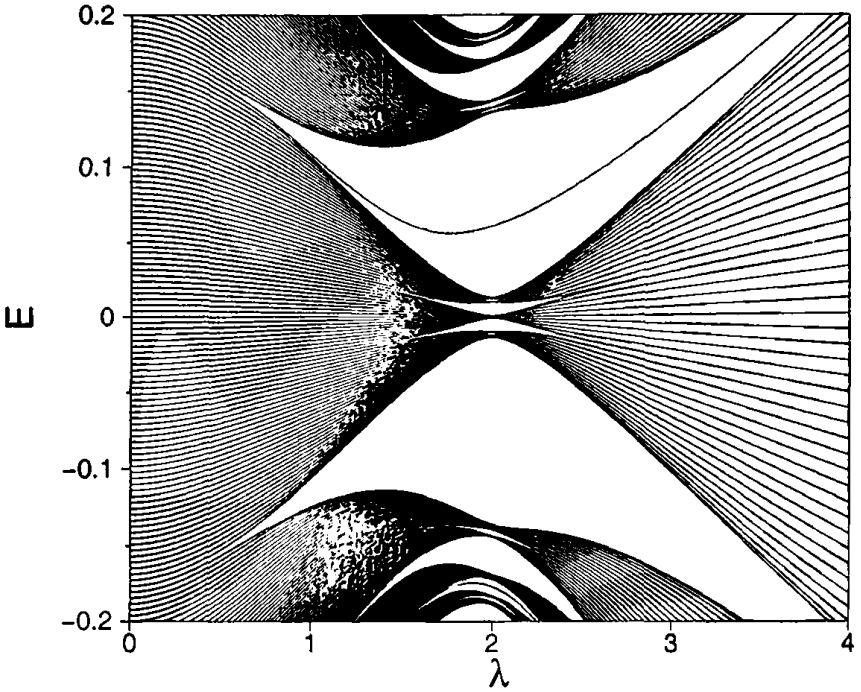
είναι η γνωστή *εξίσωση Harper* που για $\lambda = 2$ περιγράφει ένα σωμάτιο σε διδιάστατο πλέγμα, παρουσία κάθετου μαγνητικού πεδίου με σ κβάντα ροής ανά στοιχειώδη πλεγματική πλακέτα[10]. Το πρόβλημα δεν λύνεται σε αυτό το δυναμικό λόγω του *άρρητου αριθμού* σ που εισάγει ασυμμετρία στην εξίσωση Harper. Όμως ο άρρητος σ επιδέχεται προσεγγίσεις με διαδοχικούς ρητούς $\sigma = M/N$, π.χ. για τον χρυσό μέσο $\sigma = \left(\sqrt{5}-1\right)/2$ είναι εύκολο να δειχθεί ότι οι διαδοχικές ρητές προσεγγίσεις είναι οι λόγοι $\sigma \approx 2/3, 3/5, 5/8, 8/13, 13/21, 21/33, \cdots$ από αριθμούς Fibonacci. Με αυτόν τον τρόπο κάθε ρητή προσέγγιση $\sigma = M/N$ εξασφαλίζει την συνθήκη $N-$περιοδικότητας $V(n) = V(n+N)$ λόγω της ισότητας $\cos(2\pi Mn/N) = \cos(2\pi Mn/N + 2\pi M)$. Προφανώς για $N \to \infty$ επιτυγχάνεται το όριο του άρρητου αριθμού σ όπου παύει πλέον να υπάρχει περιοδικότητα στην εξ. (Ε.14) αφού το δυναμικό επαναλαμβάνεται μόνο μετά από άπειρες θέσεις N. Άρα, η διαγωνοποίηση διαδοχικά αυξανόμενης διάστασης $N \times N$ Χαμιλτονιανών, με περιοδικές και αντιπεριοδικές οριακές συνθήκες, εξασφαλίζει την επίλυση των προβλημάτων $N-$περιοδικότητας στις ρητές προσεγγίσεις.



