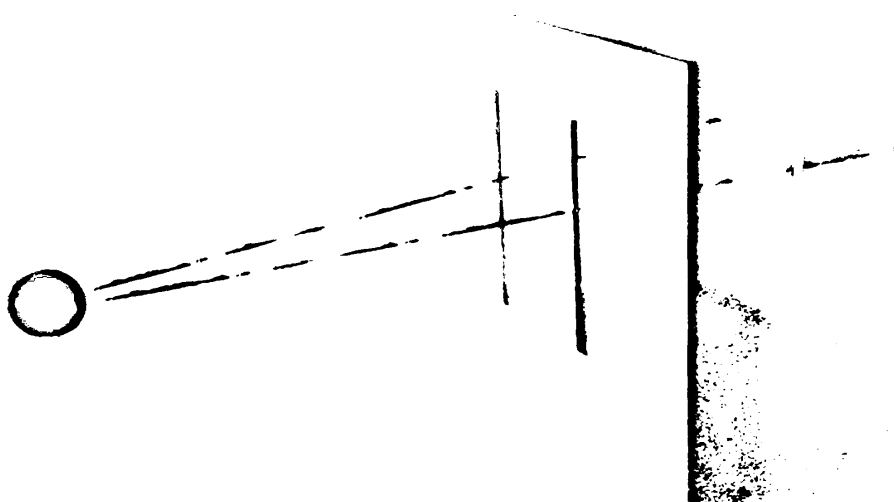


Εισαγωγή στην Κβαντική Μηχανική

ΑΡΧΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΤΥΠΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$



3η Έκδοση

ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΚΡΑΤΙΚΗΣ ΠΟΛΙΤΕΧΝΙΚΗΣ



ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



026000318411



Ap. 850. 7226 2011
DWPEd: L. E. OKRIONAWATI



ΕΙΣΑΓΩΓΗ
ΣΤΗΝ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ
ΑΡΧΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΤΥΠΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ



Κ. Ε. ΒΑΓΙΟΝΑΚΗΣ
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗΝ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ
ΑΡΧΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΤΥΠΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2002



Στην οικογένειά μου
για το χρόνο που της έλειπα



ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	7
ΠΡΟΛΟΓΟΣ	13
ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΕΙΣΑΓΩΓΗ	17
Πρώτη περίοδος Κβαντικής Θεωρίας.....	17
Δεύτερη περίοδος Κβαντικής Θεωρίας.....	19
Τρίτη περίοδος-Ανάπτυξη κβαντικής μηχανικής 1925-27.....	22
Μερικές χρονολογίες της μετέπειτα εξέλιξης	23
ΚΕΦΑΛΑΙΟ I	29
ΘΕΜΕΛΕΙΩΔΕΙΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΚΑΙ ΣΧΕΣΕΙΣ	
1.1. Προκαταρκτικά	30
1.2. Η έννοια της κυματοσυνάρτησης.....	32
1.3. Μορφές κυματοσυνάρτησης.....	37
1.4. Σχέσεις αβεβαιότητας του Heisenberg.....	44
1.5. Η εξίσωση του Schrödinger	50
1.6. Μέσες τιμές φυσικών μεγεθών - Τελεστές.....	56
1.7. Ιδιότητες των ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας.....	62
Προβλήματα.....	68
ΚΕΦΑΛΑΙΟ II	75
ΚΑΤΑΣΤΑΤΙΚΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΑ, ΤΕΛΕΣΤΕΣ ΚΑΙ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΕΙΣ.	
Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ	
2.1. Καταστατικά διανύσματα και τελεστές	76
2.2. Κβαντικές μετρήσεις.....	82
2.3. Συνεχή φάσματα - Η δ-συνάρτηση του Dirac.....	84
2.4. Κυματοσυναρτήσεις και τελεστές: αναπαραστάσεις θέσης και ορμής	88
2.5. Λύση ενός προβλήματος: εκλογή μιας οποιασδήποτε αναπαράστασης.....	94
2.6. Συμβιβαστά και ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη- Γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας.....	97



2.7.	Αναπαράσταση με πίνακες.....	102
2.8.	Εξέλιξη με το χρόνο: Κβαντική δυναμική.....	111
2.9.	Εικόνα Schrödinger -Εικόνα Heisenberg.....	116
	Προβλήματα.....	121

ΚΕΦΑΛΑΙΟ III..... 129

ΒΑΣΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΤΗΣ ΚΥΜΑΤΙΚΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ SCHRODINGER

3.1.	Το ελεύθερο σωματίδιο.....	129
3.2.	Γενικά χαρακτηριστικά των λύσεων της κυματικής εξίσωσης Schrödinger.	134
3.3.	Βήμα (σκαλοπάτι) δυναμικού.....	140
3.4.	Φράγμα δυναμικού.....	146
3.5.	Γραμμικό δυναμικό - Σταθερή δύναμη.....	151
3.6.	Φρέαρ (πηγάδι) δυναμικού άπειρου βάθους - Ομοτιμία ιδιοσυναρτήσεων ..	155
3.7.	Σωματίδιο μέσα σε "κουτί".....	160
3.8.	Τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού.....	163
3.9.	Το μόριο της αμμωνίας - Διπλό φρέαρ δυναμικού.	168
3.10.	Αρχή του φαινομένου μείζερ.....	174
3.11.	Μείζερ - Λείζερ.....	179
3.12.	Περιοδικό δυναμικό.....	183
	Προβλήματα.....	190

ΚΕΦΑΛΑΙΟ IV.....201

ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

4.1.	Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση θέσης.....	202
4.2.	Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση ορμής.....	208
4.3.	Αλγεβρική μέθοδος επίλυσης του αρμονικού ταλαντωτή- Τελεστές καταστροφής και δημιουργίας.....	210
4.4.	Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση με πίνακες.....	214
4.5.	Ο διπλός αρμονικός ταλαντωτής.....	216
4.6.	Φωνόνια.....	222
	Προβλήματα.....	225

ΚΕΦΑΛΑΙΟ V.....231

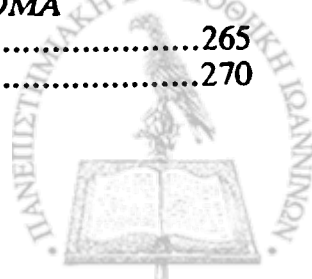
ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

5.1.	Περί συμμετριών στην κβαντική μηχανική.....	231
5.2.	Τροχιακή στροφορμή και γενικευμένη στροφορμή: ιδιοτιμές.....	235
5.3.	Τροχιακή στροφορμή: ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις.....	239
5.4.	Αναπαράσταση με πίνακες των τελεστών της στροφορμής.....	244
5.5.	Ιδιοστροφορμή.....	247
5.6.	Ιδιοστροφορμή $s=1/2$	248
5.7.	Ολική στροφορμή -Πρόσθεση στροφορμών.....	252
	Προβλήματα.....	259

ΚΕΦΑΛΑΙΟ VI.....265

ΚΕΝΤΡΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ - ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ

6.1.	Κεντρικά δυναμικά: το γενικό πρόβλημα.....	265
6.2.	Το ελεύθερο σωματίδιο.....	270



6.3.	Σφαιρικό φρέαρ δυναμικού - Το σύστημα του δευτερίου	274
6.4.	Το άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή άτομα.....	278
6.5.	Τα συστήματα ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου, κουάρκ-αντικουάρκ	283
6.6.	Ο τριδιάστατος ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής.....	288
	Προβλήματα.....	291

ΚΕΦΑΛΑΙΟ VII.....297
ΚΒΑΝΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕΣΑ ΣΕ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ -
ΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

7.1.	Στροφορμή και μαγνητική ροπή.....	297
7.2.	Μαγνητικός συντονισμός.....	305
7.3.	Φορτισμένα σωματίδια μέσα σ' ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο- Μετασχηματισμοί βαθμίδας.....	309
7.4.	Φαινόμενο Aharonov-Bohm	312
7.5.	Φαινόμενο Zeeman.....	315
7.6.	Κίνηση μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό και ηλεκτρικό πεδίο-Στάθμες Landau-Κβαντικό φαινόμενο Hall	317
7.7.	Συμβολόμετρο νετρονίων	323
	Προβλήματα.....	326

ΚΕΦΑΛΑΙΟ VIII.....331
ΟΜΟΙΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

8.1.	Σύστημα όμοιων σωματιδίων-Κατασκευή ολικά συμμετρικών και αντισυμμετρικών κυματοσυναρτήσεων	332
8.2.	Αέριο Fermi	336
8.3.	Ηλεκτρόνια σε στερεά.....	342
8.4.	Υπεραγωγιμότητα.	347
	Προβλήματα.....	365

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΧ.....369
ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

9.1.	Θεωρία διαταραχών ανεξάρτητη από το χρόνο για μη εκφυλισμένη ενεργειακή στάθμη.....	369
9.2.	Θεωρία διαταραχών ανεξάρτητη από το χρόνο για εκφυλισμένη ενεργειακή στάθμη.....	373
9.3.	Φαινόμενο Stark.....	374
9.4.	Ρεαλιστικό άτομο υδρογόνου - Λεπτή υφή.....	377
9.5.	Υπέρλεπτη υφή-Γραμμή 21 cm του υδρογόνου	383
9.6.	Η μέθοδος WKB	389
9.7.	Η μέθοδος των μεταβολών	397
	Προβλήματα.....	400

ΚΕΦΑΛΑΙΟ Χ.....407
ΧΡΟΝΙΚΗ ΕΞΕΛΙΞΗ ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

10.1.	Πιθανότητα μετάβασης σ' ένα κβαντικό σύστημα	408
10.2.	Θεωρία διαταραχών εξαρτημένη από το χρόνο	412
10.3.	Αρμονικές διαταραχές	413



10.4. Αλληλεπιδράσεις κβαντικών συστημάτων με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία	418
10.5. Αιφνίδια προσέγγιση - Σταθερή διαταραχή	426
10.6. Διάσπαση ενός συστήματος	428
10.7. Αδιαβατική προσέγγιση	432
Προβλήματα.....	435

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΧΙ.....439

ΘΕΩΡΙΑ ΣΚΕΔΑΣΗΣ

11.1. Ενεργός διατομή σκέδασης.....	440
11.2. Πλάτος σκέδασης	442
11.3. Οπτικό θεώρημα.....	445
11.4. Υπολογισμός πλατών σκέδασης	447
11.5. Προσέγγιση Born	450
11.6. Μέθοδος μερικών πλατών σκέδασης - Μετατόπιση φάσης.....	454
11.7. Προσδιορισμός μετατόπισης φάσης και εφαρμογές: δέσμες καταστάσεις και συντονισμοί	460
11.8. Όμοια σωματίδια και σκέδαση.....	471
Προβλήματα.....	474

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΧΙΙ.....479

ΑΤΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

12.1. Άτομα δύο ηλεκτρονίων - Άτομο ηλίου.....	479
12.2. Άτομα πολλών ηλεκτρονίων - Άτομο λιθίου.....	485
12.3. Μόρια - Μόριο υδρογόνου	491
12.4. Δυνάμεις van der Waals	498
Προβλήματα.....	503

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι.....503

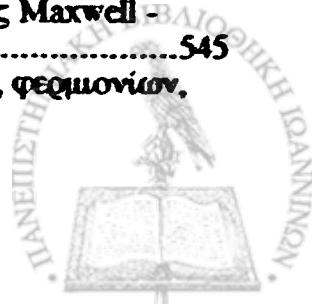
ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ, ΑΣΤΡΟΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΚΟΣΜΟΛΟΓΙΑ

Π-Ι.1. Μικροσκοπικά και μακροσκοπικά φαινόμενα: τάξεις μεγέθους	506
Π-Ι.2. Αέριο Fermi και βαρυτική κατάρρευση αστέρων.....	511
Π-Ι.3. Ταλαντώσεις νετρίνων και ηλιακά νετρίνα.....	516
Π-Ι.4. Η γραμμή των 21cm και τα κοσμικά μέγεζες.....	520
Π-Ι.5. Η κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου του σύμπαντος	523

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ.....527

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

Π-ΙΙ.1. Πίνακας πυκνότητας.....	528
Π-ΙΙ.2. Εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας	534
Π-ΙΙ.3. Η μικροκανονική συλλογή.....	537
Π-ΙΙ.4. Η κανονική συλλογή.....	539
Π-ΙΙ.5. Η μεγαλοκανονική συλλογή.....	543
Π-ΙΙ.6. Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων - Κατανομές Maxwell - Boltzmann, Bose - Einstein και Fermi - Dirac	545
Π-ΙΙ.7. Εφαρμογές: Νόμος του Planck - Ιδανικά αέρια μποζονίων, φερμιονίων.....	



υπερρευσιτότητα.....552

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ III.....561

ΘΕΩΡΙΑ ΜΕΤΡΗΣΗΣ -

ΕΝΝΟΙΟΛΟΓΙΚΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Π-III.1. Κβαντική θεωρία μέτρησης.....562

Π-III.2. "Παράδοξα" κβαντικής θεωρίας μέτρησης.....566

Π-III.3 Κρυμμένες μεταβλητές και το θεώρημα Bell576

Π-III.4 Εννοιολογικά - ερμηνευτικά προβλήματα κβαντικής μηχανικής.....582

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 591

ΦΥΣΙΚΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ..... 597

ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗΣ..... 598

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ..... 599



ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Στο ερώτημα γιατί σπουδάζουμε φυσική, μια πρώτη άμεση απάντηση είναι: για τις τεχνολογικές εφαρμογές της. Όμως πέρα από αυτό, υπάρχει και ο βαθύτερος λόγος: σπουδάζουμε φυσική, γιατί σπρωχνόμαστε σ' αυτό από μια εσωτερική ανάγκη ν' αναζητήσουμε τους βασικούς νόμους για το φυσικό κόσμο. Η αναζήτηση αυτή στην επιστήμη, όπως άλλωστε και στην τέχνη, έχει μια τεχνική και μια αισθητική συνιστώσα. Μέσα σ' αυτό το πλαίσιο, η φυσική είναι η μελέτη των εννοιολογικών δομών λειτουργίας της φύσης.

Η κβαντική μηχανική αποτελεί σήμερα τον ακρογωνιαίο θεωρητικό λίθο, πάνω στον οποίο στηρίζεται η όλη κατανόησή μας για τη δομή του φυσικού κόσμου. Το βιβλίο αυτό αποτελεί μια εισαγωγική έκθεση της θεωρίας της κβαντικής μηχανικής. Αντικειμενικός του σκοπός είναι να εισάγει τον αναγνώστη, τόσο στο φυσικό περιεχόμενο της θεωρίας, όσο και στον απαραίτητο μαθηματικό φορμαλισμό. Προϋποθέτει ασφαλώς, από προηγούμενη διδασκαλία, μια καλή γνώση βασικών στοιχείων και εννοιών κλασικής φυσικής και μαθηματικών. Από και πέρα, η προσπάθεια είναι να παρουσιαστεί μια συνεπής εικόνα της φυσικής θεωρίας παράλληλα με τα μαθηματικά της, ούτως ώστε να φανεί πως η φυσική θεωρία διαχέεται στη μαθηματική γλώσσα της και αντίστροφα.

Αυτή η αλληλεπίδραση ανάμεσα στη φυσική θεωρία και τα μαθηματικά της επιτυγχάνεται με τον καλύτερο τρόπο χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό που επινόησε ο Dirac. Ο συμβολισμός του Dirac ενσωματώνει ιδανικά τον κβαντομηχανικό τρόπο σκέψης για τη φύση. Γι' αυτό είναι σκόπιμο να χρησιμοποιείται όσο γίνεται πιο πλατιά.

Το πείραμα είναι ο οδηγός, καθώς και ο τελικός κριτής, των φυσικών θεωριών. Η επαφή με τα φαινόμενα είναι το πιο σημαντικό στάδιο για μια φυσική



θεωρία. Η φαινομενολογία της κβαντικής μηχανικής την καθιστά, κατά αδιαφιλονίκητο τρόπο, τη θεωρία που περιγράφει πιστά την συμπεριφορά της φύσης στο κβαντικό επίπεδο.

Έτσι, ο συνολικός χαρακτήρας αυτού του βιβλίου είναι, παράλληλα με την παρουσίαση της φυσικής και μαθηματικής πλευράς της κβαντικής μηχανικής, να καταδειχθεί η συμφωνία της με τη φύση σε κάθε κλίμακα φαινομένων, όπου αυτή χρειάζεται να εφαρμοστεί.

Στην παρούσα γ' έκδοση, κρατώντας την ίδια πάντα φιλοσοφία στην παρουσίαση της ύλης όπως στις δύο προηγούμενες εκδόσεις (1992, 1996), κατεβλήθη προσπάθεια να περιληφθούν όσα κεφάλαια και θέματα συνιστούν μια ολοκληρωμένη σύγχρονη διαπραγμάτευση της κβαντικής μηχανικής. Έτσι, με την νέα μορφή πιστεύουμε ότι το βιβλίο αυτό καλύπτει όλες σχεδόν τις πλευρές που θα πρέπει να γνωρίσει κάποιος στην επαφή του με την κβαντική μηχανική και ελπίζουμε να αποτελέσει ένα χρήσιμο εργαλείο μάθησης.

Ευχαριστούμε πάντα την κ. Λ. Παπαφωτίκα για την ηλεκτρονική επεξεργασία και της παρούσας έκδοσης.

Ιωάννινα, Καλοκαίρι 2002

Κ.Ε. Βαγιονάσης



ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στην ιστορία των επιστημονικών ανακαλύψεων, κάθε μεγάλη θεωρητική σύνθεση φθάνει στο πλήρωμά της και δίνει τη θέση της σε μια καινούργια, όταν ο άνθρωπος οριοθετήσει το πεδίο εφαρμογής της και αποφανθεί τί αυτή δεν μπορεί να εξηγήσει. Το 1686 ο Isaac Newton δημοσιεύει το "Principia mathematica", ένα από τα σημαντικότερα βιβλία στην ιστορία της ανθρώπινης σκέψης, και αρχίζει η εποχή της Κλασικής Φυσικής. Στο απόγειο της Ουράνιας Μηχανικής, ενός από τους κορυφαίους κλάδους του κλασικού οικοδομήματος, οι αστρονόμοι αντιμετωπίζουν προβλήματα που δεν μπορούν να εξηγηθούν, όπως π.χ. οι ανωμαλίες στην κίνηση του Ερμή. Η μετάπτωση του περιηλίου του Ερμή εξηγείται τελικά το 1915, επιβεβαιώνοντας την Γενική Σχετικότητα και σημαδεύοντας τα όρια της Νευτώνιας Μηχανικής.

Με την Κβαντική Θεωρία έχουμε παρόμοια διαδικασία: γεννιέται στις αρχές του εικοστού αιώνα με την προσπάθεια των φυσικών να εξηγήσουν ένα μεγάλο αριθμό πειραματικών δεδομένων, που είχαν μέχρι τότε συγκεντρωθεί. Τα θεμέλια της Κβαντικής Μηχανικής τέθηκαν στα έτη 1925-27. Η χρονολογία αυτή σημαδεύει και το τέλος της Κλασικής Φυσικής, που έζησε έτσι δύομισυ περίπου αιώνες.

Πρώτη περίοδος Κβαντικής Θεωρίας

Η γένεση των κβαντικών εννοιών έγινε το 1900 από τον Max Planck κατά την μελέτη του φάσματος, που παρουσιάζει η θερμική ακτινοβολία ενός μελανού σώματος. Το πρόβλημα της θερμικής ακτινοβολίας του μελανού σώματος είναι αρκετά μακριά από τις βάσεις της κβαντικής μηχανικής, όπως αρχικά τέθηκαν αργότερα, γιατί έχει να κάνει αφ' ενός μεν με φωτόνια, που είναι σχετικιστικά



σωματίδια, αφ' ετέρου δε με ιδιότητες της Στατιστικής Φυσικής. Αυτή όμως η ιστορική συγκυρία δεν εμπόδισε τη γένεση της κβαντικής θεωρίας.

Το πρόβλημα ήταν το ακόλουθο: έστω μια κοιλότητα θερμοκρασίας τοιχωμάτων T , που περιέχει θερμική ακτινοβολία, έτσι ώστε η πυκνότητα ενέργειας, που αντιστοιχεί στο διάστημα συχνοτήτων μεταξύ ν και $\nu+d\nu$, να είναι $u_\nu d\nu$. Ο Kirchhoff είχε καταλήξει στο συμπέρασμα ότι, σαν συνέπεια του δεύτερου θερμοδυναμικού νόμου, η u_ν πρέπει να είναι ανεξάρτητη από τη φύση των τοιχωμάτων και συνάρτηση μόνο των ν και T : $u_\nu(\nu, T)$. Μέχρι το 1900, οι Rayleigh και Jeans είχαν πράγματι δείξει ότι η κλασική φυσική οδηγούσε αναγκαστικά στη σχέση

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2 k T}{c^3} \quad (\text{E.1})$$

Από τη σχέση αυτή φαίνεται αμέσως η βαθιά αντίφαση της κλασικής φυσικής,

αφού η ολική ενέργεια της ακτινοβολίας $\int_0^\infty u_\nu d\nu$ είναι άπειρη. Εμπειρικά, βρίσκει

κανείς ότι η παραπάνω έκφραση επαληθεύεται στις χαμηλές συχνότητες. Στις υψηλές συχνότητες ισχύει ο νόμος του Wien

$$u_\nu(\nu, T) = \alpha \nu^3 e^{-\beta\nu/T} \quad (\text{E.2})$$

όπου α και β σταθερές. Το 1900 ο Max Planck ανακαλύπτει μια σχέση, που καταλήγει στις δύο παραπάνω στις χαμηλές και υψηλές συχνότητες, αντίστοιχα, και στην οποία εισέρχεται μια σταθερά h με διαστάσεις δράσης. Η σχέση αυτή είναι:

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (\text{E.3})$$

Τώρα η ολική ενέργεια είναι πεπερασμένη:

$$\int_0^\infty u_\nu(\nu, T) d\nu = a T^4 \quad \left(a = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c^3} \right) \quad (\text{E.4})$$

(νόμος Stefan - Boltzmann).