Σχ. Ε.5. *Η πεταλούδα του Hofstadter. Στον κατακόρυφο άξονα είναι οι ρητές τιμές του σ από 0 μέχρι 1 και στον οριζόντιο άξονα οι ενεργειακές ζώνες. Π. χ. για σ=2/3 και σ=1/3 υπάρχουν 3 ζώνες ενώ για σ=3/4 και σ=1/4 υπάρχουν 4 ζώνες, κλπ.*

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η περίπτωση $\lambda = 2$ είναι η πιο ενδιαφέρουσα επειδή αντιστοιχεί στο κρίσιμο σημείο της μετάβασης μετάλλου-μονωτή με ιδιοσυναρτήσεις που δεν είναι ούτε εκτεταμένες ούτε εντοπισμένες αλλά παρουσιάζουν εξωτικές μορφοκλασματικές ιδιότητες[12-14]. Οι *μορφοκλασματικές διαστάσεις των ιδιοσυναρτήσεων* υπολογίζονται από το μέτρο $|c_n|^2$ συναρτήσει του δείκτη θέσης n. Για κανονικοποιημένο μέτρο σε N θέσεις από την σχέση κλιμάκωσης των στατιστικών ροπών



Σχ. Ε.6. *Το ενεργειακό φάσμα για κίνηση του ηλεκτρονίου στο μονοδιάστατο οιονεί περιοδικό δυναμικό της (Ε.14) συναρτήσει του λ. Η συμπεριφορά είναι οιονεί-μεταλλική για $\lambda < 2$, μονωτική για $\lambda > 2$ ενώ στο σημείο της μετάβασης μετάλλου-μονωτή $\lambda = 2$ παρατηρείται το κρίσιμο κβαντικό χάος.*

$$\sum_{n=1}^{N} |c_n|^{2q} \propto N^{(q-1)D_q^{\psi}}, \quad q \in [-\infty, +\infty], \tag{E.15}$$

λαμβάνονται οι διαστάσεις D_q^{ψ}. Η κατανομή του μέτρου $|c_n|^2$ μπορεί να μοιρασθεί και σε κουτιά μεγέθους ℓ_i ώστε οι D_q^{ψ} υπολογίζονται εναλλακτικά με αλγορίθμους μέτρησης κουτιών αν το μέγεθος της αλυσίδας N αντικατασταθεί στην (Ε.15) με το μέγεθος του

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κουτιού $\ell_i = \ell, \forall i$ και το άθροισμα γίνει σε όλα τα κουτιά στο πρώτο μέλος με το αθροισμένο μέτρο $\sum |c_n|^2$ στο κάθε κουτί

Οι *μορφοκλασματικές διαστάσεις του φάσματος* $D_q, q \in [-\infty, +\infty]$ είναι διαφορετικές και υπολογίζονται με τεχνικές μέτρησης κουτιών από την κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων συναρτήσει της ενέργειας E. Όμως η παρουσία N ενεργειακών ζωνών συγκεκριμένου μεγέθους S_i και $N-1$ χασμάτων μεγέθους G_i τροποποιεί τον υπολογισμό αφού φυσιολογικά τα μεγέθη των κουτιών ℓ_i στον υπολογισμό δεν είναι ίσα μεταξύ τους. Τα μεγέθη των κουτιών μπορεί να ληφθούν ως τα S_i αφού δεν υπάρχουν καταστάσεις στα χάσματα G_i. Το μορφοκλασματικό μέτρο στην περίπτωση αυτή είναι ο αριθμός των καταστάσεων στα διαδοχικά κουτιά που είναι ο ίδιος σε όλες τις ζώνες-κουτιά ανάλογος του N^{-1}. Ο υπολογισμός των D_q γίνεται από το $\tau(q) = (q-1)D_q$ γίνεται με την συνάρτηση επιμερισμού[14]

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\left(N^{-1}\right)^q}{S_i^{\tau(q)}} - 1 = 0 \tag{E.16}$$

που οδηγεί στην σχέση κλιμάκωσης

$$\sum_{i=1}^{N} S_i^{-\tau(q)} \propto N^q, \quad q \in [-\infty, +\infty]. \tag{E.17}$$

Για μέγεθος της αλυσίδας $N = 313897$ οι φασματικές διαστάσεις ήδη συγκλίνουν στις τιμές $D_{-\infty} \approx 0.547, \cdots, D_{-1} = 0.5, D_0 \approx 0.498, D_1 \approx 0.496, D_2 \approx 0.493, \cdots, D_{+\infty} \approx 0.42$. Ο μετασχηματισμός Legendre δίνει τους απειρισμούς $\alpha = d\tau(q)/dq$ και την πυκνότητά τους $f(\alpha) = q\alpha - \tau(q)$ ενώ οι ακραίες διαστάσεις είναι $D_{+\infty} = \alpha_{\min} \approx 0.421$ και $D_{-\infty} = \alpha_{\max} \approx 0.547$. Η διάσταση $D_0 \approx 0.498$ χαρακτηρίζει το μέγιστο της $f(\alpha)$ που βρίσκεται στο $\alpha = \alpha_0 = 0.5$.

Η στατιστική κατανομή των ενεργειακών ζωνών S_i και των χασμάτων G_i στο κρίσιμο σημείο της εξίσωσης Harper αναλύονται στην[15]. Από την διαγωνοποίηση της μήτρας H υπολογίζονται οι ζώνες και τα χάσματα με περιοδικές και αντιπεριοδικές οριακές συνθήκες για αλυσίδες μήκους N. Η προσέγγιση του άρρητου με διαδοχικούς ρητούς εξασφαλίζει μια φυσιολογική διαδικασία κλιμάκωσης ώστε το όριο του άρρητου σ συμπίπτει με το θερμοδυναμικό όριο $N \to \infty$. Το αποτέλεσμα για την κατανομή των

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενεργειακών ζωνών και περιγράφεται από την κατανομή semi-Poisson (Ε.8) του Σχ. Ε.4. Το άθροισμα όλων των ζωνών είναι

$$\sum_{i=1}^{N} S_i = \frac{4.6649744644\cdots}{N} \tag{E.18}$$

προσδιορίζοντας μια συμπαντική σταθερά ανάλογη των *αριθμών Feigenbaum* α, δ της *λογιστικής απεικόνισης* στο κλασσικό χάος. Στον υπολογισμό της κατανομής $P(S)$ το εμβαδόν της και η μέση τιμή $\langle S \rangle$ είναι μονάδα για διαφορετικά N. Αντίθετα η κατανομή των χασμάτων λόγω της ποικιλίας των διαφορετικών μεγεθών είναι μη κανονικοποιήσιμη του τύπου $P(G) \propto G^{-D_0}$, επιτρέποντας να προσδιορισθεί η μορφοκλασματική διάσταση D_0. Η παρουσία της κατανομής semi-Poisson για τις ενεργειακές ζώνες μπορεί να αντιστοιχηθεί στην κατανομή των κοντινότερων ενεργειακών σταθμών $P(S)$ αν συμπεριληφθούν οι μορφοκλασματικές διακυμάνσεις του φάσματος και όλες οι οριακές συνθήκες με ροή φ[15].