Η σχέση (E.3), που βρίσκεται σε τέλεια συμφωνία με το πείραμα, βγήκε πρώτα εμπειρικά. Ο Planck προσπάθησε στη συνέχεια να τη δικαιολογήσει με όρους στατιστικής. Το πέτυχε κάνοντας την υπόθεση ότι η ύλη, που απορροφά την ακτινοβολία, συμπεριφέρεται σαν ένα σύνολο ταλαντωτών και ότι η ενέργεια των ταλαντωτών, που εκπέμπουν στη συχνότητα ν , είναι σε δεδομένη στιγμή ίση με ένα ακέραιο πολλαπλάσιο του $h\nu$. Ήταν η πρώτη φορά που μια κβάντωση εισερχόταν στη φυσική ποσοτικά και που έμελλε να έχει βαθιές επιδράσεις στις μετέπειτα



θεωρητικές εξελίξεις, παρά το γεγονός ότι, όπως είπαμε, το πρόβλημα απ' όπου ξεκίνησε η αρχική ιδέα είναι μακριά από τα θεμέλια της μη σχετικιστικής κβαντικής μηχανικής, όπως τη μελετούμε σήμερα.

Μια καινούργια αποφασιστική πρόοδος έγινε με την ανάλυση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου. Το 1905, τη χρονιά που εισήγαγε την ειδική θεωρία της σχετικότητας και που ερμήνευσε την κίνηση Brown με την βοήθεια μοριακών κρούσεων, ο Einstein σε μια κριτική ανάλυση της εκπομπής και απορρόφησης του φωτός εισήγαγε την έννοια του φωτονίου. Οι προβλέψεις του για το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο επιβεβαιώθηκαν πειραματικά από τον Millikan το 1914.

Τα φωτόνια του Einstein έδωσαν ένα πιο συγκεκριμένο λόγο ύπαρξης στην υπόθεση του Planck. Από την άλλη μεριά, εκδηλώνονταν για πρώτη φορά η δυαδική συμπεριφορά, κυματική και σωματιδιακή, των ιδιοτήτων του φωτός.

Το 1906 ο Einstein ερμήνευσε με την κβαντική θεωρία την ειδική θερμοότητα των στερεών σε χαμηλές θερμοκρασίες, πράγμα που βοήθησε στο να πεισθούν ακόμα περισσότερο οι φυσικοί για την πραγματικότητα της κβαντικής έννοιας.

Αν ήθελε κανείς να ανακεφαλαιώσει την πρώτη περίοδο, θα μπορούσε να αναφέρει ότι αυτή συνίσταται στην ανακάλυψη του φωτονίου και στη σχέση $E=hn$.

Δεύτερη περίοδος Κβαντικής Θεωρίας.

Η επόμενη περίοδος στην εξέλιξη της κβαντικής φυσικής σημαδεύεται από ένα ερώτημα πολύ πιο κοντά στις ρίζες της σημερινής κβαντικής μηχανικής. Πρόκειται για τη μελέτη και ερμηνεία του φάσματος των ατόμων, μια ιστορία που άρχισε το 1814 με τη μελέτη του Fraunhofer για το ηλιακό φάσμα.

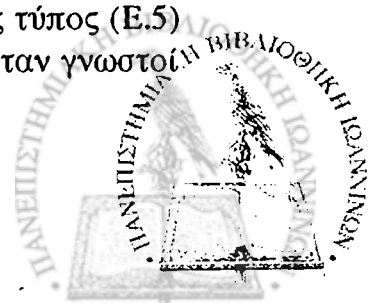
Μέχρι το 1908 είχαν συσσωρευτεί αρκετά εμπειρικά δεδομένα σε ό,τι αφορά την ατομική φασματοσκοπία: οι συχνότητες του φάσματος των ατόμων μπορούσαν να γραφούν σαν διαφορά

$$\nu_{nm} = A_n - A_m, \quad (\text{E.5})$$

όπου A_n είναι συνάρτηση ενός ακέραιου αριθμού n (που ονομάζεται για πρώτη φορά κβαντικός αριθμός). Για το άτομο του υδρογόνου είναι

$$A_n = \frac{R_H c}{n^2}, \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (\text{E.6})$$

όπου η σταθερά R_H είναι γνωστή σαν σταθερά Rydberg. Ο αντίστοιχος τύπος (E.5) είναι γνωστός σαν τύπος Balmer-Rydberg. Άλλοι εμπειρικοί τύποι ήταν γνωστοί



για πιο πολύπλοκα άτομα. Θεωρητικές αναλύσεις έδειχναν ότι όλες αυτές οι εκφράσεις ήταν ασυμβίβαστες με την κλασική μηχανική και τον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό.

Το 1903 ο J.J. Thomson προτείνει για το άτομο το μοντέλο της διάχυτης μάζας, μέσα στην οποία κινούνται τα σωματίδια που το απαρτίζουν, ενώ το 1911 ο Rutherford προτείνει το πλανητικό μοντέλο, σύμφωνα με το οποίο γύρω από ένα μαζικό πυρήνα πρωτονίων και νετρονίων κινούνται τα ηλεκτρόνια. Όμως, το μοντέλο του Rutherford ήταν ασυμβίβαστο με την κλασική φυσική, δεδομένου ότι έπρεπε να οδηγεί σε αστάθεια, αφού τα ηλεκτρόνια, λόγω της κίνησής τους γύρω από τον πυρήνα, θα εξέπεμπαν ακτινοβολία και τελικά θα έπεφταν πάνω του.

Το 1913 γίνεται ένα αποφασιστικό βήμα από τον Niels Bohr κατά τη διάρκεια της παραμονής του στο Manchester και της συνεργασίας του με τον Rutherford. Διατυπώνει τις συνθήκες για την ύπαρξη σταθερών ενεργειακών καταστάσεων για την κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα. Σύμφωνα με αυτές, ακτινοβολία συμβαίνει μόνο όταν ένα ηλεκτρόνιο περνά από μια ενεργειακή στάθμη E_n σε μια άλλη E_m , εκπέμποντας ένα φωτόνιο ενέργειας $h\nu$ σύμφωνα με τη σχέση

$$E_n - E_m = h\nu \quad (E.7)$$

Για να υπολογίσει την ενέργεια E_n , χρησιμοποιεί αυτό που μετέπειτα ονομάστηκε "αρχή της αντιστοιχίας", σύμφωνα με την οποία τα κβαντικά φαινόμενα τείνουν προς το αντίστοιχο κλασικό όριο, όταν το h μπορεί να αγνοηθεί. Μελετώντας, λοιπόν το ηλεκτρόνιο σε μεγάλες αποστάσεις από τον πυρήνα, όταν η τροχιά του και η ακτινοβολία του διέπονται από κλασικούς κανόνες, δείχνει ότι για το υδρογόνο

$$E_n = - \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2 n^2} \quad (E.8)$$

Έτσι, το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου ερμηνεύεται με τη βοήθεια των θεμελιωδών φυσικών σταθερών h, e και της μάζας του ηλεκτρονίου m_e . Ο τύπος του Bohr καθορίζει το E_n για μεγάλα n , όταν η τροχιά γίνεται κλασική. Κατά καλή πάντως σύμπτωση, η σχέση ισχύει και για μικρά n , πράγμα που όμως θα χρειαστεί να περιμένει αργότερα την εξίσωση του Schrödinger για να εξηγηθεί.

Τα πειράματα των Franck και Hertz (1914-19) επιβεβαιώνουν την πιο επαναστατική πλευρά της θεωρίας του Bohr, την ύπαρξη δηλαδή σταθερών ενεργειακών καταστάσεων. Κατά την πρόσκρουση ηλεκτρονίων, που έχουν επιταχυνθεί, πάνω σε άτομα παρατηρείται ότι τα ηλεκτρόνια χάνουν ενέργεια, που είναι κβαντισμένη σύμφωνα με την μορφή $E_n - E_m$.



Η θεωρία του Bohr γνώρισε περαιτέρω επεξεργασία, ιδιαίτερα από τον A. Sommerfeld, σ' αυτό που ονομάζεται παλιά κβαντική θεωρία, στην οποία χρησιμοποιούνται όλες οι τεχνικές της αναλυτικής μηχανικής. Έτσι, η συνθήκη κβάντωσης του Bohr παίρνει τη μορφή

$$\oint p \, dq = n h, \quad (\text{E.9})$$

όπου η δράση είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς h του Planck (p είναι συνιστώσα ορμής, q η αντίστοιχη συνιστώσα θέσης και το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα είναι πάνω στην τροχιά ενός ηλεκτρονίου). Έχει κανείς εδώ τον κανόνα εκείνης της θεωρίας: η βάση ήταν η κλασική φυσική και η κβάντωση συνίστατο στον περιορισμό των δυνατών κβαντικών τροχιών σύμφωνα με τη σχέση (E.9) Η θεωρία αυτή εξηγούσε ορισμένα πειραματικά δεδομένα, αλλά ήταν αδύνατο να εξηγήσει άλλα (π.χ. φαινόμενο Zeeman).

Στη συνέχεια, το περίφημο πείραμα των Stern και Gerlach (1921) έδειξε για πρώτη φορά ότι η έννοια της κβάντωσης μπορούσε να επηρεάζει και την κατανομή των σωματιδίων στο χώρο. Έτσι, η μαγνητική ροπή

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \quad (\text{E.10})$$

έπρεπε να παίρνει τιμές κβαντισμένες. Το 1925, για να εξηγήσει τη σταθερότητα των ατόμων, ο Pauli εισάγει για τα ηλεκτρόνια την ομώνυμη "απαγορευτική αρχή", που έμελλε να γίνει ένα βασικό γεγονός της κβαντικής μηχανικής. Την ίδια χρονιά, οι Uhlenbeck και Goudsmit εισάγουν την έννοια της ιδιοστροφορμής (σπιν) για το ηλεκτρόνιο, έννοια που έδωσε τον καινούργιο κβαντικό αριθμό, που χρειαζόταν για την υλοποίηση της απαγορευτικής αρχής του Pauli. Η αντίστοιχη μαγνητική ροπή \mathbf{M}_S για το σπιν \mathbf{S} έπρεπε να είναι

$$\mathbf{M}_S = \frac{e}{mc} \mathbf{S} \quad (\text{E.11})$$

Σημειώνει κανείς εδώ τη διαφορά ενός παράγοντα 2 ανάμεσα στις εκφράσεις (E.10) και (E.11). Η διαφορά αυτή θα πρέπει να περιμένει μέχρι το 1928 για να εξηγηθεί με τη σχετικιστική κβαντική θεωρία του Dirac για το ηλεκτρόνιο.

Είναι ακριβώς η χρονιά του 1925, που οι συνθήκες είχαν ωριμάσει τόσο, ώστε η παλιά κβαντική θεωρία να παραχωρήσει τη θέση της στην κβαντική μηχανική.



Τρίτη περίοδος-Ανάπτυξη κβαντικής μηχανικής 1925-27

Όπως είδαμε, μέχρι το 1925 η κβαντική θεωρία συνιστούσε, από μεθοδολογική άποψη, περισσότερο μια αδιέξοδη επιτομή από υποθέσεις, αρχές, θεωρήματα και συνταγές υπολογισμού, παρά μια συνεπή θεωρία. Όμως, όπως προαναφέρθηκε, οι συνθήκες είχαν ωριμάσει για τη διατύπωση μιας συνεπούς θεωρίας, που όχι μόνο θα εξηγούσε όλα τα μέχρι τότε πειραματικά δεδομένα, αλλά θα μπορούσε να προβλέψει πολύ περισσότερα, όπως συμβαίνει με κάθε μεγάλη θεωρία.

Στην ιστορική εξέλιξη, συνήθως διακρίνει κανείς την πλευρά του προβλήματος, που είναι γνωστή σαν κυματομηχανική. Ήδη από το 1923, το φαινόμενο Compton έδειχνε πως οι ακτίνες X παρουσίαζαν συγχρόνως χαρακτηριστικά σωματιδιακά και κυματικά. Στηριζόμενος στα αποτελέσματα του Compton, ο L. de Broglie προτείνει να γίνει συστηματική σύνδεση κυματικών και σωματιδιακών ιδιοτήτων μέσω της βασικής σχέσης

$$p = \hbar k \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi}, |k| = \frac{2\pi}{\lambda}) \quad (\text{E.12})$$

Η εργασία του de Broglie παρουσιάζεται στον Schrödinger το 1925. Σπρωγμένος από τον ενθουσιασμό του Einstein για την ίδια ιδέα και από την προτροπή του Debye ότι αυτό που χρειάζεται είναι μια κυματική εξίσωση, ο Schrödinger φθάνει στην περίφημη εξίσωσή του το 1926. Με αυτήν λύνει μια ολόκληρη σειρά προβλημάτων. Το 1927 οι Davisson και Germer επιβεβαιώνουν πειραματικά, με τη σκέδαση ηλεκτρονίων πάνω σε ένα κρύσταλλο, ότι κυματικές ιδιότητες φαίνεται πράγματι να συνδέονται με τα ηλεκτρόνια.

Παράλληλα, μια άλλη μέθοδος προσέγγισης αναπτυσσόταν, με την οποία δεν άρχισε να δείχνει ότι η κυματομηχανική του Schrödinger είναι ισοδύναμη. Το 1925, ο Heisenberg κάνει την εξής θεμελιώδη υπόθεση: αφού κανένα πείραμα δεν μετρά κατ' ευθείαν τη θέση και την ορμή ενός ατομικού ηλεκτρονίου, οι κλασικές αυτές έννοιες πρέπει να απορριφθούν για το ηλεκτρόνιο. Ας θυμηθούμε εδώ ότι, για εντελώς ανάλογους λόγους, ο Einstein είχε νωρίτερα απορρίψει την νευτώνια έννοια του απόλυτου χωρόχρονου. Το βασικό πρόβλημα του Heisenberg ήταν όχι πως να λύσει ένα συγκεκριμένο κβαντικό πρόβλημα, αλλά πως να βρει μια μαθηματική δομή για τη κβαντική θεωρία, κατάλληλη για το σύνολο των κβαντικών φαινομένων. Η μαθηματική αυτή δομή φάνηκε αμέσως ότι δεν ήταν άλλη από τη θεωρία των πινάκων, που τώρα αντιστοιχούσαν σε φυσικά μεγέθη. Η νέα κβαντική μηχανική (μηχανική των πινάκων) παρουσιάστηκε από τους Born, Heisenberg και Jordan (γερμανική σχολή του Göttingen). Στη συνέχεια, ο Pauli έδειξε ότι πράγματι



ο φορμαλισμός αυτός μπορούσε να εξηγήσει όλα τα μέχρι τότε γνωστά κβαντικά φαινόμενα.

Την ίδια περίοδο, μια διάλεξη του Heisenberg στο Cambridge δίνει την ευκαιρία στον Dirac να δώσει την δική του προσέγγιση στην κβαντική μηχανική, ανεξάρτητα από τη γερμανική σχολή. Εκεί που ο Heisenberg προβληματιζόταν για τη μεταθετικότητα των πινάκων και των αντίστοιχων κβαντικών φυσικών μεγεθών, ο Dirac, γνώστης των αλγεβρών που χαρακτηρίζονται από σχέσεις μη μετάθεσης, αναγνώριζε ότι τίποτα δεν υποχρεώνει τα φυσικά μεγέθη να μετατίθενται και ενσωμάτωνε τη βασική αυτή ιδιότητα στην δική του διατύπωση της κβαντικής μηχανικής (συμβολισμός Dirac).

Τέλος, το 1927 οι Darwin και Pauli, ανεξάρτητα ο ένας από τον άλλον, έδειχναν πως μπορεί να ενσωματωθεί το σπιν του ηλεκτρονίου στο νέο φορμαλισμό της κβαντικής μηχανικής, ενώ την επόμενη χρονιά 1928 ο Dirac διατύπωνε την περίφημη σχετικιστική του εξίσωση για το ηλεκτρόνιο και εξηγούσε με φυσικό τρόπο το σπιν.

Ήδη, στην ίδια περίοδο ο Born εισάγει στην κβαντική θεωρία την έννοια της πιθανότητας, που δίνεται από το τετράγωνο ενός πλάτους πιθανότητας. Το τελευταίο παριστάνεται από την κυματοσυνάρτηση. Παράλληλα, την ίδια εποχή εμβραθύνεται η θεωρία των μετρήσεων στην κβαντική μηχανική από τον Bohr και τους συνεργάτες του στη σχολή της Κοπεγχάγης.

Θα πρέπει επίσης να αναφέρουμε ότι προς το τέλος αυτής της περιόδου, το 1927, αποσαφηνίζονται οι μαθηματικές βάσεις της κβαντικής μηχανικής (Hilbert, Nordheim, von Neumann). Ιδιαίτερα, εισάγεται η έννοια του χώρου Hilbert, του γενικού πλαισίου δράσης των (γραμμικών) τελεστών.

Η θεωρία της κβαντικής μηχανικής ολοκληρώνεται έτσι μέσα στη χρυσή τριετία 1925-27. Αυτό και και πέρα, εξελικτικά, θα συμπεριλάβει και θα εξηγήσει σχεδόν όλη τη φυσική.

Μερικές χρονολογίες της μετέπειτα εξέλιξης

Αξίζει εδώ να παραθέσουμε μερικές σημαντικές χρονολογίες στη μετέπειτα εξέλιξη της φυσικής, που έχουν άμεση ή έμμεση σχέση με την κβαντική μηχανική, για να σχηματίσει κανείς μια συνολική ιστορική προοπτική. Ένα σχετικό άρθρο που προτείνουμε είναι αυτό των D. Kleppner and R. Jackiw, "100 Years of Quantum Physics", Science, Vol 289 (11 August 2001), p.893.



- 1927 Ο Dirac διατυπώνει τη κβαντική θεωρία για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και εξηγεί πλήρως την εκπομπή και απορρόφηση φωτονίων από τα άτομα.
- 1928 Ο Dirac προτείνει τη σχετικιστική κβαντική θεωρία του ηλεκτρονίου, ανακαλύπτοντας τη θεμελιώδη εξίσωσή του, και προβλέπει την ύπαρξη του αντιηλεκτρονίου ή ποζιτρονίου (και γενικότερα των αντισωματιδίων).
- 1930 Επινόηση του μαγνητικού συντονισμού από τον Rabi
- 1931 Ο Wigner εφαρμόζει τη θεωρία ομάδων στη κβαντομηχανική και αποσαφηνίζει τις έννοιες του σπιν και των συμμετριών χώρου -χρόνου.
- 1932 Ανακάλυψη του ποζιτρονίου στις κοσμικές ακτίνες από τον Anderson.
- 1933 Ο Pauli προβλέπει την ύπαρξη του νετρίνο για να εξηγήσει το φάσμα των ηλεκτρονίων κατά την ακτινοβολία β : $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}_e$.
- 1934 Ο Fermi προτείνει το ομώνυμο μοντέλο για τις ασθενείς αλληλεπιδράσεις, όπως είναι η ακτινοβολία β .
- 1935 Σε αναλογία με την κβαντική ηλεκτροδυναμική, ο Yukawa προτείνει για την εξήγηση των πυρηνικών δυνάμεων την εκπομπή και απορρόφηση ενός καινούργιου σωματιδίου, του π μεσονίου.
- Διατυπώνεται το περίφημο παράδοξο των Einstein-Podolsky-Rosen για την πληρότητα ή όχι της κβαντικής μηχανικής.
- 1938 Ο Bethe προτείνει ένα μηχανισμό πυρηνικών αντιδράσεων για την παραγωγή ενέργειας στα άστρα. Ανακαλύπτεται η σχάση βαριών πυρήνων από τους Hahn-Strassmann και η υπερρευστότητα του ηλίου από τον Kapitza.
- 1941 Ο Landau εξηγεί την υπερρευστότητα του ηλίου ^4He .
- 1942 Ο Fermi πραγματοποιεί ελεγχόμενες πυρηνικές αντιδράσεις στον πρώτο πυρηνικό αντιδραστήρα.
- 1944 Ο Onsager δίνει την πρώτη κβαντική ερμηνεία των μετατροπών φάσης.



- 1945 Οι Bloch και Purcell ανακαλύπτουν τον πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό.
- 1946 Μελέτη των ημιαγωγών και επινοήση του τρανζίστορ (Bardeen, Brattain, Shockley).
- 1947 Μέτρηση της διαφοράς ανάμεσα στις στάθμες $2s \frac{1}{2}$ και $2p \frac{1}{2}$ του ατόμου του υδρογόνου (μετατόπιση Lamb), πράγμα που θα εξηγηθεί από την κβαντική ηλεκτροδυναμική.
- Ανακάλυψη του π μεσονίου στις κοσμικές ακτίνες.
- 1948 Ακριβής μέτρηση της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου, που οδηγεί σε μικρή διαφορά από την τιμή που προβλέπει η εξίσωση του Dirac.
- Ο Gamow εφαρμόζει την πυρηνική φυσική στη μελέτη της κοσμολογίας με βάση το μοντέλο της μεγάλης έκρηξης.
- 1949 Οι Feynman, Schwinger και Tomonaga διατυπώνουν την κβαντική ηλεκτροδυναμική, που αποτελεί πλέον μια θεωρία μοντέλο και περιλαμβάνει όλα τα ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα. Με βάση αυτή γίνεται πολύ ακριβής υπολογισμός για την μετατόπιση Lamb και για την τιμή της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου.
- 1952 Ο D. Bohm προτείνει την αιτιοκρατική θεωρία των κρυμμένων μεταβλητών σαν εναλλακτική θεωρία στην καθιερωμένη κβαντική μηχανική.
- 1953 Οι Gell-Mann και Nishijima προτείνουν τη διατήρηση ενός νέου είδους φορτίου, του υπερφορτίου, για να εξηγήσουν τους κανόνες σχηματισμού των τότε καινούργιων σωματιδίων.
- 1955 Παρατήρηση του αντιπρωτονίου (Segré, Chamberlain, Ypsilantis)
- 1956 Οι Lee και Yang προβλέπουν την παραβίαση της διατήρησης της ομοτιμίας (συμμετρίας αναστροφής χώρου) στις ασθενείς αλληλεπιδράσεις και προτείνουν τρόπους επιβεβαίωσης.
- Ανακαλύπτεται πειραματικά το νετρίνο.
- 1957 Επαλήθευση της παραβίασης της διατήρησης της ομοτιμίας στις ασθενείς αλληλεπιδράσεις (Wu).



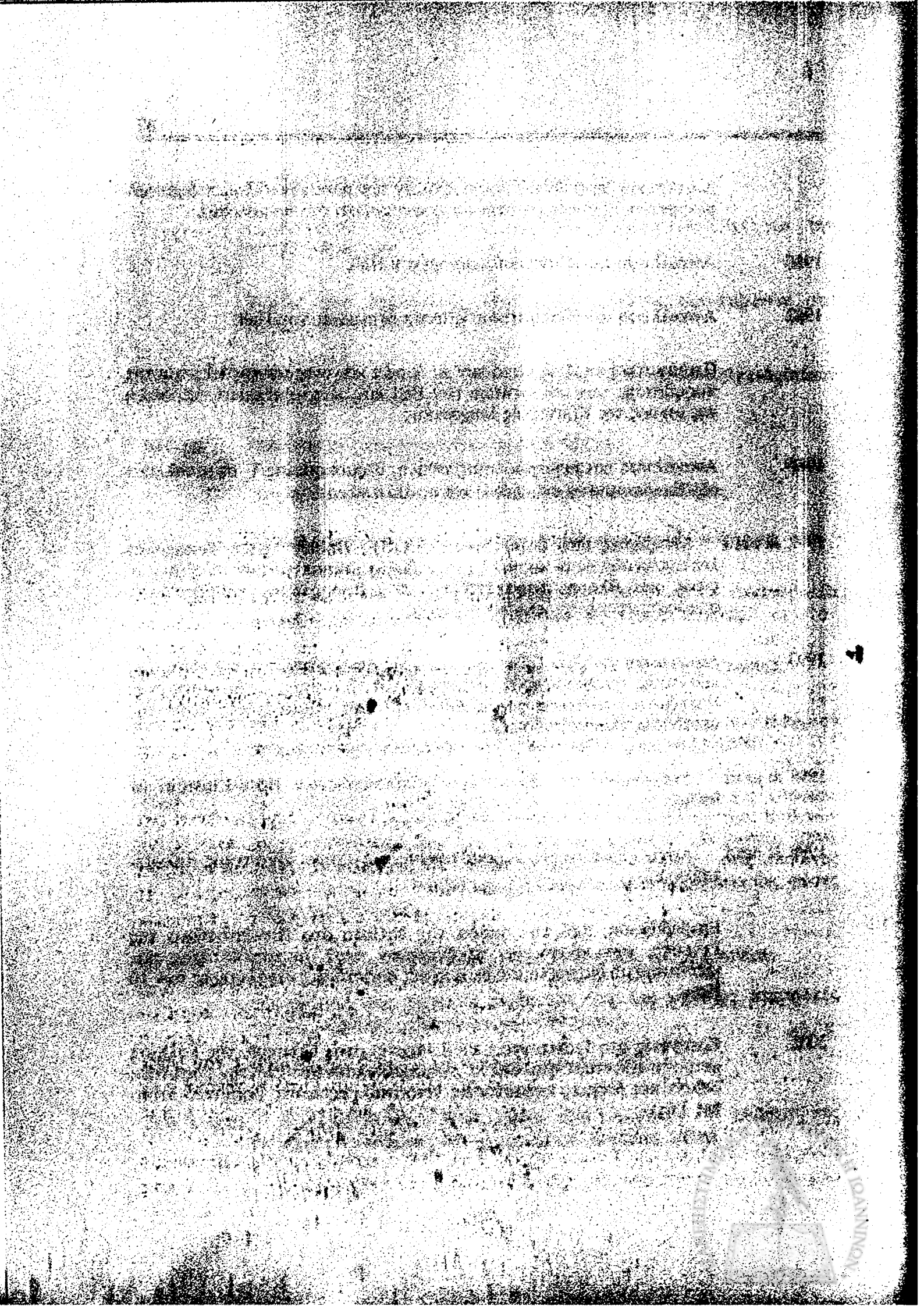
- Ανακάλυψη του φαινομένου Mössbauer.
- Προτείνεται η θεωρία BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer) για την υπεραγωγιμότητα.
- Προτείνεται λεπτομερής εξήγηση της σύνθεσης των πυρήνων στα άστρα (Fowler, Hoyle).
- 1958 Προσδιορισμός της χαμιλτονιανής των ασθενών αλληλεπιδράσεων (Feynman, Gell-Mann).
- 1960-62 Προτείνεται η αρχή του φαινομένου λείζερ.
- Ανακάλυψη του φαινομένου Josephson στους ημιαγωγούς.
- 1964 Οι Gell-Mann και Zweig προτείνουν την ύπαρξη των κουάρκ.
- Οι Penzias και Wilson ανακαλύπτουν την κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου, κατάλοιπο της μεγάλης έκρηξης.
- 1965 Ανακάλυψη της παραβίασης της συμμετρίας CP (Fitch, Cronin).
- Ο J. S. Bell προτείνει τις φημισμένες ανισότητες του, που ελέγχουν θεωρίες διαφορετικές από την καθιερωμένη κβαντομηχανική.
- 1967 Οι S. Weinberg και A. Salam, προεκτείνοντας ιδέες του S.L. Glashow από το 1961, δείχνουν τη δυνατότητα ενοποίησης των ασθενών αλληλεπιδράσεων και του ηλεκτρομαγνητισμού. Η θεωρία αυτή, ελεγμένη πειραματικά, είναι το σημείο αφετηρίας μιας αληθινής επανάστασης στη θεωρία των βασικών αλληλεπιδράσεων της φύσης (θεωρίες βαθμίδας)
- 1970-72 Πειραματική επαλήθευση της εσωτερικής δομής του πρωτονίου.
- Διατύπωση της θεωρίας βαθμίδας για τις ισχυρές πυρηνικές αλληλεπιδράσεις (κβαντική χρωμοδυναμική).
- 1972 Ανακάλυψη της υπερρευστότητας του ηλίου ^3He .
- 1974 & μετά Ανακάλυψη νέων σωματιδίων, που ενισχύουν την υπόθεση της ύπαρξης των κουάρκ σαν στοιχειωδών δομικών λίθων.



Διατύπωση θεωριών ενοποίησης όλων των βασικών αλληλεπιδράσεων με σημαντικές συνέπειες στην αστροφυσική και την κοσμολογία.

- 1980 Ανακάλυψη του κβαντικού φαινομένου Hall.
- 1982 Ανακάλυψη του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall.
- Πειραματική απόδειξη από τον A. Aspect και τους συνεργάτες του της παραβίασης των ανισοτήτων του Bell και, κατά συνέπεια, απόδειξη της ισχύος της Κβαντικής Μηχανικής.
- 1986 Ανακάλυψη υπεραγωγιμότητας υψηλής θερμοκρασίας T_c σε μεταλλικά οξείδια βασισμένα στο χαλκό και σε άλλα υλικά.
- 1992 & μετά Μετρήσεις από δορυφόρους (COBE, Hubble Space Telescope) λεπτομερειών στην κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου, όπως και άλλων παραμέτρων, που θεωρούνται καθοριστικής σημασίας στην σύγχρονη κοσμολογία.
- 1993 Διατύπωση από τον C. Bennett και τους συνεργάτες του της ιδέας της κβαντικής τηλεμεταφοράς (μεταφορά της κβαντικής κατάστασης ενός συστήματος ανάμεσα σε απομακρυσμένους παρατηρητές μέσω της μετάδοσης κλασικής πληροφορίας)
- 1995 & μετά Δημιουργία στο εργαστήριο συμπυκνώσεων Bose-Einstein με άτομα.
- 1998 & μετά Αρχή σημαντικών πειραματικών επιδείξεων κβαντικής τηλεμεταφοράς.
- Επιβεβαίωση, από την ομάδα του N. Gisin στο Πανεπιστήμιο της Γενεύης, των κβαντικών προβλέψεων περί μη τοπικότητας και κβαντικού μη διαχωρισμού σε χωρικές αποστάσεις μεγαλύτερες των 10 Km.
- 2002 Ερευνητές στο Ινστιτούτο Laue-Langevin στην Grenoble της Γαλλίας μετρούν κβαντικά φαινόμενα που προκαλούνται από την βαρύτητα (κβαντικές δέσμιες καταστάσεις νετρονίων μέσα στο βαρυτικό πεδίο της Γης).





ΚΕΦΑΛΑΙΟ Ι

ΘΕΜΕΛΙΩΔΕΙΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΚΑΙ ΣΧΕΣΕΙΣ

Η όλη κατανόησή μας για τη φύση εδράζεται στην κβαντική μηχανική. Από τότε που διατυπώθηκε, η κβαντική μηχανική έχει γνωρίσει μόνο επιτυχίες στην περιγραφή του φυσικού κόσμου και έχει ξεπεράσει, επίσης με επιτυχία, όλες τις δοκιμασίες για την ισχύ της. Σ' αυτήν στηρίζεται η μελέτη του κόσμου των ατόμων και των μορίων, η φυσική των χημικών αλληλεπιδράσεων, η μελέτη των ιδιοτήτων των διαφόρων μορφών της ύλης (υγρών, στερεών και αερίων), η δομή του πυρήνα και των νουκλεονίων, τέλος η φυσική των στοιχειωδών σωματιδίων. Η ισχύς της έχει έτσι επαληθευτεί μέχρι την κλίμακα των 10^{-16} cm.

Παρ' όλα αυτά, κατά την εκμάθησή της κανείς συνήθως δεν αποφεύγει ένα πρώτο σοκ: η κβαντική μηχανική φαίνεται να ανατρέπει την κλασική "κοινή αίσθησή" μας για τη φύση. Όμως, το να καταλάβουμε τη φύση σημαίνει να αναπροσαρμόσουμε την "κοινή αίσθησή" μας κάθε φορά που χρειάζεται. Η κβαντική μηχανική μας διδάσκει αυτό ακριβώς: καταλαβαίνουμε τη φύση όταν θέτουμε ερωτήματα που έχουν νόημα και μπορούν ν' απαντηθούν.

Έτσι, η πιο σπουδαία πρόταση της κβαντικής μηχανικής είναι αυτή: αυτό που ξέρει κανείς είναι αυτό που μπορεί να μετρήσει. Αυτή η πρόταση μπορεί να πάρει, σε κάθε περίπτωση, την κατάλληλη μαθηματική διατύπωση, πράγμα απαραίτητο για τους υπολογισμούς. Όπως θα δούμε, ο συμβολισμός του Dirac είναι ο πιο πρόσφορος για κάτι τέτοιο, γιατί ακριβώς ξεκινά από τη φυσική ενός προβλήματος για να καταλήξει στη μαθηματική του έκφραση. Τόσο η κυματική μηχανική, όσο και η μηχανική των πινάκων, που αποτελούν τις δύο άλλες γλώσσες της κβαντικής μηχανικής, είναι στην πραγματικότητα ειδικές μορφές του γενικού φορμαλισμού του Dirac για την κβαντική μηχανική. Πάντως, για λόγους



βαθμιαίας εξοικείωσης του αναγνώστη, η εισαγωγή και χρησιμοποίηση του φορμαλισμού του Dirac θα γίνει από το επόμενο κεφάλαιο.

1.1. Προκαταρκτικά

ΑΣ ξεκινήσουμε με μια σύντομη ανασκόπηση των μετασχηματισμών Fourier, η μεγάλη σημασία και χρησιμότητα των οποίων θα φανεί στη συνέχεια.

Μια συνεχής μονότιμη συνάρτηση $f(x)$ μιας πραγματικής μεταβλητής x μπορεί να αναπτυχθεί κατά Fourier. Αν η συνάρτηση είναι περιοδική κατά μήκος του άξονα x με περίοδο L , τότε η $f(x)$ μπορεί να γραφεί σαν ένα άθροισμα κυμάτων

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[A_n \cos\left(n \frac{2\pi x}{L}\right) + B_n \sin\left(n \frac{2\pi x}{L}\right) \right] \quad (1.1\alpha)$$

ή, ισοδύναμα,

$$f(x) = \sum_{\lambda} \left[A_{\lambda} \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) + B_{\lambda} \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \right] \quad (1.1\beta)$$

όπου τα επιτρεπόμενα μήκη κύματος λ συνδέονται με την περίοδο L μέσω του μη αρνητικού ακέραιου αριθμού n με τη σχέση

$$\lambda = \frac{L}{n} \quad (1.2)$$

Οι συντελεστές $A_n \equiv A_{\lambda}$ και $B_n \equiv B_{\lambda}$ δίνονται από τους γνωστούς τύπους

$$\begin{aligned} A_n \equiv A_{\lambda} &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) dx, & n > 0 \\ A_{n=0} &= \frac{1}{L} \int_0^L f(x) dx, & n = 0 \\ B_n \equiv B_{\lambda} &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) dx, & n \geq 0 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Η σχέση (1.1) δείχνει ότι η συνάρτηση $f(x)$ είναι μια επαλληλία απ' όλα τα δυνατά κύματα και κάθε συντελεστής A_n , B_n παριστάνει το πλάτος του αντίστοιχου επιμέρους κύματος. Η συνάρτηση $f(x)$, αυτή καθ' αυτή, δεν έχει εν γένει ένα καθορισμένο μήκος κύματος. Χαρακτηρίζεται μόνο από μια περιοδικότητα.

Είναι προτιμότερο, αντί για το μήκος κύματος, να μιλάμε για τον κυματαριθμό k . Συνδέονται με τη σχέση

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.4)$$



Το πλεονέκτημα είναι ότι ο k μπορεί να είναι τόσο αρνητικός, όσο και θετικός αριθμός, ενώ το μήκος κύματος είναι πάντα θετικό. Η έννοια του αρνητικού k φαίνεται καλύτερα, αν αντί για την (1.1) χρησιμοποιήσουμε την εκθετική μορφή γράφοντας,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{i(2\pi n/L)x} \quad (1.5a)$$

ή ακόμα

$$f(x) = \sum_k C_k e^{ikx} \quad (1.5b)$$

Το άθροισμα είναι πάνω σε όλους τους επιτρεπόμενους κυματαριθμούς k , που συνδέονται με τον ακέραιο n με τη σχέση

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad (1.6)$$

όπου τώρα ο ακέραιος n παίρνει όλες τις τιμές από $-\infty$ έως $+\infty$. Οι συντελεστές $C_n \equiv C_k$ δίνονται από τον τύπο

$$C_n \equiv C_k = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) e^{-ikx} dx \quad (1.7)$$

Δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι οι συντελεστές A, B και C συνδέονται μεταξύ τους με τις σχέσεις

$$C_{n>0} = \frac{1}{2} (A_n - iB_n)$$

$$C_{n=0} = A_{n=0}$$

$$C_{n<0} = \frac{1}{2} (A_{|n|} - iB_{|n|})$$

Οι συντελεστές C_k παριστάνουν, όπως και πριν, το πλάτος του επιμέρους επίπεδου κύματος e^{ikx} , κυματαριθμού k . Η συνάρτηση $f(x)$ είναι μια επαλληλία άπειρων επίπεδων κυμάτων. Κάθε επίπεδο κύμα χαρακτηρίζεται από ένα συγκεκριμένο κυματαριθμό. Τα επίπεδα κύματα e^{ikx} με $k = +\frac{2\pi}{\lambda}$ και $k = -\frac{2\pi}{\lambda}$ έχουν το ίδιο μήκος κύματος, αλλά αντίθετους κυματαριθμούς και περιγράφουν επίπεδα κύματα, που έχουν αντίθετες κατευθύνσεις διάδοσης.

Συχνά, οι συναρτήσεις $f(x)$ δεν είναι περιοδικές, αλλά ορίζονται στο διάστημα $-\infty < x < +\infty$. Αν στις σχέσεις (1.5) - (1.7) θεωρήσουμε το όριο $L \rightarrow \infty$, η διαφορά μεταξύ διαδοχικών όρων γίνεται απειροστή και το άθροισμα (1.5) αντικαθίσταται με ολοκλήρωμα:



$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} C_n e^{i(2\pi n/L)x} dn \quad (1.8)$$

όπου ο παράγων $(2\pi)^{-1/2}$ εισάγεται για λόγους συμμετρίας στον μετέπειτα συμβολισμό. Ορίζοντας $g(k) = \frac{LC_n}{2\pi}$, το παραπάνω ολοκλήρωμα μπορεί να γραφεί

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1.9)$$

ενώ η (1.7) ανάγεται στη σχέση

$$g(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (1.10)$$

Τα ολοκληρώματα (1.9) και (1.10) είναι τα γνωστά ολοκληρώματα Fourier και κάθε μια από τις συναρτήσεις $f(x)$, $g(k)$ λέμε ότι είναι μετασχηματισμός Fourier της άλλης. Για να υπάρχουν οι παραπάνω εκφράσεις, θα πρέπει οι συναρτήσεις $f(x)$ και $g(k)$ να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, δηλαδή

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk < \infty. \quad (1.11)$$

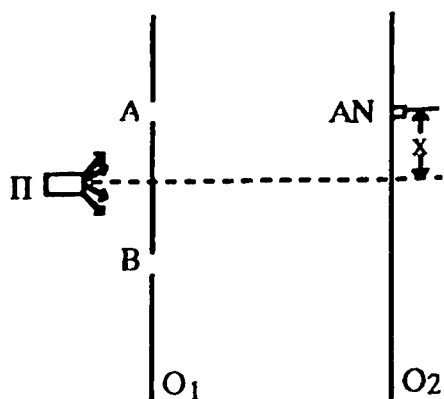
Ισχύει η βασική ιδιότητα των μετασχηματισμών Fourier (θεώρημα Parseval - Plancherel)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk \quad (1.12)$$

1.2. Η έννοια της κυματοσυνάρτησης.

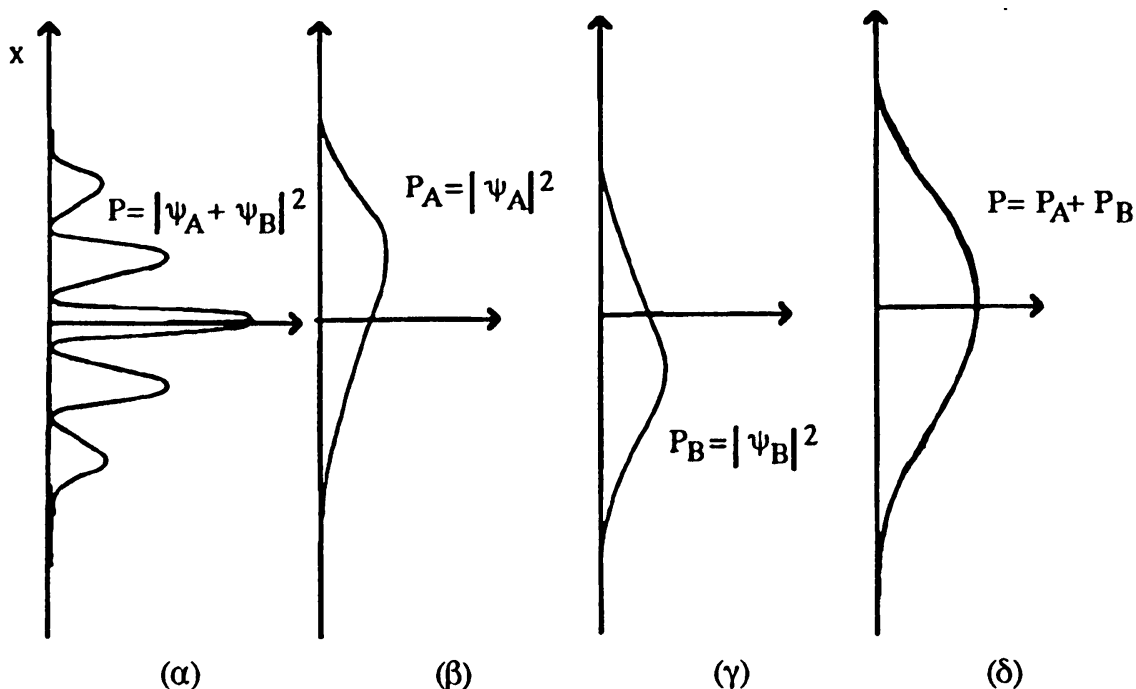
Ας θεωρήσουμε το ιδεατό πείραμα των δύο οπών, στο οποίο σωματίδια μιας ορισμένης ενέργειας, π.χ. ηλεκτρόνια, εκπέμπονται από μια πηγή Π και κατευθύνονται σε μια οθόνη O_1 , που έχει δύο οπές A και B (Σχ.1.1)





Σχ. 1.1. Το πείραμα των δύο οπών.