Ε.5. Συζήτηση-συμπεράσματα

Η εμφάνιση του κβαντικού χάους συνδέεται με την *στατιστική Wigner* που περιγράφει φασματικές διακυμάνσεις συσχετισμένου τύπου, με άπωση των ενεργειακών σταθμών και φασματική ακαμψία. Η ολοκληρωσιμότητα αντίθετα περιέργως αφορά ένα ασυσχέτιστο τυχαίο φάσμα με έλξη σταθμών χωρίς ακαμψία, δηλαδή τυχαιότητα στην εμφάνιση των ενεργειακών σταθμών που περιγράφεται από την *στατιστική Poisson*. Στην περίπτωση κλασσικά χαοτικών συστημάτων, όπως το μπιλιάρδο σχήματος σταδίου, το κβαντικό όριο χαρακτηρίζεται από την στατιστική Wigner ενώ για κλασσικά ολοκληρώσιμα συστήματα, όπως το μπιλιάρδο σχήματος κύκλου, από την στατιστική Poisson. Ορισμένες περιπτώσεις, όπως τα ψευδο-ολοκληρώσιμα τριγωνικά μπιλιάρδα, είναι στην ενδιάμεση περίπτωση, ούτε χαοτικού αλλά ούτε και κανονικού τύπου. Η στατιστική που μπορεί να περιγράψει τέτοια συστήματα στην απλούστερη μορφή της είναι η υβριδικού τύπου semi-Poisson. Τα ίδια ακριβώς αποτελέσματα ισχύουν με ακρίβεια για την κίνηση των ηλεκτρονίων σε τυχαίο δυναμικό. Στα μέταλλα με τυχαιότητα εμφανίζεται η κβαντική χαοτική στατιστική ενώ στους μονωτές η στατιστική είναι ίδια με αυτή των ολοκληρώσιμων συστημάτων. Στο σημείο της μετάβασης μετάλλου-μονωτή η ενδιάμεση κρίσιμη στατιστική αντιστοιχεί στο κρίσιμο κβαντικό χάος. Επιπλέον, η κρίσιμη στατιστική επηρεάζεται από τις οριακές συνθήκες και εμφανίζεται μόνο σε υψηλές διαστάσεις όπως η μετάβαση μετάλλου-μονωτή σε τυχαίο δυναμικό.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το σενάριο του κρίσιμου κβαντικού χάους φαίνεται να ικανοποιείται στο κρίσιμο μοντέλο της εξίσωση Harper. Αντί του τυχαίου δυναμικού μελετάται ένα εναλλακτικό μοντέλο κίνησης σε οιονεί-περιοδικό ή ψευδο-τυχαίο δυναμικό στην μία διάσταση. Η εξίσωση Harper στο όριο του άρρητου αριθμού σ παρουσιάζει μετάβαση μετάλλου-μονωτή όταν η παράμετρος του δυναμικού γίνει $\lambda = 2$. Το πρόβλημα μπορεί να μελετηθεί με συστηματικό τρόπο παίρνοντας διαδοχικές ρητές προσεγγίσεις του άρρητου σ και επιλύοντας διαδοχικά περιοδικά προβλήματα μεγέθους N. Η κατανομή του κρίσιμου χάους semi-Poisson χαρακτηρίζει το κρίσιμο σημείο $\lambda = 2$ και συνδέεται με τις μορφοκλασματικές διαστάσεις D_q που παρουσιάζει το ενεργειακό φάσμα. Παρ' όλο που αυτό δεν είναι ένα τυχαίο σύστημα, όπως η περίπτωση κβαντικής κίνησης σε τυχαίο δυναμικό, επιτρέπει να εξαχθούν ακριβή αποτελέσματα για την σύνδεση της στατιστικής των ενεργειών και του μορφοκλασματικού φάσματος. Τα αποτελέσματα αυτά μπορεί να βοηθήσουν για να διελευκανθεί το σαφώς δυσκολότερο ρεαλιστικό πρόβλημα της κίνησης σε τυχαίο δυναμικό στον τρισδιάστατο χώρο, ειδικότερα στην εξάρτηση από την τοπολογία του πλέγματος και τις οριακές συνθήκες, ενώ διανοίγει νέες διαδρομές στην έρευνα για πολύπλοκα χαοτικά συστήματα με κρίσιμη χαοτική συμπεριφορά[16,17].

Βιβλιογραφία:

1. L.E. Reichl, "The Transition to Chaos", Springer, N-Y 1992.
2. M.C. Gutzwiller, "Chaos in Classical and Quantum Mechanics", Springer, N-Y 1990.
3. G. Casati, B.V. Chrikov, J. Ford and F. Israilev, "Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems", Springer Lecture Notes in Physics, 93, p334, 1979.
4. M.V. Berry, "Chaotic Behavior of deterministic Systems", Les Houches Lectures 36, p171, Amsterdam: North-Holland, 1983.
5. M.V. Berry, "Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics", Springer Lecture Notes in Physics, 263, p1, 1986.
6. G. Casati, B.V. Chrikov, J. Ford and F. Israilev, "Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems", Springer Lecture Notes in Physics, 93, p334, 1979.
7. M.V. Berry, "Chaotic Behavior of deterministic Systems", Les Houches Lectures 36, p171, Amsterdam: North-Holland, 1983.
8. M.V. Berry, "Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics", Springer Lecture Notes in Physics, 263, p1, 1986.
9. M.V. Berry, "Dynamical Chaos", Princeton University Press, p453, Princeton New-York, 1987.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

10. Σ.Ν. Ευαγγέλου, "Τάξη και Χάος", Τόμος V, Εκδ. Πνευματικού, σ.139, 1999.

11. B.I. Shklovskii et al, Phys. Rev. B47, 11487, 1993.

12. O. Bohigas, "Chaos and Quantum Physics", Les Houches Summer School, Elsevier, New-York, 1991.

13. D.R. Hofstadter, Phys. Rev. B14, 2239, 1976.

14. S. Aubry and G. Andre, Ann. Israel Phys. Soc. 3, 133, 1980.

15. C. Tang and M. Kohmoto, Phys. Rev. B34, 2041, 1986.

16. B.B. Manderlbrot, "The Fractal Geometry of Nature", W.H. Freeman and Co, New-York 1983.

17. T.C. Halsey et al Phys. Rev. A33, 1141, 1986.

18. S.N. Evangelou and J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. 84, 1643, 2000. G.N. Katomeris and S.N. Evangelou, Eur. Phys. J. B 16, 133-136, 2000.