Σε κάποια απόσταση από την οθόνη O_1 βρίσκεται μια δεύτερη οθόνη O_2 , η οποία είναι εφοδιασμένη με ανιχνευτές AN, που μπορούν να καταγράφουν κάθε ηλεκτρόνιο που προσκρούει στην οθόνη O_2 σε κάθε θέση x . Κατά την ανίχνευση, κάθε ηλεκτρόνιο παρουσιάζει καθαρά τον σωματιδιακό του χαρακτήρα, δηλαδή η μάζα του και το φορτίο του ανιχνεύονται σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο του χώρου και ποτέ δεν διαχέονται σε περισσότερους από



Σχ. 1.2 Η ένταση για κάθε θέση x πάνω στην οθόνη O_2 για διάφορες περιπτώσεις (α) Διάγραμμα συμβολής (β) Οπή A ανοικτή, B κλειστή (γ) Οπή A κλειστή, B ανοικτή (δ) Κλασική κατανομή.

έναν ανιχνευτές για κάθε χρονική στιγμή. Σε αντίθεση, εάν έπειτα από κάποιο χρόνο σχεδιαστεί ο συνολικός αριθμός των ηλεκτρονίων, που φτάνουν στην οθόνη



O₂, συναρτήσει της θέσης x , παίρνει κανείς ένα διάγραμμα συμβολής, που είναι χαρακτηριστικό κυμάτων (Σχ. 1.2(α)). Έτσι, σε ένα μόνο πείραμα, παρουσιάζονται συγχρόνως τόσο ο σωματιδιακός, όσο και ο κυματικός χαρακτήρας των ηλεκτρονίων.

Μια πραγμάτωση αυτού του ιδεατού πειράματος έγινε αρχικά από τον C. Jönsson το 1961, ο οποίος έκανε ένα πείραμα με ηλεκτρόνια ανάλογο με το περίφημο πείραμα διπλής σχισμής του Young, που το 1803 κατέδειξε τις κυματικές ιδιότητες του φωτός. Ο Jönsson χρησιμοποίησε ηλεκτρόνια ενέργειας 40 KeV, τα οποία έχουν μήκος κύματος de Broglie $\lambda = 5 \times 10^{-2} \text{ \AA}$. Οι σχισμές, που σχηματίζονταν σε διάφραγμα χαλκού, είχαν πολύ μικρό εύρος (της τάξεως του $0.5 \times 10^{-6} \text{ m}$), ενώ η απόστασή τους ήταν $d \approx 2 \times 10^{-6} \text{ m}$. Το διάγραμμα συμβολής παρατηρήθηκε σε οθόνη σε απόσταση $D = 0.35 \text{ m}$ από τις σχισμές. Η απόσταση s ανάμεσα σε δύο διαδοχικούς κροσσούς ήταν $s = D(\lambda/d) = 10^{-6} \text{ m}$. Επειδή αυτή είναι πολύ μικρή, οι κροσσοί μεγεθύνθηκαν τοποθετώντας ηλεκτροστατικούς φακούς ανάμεσα στο διάφραγμα με τις σχισμές και την οθόνη. Ανάλογο πείραμα με ηλεκτρόνια έγινε από μια ιαπωνική ομάδα το 1987, ενώ μια γερμανική ομάδα στην Konstanz στα 1990 πέτυχε το ίδιο χρησιμοποιώντας άτομα ηλίου που περνάνε μέσα από διάφραγμα χρυσού. Παρόμοιο πείραμα μπορεί να γίνει με φως. Σ' αυτή την περίπτωση, το φως μπορεί να ανιχνευτεί με το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, δείχνοντας το σωματιδιακό του χαρακτήρα (φωτόνιο), ενώ η ένταση που καταγράφεται στην οθόνη ακολουθεί το διάγραμμα συμβολής, που χαρακτηρίζει την κυματική θεωρία του φωτός. Επίσης, ερευνητές στις Ηνωμένες Πολιτείες στο Εθνικό Ινστιτούτο Μέτρων και Τεχνολογίας (NIST) και το Πανεπιστήμιο του Texas πέτυχαν το 1993 πραγμάτωση του πειράματος των δύο οπών, στο οποίο το ρόλο των δύο οπών παίζουν ζευγάρια ατόμων παγιδευμένων μέσα σε μαγνητικό πεδίο και πάνω στα οποία πέφτει φως.

Θα νόμιζε κανείς ότι το διάγραμμα συμβολής είναι, κατά κάποιο τρόπο, αποτέλεσμα της ανάμειξης μεταξύ ηλεκτρονίων (ή φωτονίων) που περνούν και από τις δύο οπές. Όμως, εάν η προσπίπτουσα ένταση ελαττωθεί μέχρι του σημείου να υπάρχει σε κάθε χρονική στιγμή μόνο ένα σωματίδιο μεταξύ της πηγής και των ανιχνευτών, το διάγραμμα συμβολής πάλι θα παρατηρηθεί. Σχετικό πείραμα με φωτόνια έγινε αρχικά στα μέσα της δεκαετίας του 1980 από μια ομάδα στο Παρίσι. Μπορεί να συμπεράνει κανείς ότι το αποτέλεσμα της συμβολής είναι ιδιότητα και ενός μόνο σωματιδίου. Αντίθετα, εάν η μία οπή κλειστεί, το διάγραμμα συμβολής εξαφανίζεται. Μπορούμε να πούμε ότι όταν και οι δύο οπές είναι ανοικτές, το σωματίδιο δεν εντοπίζεται πριν ανιχνευτεί και, επομένως, μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει περάσει και από τις δύο οπές! Με άλλα λόγια, το σωματίδιο πριν ανιχνευτεί συμπεριφέρεται σαν κύμα, εκδηλώνοντας το σωματιδιακό του χαρακτήρα μόνο κατά την ανίχνευση. Αυτό ασφαλώς είναι σε πλήρη αντίθεση με την κλασική εικόνα,



σύμφωνα με την οποία κάθε σωματίδιο πρέπει να περάσει είτε από τη μια οπή είτε από την άλλη. Ας το δούμε αυτό από πιο κοντά. Εάν καταγράψουμε τα σωματίδια που διέρχονται από την οπή Α, με την οπή Β κλειστή, η κατανομή της έντασης δεν θα δείξει το διάγραμμα συμβολής του σχ. 1.2(α), αλλά θα έχει τη μορφή του σχ. 1.2(β). Όμοια, με την οπή Β ανοικτή και την Α κλειστή, η μορφή της έντασης θα είναι αυτή του σχ. 1.2(γ). Εάν προσθέσουμε τις κατανομές των εντάσεων των σχ. 1.2(β) και 1.2(γ), παίρνουμε τη μορφή του σχήματος 1.2(δ), που είναι πολύ διαφορετική από το διάγραμμα συμβολής (σχ.1.2(α)), το οποίο παίρνουμε όταν δεν ξέρουμε από ποια οπή πέρασε το σωματίδιο. Τη μορφή του σχήματος 1.2(δ) θα παίρναμε, αν πραγματοποιούσαμε το πείραμα των δύο οπών με κλασικά σωματίδια (π.χ. μικρές σφαίρες).

Συνοψίζοντας, θα λέγαμε ότι ο σωματιδιακός και ο κυματικός χαρακτήρας ενός ηλεκτρονίου, φωτονίου κ.λ.π. εκδηλώνονται ταυτόχρονα σε μια φυσική διαδικασία. Αν περιοριζόμασταν μόνο στο σωματιδιακό χαρακτήρα τους, με το να ελέγχουμε παραδείγματος χάρη το δρόμο που αυτά ακολουθούν, θα χάναμε τις εκδηλώσεις του κυματικού τους χαρακτήρα, και αντίθετα. Έτσι, ο σωματιδιακός και ο κυματικός χαρακτήρας των ηλεκτρονίων, φωτονίων κλπ. είναι συμπληρωματικοί (αρχή της συμπληρωματικότητας).

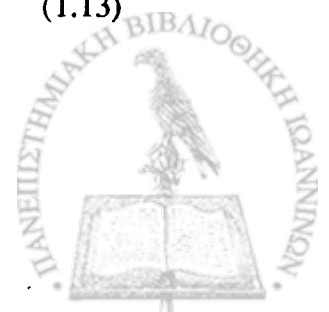
Από τα προηγούμενα γίνεται φανερό ότι η θέση πάνω στην οθόνη O_2 , στην οποία θα ανιχνευτεί ένα σωματίδιο, δεν μπορεί να προβλεφθεί, γιατί κάτι τέτοιο θα σήμαινε ότι μπορεί να προσδιοριστεί η τροχιά του σωματιδίου, πράγμα που, όπως είδαμε, θα εξαφάνιζε το διάγραμμα συμβολής. Αυτό που μπορεί να προβλεφθεί είναι η κατανομή της έντασης, η οποία προκύπτει έπειτα από ένα μεγάλο αριθμό επί μέρους γεγονότων. Αυτό σημαίνει ότι για ένα σωματίδιο η διαδικασία είναι στατιστικής φύσης, έτσι ώστε το μόνο που μπορεί κανείς να προσδιορίσει είναι η πιθανότητα P που έχει ένα σωματίδιο να κτυπήσει την οθόνη O_2 σε κάποια θέση. Η κατανομή της έντασης που προκύπτει πάνω στην οθόνη O_2 προέρχεται ακριβώς από το γεγονός ότι η ένταση είναι ανάλογη της πιθανότητας P .

Στην κλασική κυματική θεωρία του φωτός, η ένταση σε κάθε σημείο δίνεται από το τετράγωνο του πλάτους του κύματος. Σε αναλογία, στην κβαντική μηχανική εισάγεται μια κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$, η οποία παίζει το ρόλο ενός πλάτους πιθανότητας. Όπως θα δούμε αργότερα, η κυματοσυνάρτηση ψ είναι εν γένει μιγαδική ποσότητα. Περιμένουμε τότε ότι η πιθανότητα $P(\mathbf{r},t)$ να βρεθεί ένα σωματίδιο μέσα στη μονάδα του όγκου γύρω από ένα ορισμένο σημείο \mathbf{r} , στη χρονική στιγμή t , είναι ανάλογη του $|\psi|^2$:

$$P(\mathbf{r},t) \propto |\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

(1.13)

Έτσι οι πιθανότητες είναι πραγματικοί θετικοί αριθμοί, όπως πρέπει.



Στο πείραμα των δύο οπών, έστω ότι ψ_A είναι η κυματοσυνάρτηση, που αντιστοιχεί σε κάποιο γεγονός πάνω στην οθόνη O_2 , για την περίπτωση που η οπή A είναι ανοικτή και η B κλειστή, και ψ_B η κυματοσυνάρτηση, που αντιστοιχεί στο ίδιο γεγονός, για την περίπτωση που η οπή B είναι ανοικτή και η A κλειστή. Οι δύο κατανομές του σχ. 1.2 (β) και (γ) αντιστοιχούν στις κατανομές πιθανότητας

$$P_A \propto |\psi_A|^2, \quad P_B \propto |\psi_B|^2 \quad (1.14)$$

Από τη άλλη μεριά, όταν και οι δύο οπές είναι ανοικτές, η κυματοσυνάρτηση ψ λαμβάνεται σαν άθροισμα των δύο κυματοσυναρτήσεων ψ_A και ψ_B :

$$\psi = \psi_A + \psi_B \quad (1.15)$$

Η αντίστοιχη κατανομή πιθανότητας

$$P \propto |\psi|^2 = |\psi_A + \psi_B|^2 \quad (1.16)$$

είναι αυτή που αντιστοιχεί στο διάγραμμα συμβολής του σχήματος 1.2(α). Είναι σημαντικό να παρατηρήσει κανείς ότι προστίθενται τα πλάτη πιθανότητας ψ_A και ψ_B και όχι οι πιθανότητες P_A και P_B , πράγμα που θα έδινε την κατανομή του σχ. 1.2(δ) χωρίς τη δυνατότητα παρατήρησης των φαινομένων συμβολής, που χαρακτηρίζουν την κυματική πλευρά της θεωρίας.

Η παραπάνω ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης σαν πλάτους πιθανότητας (που οφείλεται στον Max Born) μπορεί να διατυπωθεί ακριβέστερα. Έστω ένα μεγάλο σύνολο όμοιων, ανεξάρτητων συστημάτων. Αυτό το σύνολο περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r}, t)$, που περιέχει όλες τις πληροφορίες σχετικά με αυτό. Δεχόμαστε ότι οι μετρήσεις που γίνονται για τον προσδιορισμό της θέσης ενός σωματιδίου σε καθένα από αυτά τα συστήματα, δίνουν την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μέσα σε ένα στοιχείο όγκου $d\mathbf{r} = dx dy dz$ γύρω από το σημείο $\mathbf{r} = (x, y, z)$, στη χρονική στιγμή t , μέσω της σχέσης

$$P(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} \quad (1.17)$$

έτσι ώστε η

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1.18)$$

να εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση. Βλέπουμε λοιπόν ότι η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης είναι στατιστικού χαρακτήρα. Επειδή η συνολική πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο κάπου πρέπει να είναι μονάδα, συμπεραίνουμε ότι η κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r}, t)$ πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (1.19)$$

όπου το ολοκλήρωμα εκτείνεται σε όλο το χώρο. Λέμε ότι η σχέση (1.19) κανονικοποιεί την κυματοσυνάρτηση στη μονάδα, κάτι που είναι δυνατό και



οφείλεται στο ότι η κυματοσυνάρτηση είναι μία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση.

Είναι σημαντικό να παρατηρήσουμε ότι η ίδια η κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$ είναι μια αφηρημένη ποσότητα. Δεχόμαστε όμως ότι περιγράφει πλήρως τη δυναμική κατάσταση ενός συστήματος. Η ποσότητα που έχει φυσική σημασία είναι η $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$. Γι' αυτό, δύο κυματοσυναρτήσεις που διαφέρουν η μια από την άλλη κατά ένα σταθερό πολλαπλασιαστικό παράγοντα με μέτρο μονάδα, δηλαδή όπως λέγεται κατά ένα παράγοντα φάσης e^{ia} , είναι ισοδύναμες και ικανοποιούν την ίδια συνθήκη κανονικοποίησης (1.19).

Όπως είδαμε προηγούμενα (σχέση (1.16)), για να συμπεριλάβει κανείς φαινόμενα συμβολής, πρέπει να θεωρήσει άθροισμα κυματοσυναρτήσεων. Αυτό σημαίνει ότι αν μια δυνατή κατάσταση ενός συνόλου όμοιων συστημάτων περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση ψ_1 και μια άλλη δυνατή κατάσταση του ίδιου συνόλου από μια κυματοσυνάρτηση ψ_2 , τότε ο οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (1.20)$$

όπου c_1 και c_2 είναι σταθερές, είναι επίσης μια κυματοσυνάρτηση που περιγράφει μια άλλη δυνατή κατάσταση του ίδιου συνόλου (αρχή της επαλληλίας).

Αν γράψουμε τις κυματοσυναρτήσεις ψ_1 και ψ_2 με τη μορφή

$$\psi_1 = |\psi_1| e^{ia_1}, \quad \psi_2 = |\psi_2| e^{ia_2}, \quad (1.21)$$

τότε βρίσκουμε ότι

$$|\psi|^2 = |c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2|^2 = |c_1 \psi_1|^2 + |c_2 \psi_2|^2 + 2\text{Re}[c_1 c_2^* |\psi_1| |\psi_2| \exp[i(a_1 - a_2)]] \quad (1.22)$$

Έτσι, εν γένει, $|\psi|^2 \neq |c_1 \psi_1|^2 + |c_2 \psi_2|^2$. Αξίζει εδώ να σημειώσουμε ότι, αν και η ποσότητα $|\psi|^2$ δεν επηρεάζεται από το αν η ίδια η ψ πολλαπλασιαστεί με ένα παράγοντα φάσης e^{ia} , εξαρτάται όμως από τη σχετική φάση ($a_1 - a_2$) των ψ_1 και ψ_2 μέσω του τρίτου όρου στην εξίσωση (1.22), που είναι και ο όρος συμβολής.

1.3. Μορφές κυματοσυνάρτησης.

Ας θεωρήσουμε πρώτα την απλή περίπτωση ενός ελεύθερου σωματίδιου. Ακολουθώντας τον de Broglie, γράφουμε τις σχέσεις:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \quad (1.23)$$



τόσο για υλικά σωματίδια (π.χ. ηλεκτρόνια), όσο και για κβάντα πεδίου (π.χ. φωτόνια). Έστω ένα ελεύθερο σωματίδιο μάζας m με καθορισμένη ορμή p (καθορισμένο κυματαριθμό k) και ενέργεια E (κυκλική συχνότητα ω). Αν η κίνηση γίνεται κατά μήκος του άξονα x και δεχτούμε $p > 0$, συνδέουμε με το ελεύθερο σωματίδιο το επίπεδο κύμα (σχ. 1.3 (α)).

$$\psi(x,t) = A e^{i[kx - \omega(k)t]} \quad (1.24a)$$

ή ισοδύναμα,

$$\psi(x,t) = A e^{i[p x - E(p)t]/\hbar} \quad (1.24b)$$

Οι συναρτήσεις $\omega(k)$ και $E(p)$ θα προσδιοριστούν αργότερα. Αξίζει να σημειώσει κανείς τη σχέση

$$-i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = p \psi \quad (1.25)$$

που προκύπτει από τη μορφή (1.24) της κυματοσυνάρτησης και της οποίας η σημασία θα φανεί στη συνέχεια.

Γενικεύοντας από τη μία στις τρεις διαστάσεις, γράφουμε για το επίπεδο κύμα

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r},t) &= A e^{i[\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t]} \\ &= A e^{i[p\mathbf{r} - E(p)t]/\hbar} \end{aligned} \quad (1.26)$$

όπου \mathbf{k} είναι το άνυσμα διάδοσης (ή κυματάνυσμα)

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.27)$$

Παρόμοια, όπως και προηγούμενα, προκύπτει η σχέση

$$-i \hbar \nabla \psi = p \psi \quad (1.28)$$

Οι σχέσεις (1.25) και (1.28) υποδεικνύουν ότι για ένα ελεύθερο σωματίδιο η ορμή μπορεί να παρασταθεί από τον διαφορικό τελεστή (στο εξής θα συμβολίζουμε έναν τελεστή με το σύμβολο \hat{p} πάνω από το αντίστοιχο κλασικό φυσικό μέγεθος)

$$\hat{p} = -i \hbar \nabla \quad (1.29)$$

που δρα πάνω στην κυματοσυνάρτηση ψ . Δεχόμαστε κατ' επέκταση ότι ο τελεστής (1.29) εξακολουθεί να διατηρεί την ίδια μορφή και για σωματίδια που δεν είναι ελεύθερα.

Οι κυματοσυναρτήσεις (1.24) και (1.26) θα πρέπει να κανονικοποιηθούν στη μονάδα για να διατηρηθεί η έννοια της πιθανότητας

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$



Όμως, τα επίπεδα κύματα (1.24) και (1.26) δεν ικανοποιούν αυτή την απαίτηση, γιατί

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = |A|^2 \int d\mathbf{r} \quad (1.30)$$

και το ολοκλήρωμα (1.30) απειρίζεται. Για να υπερπηδήσει κανείς τη δυσκολία υπάρχουν δύο τρόποι. Ο πρώτος είναι να εγκαταλείψει την έννοια της απόλυτης πιθανότητας, όταν έχει να κάνει με μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις, και να την αντικαταστήσει με την έννοια της σχετικής πιθανότητας: $|\psi(\mathbf{r}_1,t)|^2/|\psi(\mathbf{r}_2,t)|^2$. Για την ειδική περίπτωση του επίπεδου κύματος $|\psi|^2 = |A|^2$ και έτσι υπάρχει ίση πιθανότητα να βρεί κανείς το ελεύθερο σωματίδιο σε οποιαδήποτε θέση. Το επίπεδο κύμα παριστάνει μια εξιδανικευμένη κατάσταση, όπου το σωματίδιο έχει μια τελείως καθορισμένη ορμή, αλλά συγχρόνως και μια τελείως ακαθόριστη θέση. Αυτό μας οδηγεί στο δεύτερο τρόπο διεξόδου: να εγκαταλείψουμε την ιδέα ενός ελεύθερου σωματίδιου με τέλεια καθορισμένη ορμή και να κατασκευάσουμε μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων, με διαφορετικές ορμές, που θα σχηματίσουν ένα εντοπισμένο στο χώρο κυματοπακέτο, το οποίο θα μπορεί να κανονικοποιηθεί στη μονάδα. Το κυματοπακέτο, που έτσι κατασκευάζεται, παριστάνει ένα σωματίδιο με αρκετά ακριβείς τιμές τόσο για την ορμή, όσο και για τη θέση.

Ας θεωρήσουμε πρώτα τη μονοδιάστατη περίπτωση. Για να περιγράψουμε ένα σωματίδιο εντοπισμένο σε μια περιοχή του άξονα x , η πιο γενική επαλληλία επίπεδων κυμάτων γράφεται

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i[px-E(p)t]/\hbar} \Phi(p) dp \quad (1.31)$$

Η συνάρτηση $\Phi(p)$ είναι το πλάτος του επίπεδου κύματος που αντιστοιχεί στην ορμή p . Για τη συνάρτηση $\Phi(p)$ δεχόμαστε ότι παρουσιάζει ένα απότομο μέγιστο στην τιμή $p = p_0$ και πέφτει γρήγορα στο μηδέν έξω από το διάστημα $(p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$ (σχ.1.3 (γ)). Από την (1.31) συμπεραίνουμε ότι η $|\psi(x,t)|$ είναι μέγιστη, όταν η φάση $[px - E(p)t]$ είναι σχεδόν σταθερή γύρω από την τιμή $p = p_0$. Διαφορετικά, αν μεταβαλλόταν σημαντικά στο διάστημα $(p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$, τότε ο παράγων $\exp\{i[px - E(p)t]\}$ θα ταλαντώνονταν αρκετά γρήγορα, με αποτέλεσμα η τιμή του ολοκληρώματος (1.31) να ήταν μικρή. Η $|\psi(x,t)|$ θα είναι λοιπόν σημαντική σε μια περιορισμένη περιοχή, με το μέγιστο να συμβαίνει όταν

$$\frac{d}{dp} [px - E(p)t] \Big|_{p=p_0} = 0 \quad (1.32)$$



Από τη συνθήκη αυτή συνάγεται ότι το κέντρο του κυματοπακέτου (το μέγιστο του $|\psi(x,t)|^2$) κινείται σύμφωνα με το νόμο $x = v_{ομ} t$, όπου

$$v_{ομ} = \left. \frac{dE(p)}{dp} \right|_{p=p_0} \quad (1.33)$$

Η ταχύτητα $v_{ομ}$ είναι γνωστή σαν ομαδική ταχύτητα του κυματοπακέτου. Ισοδύναμα, μπορεί να γραφεί

$$v_{ομ} = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (1.34)$$

Εν γένει, η ομαδική ταχύτητα είναι διαφορετική από τη φασική ταχύτητα

$$v_{φασ} = \frac{\omega(k_0)}{k_0} = \frac{E(p_0)}{p_0}, \quad (1.35)$$

που είναι η ταχύτητα διάδοσης για το επίπεδο κύμα

$$Ae^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} = A e^{i[p_0 x - E(p_0)t]/\hbar}$$

Βάσει της αρχής της αντιστοιχίας, στο μακροσκοπικό όριο της κίνησης του σωματιδίου θα πρέπει να ξαναβρίσκει κανείς τους νόμους της κλασικής μηχανικής. Συνεπώς, στο κλασικό όριο, που η έκταση του κυματοπακέτου θα είναι αμελητέα, η ομαδική ταχύτητα $v_{ομ}$ θα είναι η κλασική ταχύτητα του σωματιδίου

$$v_{ομ} = v_{κλ} = \frac{p_0}{m} \quad (1.36)$$

Από τις σχέσεις (1.33) και (1.36) έχουμε την συναρτησιακή εξάρτηση της $E(p)$ από την p :

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} \quad (1.37)$$

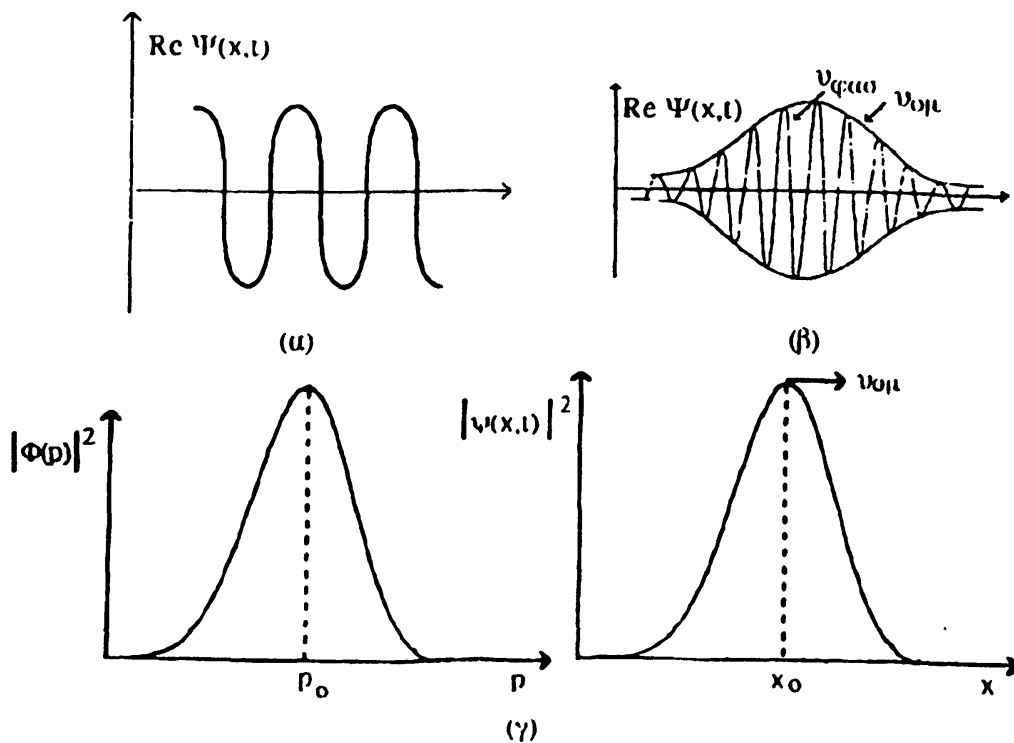
Αναπτύσσοντας την $E(p)$ γύρω από το σημείο $p = p_0$ και κρατώντας από το ανάπτυγμα τους όρους μέχρι και πρώτης τάξης, βρίσκουμε ότι η σχέση (1.31) ανάγεται στη μορφή

$$\psi(x,t) = e^{i[p_0 x - E(p_0)t]/\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p_0)(x-v_{ομ}t)/\hbar} \Phi(p) dp \quad (1.38)$$

Φέρον κύμα

Μεταβαλλόμενο πλάτος $A(x,t)$





Σχ. 1.3 Μορφές κυματοσυνάρτησης: (α) Επίπεδο κύμα με καθορισμένη ορμή, αλλά τελείως ακαθόριστη θέση. (β) Κυματοπακέτο με σχετικά καθορισμένες τιμές για την ορμή και τη θέση, όπως δείχνουν τα σχήματα (γ).

Επειδή $A(x,t=0)=A(x+u_{ομ}t,t)$, συνάγεται ότι το κυματοπακέτο διαδίδεται χωρίς αλλαγή του σχήματός του με την ομαδική ταχύτητα $u_{ομ}$ (σχ. 1.3(β)).

Εξ άλλου, η σχέση $|\psi(x,t=0)|^2 = |\psi(x+u_{ομ}t,t)|^2$ δείχνει ότι η κορυφή του μέτρου $|\psi|^2$, δηλαδή το κέντρο του κυματοπακέτου, διαδίδεται με την ομαδική ταχύτητα $u_{ομ}$, όπως αναφέρθηκε ήδη (σχ. 1.3(γ)).

Από τη σχέση (1.31) προκύπτει ότι μπορούμε παράλληλα με την $\psi(x,t)$ να εισάγουμε τη $\Phi(p,t)$, όπου

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p,t) dp \quad (1.39)$$

και

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x,t) dx \quad (1.40)$$

είναι αμοιβαίοι μετασχηματισμοί Fourier. Η συνάρτηση $\Phi(p,t)$ ονομάζεται κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών και η (1.40) αποτελεί το γενικό ορισμό της.



Η ερμηνεία της $\Phi(p,t)$ σαν πλάτους πιθανότητας στο χώρο των ορμών είναι η ίδια με εκείνη της $\psi(x,t)$ στο χώρο των θέσεων. Από το θεώρημα Parseval-Plancherel (σχέση (1.12)), συνάγεται ότι, αν η $\psi(x,t)$ είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα, το ίδιο θα ισχύει και για την $\Phi(p,t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(p,t)|^2 dp = 1 \quad (1.41)$$

Η σχέση (1.41) εκφράζει παράλληλα τη διατήρηση της πιθανότητας, που είναι προφανώς μια απαίτηση της θεωρίας.

Όλες οι παραπάνω εκφράσεις για μονοδιάστατα κυματοπακέτα μπορούν εύκολα να γενικευτούν στις τρεις διαστάσεις. Ξεκινώντας από την (1.26), γράφουμε την επαλληλία

$$\begin{aligned} \psi(r,t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i[pr - E(p)t]/\hbar} \Phi(p) dp \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{ipr/\hbar} \Phi(p,t) dp \end{aligned} \quad (1.42)$$

απ' όπου

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-ipr/\hbar} \psi(r,t) dr \quad (1.43)$$

Ο ορισμός (1.43) για τη κυματοσυνάρτηση $\Phi(p,t)$ στο χώρο των ορμών είναι αρκετά γενικός και ισχύει για όλες τις μορφές των κυματοσυναρτήσεων $\psi(r,t)$. Αν η $\psi(r,t)$ έχει κανονικοποιηθεί στη μονάδα, το ίδιο θα ισχύει και για την $\Phi(p,t)$

$$\int |\psi(r,t)|^2 dr = \int |\Phi(p,t)|^2 dp = 1 \quad (1.44)$$

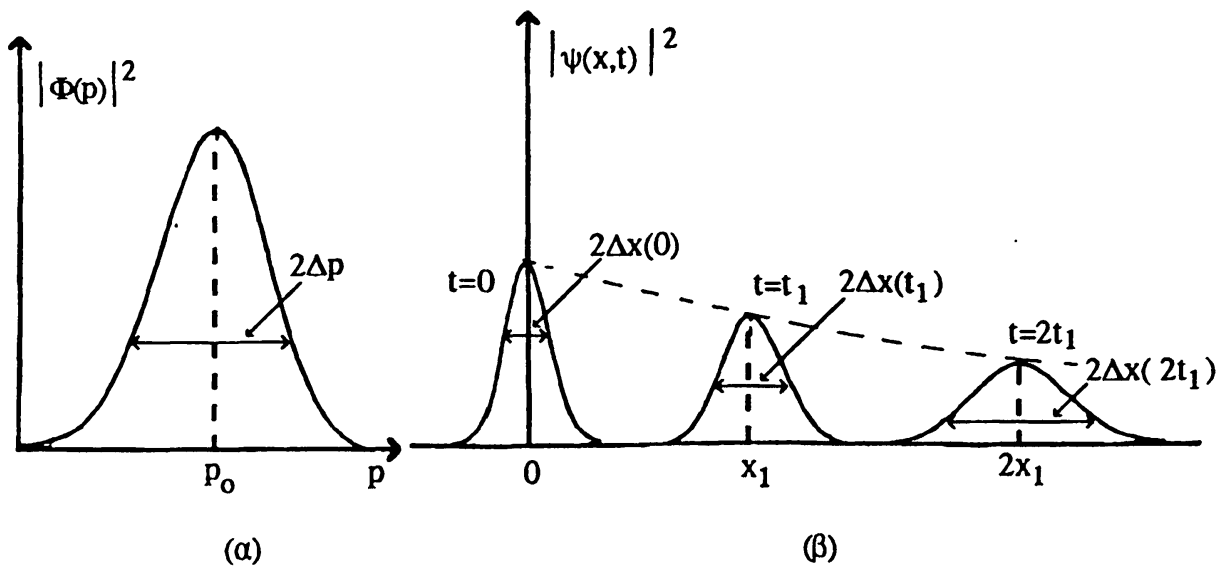
Η ποσότητα $|\Phi(p,t)|^2 dp$ είναι η πιθανότητα να έχει το σωματίδιο ορμή, που να βρίσκεται μέσα στο στοιχείο όγκου $dp = dp_x dp_y dp_z$ του χώρου των ορμών γύρω από το σημείο $p = (p_x, p_y, p_z)$.

Ας θεωρήσουμε, τέλος, την ειδική περίπτωση του κυματοπακέτου Gauss στην οποία η συνάρτηση $\Phi(p)$ είναι μια συνάρτηση Gauss με μέγιστο γύρω από το σημείο $p = p_0$:

$$\Phi(p) = C \exp \left[-\frac{(p-p_0)^2}{2(\Delta p)^2} \right] \quad (1.45)$$

όπου Δp είναι το εύρος της κατανομής για την $\Phi(p)$, έτσι ώστε η $|\Phi(p)|^2$ να πέφτει στο $1/e$ του μέγιστού της στις θέσεις $(p_0 \pm \Delta p)$ (σχ. 1.4(α)).





Σχ. 1.4. Κυματοπακέτο Gauss

Η σταθερά κανονικοποίησης C μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνθήκη κανονικοποίησης (1.41) για $t = 0$. Χρησιμοποιώντας τη γνωστή μαθηματική σχέση

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2 - \beta u} du = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} e^{\beta^2/4\alpha}, \quad (1.46)$$

εύκολα προκύπτει ότι

$$C = \pi^{-1/4} (\Delta p)^{-1/2} \quad (1.47)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις βρίσκουμε ότι η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση για τη θέση (κυματοπακέτο Gauss) είναι

$$\begin{aligned} \psi(x,t=0) &= \frac{1}{(2\pi\hbar^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p) dp = \\ &= \pi^{-1/4} \hbar^{-1/2} (\Delta p)^{1/2} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-(\Delta p)^2 x^2 / 2\hbar^2} \end{aligned} \quad (1.48)$$

Η σχέση (1.48) δείχνει το πολύ σημαντικό αποτέλεσμα ότι και η $\psi(x,t=0)$ είναι επίσης μια συνάρτηση Gauss (αν εξαιρέσει κανείς το παράγοντα φάσης $e^{ip_0 x/\hbar}$). Αυτό αποτελεί γενική ιδιότητα των μετασχηματισμών Fourier. Βλέπουμε ότι η $|\psi(x,t=0)|^2$ παρουσιάζει μέγιστο στο $x = 0$ και πέφτει στο $1/e$ της μέγιστης τιμής της στις θέσεις $x = \pm \Delta x$, όπου $\Delta x = \hbar/\Delta p$ είναι το εύρος της κατανομής για την $|\psi(x,t=0)|^2$ (σχ. 1.4(β)). Έχουμε λοιπόν ότι για ένα κυματοπακέτο Gauss $\Delta x \Delta p = \hbar$. Έτσι, όσο πιο μικρό είναι το Δx , όσο δηλαδή πιο πολύ εντοπισμένο είναι το σωματίδιο στο χώρο των θέσεων, τόσο πιο μεγάλο είναι το Δp , τόσο δηλαδή πιο "απλωμένο" είναι το σωματίδιο στο χώρο των ορμών, και αντίστροφα. Πριν προχωρήσουμε στη συζήτηση της πολύ σπουδαίας αυτής ιδιότητας, ας δούμε πρώτα



πως εξελίσσεται ένα κυματοπακέτο Gauss με το χρόνο. Για την κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ βρίσκουμε

$$\psi(x,t) = \pi^{-1/4} \left[\frac{\Delta p/\hbar}{1+i(\Delta p)^2 t/m\hbar} \right]^{1/2} \times \exp \left[\frac{ip_0 x/\hbar - (\Delta p/\hbar)^2 x^2/2 - ip^2_0 t/2m\hbar}{1+i(\Delta p)^2 t/m\hbar} \right] \quad (1.49)$$

και, συνεπώς, για την πυκνότητα πιθανότητας έχουμε

$$|\psi(x,t)|^2 = \pi^{-1/2} \frac{\Delta p/\hbar}{[1+(\Delta p)^4 t^2/m^2 \hbar^2]^{1/2}} \times \exp \left[- \frac{(\Delta p/\hbar)^2 (x-v_{0m} t)^2}{1+(\Delta p)^4 t^2/m^2 \hbar^2} \right] \quad (1.50)$$

όπου $v_{0m} = p_0/m$ είναι η ομαδική ταχύτητα του κυματοπακέτου. Το εύρος του κυματοπακέτου, που καθορίζεται από τα σημεία $x - v_{0m} t = \pm \Delta x$, στα οποία η $|\psi(x,t)|^2$ πέφτει στο $1/e$ της μέγιστης τιμής της, δίνεται από τη σχέση

$$\Delta x(t) = \frac{\hbar}{\Delta p} \left[1 + \frac{(\Delta p)^4 t^2}{m^2 \hbar^2} \right]^{1/2} \equiv \Delta x(0) \left[1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \Delta x(0)^4} \right]^{1/2} \quad (1.51)$$

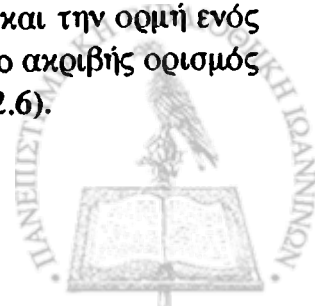
και, συνεπώς, αυξάνεται με το χρόνο. Για χρόνο $t \ll \frac{m\hbar}{(\Delta p)^2} = \frac{m\Delta x(0)^2}{\hbar}$, ο δεύτερος όρος στη σχέση (1.51) είναι πολύ μικρός και το κυματοπακέτο διαδίδεται χωρίς σημαντική αλλαγή του εύρους του (βλ. και πρόβλημα 1.2). Το άπλωμα της πυκνότητας πιθανότητας (1.50) δείχνεται στο σχ. 1.4(β), όπου η $|\psi(x,t)|^2$ σχεδιάζεται για τις χρονικές στιγμές $t=0$, $t=t_1$ και $t=2t_1$.

1.4. Σχέσεις αβεβαιότητας του Heisenberg

Είδαμε στην περίπτωση του κυματοπακέτου Gauss ότι το εύρος Δx στο χώρο των θέσεων συνδέεται με το εύρος Δp στο χώρο των ορμών με τη σχέση $\Delta x \Delta p \geq \hbar$. Πράγματι, αποτελεί γενική ιδιότητα των αντίστοιχων μετασχηματισμών Fourier ότι οι "αβεβαιότητες" στη θέση και την ορμή ικανοποιούν τη σχέση

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \quad (1.52)$$

Η σχέση (1.52) μέσα στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής ονομάζεται σχέση αβεβαιότητας του Heisenberg για τη θέση και την ορμή. Σύμφωνα με αυτή, δεν μπορεί να προετοιμάσει κανείς μια κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος, στην οποία να μπορεί να προσδιορίσει συγχρόνως τόσο τη θέση, όσο και την ορμή ενός σωματιδίου, με όση ακρίβεια θέλει. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο ακριβής ορισμός των "αβεβαιότητων" Δx και Δp θα δοθεί αργότερα (βλ. §1.6 και §2.6).



Η σχέση (1.52) μπορεί εύκολα να γενικευτεί στις τρεις διαστάσεις χρησιμοποιώντας τους τριδιάστατους μετασχηματισμούς Fourier (1.42-1.43). Έτσι, η τριδιάστατη μορφή των σχέσεων αβεβαιότητας του Heisenberg για τη θέση και την ορμή είναι

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar \quad (1.53)$$

Πρέπει να παρατηρηθεί εδώ ότι δεν υπάρχει σχέση αβεβαιότητας ανάμεσα σε μια καρτεσιανή συντεταγμένη για τη θέση ενός σωματιδίου και σε μια διαφορετική καρτεσιανή συντεταγμένη για την ορμή. Οι σχέσεις αβεβαιότητας αφορούν μόνο στα "συμπληρωματικά" ζεύγη $(\Delta x, \Delta p_x)$, $(\Delta y, \Delta p_y)$ και $(\Delta z, \Delta p_z)$.