19. M. Gaudin, Nuclear Phys. 85, 545, 1996.

20. T. Yukawa, Phys. Rev. Let. 54, 1883, 1985.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, New York, 1996.
2. C. Cohen, B. Diu and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, NY, 1997.
3. P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, (4th Edition), Oxford University Press (Clarendon), Oxford, 1958.
4. R.P. Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
5. R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. 3, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1965.
6. D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1995.
7. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (*Nonelativistic Theory*) (2nd Edition), Addison-Wesley, Reading, Mass., 1965.
8. Lim Yung-Kuo, *Problems and Solutions on Quantum Mechanics*, World Scientific, 1998.
9. S.M. McMurry, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1993.
10. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1968.
11. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1970.
12. M.A. Morrison, *Understanding Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 1990.
13. M.A. Morrison, T.L. Estle, N.F. Lane, *Understanding More Quantum Physics*, Prentice-Hall International Editions, 1991.
14. D. Park, *Introduction to Quantum Theory*, McGraw-Hill, New York, 1984.
15. A.M. Rae, *Quantum Mechanics,* Institute of Physics Publ., 1998.
16. M.S. Rogalski and S.B. Palmer, *Quantum Physics*, Gordon and Breach, New York, 1999.
17. J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1995
18. L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1968.
19. A.A. Sokolov, I.M. Ternov and V.Ch. Zhukovskii, *Quantum Mechanics*, Mir Publishers, 1984.
20. G.L. Squires, *Problems in quantum mechanics*, Cambridge University Press, 1995.
21. J.G. Taylor, *Quantum Mechanics*: *an Introduction*, McGraw-Hill, New York, 1968

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

22. Σ. Τραχανά, *Κβαντομηχανική* I,II,III, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1985,1988. Θα κόμιζα γλαύκα στην Αθήνα αν έλεγα πως αυτό το τρίτομο *cult* βιβλίο αποτελεί μια πολύ καλή προσπάθεια στα Ελληνικά. Όμως, πολλές περιγραφές εδώ φαίνεται να πλατειάζουν αφόρητα συχνά αδιαφορώντας για τον διαθέσιμο χρόνο του αναγνώστη ή ακόμη χειρότερα δίνεται έμφαση σε όχι τόσο σύγχρονα θέματα με τεχνικές περιορισμένης γενικής χρησιμότητας, π. χ. η υπέροχη περιγραφή λύσης των διαφορικών εξισώσεων για τα βασικά δυναμικά της κβαντικής έχει, δυστυχώς, πολύ περιορισμένες δυνατότητες εφαρμογής σε ρεαλιστικά προβλήματα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Γραφικές Τέχνες
ΘΕΟΔΩΡΙΔΗ
Γαριβάλδη 10, 45221 Ιωάννινα
Τηλ.-Fax: 0651 - 77358

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Copyright: Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.

Απαγορεύεται η μερική ή ολική ανατύπωση καθώς και η λήψη φωτοαντίγραφων από το βιβλίο χωρίς την γραπτή άδεια του συγγραφέα και του τμήματος δημοσιευμάτων του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Διατίθεται στο βιβλιοπωλείο του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων (0651-97122).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Θεμελιώδεις σταθερές

σταθερά Planck :	$\hbar$	=	$1.05457\times10^{-34}\ Js$
ταχύτητα φωτός	c	=	$2.99792\times10^{8}\ m/s$
μάζα ηλεκτρονίου	m_e	=	$9.10939\times10^{-31}\ Kg$
μάζα πρωτονίου	m_p	=	$1.67262\times10^{-27}\ Kg$
φορτίο ηλεκτρονίου	$-e$	=	$-1.60218\times10^{-19}\ C$
διαπερατότητα κενού	ϵ_0	=	$8.85419\times10^{-12}\ C^2/Jm$
σταθερά Boltzmann	k_B	=	$1.38066\times10^{-23}\ J/K$

Άτομο υδρογόνου

ακτίνα Bohr :	a	=	$0.0529177\ nm\ (1nm=10^{-9}\ m)$
ενέργειες Bohr	$-E_n$	=	$13.6057/n^2\ eV,\ n=1,2,\cdots$
θεμελιώδης ενέργεια	$-E_1$	=	$13.6057\ eV$
θεμελιώδης ιδιοσυνάρτηση	ψ_0	=	$\left(1/\sqrt{\pi a^3}\right)e^{-r/a}$
σταθερά λεπτής υφής	α	=	$1/137.036$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