Αξίζει να τονίσουμε ότι οι σχέσεις αβεβαιότητας του Heisenberg δεν περιορίζουν την ακρίβεια με την οποία μπορούμε να μετρήσουμε είτε τη θέση, είτε την ορμή ενός σωματιδίου. Αλλά, εάν π.χ. μια μέτρηση δώσει τη θέση ενός σωματιδίου με ακρίβεια Δx , μετέπειτα μετρήσεις της ορμής θα δώσουν ένα σύνολο αποτελεσμάτων, που εκτείνονται σ' ένα εύρος που προσδιορίζεται από τη σχέση $\Delta p \geq \hbar/\Delta x$. Το ίδιο ισχύει για μέτρηση πρώτα της ορμής και έπειτα της θέσης του σωματιδίου. Θα πρέπει επίσης να τονιστεί ότι οι περιορισμοί στις μετρήσεις, που επιβάλλουν οι σχέσεις αβεβαιότητας, αποτελούν εγγενή ιδιότητα των κβαντικών συστημάτων και δεν έχουν τίποτε να κάνουν με τα πειραματικά σφάλματα, που γίνονται κατά τις μετρήσεις.

Μια σχέση αβεβαιότητας ανάμεσα στο χρόνο και την ενέργεια, ανάλογη με τη σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής, υπάρχει και μπορούμε να τη βρούμε ανάλογα. Έστω η κυματοσυνάρτηση $\psi(t) = \psi(\mathbf{r}_0, t)$ σε κάποιο σημείο \mathbf{r}_0 , που περιγράφει την κατάσταση ενός σωματιδίου. Μπορούμε να θεωρήσουμε την $\psi(t)$ σαν ένα κυματοπακέτο στο χρόνο, που είναι αμελητέο εκτός από ένα διάστημα Δt . Μπορούμε τότε να την εκφράσουμε σαν επαλληλία μονοχρωματικών κυμάτων κυκλικής συχνότητας $\omega = E/\hbar$

$$\psi(t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt/\hbar} \Phi(E) dE \quad (1.54)$$

όπου η $\Phi(E)$ δίνεται από τους γνωστούς τύπους των μετασχηματισμών Fourier

$$\Phi(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt/\hbar} \psi(t) dt \quad (1.55)$$

Όπως και στην περίπτωση του κυματοπακέτου στο χώρο (βλ. σχέση (1.48)), έτσι κι εδώ συνάγεται ότι, επειδή η $\psi(t)$ παίρνει σημαντικές τιμές μόνο για ένα διάστημα Δt , η $\Phi(E)$ είναι σημαντική για μια περιοχή ενεργειών εύρους ΔE που ικανοποιεί τη σχέση αβεβαιότητας χρόνου-ενέργειας



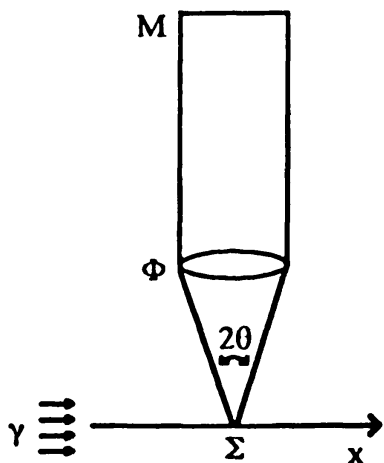
$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (1.56)$$

Επειδή ο χρόνος t είναι πάντα μια παράμετρος και όχι μια δυναμική μεταβλητή, όπως η θέση ή η ορμή, η ερμηνεία της σχέσης (1.56) είναι κάπως διαφορετική από εκείνη των σχέσεων (1.53). Η σχέση (1.56) σημαίνει ότι, εάν η δυναμική κατάσταση ενός συστήματος, που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση ψ , υπάρχει μόνο για ένα διάστημα χρόνου Δt , τότε οι μετρήσεις της ενέργειας θα δώσουν ένα σύνολο τιμών που εκτείνονται σε ένα εύρος $\Delta E \geq \hbar / \Delta t$.

Οι σχέσεις αβεβαιότητας θέσης - ορμής (1.53) και χρόνου - ενέργειας (1.56) αποτελούν παραδείγματα μιας γενικότερης αρχής, της αρχής της αβεβαιότητας (ή απροσδιοριστίας) του Heisenberg. Σύμφωνα με την αρχή αυτή, είναι αδύνατο να προετοιμάσει κανείς μια κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος, στην οποία και τα δύο μέλη ενός ζευγαριού μεταβλητών, που ονομάζονται συμπληρωματικές μεταβλητές, να έχουν τιμές ταυτόχρονα ορισμένες με οσηδήποτε ακρίβεια θέλει. Εάν μετρηθεί η μια μεταβλητή ενός ζευγαριού συμπληρωματικών μεταβλητών, χάνεται πληροφορία για την άλλη. Τέτοια ζευγάρια συμπληρωματικών μεγεθών, εκτός από τα (x,p) και (t,E) , υπάρχουν και άλλα, όπως θα δούμε.

Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg είναι ασφαλώς αποτέλεσμα του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού, σύμφωνα δε με την αρχή της συμπληρωματικότητας του Bohr, κυματικές και σωματιδιακές ιδιότητες των φυσικών συστημάτων είναι συμπληρωματικές και χρειάζονται και οι δύο για μια πλήρη περιγραφή της φύσης.

Ο Heisenberg συζήτησε το ιδεατό πείραμα ενός μικροσκοπίου ακτίνων γ , σαν μια απόπειρα να μετρηθεί η θέση ενός σωματιδίου με όσο πιο μεγάλη ακρίβεια είναι δυνατόν. Το πείραμα συνίσταται στο να φωτίσει κανείς με ακτίνες γ ένα σωματίδιο Σ και να παρατηρήσει την εικόνα του μέσα από ένα μικροσκόπιο M (σχ.1.5).



Σχ. 1.5 Το μικροσκόπιο ακτίνων γ του Heisenberg



Αν λ είναι το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, η ακρίβεια που μπορεί να προσδιοριστεί η θέση του σωματιδίου δίνεται από τη γνωστή σχέση της οπτικής

$$\Delta x = \lambda / \sin \theta \quad (1.57)$$

όπου θ το μισό της γωνίας "ανοίγματος" ανάμεσα στο σωματίδιο και το φακό Φ . Μετά τη σκέδαση Compton μ' ένα φωτόνιο, που στη συνέχεια εισέρχεται στο μικροσκόπιο, η αβεβαιότητα στην ορμή του σωματιδίου κατά τη διεύθυνση x θα είναι

$$\Delta p \approx p_{\gamma} \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta \quad (1.58)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (1.57) και (1.58) βλέπουμε ότι μετά την παρατήρηση θα ισχύει

$$\Delta x \Delta p \approx h \quad (1.59)$$

πράγμα που είναι συνεπές με τις σχέσεις αβεβαιότητας (1.53).

Ας δούμε τώρα μερικά χαρακτηριστικά παραδείγματα εφαρμογών των σχέσεων αβεβαιότητας, που δείχνουν τη βαθιά σημασία τους.

α) Οι σχέσεις αβεβαιότητας θέσης - ορμής παρέχουν ένα απλό τρόπο υπολογισμού της ενέργειας της βασικής κατάστασης ενός συστήματος, τουλάχιστον σε ότι αφορά την τάξη μεγέθους. Η βάση ενός τέτοιου υπολογισμού είναι η παραδοχή ότι η τιμή της αβεβαιότητας Δp είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με την ορμή p , που αντιστοιχεί στη βασική κατάσταση. Ας θεωρήσουμε π.χ. ένα ηλεκτρόνιο μάζας $m = 10^{-27}$ gr περιορισμένο μέσα σε ατομικές διαστάσεις ($r_0 = 10^{-8}$ cm = 1 \AA). Η κινητική του ενέργεια θα είναι

$$E_{\text{κιν}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \quad (1.60)$$

και, συνεπώς,

$$E_{\text{κιν}} = 10^{-11} \text{ erg} = 10 \text{ eV} \quad (1.61)$$

Η τιμή αυτή είναι πράγματι περίπου η σωστή για την κινητική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου στη βασική κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου.

Εξ άλλου, για ένα πρωτόνιο ή νετρόνιο ($m = 10^{-24}$ gr) περιορισμένο στο εσωτερικό ενός πυρήνα ($r_0 = 10^{-13}$ cm), έχουμε

$$E_{\text{κιν}} = 100 \text{ MeV} \quad (1.62)$$

Κινητικές ενέργειες αυτής της τάξης μεγέθους είναι πράγματι τυπικές για νουκλεόνια στη βασική κατάσταση για μεσαίου βάρους πυρήνες.

Το ότι πράγματι υπάρχει μια κατώτερη τιμή για την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων στα άτομα και ότι, συνεπώς, τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να πέσουν



πάνω στον πυρήνα (πράγμα που εξηγεί την ευστάθεια των ατόμων, σε αντίθεση με την κλασική εικόνα), φαίνεται αν θεωρήσουμε το απλό παράδειγμα του ατόμου του υδρογόνου. Αν γράψουμε για την ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου μέσα στο πεδίο του πρωτονίου

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad (1.63)$$

η σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής μας επιτρέπει να έχουμε

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \quad (1.64)$$

Το ελάχιστο της E συμβαίνει για

$$\frac{dE}{dr} \Big|_{r=r_0} = 0, \quad (1.65)$$

από την οποία βρίσκουμε

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_0 \quad (1.66)$$

όπου a_0 η πρώτη ακτίνα του Bohr. Αντικαθιστώντας στην (1.64) παίρνουμε

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} \quad (1.67)$$

Η τιμή αυτή είναι η ελάχιστη ενέργεια του ατόμου του υδρογόνου, που είναι συμβαστική με την αρχή της αβεβαιότητας, και τυχαίνει να συμπίπτει ακριβώς με την ενέργεια της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου, όπως θα δούμε αργότερα στην §6.4 (αυτό βέβαια δεν θα πρέπει να ληφθεί υπέρ το δέον σοβαρά, μια και το παραπάνω επιχείρημα είναι κατ' αρχήν καθαρά ποιοτικό).

β) Η πιο σημαντική εφαρμογή της σχέσης αβεβαιότητας χρόνου -ενέργειας αφορά στους χρόνους ζωής διεγερμένων καταστάσεων σε άτομα και πυρήνες. Για ένα άτομο ή ένα πυρήνα που βρίσκεται σε διεγερμένη κατάσταση, αν και δεν μπορεί να προβλεφθεί ο χρόνος κατά τον οποίο θα εκπνευθεί ένα φωτόνιο, μπορεί να προβλεφθεί η πιθανότητα να γίνει μια τέτοια μετάβαση από μια διεγερμένη κατάσταση σε μια άλλη (ή και στη βασική) σε δεδομένο χρόνο. Αυτό καθορίζει και το χρόνο ζωής τ αυτής της διεγερμένης κατάστασης. Η κυματοσυνάρτηση $\psi(t)$, που περιγράφει το άτομο στη διεγερμένη κατάσταση, θα πρέπει να είναι σημαντική μόνο για ένα διάστημα χρόνου της τάξης του τ . Σε αντιστοιχία με τη γνωστή σχέση

$$\frac{N(t)}{N_0} = e^{-t/\tau}, \quad (1.68)$$

που περιγράφει όλα τα είδη τυχαίων εκπομπών, μπορούμε να γράψουμε για την πυκνότητα πιθανότητας



$$|\psi(t)|^2 = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} & t \geq 0 \end{cases} \quad (1.69)$$

έτσι ώστε πράγματι να ικανοποιείται η συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t)|^2 dt = 1 \quad (1.70)$$

Επαληθεύεται εύκολα ότι η έκφραση (1.69) οδηγεί στη σχέση (1.68). Πράγματι, επειδή $N(t)$ είναι ο αριθμός των διεγερμένων ατόμων, που δεν έχουν εκπέμψει φωτόνια, μπορούμε να γράψουμε

$$\frac{N(t)}{N_0} = \int_t^{\infty} |\psi(t)|^2 dt, \quad t \geq 0 \quad (1.71)$$

Τώρα από την (1.71) προκύπτει η (1.68).

Από τη σχέση αβεβαιότητας χρόνου - ενέργειας συνάγεται ότι το ενεργειακό εύρος ΔE μιας διεγερμένης κατάστασης είναι

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \quad (1.72)$$

Για τη βασική κατάσταση, ο χρόνος ζωής είναι άπειρος και το ενεργειακό εύρος μηδέν. Έτσι, οι φασματικές γραμμές, που αντιστοιχούν σε εκπομπή φωτονίων ανάμεσα σε μια διεγερμένη κατάσταση E_1 εύρους ΔE και τη βασική κατάσταση E_0 , δεν έχουν ακριβώς καθορισμένη συχνότητα $\nu = \frac{E_1 - E_0}{h}$, αλλά χαρακτηρίζονται από ένα φυσικό φασματικό εύρος $\Delta \nu = \frac{\Delta E}{h}$ γύρω από την συχνότητα ν . Για εκπομπή φωτονίων ανάμεσα σε δύο διεγερμένες καταστάσεις E_1 και E_2 , το φυσικό φασματικό εύρος θα είναι $\Delta \nu = \frac{\Delta E_{12}}{h}$, όπου

$$\Delta E_{12} = \Delta E_1 + \Delta E_2 = \hbar \left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \right)$$

Τυπικοί χρόνοι ζωής για ατομικές αποδιεγέρσεις είναι της τάξης $\tau \approx 10^{-7} - 10^{-8}$ sec. Αντιστοιχούν σε ενεργειακό εύρος

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau} \approx 10^{-7} - 10^{-8} \text{ eV} \quad (1.73)$$

Στην πυρηνική φυσική, οι διεγερμένες πυρηνικές καταστάσεις έχουν τυπικό ενεργειακό εύρος της τάξης $\Delta E \approx 10^{-8} \text{ erg} \approx 10 \text{ KeV}$ και οι αντίστοιχοι χρόνοι ζωής είναι



$$\tau \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \approx 10^{-19} \text{ sec} \quad (1.74)$$

Τέλος, θα πρέπει να αναφέρουμε ότι ανάλογες θεωρήσεις γίνονται και στην περιοχή των στοιχειωδών σωματιδίων. Κατά τις συγκρούσεις δεσμών υψηλών ενεργειών της τάξης πολλών GeV, υπάρχει ένα εύρος ΔE γύρω από την ενέργεια στην οποία ένα συγκεκριμένο στοιχειώδες σωματίδιο παράγεται. Για $\Delta E = 1 \text{ GeV}$, ο χρόνος ζωής είναι

$$\tau \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \approx 6.6 \times 10^{-25} \text{ sec} \quad (1.75)$$

Ένας τέτοιος αριθμός αντιστοιχεί στο χρόνο που χρειάζεται ένα φωτεινό σήμα να διανύσει απόσταση ίση με τις διαστάσεις ενός νουκλεονίου. Περισσότερα για τη σχέση αβεβαιότητας ενέργειας -χρόνου θα δούμε στο κεφάλαιο X (§10.6).

1.5. Η εξίσωση του Schrödinger

Μέχρι τώρα είδαμε την έννοια της κυματοσυνάρτησης $\psi(\mathbf{r}, t)$, καθώς επίσης και παραδείγματα κυματοσυναρτήσεων. Προφανώς, αυτό που χρειαζόμαστε είναι μια συστηματική μέθοδος προσδιορισμού κυματοσυναρτήσεων. Με άλλα λόγια, χρειαζόμαστε μια διαφορική εξίσωση για την $\psi(\mathbf{r}, t)$. Ήδη, διαβλέπουμε κάποιες γενικές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί μια τέτοια εξίσωση. Πρώτα-πρώτα, πρέπει να είναι γραμμική και ομογενής για να ισχύει η αρχή της επαλληλίας (μια γραμμική επαλληλία κυματοσυναρτήσεων-λύσεων πρέπει να είναι μια δυνατή κυματοσυνάρτηση-λύση). Θα πρέπει επίσης να είναι πρώτης τάξης ως προς τη χρονική παράγωγο $\partial/\partial t$, έτσι ώστε η εξέλιξη του συστήματος να καθορίζεται εξ ολοκλήρου μόνο από τη γνώση της κυματοσυνάρτησης σε μια δεδομένη χρονική στιγμή. Τέλος, τα αποτελέσματά της θα πρέπει να συμφωνούν με εκείνα της κλασικής μηχανικής στο μακροσκοπικό όριο (σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας).

Ας θεωρήσουμε το επίπεδο κύμα

$$\psi(x, t) = A e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (1.76)$$

Από τη σχέση αυτή έχουμε

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (1.77\alpha)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi \quad (1.77\beta)$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση $E = p^2/2m$ βλέπουμε ότι το επίπεδο κύμα ικανοποιεί την εξίσωση



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (1.78)$$

Η γενίκευση σε τρεις διαστάσεις γίνεται αμέσως. Θα έχουμε την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) \quad (1.79)$$

όπου $\nabla^2 \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ είναι ο τελεστής του Laplace.

Γενικότερα, για ένα σωματίδιο που κινείται μέσα σε ένα πεδίο δυνάμεων, η ολική του ενέργεια E είναι άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) \quad (1.80)$$

Ακριβώς τα ίδια βήματα μας οδηγούν τώρα στην εξίσωση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \right] \psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) \quad (1.81)$$

Η εξίσωση (1.81), που δεχόμαστε ότι γενικεύεται για μια οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$ είναι η εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger, η βασική εξίσωση της μη σχετικιστικής κβαντικής μηχανικής. Θα πρέπει να τονιστεί ότι σε αυτό το επίπεδο δεν οδηγούμαστε αναπόδραστα, πολύ περισσότερο δε δεν αποδεικνύουμε την εξίσωση (1.81). Η εξίσωση του Schrödinger (όπως και οι νόμοι του Newton) δεν είναι κάτι που αποδεικνύεται. Η αλήθεια της έγκειται στο ότι αυτή δουλεύει, δηλαδή στο ότι η εξονυχιστική σύγκριση των προβλέψεών της με το πείραμα αποβαίνει πάντα επιτυχής, εκεί όπου εφαρμόζεται (σε όλα τα είδη μοριακών, ατομικών και πυρηνικών συστημάτων).

Θα πρέπει να παρατηρήσουμε ότι η εξίσωση (1.81) είναι πράγματι γραμμική και ομογενής και πρώτης τάξης ως προς τη χρονική παράγωγο $\partial/\partial t$. Εξάλλου, μπορεί να γραφεί με τη μορφή

$$\left[\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\mathbf{r},t) \right] \psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) \quad (1.82)$$

με βάση τον τελεστή (1.29) της ορμής $\hat{p} = -i\hbar \nabla$. Ο τελεστής στο αριστερό μέλος της (1.81) - (1.82) ονομάζεται τελεστής του Hamilton ή χαμιλτονιανός τελεστής και συμβολίζεται με το \hat{H} :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p})^2 + \hat{V}(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \quad (1.83)$$

Στην κλασική μηχανική, η ολική ενέργεια E ενός συστήματος, εκφρασμένη σαν συνάρτηση της θέσης \mathbf{r} , της ορμής \mathbf{p} και του χρόνου t , είναι η κλασική χαμιλτονιανή $H_{\text{κλ}}$



$$E = H_{\kappa\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (1.84)$$

Σύγκριση με την (1.80) και την (1.83) δείχνει ότι ο κβαντομηχανικός χαμιλτονιανός τελεστής \hat{H} προκύπτει από την κλασική χαμιλτονιανή με την αντικατάσταση $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$

$$\hat{H} \equiv H_{\kappa\lambda}(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla, t) \quad (1.85)$$

Έτσι, η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger γράφεται συμβολικά

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.86)$$

Με βάση τα παραπάνω βλέπουμε ότι πράγματι ικανοποιεί όλες τις συνθήκες που αναφέραμε στην αρχή.

Ας θεωρήσουμε τώρα την περίπτωση, όπου το V είναι ανεξάρτητο από το χρόνο. Για να λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger (1.81), που είναι διαφορική εξίσωση με μερικές παραγώγους, εφαρμόζουμε τη μέθοδο του διαχωρισμού των μεταβλητών, γράφοντας

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) g(t) \quad (1.87)$$

Θα έχουμε τότε

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right] g(t) = i\hbar \psi(\mathbf{r}) \frac{d}{dt} g(t) \quad (1.88)$$

Διαιρώντας τα δύο μέλη αυτής της εξίσωσης με $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) g(t)$ βρίσκουμε

$$\frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right] = i\hbar \frac{1}{g(t)} \frac{d g(t)}{dt} \quad (1.89)$$

Για να ισχύει η παραπάνω σχέση, της οποίας το αριστερό μέλος εξαρτάται μόνο από το \mathbf{r} και το δεξιό μόνο από το t , θα πρέπει και τα δύο μέλη να είναι ίσα με μία σταθερά, της οποίας οι διαστάσεις είναι διαστάσεις ενέργειας. Εξισώνοντας λοιπόν και τα δύο μέλη με τη σταθερά E , παίρνουμε κατ' αρχήν την εξίσωση

$$i\hbar \frac{d}{dt} g(t) = E g(t), \quad (1.90)$$

της οποίας η λύση είναι

$$g(t) = C e^{-iEt/\hbar} \quad (1.91)$$

όπου C σταθερά ολοκλήρωσης, την οποία εδώ χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορούμε να πάρουμε ίση με τη μονάδα. Έτσι, η κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r}, t)$ γράφεται

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (1.92)$$

όπου η $\psi(\mathbf{r})$ είναι λύση της εξίσωσης



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (1.93)$$

Η εξίσωση (1.93) είναι η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger. Σε αντίθεση με την εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger, που περιγράφει την εξέλιξη με το χρόνο της κυματοσυνάρτησης $\psi(\mathbf{r},t)$ κατά την κίνηση συστημάτων από ένα σημείο σε άλλο, η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger έχει τα χαρακτηριστικά μιας εξίσωσης ιδιοτιμών και αποτελεί τη βάση για την ανάλυση των στάσιμων καταστάσεων σε διάφορα συστήματα. Οι καταστάσεις (1.92) λέγονται στάσιμες καταστάσεις γιατί, όπως θα δούμε αμέσως παρακάτω, η ενέργεια E είναι πραγματική και, συνεπώς, η πυκνότητα πιθανότητας $|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$ σταθερή στο χρόνο.

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger (1.93), εάν χρησιμοποιήσουμε τον χαμιλτονιανό τελεστή $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r})$, μπορεί να γραφεί

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (1.94)$$

ή ακριβέστερα

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (1.95)$$

Η εξίσωση (1.94)-(1.95) είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών, όπου η $\psi(\mathbf{r})$ αποτελεί μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή \hat{H} με ιδιοτιμή E . Το σύνολο των ιδιοτιμών E αποτελεί το φάσμα του τελεστή \hat{H} . Βέβαια, όπως είναι γνωστό, για να είναι καλά ορισμένο ένα τέτοιο πρόβλημα ιδιοτιμών, θα πρέπει να καθοριστούν οι συνοριακές συνθήκες που ικανοποιούν οι συναρτήσεις $\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_E(\mathbf{r})$, που αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E . Εάν στην ίδια ιδιοτιμή E αντιστοιχούν περισσότερες της μιας γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις, θα λέμε ότι η αντίστοιχη ιδιοτιμή είναι εκφυλισμένη. Ο βαθμός εκφυλισμού ορίζεται σαν ο αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων, που αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή αυτή.

Ασφαλώς, οι λύσεις $\psi(\mathbf{r},t)$ της εξίσωσης του Schrödinger θα πρέπει να μπορούν να ερμηνευτούν σαν πλάτη πιθανότητας. Η ερμηνεία του $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ σαν πυκνότητας πιθανότητας στο χώρο των θέσεων συνεπάγεται ότι η πιθανότητα να βρεθεί ένα σωματίδιο κάπου στο χώρο πρέπει να παραμένει ίση με τη μονάδα με την πάροδο του χρόνου. Αυτή η διατήρηση της πιθανότητας σημαίνει ότι η συνθήκη κανονικοποίησης $\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 1$ πρέπει να ισχύει για κάθε χρονική στιγμή. Θα πρέπει συνεπώς να είναι

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 0, \quad (1.96)$$



όπου $P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$ και το ολοκλήρωμα εκτείνεται σε όλο το χώρο (εδώ και στη συνέχεια τα ολοκληρώματα νοούνται πάνω σ' έναν όγκο V , που αφήνεται να εκτείνεται στο άπειρο· αργότερα, θα τροποποιήσουμε αυτή την παραδοχή).

Πραγματικά, γράφοντας

$$\int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r}, \quad (1.97)$$

βρίσκουμε για το ρυθμό μεταβολής της πιθανότητας

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int \left[\psi^* \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi \right] d\mathbf{r} \quad (1.98)$$

Η $\psi^*(\mathbf{r},t)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \right] \psi^*(\mathbf{r},t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r},t) \quad (1.99)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει το ότι το $V(\mathbf{r},t)$ είναι πραγματική ποσότητα. Συνεπώς, βρίσκουμε ότι η (1.98) δίνει

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} &= \frac{i\hbar}{2m} \int \left[\psi^* (\nabla^2 \psi) - (\nabla^2 \psi^*) \psi \right] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int \nabla \cdot \left[\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi \right] d\mathbf{r} \equiv - \int \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (1.100)$$

όπου έχουμε εισαγάγει την ποσότητα

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi (\nabla \psi^*) - \psi^* (\nabla \psi) \right] \quad (1.101)$$

Η σχέση (1.100) ισοδυναμεί με τη σχέση

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = 0 \quad (1.102)$$

που είναι το ανάλογο της εξίσωσης συνέχειας της ηλεκτροδυναμικής (όμοια της υδροδυναμικής) και υπαγορεύει την ερμηνεία της $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ σαν πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας. Από την (1.100) προκύπτει ότι

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = - \int \mathbf{J}(\mathbf{r},t) \cdot d\mathbf{S} \quad (1.103)$$

όπου το επιφανειακό ολοκλήρωμα γίνεται πάνω σε μια επιφάνεια στο άπειρο. Επειδή η ψ πρέπει να είναι μια συνάρτηση τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, έπεται ότι θα πρέπει να σβύνει σε μεγάλες αποστάσεις, έτσι ώστε το επιφανειακό ολοκλήρωμα (1.103) να είναι μηδέν. Από αυτό ακολουθεί η συνθήκη διατήρησης της πιθανότητας (1.96).



Συνέπεια της διατήρησης της πιθανότητας είναι το γεγονός ότι η ενέργεια E των κυματοσυναρτήσεων (1.92) είναι πραγματική ποσότητα. Πράγματι, για τις κυματοσυναρτήσεις (1.92) έχουμε

$$P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 e^{-i(E-E^*)t/\hbar} \quad (1.104)$$

Η συνθήκη διατήρησης πιθανότητας (1.96) θα δώσει

$$(E - E^*) \int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 0 \quad (1.105)$$

Συνεπώς $E = E^*$ και η E είναι πραγματική. Αυτό σημαίνει ότι για τις κυματοσυναρτήσεις (1.92) ισχύει

$$P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (1.106)$$

και, επομένως, η $P(\mathbf{r},t)$ είναι σταθερή στο χρόνο. Αυτός είναι ο λόγος που οι κυματοσυναρτήσεις (1.92) σταθερής ενέργειας E λέμε ότι περιγράφουν στάσιμες καταστάσεις.

Η συνθήκη διατήρησης της πιθανότητας (1.96) μπορεί να διατυπωθεί διαφορετικά, συναρτήσει του χαμιλτονιανού τελεστή \hat{H} . Πραγματικά, από τις εξισώσεις Schrödinger

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(\mathbf{r},t) &= i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) \\ [\hat{H} \psi(\mathbf{r},t)]^* &= -i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r},t) \end{aligned} \quad (1.107)$$

έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} &= \frac{\partial}{\partial t} \int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} \\ &= \int \left[\psi^* \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi \right] d\mathbf{r} = \frac{1}{i\hbar} \int [\psi^* (\hat{H}\psi) - (\hat{H}\psi)^* \psi] d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (1.108)$$

και η συνθήκη (1.96) δίνει

$$\int \psi^* (\hat{H}\psi) d\mathbf{r} = \int (\hat{H}\psi)^* \psi d\mathbf{r} \quad (1.109)$$

Η σχέση (1.109) αποτελεί τη συνθήκη που πρέπει να ικανοποιεί ο τελεστής του Hamilton \hat{H} . Οι τελεστές που ικανοποιούν τη συνθήκη αυτή λέγονται ερμιτιανοί τελεστές. Ειδικότερα, ο ερμιτιανός συζυγής \hat{A}^+ ενός τελεστή \hat{A} ορίζεται από τη σχέση $\int f^* (\hat{A}g) d\mathbf{r} = \int (\hat{A}^+f)^* g d\mathbf{r}$, όπου f και g είναι συναρτήσεις. Ο τελεστής είναι ερμιτιανός αν $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Η συνθήκη διατήρησης πιθανότητας, που συνεπάγεται την ερμιτιανότητα του τελεστή \hat{H} , συνεπάγεται, όπως είδαμε, και την πραγματικότητα



των ιδιοτιμών E των στάσιμων καταστάσεων. Αυτό άλλωστε προκύπτει και από τις σχέσεις (1.95) και (1.109). Όπως θα δούμε αργότερα, η ιδιότητα αυτή είναι γενική: κάθε ερμιτιανός τελεστής έχει πραγματικές ιδιοτιμές.

1.6. Μέσες τιμές φυσικών μεγεθών - Τελεστές.

Επειδή $|\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}$ είναι η πιθανότητα να βρεθεί ένα σωματίδιο μέσα σε χώρο $d\mathbf{r}$ γύρω από τη θέση \mathbf{r} , η μέση (ή αναμενόμενη) τιμή για τη θέση \mathbf{r} θα δίνεται από τη σχέση

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi^*(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.110)$$

Η φυσική ερμηνεία για το $\langle \mathbf{r} \rangle$ είναι ότι αποτελεί τη μέση τιμή των μετρήσεων της θέσης \mathbf{r} , που γίνονται σ' ένα μεγάλο αριθμό ισοδύναμων και όμοια προετοιμασμένων ανεξάρτητων συστημάτων, που περιγράφονται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$.

Γενικότερα, για μια συνάρτηση $f(\mathbf{r},t)$, η μέση τιμή της δίνεται από τη σχέση

$$\langle f(\mathbf{r},t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) f(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.111)$$

Παραδείγματος χάρη, η μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας $V(\mathbf{r},t)$ είναι

$$\langle V(\mathbf{r},t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) V(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.112)$$

Σε αντιστοιχία με τον ορισμό της μέσης τιμής για τη θέση, η μέση τιμή της ορμής \mathbf{p} θα δίνεται από τη σχέση

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) \mathbf{p} \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.113)$$

όπου $\Phi(\mathbf{p},t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών. Έτσι, για μια συνάρτηση $g(\mathbf{p},t)$ θα έχουμε

$$\langle g(\mathbf{p},t) \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) g(\mathbf{p},t) \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.114)$$

Παραδείγματος χάρη, η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας είναι

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.115)$$

Είναι ενδιαφέρον να δούμε ποια μορφή παίρνει η μέση τιμή της \mathbf{p} , όταν χρησιμοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$ αντί για την κυματοσυνάρτηση



$\Phi(\mathbf{p},t)$, που είναι ο μετασχηματισμός Fourier της $\psi(\mathbf{r},t)$. Από τη γνωστή σχέση Parseval-Plancherel (σχέση (1.12)), έχουμε γενικά

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r},t) \psi_2(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int \Phi_1^*(\mathbf{p},t) \Phi_2(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.116)$$

όπου Φ_1, Φ_2 οι μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων ψ_1, ψ_2 , αντίστοιχα. Επειδή

$$\nabla \psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p},$$

χρησιμοποιώντας στην παραπάνω σχέση για ψ_1 την $\psi(\mathbf{r},t)$ και για ψ_2 την $\nabla \psi(\mathbf{r},t)$, παίρνουμε

$$\int \psi^*(\mathbf{r},t) \nabla \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p}, \quad (1.117)$$

από την οποία προκύπτει η μορφή

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) \mathbf{p} \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{r},t) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.118)$$

Το αποτέλεσμα αυτό δείχνει ότι με την ορμή \mathbf{p} συνδέεται στο χώρο των θέσεων ο τελεστής

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (1.119)$$

και ότι η μέση τιμή μπορεί να εκφραστεί μέσω της σχέσης (1.118), είτε με τον έναν, είτε με τον άλλο τρόπο, συναρτήσει της μορφής που παίρνει ο αντίστοιχος τελεστής σε κάθε περίπτωση.

Ξεκινώντας τώρα από την έκφραση

$$\langle p^n \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) p^n \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p}$$

όπου n θετικός ακέραιος, δεν είναι δύσκολο να δειχθεί ότι

$$\langle p^n \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x},t) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}})^n \psi(\mathbf{x},t) d\mathbf{x}$$

Γενικεύοντας, γράφουμε για μια συνάρτηση $g(\mathbf{p},t)$ ότι

$$\langle g(\mathbf{p},t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) g(-i\hbar \nabla, t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.120)$$

Ακόμα γενικότερα, θα μπορούσε κανείς να θεωρήσει ένα φυσικό μέγεθος, που είναι συνάρτηση των \mathbf{r}, \mathbf{p} και t . Παραδείγματος χάρι, μια τέτοια συνάρτηση είναι η ολική ενέργεια $E = (\mathbf{p}^2/2m) + V(\mathbf{r},t)$ ενός σωματιδίου που κινείται μέσα σ'



ένα δυναμικό. Ο αντίστοιχος τελεστής Hamilton είναι $\hat{H} = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(\mathbf{r},t)$. Έτσι έχουμε

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{H} \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r},t) (+i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \\ &= \int \psi^*(\mathbf{r},t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \right] \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (1.121)$$

πράγμα που σημαίνει ότι

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\rangle + \langle V(\mathbf{r},t) \rangle \quad (1.122)$$

σε συμφωνία με την αρχή της αντιστοιχίας.

Επεκτείνοντας τα παραπάνω αποτελέσματα δεχόμαστε ότι, αν η δυναμική κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$, τότε η μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους υπολογίζεται ως εξής:

1. Στο φυσικό μέγεθος $A=A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ αντιστοιχούμε τον τελεστή $\hat{A}(\mathbf{r},-i\hbar \nabla, t)$.

2. Η μέση τιμή $\langle A \rangle$ θα δίνεται από την έκφραση

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{A}(\mathbf{r},-i\hbar \nabla, t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}, \quad (1.123)$$

αν η $\psi(\mathbf{r},t)$ είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα. Διαφορετικά, θα έχουμε την έκφραση

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{A}(\mathbf{r},-i\hbar \nabla, t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}}{\int \psi^*(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}} \quad (1.124)$$

Οι τελεστές, που συνδέονται με φυσικές ποσότητες, υπόκεινται σ' ένα σημαντικό περιορισμό. Τα αποτελέσματα της μέτρησης και, συνεπώς, η μέση τιμή των αντίστοιχων φυσικών μεγεθών πρέπει να είναι πραγματικές ποσότητες. Κατά συνέπεια, θα πρέπει να ικανοποιείται η συνθήκη

$$\int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{A} \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \int (\hat{A} \psi(\mathbf{r},t))^* \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \quad (1.125)$$

Αυτό σημαίνει ότι ο τελεστής \hat{A} , που συνδέεται με το αντίστοιχο φυσικό μέγεθος, πρέπει να είναι ερμιτιανός τελεστής. Οι ερμιτιανοί τελεστές λέμε ότι περιγράφουν δυναμικές μεταβλητές. Ο παρακάτω πίνακας 1.1 παρουσιάζει βασικούς ερμιτιανούς τελεστές στο χώρο των θέσεων και τις δυναμικές μεταβλητές, στις οποίες αντιστοιχούν. Ας σημειωθεί ότι οι τελεστές αυτοί είναι γραμμικοί τελεστές, δηλαδή



ικανοποιούν τη σχέση $\hat{A}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{A}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2$, όπως συμβαίνει με την πλειονότητα των τελεστών της κβαντικής μηχανικής.

<u>Δυναμική μεταβλητή</u>	<u>Τελεστής</u>
θέση \mathbf{r}	Πολλαπλασιασμός με \mathbf{r}
ορμή \mathbf{p}	$-i\hbar \nabla$
ολική ενέργεια $E=\mathbf{p}^2/2m+V(\mathbf{r},t)$	$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)$
στροφορμή $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$

Πίνακας 1.1 Δυναμικές μεταβλητές και οι αντίστοιχοι τελεστές στο χώρο των θέσεων.

Ακολουθώντας τα ίδια βήματα, που μας οδήγησαν στην σχέση (1.118), μπορούμε να δείξουμε ότι η μέση τιμή της θέσης \mathbf{r} , εκφρασμένη συναρτήσει της $\Phi(\mathbf{p},t)$, γράφεται

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) (+i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}) \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.126)$$

όπου το σύμβολο $\nabla_{\mathbf{p}}$ σημαίνει παραγωγή ως προς \mathbf{p} .

Από τη σχέση (1.126) συνάγει κανείς ότι για ένα φυσικό μέγεθος $A = A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$, η μέση τιμή $\langle A \rangle$ μπορεί επίσης να υπολογιστεί στο χώρο των ορμών συναρτήσει της $\Phi(\mathbf{p},t)$ από την έκφραση

$$\langle A \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p},t) \hat{A} (+i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, t) \Phi(\mathbf{p},t) d\mathbf{p} \quad (1.127)$$

Ο πίνακας 1.2 δείχνει βασικούς ερμιτιανούς τελεστές στο χώρο των ορμών και τις αντίστοιχες δυναμικές μεταβλητές.

<u>Δυναμική μεταβλητή</u>	<u>Τελεστής</u>
θέση \mathbf{r}	$i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}$
ορμή \mathbf{p}	Πολλαπλασιασμός με \mathbf{p}
ολική ενέργεια $E = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r},t)$	$\hat{H} = \mathbf{p}^2/2m + V(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}, t)$
στροφορμή $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{L}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{p}$

Πίνακας 1.2: Δυναμικές μεταβλητές και οι αντίστοιχοι τελεστές στο χώρο των ορμών.



Μπορεί η θέση r και η ορμή p να είναι δυναμικές μεταβλητές, με την έννοια ότι οι αντίστοιχοι τελεστές είναι ερμιτιανοί και οι μέσες τιμές τους πραγματικές ποσότητες, αλλά εν γένει για μια τυχαία συνάρτηση, που εξαρτάται από το r και το p , δεν συμβαίνει το ίδιο. Παραδείγματος χάρη, είναι εύκολο να δει κανείς ότι τα γινόμενα $x \cdot p$ και $p \cdot x$ δεν είναι δυναμικές μεταβλητές με την παραπάνω έννοια του όρου. Ας θεωρήσουμε το $x \cdot p$:

$$\langle xp \rangle = \int \psi^*(x,t) x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x,t) dx \quad (1.128)$$

Ολοκληρώνοντας κατά μέρη βρίσκουμε ($|\psi| \rightarrow 0$ όταν $|x| \rightarrow \infty$, έτσι ώστε η ψ να είναι μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση)

$$\begin{aligned} \langle xp \rangle &= i\hbar \int \psi \frac{\partial}{\partial x} (x\psi^*) dx \\ &= i\hbar \int \psi x \frac{\partial}{\partial x} \psi^* dx + i\hbar \int \psi^* \psi dx \\ &= \langle xp \rangle^* + i\hbar \end{aligned} \quad (1.129)$$

Έτσι, η μέση τιμή $\langle xp \rangle$ δεν είναι πραγματική ποσότητα και ο αντίστοιχος τελεστής $\hat{x} \cdot \hat{p} \equiv x (-i\hbar (\partial/\partial x))$ δεν είναι ερμιτιανός. Πραγματικά, για τον ερμιτιανό συζυγή του τελεστή $\hat{x} \cdot \hat{p}$ έχουμε

$$(\hat{x} \hat{p})^+ = \hat{p}^+ \hat{x}^+ = \hat{p} \hat{x} \neq \hat{x} \hat{p} \quad (1.130)$$

Το τελευταίο βήμα στην παραπάνω σχέση μπορεί εύκολα να προκύψει: για μια οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $\psi(r,t)$, έχουμε

$$[\hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x}] \psi = i\hbar \left[x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right] = i\hbar \psi \quad (1.131)$$

Έτσι, το $x \cdot p$ δεν μπορεί να αποτελέσει δυναμική μεταβλητή. Το ίδιο ισχύει και για το $p \cdot x$.

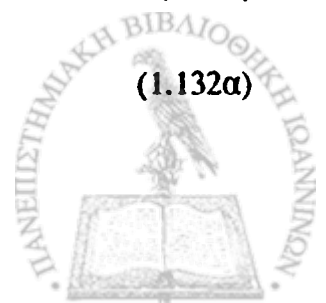
Τα παραπάνω έχουν σχέση με το γεγονός ότι, σε αντίθεση με την κλασική μηχανική, όπου οι φυσικές ποσότητες υπακούουν στους νόμους της συνηθισμένης άλγεβρας, στην κβαντική μηχανική έχει να κάνει κανείς με τους τελεστές, που αντιστοιχούν στις δυναμικές μεταβλητές, και αυτοί, εν γένει, δεν μετατίθενται μεταξύ τους. Με άλλα λόγια, αν \hat{A} και \hat{B} είναι τελεστές, το γινόμενο $\hat{A} \hat{B}$ δεν είναι αναγκαστικά το ίδιο με το γινόμενο $\hat{B} \hat{A}$. Ορίζουμε το μεταθέτι δύο τελεστών \hat{A} και \hat{B} σαν

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \quad (1.132)$$

και, εν γένει,

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 .$$

(1.132α)



Παραδείγματος χάρη, από τη σχέση (1.131) συνάγουμε τις σχέσεις μετάθεσης για τους τελεστές θέσης-ορμής

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \quad (1.133)$$

Αντίθετα, είναι προφανές ότι, παραδείγματος χάρη, οι τελεστές \hat{x} και \hat{p}_y μετατίθενται. Έτσι, γενικότερα, μπορούμε να γράψουμε τις βασικές σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (1.134)$$

όπου $i, j = 1, 2, 3$ για τις τρεις συνιστώσες θέσης και ορμής και δ_{ij} είναι το σύμβολο Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (1.134\alpha)$$

Όπως θα δούμε αργότερα, οι σχέσεις αβεβαιότητας ανάμεσα σε συμπληρωματικές μεταβλητές αφορούν ακριβώς σε δυναμικές μεταβλητές, που οι τελεστές τους δεν μετατίθενται μεταξύ τους, και κατά συνέπεια μπορούν να εκφραστούν μέσω του αντίστοιχου μεταθέτη. Για την ώρα, ας ορίσουμε την αβεβαιότητα ΔA , που συνδέεται μ' ένα φυσικό μέγεθος A , από τη σχέση της στατιστικής για την τυπική απόκλιση ΔA αυτού του μεγέθους:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (1.135)$$

Από τη σχέση (1.135) και την έκφραση για τη μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους, μπορούμε να επαναδιατυπώσουμε τις σχέσεις αβεβαιότητας του Heisenberg. Έτσι, για τις σχέσεις αβεβαιότητας θέσης και ορμής, ας θεωρήσουμε την περίπτωση του κυματοπακέτου Gauss (1.45)-(1.50), γράφοντας τώρα τη συνάρτηση $\Phi(p)$ σαν

$$\Phi(p) = \pi^{-1/4} \sigma^{-1/2} e^{-p^2/2\sigma^2} \quad (1.136)$$

Με τη βοήθεια της γνωστής μαθηματικής σχέσης

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-au^2} du = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (1.137)$$

επαληθεύουμε εύκολα ότι

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) x \psi(x,t) dx = 0$$



$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) x^2 \psi(x,t) dx = \frac{\left(1 + \frac{\sigma^4 t^2}{m^2 \hbar^2}\right)}{2 \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2}$$

και, συνεπώς,

$$(\Delta x)^2 = \frac{\left(1 + \frac{\sigma^4 t^2}{m^2 \hbar^2}\right)}{2 \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2} \quad (1.138)$$

Εξάλλου, βρίσκουμε

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p,t) p \Phi(p,t) dp = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p,t) p^2 \Phi(p,t) dp = \frac{\sigma^2}{2}$$

και, συνεπώς,

$$(\Delta p)^2 = \frac{\sigma^2}{2} \quad (1.139)$$

Η σχέση αβεβαιότητας θέσης-ορμής θα είναι τότε

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left(1 + \frac{\sigma^4 t^2}{m^2 \hbar^2}\right) \quad (1.140)$$

$$\text{ή } (\Delta x) (\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.141)$$

Η σχέση (1.141) αποτελεί τη γενικότερη διατύπωση της σχέσης αβεβαιότητας θέσης-ορμής του Heisenberg και από την (1.133) διαπιστώνουμε ότι μπορεί να γραφεί σαν

$$(\Delta x) (\Delta p) \geq \frac{1}{2} |\langle [x,p] \rangle| \quad (1.142)$$

Τη μορφή (1.142) των σχέσεων αβεβαιότητας θα συζητήσουμε αργότερα (βλ. §2.6).

1.7. Ιδιότητες των ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας

Ας θεωρήσουμε την (κανονικοποιημένη) κυματοσυνάρτηση στάσιμης κατάστασης



$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (1.143)$$

Η μέση τιμή της ενέργειας είναι τότε

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{H} \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} \\ &= \int \psi^*(\mathbf{r},t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = E \end{aligned} \quad (1.144)$$

Έτσι, για τη στάσιμη κατάσταση (1.143), η E είναι η μέση τιμή της ολικής ενέργειας. Με άλλα λόγια, η μέτρηση της ενέργειας σε κάθε μέλος ενός συνόλου όμοια προετοιμασμένων συστημάτων, που περιγράφονται από την κυματοσυνάρτηση (1.143), θα δώσει την ίδια αριθμητική τιμή E .

Η αριθμητική τιμή E είναι η ιδιοτιμή της ενέργειας στο πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (1.145)$$

όπου $\psi_E(\mathbf{r})$ είναι η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση ενέργειας. Δεχθήκαμε ήδη παραπάνω τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int |\psi_E(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (1.146)$$

Μια βασική ιδιότητα των ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας είναι ότι δύο ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας $\psi_E(\mathbf{r})$ και $\psi_{E'}(\mathbf{r})$, που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές ενέργειας $E \neq E'$, είναι ορθογώνιες:

$$\int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0, \quad E \neq E' \quad (1.147)$$

Αυτό μπορούμε εύκολα να το δούμε. Από τη σχέση $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$, έχουμε

$$\psi_{E'}^* (\hat{H} \psi_E) = E \psi_{E'}^* \psi_E \quad (1.148)$$

ενώ από τη συζυγή σχέση $(\hat{H}\psi_{E'})^* = E' \psi_{E'}^*$ προκύπτει

$$(\hat{H}\psi_{E'})^* \psi_E = E' \psi_{E'}^* \psi_E \quad (1.149)$$

Αφαιρώντας κατά μέλη τις σχέσεις (1.148) και (1.149) και ολοκληρώνοντας παίρνουμε

$$(E - E') \int \psi_{E'}^* \psi_E d\mathbf{r} = \int [\psi_{E'}^* (\hat{H}\psi_E) - (\hat{H}\psi_{E'})^* \psi_E] d\mathbf{r} = 0 \quad (1.150)$$

όπου το τελευταίο βήμα έπεται από την ερμιτιανότητα του τελεστή \hat{H} . Εφόσον $E \neq E'$, ακολουθεί η σχέση ορθογωνιότητας (1.147).



Συνδυάζοντας τις σχέσεις κανονικοποίησης (1.146) και ορθογωνιότητας (1.147), μπορούμε να γράψουμε τις σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{EE'} \quad (1.151)$$

όπου $\delta_{EE'}$ το ήδη γνωστό σύμβολο του Kronecker

$$\delta_{EE'} = \begin{cases} 1 & E=E' \\ 0 & E \neq E' \end{cases} \quad (1.152)$$

Βέβαια, τα παραπάνω δεν ισχύουν για την περίπτωση που υπάρχει εκφυλισμός και στην ίδια εκφυλισμένη ιδιοτιμή της ενέργειας E αντιστοιχούν περισσότερες της μιας ιδιοσυναρτήσεις ψ_i ($i = 1, \dots, n$). Όμως, από τις n γραμμικά ανεξάρτητες, κανονικοποιημένες συναρτήσεις ψ_i , μπορούμε πάντα να κατασκευάσουμε ένα νέο σύνολο n αμοιβαία ορθογώνιων και κανονικοποιημένων ιδιοσυναρτήσεων, που θα υπακούουν συνεπώς σε ορθοκανονικές σχέσεις. Η σχετική μέθοδος είναι η διαδικασία ορθογωνιοποίησης Schmidt. Σ' αυτή ξεκινώντας από τις συναρτήσεις ψ_i , φτιάχνουμε την ακολουθία

$$\varphi_1 = \psi_1$$

$$\varphi_2 = C_{21} \varphi_1 + \psi_2$$

$$\varphi_3 = C_{31} \varphi_1 + C_{32} \varphi_2 + \psi_3$$

.....

$$\varphi_n = C_{n1} \varphi_1 + C_{n2} \varphi_2 + \dots + C_{n,n-1} \varphi_{n-1} + \psi_n \quad (1.153)$$

όπου οι συντελεστές C_{ij} πρέπει να προσδιοριστούν κατάλληλα, ώστε κάθε συνάρτηση της ακολουθίας να είναι ορθογώνια σε όλες τις προηγούμενες. Έτσι, απαιτώντας

$$\int \varphi_1^* \varphi_2 d\mathbf{r} = 0 \quad (1.154)$$

βρίσκουμε

$$C_{21} \int \varphi_1^* \varphi_1 d\mathbf{r} + \int \varphi_1^* \psi_2 d\mathbf{r} = 0 \quad (1.155)$$

απ' όπου παίρνουμε

$$C_{21} = - \int \varphi_1^* \psi_2 d\mathbf{r} \quad (1.156)$$

Η συνάρτηση λοιπόν



$$\varphi_2 = \left[- \int \varphi_1^* \psi_2 dr \right] \varphi_1 + \psi_2 \quad (1.157)$$

είναι από κατασκευή ορθογώνια στη φ_1 . Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο, απαιτούμε

$$\int \varphi_1^* \varphi_3 dr = 0 \quad (1.158)$$

και

$$\int \varphi_2^* \varphi_3 dr = 0 \quad (1.159)$$

Βρίσκουμε, λοιπόν, όμοια ότι

$$C_{31} = - \int \varphi_1^* \psi_3 dr$$

$$C_{32} = - \frac{\int \varphi_2^* \psi_3 dr}{\int \varphi_2^* \varphi_2 dr} \quad (1.160)$$

και, συνεπώς,

$$\varphi_3 = \left[- \int \varphi_1^* \psi_3 dr \right] \varphi_1 + \left[- \frac{\int \varphi_2^* \psi_3 dr}{\int \varphi_2^* \varphi_2 dr} \right] \varphi_2 + \psi_3 \quad (1.161)$$

Γενικεύοντας τη διαδικασία, φτάνουμε στη συνάρτηση

$$\varphi_i = \sum_{r=1}^{i-1} \left[- \frac{\int \varphi_r^* \psi_i dr}{\int \varphi_r^* \varphi_r dr} \right] \varphi_r + \psi_i \quad (1.162)$$

που είναι ορθογώνια σε όλες τις συναρτήσεις $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{i-1}$. Από τις συναρτήσεις φ_i μπορούμε τελικά να κατασκευάσουμε τις ορθοκανονικές συναρτήσεις

$$\chi_i = \frac{\varphi_i}{\left[\int \varphi_i^* \varphi_i dr \right]^{1/2}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.163)$$

που ικανοποιούν τις σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\int \chi_i \chi_j dr = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (1.164)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (1.151) και (1.164), γράφουμε για τις ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας τις γενικές σχέσεις ορθοκανονικότητας



$$\int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_{E_i}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{EE'} \delta_{ij} \quad (1.165)$$

και λέμε ότι αποτελούν ένα ορθοκανονικό σύνολο.

Δεχόμαστε ότι το ενεργειακό φάσμα, που παίρνουμε λύνοντας τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger, περιλαμβάνει όλες τις φυσικά δυνατές τιμές ενέργειας του συστήματος. Αυτό σημαίνει ότι οποιαδήποτε φυσικά παραδεκτή κυματοσυνάρτηση μπορεί να εκφραστεί σαν επαλληλία των αντίστοιχων ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας. Έτσι, η γενική λύση $\psi(\mathbf{r},t)$ της χρονικά εξαρτημένης εξίσωσης του Schrödinger μπορεί να αναπτυχθεί συναρτήσει των ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_E C_E(t) \psi_E(\mathbf{r}) \quad (1.166)$$

Λέμε τότε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας $\psi_E(\mathbf{r})$ αποτελούν ένα πλήρες σύνολο. Αποτελεί βασική παραδοχή ότι τα φυσικά μεγέθη παριστάνονται από ερμιτιανούς τελεστές, που έχουν πλήρη σύνολα ιδιοσυναρτήσεων, όπως εδώ η ενέργεια. Τότε λέγονται παρατηρήσιμα μεγέθη. Οι ιδιοσυναρτήσεις τους μπορεί να χρησιμοποιηθούν για ν' αναπτυχθεί μια τυχαία κυματοσυνάρτησης $\psi(\mathbf{r},t)$ συναρτήσει αυτών κατά το πρότυπο της (1.166).

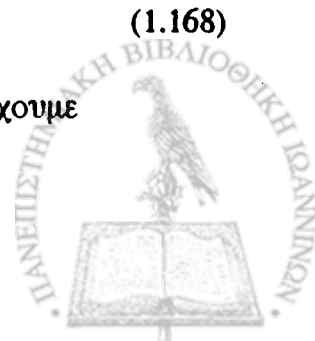
Οι συντελεστές $C_E(t)$ μπορούν εύκολα να υπολογιστούν, αν ξέρουμε την $\psi(\mathbf{r},t)$ σε μια δεδομένη χρονική στιγμή. Από την (1.166) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \sum_{E'} C_{E'}(t) \int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_{E'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \sum_{E'} C_{E'}(t) \delta_{E'E} = C_{E'}(t) \end{aligned} \quad (1.167)$$

Τελειώνουμε αυτό το κεφάλαιο με ορισμένες σημαντικές σχέσεις, τις οποίες θα δούμε και στο επόμενο κεφάλαιο μέσα σ' ένα γενικότερο πλαίσιο. Έστω ένα σωματίδιο, που κινείται μέσα σ' ένα χρονικά ανεξάρτητο δυναμικό $V(\mathbf{r})$. Αντικαθιστώντας την (1.166) στην χρονικά εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger, παίρνουμε ότι

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_E C_E(t) \psi_E(\mathbf{r}) &= \hat{H} \sum_E C_E(t) \psi_E(\mathbf{r}) \\ &= \sum_E C_E(t) E \psi_E(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.168)$$

Πολλαπλασιάζοντας την (1.168) με $\psi_{E'}^*(\mathbf{r})$ και ολοκληρώνοντας, έχουμε



$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_E C_E(t) \int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \\
= \sum_E C_E(t) E \int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) d\mathbf{r} & \quad (1.169)
\end{aligned}$$

απ' όπου προκύπτει

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_E(t) = E C_E(t) \quad (1.170)$$

Συνεπώς, οι συντελεστές $C_E(t)$ στο ανάπτυγμα (1.166) δίνονται από τη σχέση

$$C_E(t) = C_E e^{-iEt/\hbar} \quad (1.171)$$

Για την πυκνότητα πιθανότητας έχουμε

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{r},t) &= \psi^*(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t) = \\
&= \sum_E \sum_{E'} C_{E'}^* C_E e^{-i(E-E')t/\hbar} \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) & \quad (1.172)
\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι, σε αντίθεση με τις στάσιμες καταστάσεις, για μια επαλληλία στάσιμων καταστάσεων η πυκνότητα πιθανότητας εξαρτάται από το χρόνο.

Ολοκληρώνοντας την (1.172), βλέπουμε ότι η συνθήκη κανονικοποίησης $\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 1$ δίνει

$$\sum_E |C_E|^2 = 1 \quad (1.173)$$

Η σχέση (1.173) είναι γνωστή σαν σχέση πληρότητας. Τέλος, για τη μέση τιμή της ενέργειας έχουμε

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \langle H \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{H} \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \\
&= \sum_E \sum_{E'} C_{E'}^* C_E e^{-i(E-E')t/\hbar} \int \psi_{E'}^*(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \sum_E |C_E|^2 E & \quad (1.174)
\end{aligned}$$

Η τελευταία σχέση οδηγεί στην ερμηνεία του C_E σαν πλάτους πιθανότητας για την ενέργεια.



Προβλήματα

- 1.1. Θεωρούμε τη συνάρτηση

$$f(x) = \sqrt{\frac{8}{3L}} \cos^2 \frac{\pi x}{L}$$

- i) Να βρεθούν όλοι οι συντελεστές C_n της $f(x)$
 ii) Να βρεθεί η περίοδος της $f(x)$ και να εξεταστεί αν έχει μήκος κύματος.

- 1.2. Ναδειχθεί ότι πράγματι η σχέση (1.38) προκύπτει από την (1.31), αρκεί ο χρόνος t να είναι αρκετά μικρός, ώστε

$$\frac{1}{2m\hbar} (\Delta p)^2 t \ll 1.$$

Ας σημειωθεί ότι η μορφή του κυματοπακέτου δεν αλλάσσει σχήμα, όσο ο χρόνος t ικανοποιεί την παραπάνω σχέση. Σε μετέπειτα χρόνους, βέβαια, η μορφή του κυματοπακέτου αλλάσσει, καθώς αυτό διαδίδεται.

- 1.3. Έστω $\psi(\mathbf{r}, t)$ το τριδιάστατο κυματοπακέτο (1.42). Ναδειχθεί ότι, αν η συνάρτηση $\Phi(\mathbf{p})$ παρουσιάζει απότομο μέγιστο γύρω από το σημείο $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$, τότε το κέντρο του κυματοπακέτου προχωρά ομοιόμορφα σύμφωνα με το νόμο $\mathbf{r} = \mathbf{v}_{\text{ομ}} t$, όπου η ομαδική ταχύτητα $\mathbf{v}_{\text{ομ}}$ δίνεται από τη σχέση $\mathbf{v}_{\text{ομ}} = \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0}$ ($\nabla_{\mathbf{p}}$ είναι το άνωσμα με συνιστώσες $\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z}$).

- 1.4. Η εξίσωση Klein-Gordon είναι

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

- i) Ναδειχθεί ότι προκύπτει από τη λύση επίπεδου κύματος (1.26) και τη σχετικιστική σχέση $E^2(\mathbf{p}) = p^2 c^2 + m^2 c^4$ μεταξύ ενέργειας και ορμής.
 ii) Να βρεθεί η ομαδική ταχύτητα των αντίστοιχων κυματοπακέτων και ναδειχθεί η σχέση $v_{\text{ομ}} \cdot v_{\text{φασ.}} = c^2$.

Να συγκριθεί το αποτέλεσμα με τη μη σχετικιστική περίπτωση και να σχολιαστεί.

- 1.5. i) Ένα κυματοπακέτο Gauss περιγράφει ένα ηλεκτρόνιο, που για χρόνο $t=0$ εντοπίζεται μέσα σε μια περιοχή 10^{-10} m (ατομικές διαστάσεις). Ναδειχθεί ότι το κυματοπακέτο θ' απλωθεί σε διπλάσιο εύρος μετά από χρόνο $t=10^{-16} \text{ sec}$.



ii) Ένα πρωτόνιο, που περιγράφεται από ένα κυματοπακέτο Gauss, είναι εντοπισμένο για $t = 0$ μέσα σε μια περιοχή 10^{-14} m (πυρηνικές διαστάσεις). Ναδειχθεί ότι μετά από χρόνο $t \approx 10^{-21}$ sec θα διπλασιαστεί το εύρος του.

iii) Τέλος, ναδειχθεί ότι για ένα μακροσκοπικό σώμα μάζας 1 Kg, του οποίου η θέση για $t = 0$ ορίζεται με ακρίβεια $\Delta x(0) \approx 10^{-6}$ m, το εύρος του αντίστοιχου κυματοπακέτου Gauss διπλασιάζεται μετά από χρόνο $t \approx 10^{22}$ sec.

Συγκρινόμενο με την υπολογιζόμενη σημερινή ηλικία του σύμπαντος $t_{\sigma} \approx 10^{10}$ έτη $\approx 10^{17}$ sec, το αποτέλεσμα αυτό δείχνει ότι μπορεί κανείς με βεβαιότητα ν' αγνοήσει τα κβαντικά φαινόμενα, όταν εξετάζει μακροσκοπικά αντικείμενα.

1.6. Οι διαστάσεις ενός πυρήνα δίνονται από τη σχέση $R = 1.2 \times 10^{-13} \times A^{1/3}$ cm, όπου A είναι ο ατομικός μαζικός αριθμός. Χρησιμοποιώντας τη σχέση αβεβαιότητας, να υπολογισθεί σε MeV η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου, που αρχικά παράγεται μέσα στον πυρήνα και στη συνέχεια εκπέμπεται από αυτόν.

1.7. Χρησιμοποιώντας τη σχέση αβεβαιότητας, να υπολογιστεί η ενέργεια της βασικής κατάστασης ενός σωματιδίου μάζας m μέσα στο δυναμικό

$$V(x) = \lambda x^4, \quad \lambda > 0$$

1.8. Θεωρούμε την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ C e^{-(1/2t)t} e^{-iE_1 t/\hbar} & t \geq 0 \end{cases},$$

που περιγράφει τη διεγερμένη κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος με ενέργεια E_1 πάνω από την ενέργεια E_0 της βασικής κατάστασης.

i) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(t)$

ii) Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση $\Phi(E)$ και να επαληθευτεί ότι ικανοποιεί τη συνθήκη κανονικοποίησης.

iii) Ορίζοντας την αβεβαιότητα ΔE από την τιμή της ενέργειας E, στην οποία η $|\Phi(E)|^2$ πέφτει στο μισό της τιμής $|\Phi(E_1)|^2$, ναδειχθεί ότι $\Delta E \tau \approx \hbar$.

1.9. Θεωρούμε την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \psi(x, t=0) = C e^{ip_0 x/\hbar} e^{-|x|/2\Delta x}$$

i) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(x)$

ii) Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών $\Phi(p)$ και να επαληθευτεί η συνθήκη κανονικοποίησης γι' αυτήν.



iii) Να οριστεί κατάλληλα η αβεβαιότητα Δp και ναδειχτεί ότι $\Delta x \Delta p \geq \hbar$

1.10. Θεωρούμε την κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών

$$\Phi(p) = \begin{cases} 0 & |p-p_0| > a \\ C & |p-p_0| \leq a \end{cases}$$

όπου C και a σταθερές.

i) Να κανονικοποιηθεί η $\Phi(p)$

ii) Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων $\psi(x)$ και να επαληθευτεί ότι ικανοποιεί τη συνθήκη κανονικοποίησης.

(Χρήσιμη σχέση: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$)

iii) Να οριστούν κατάλληλα οι αβεβαιότητες Δp και Δx και ναδειχτεί ότι $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$.

1.11. Η εξίσωση Klein-Gordon είναι

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

i) Ναδειχθεί ότι επιδέχεται την ίδια εξίσωση συνέχειας

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

όπως η εξίσωση Schrödinger, όπου όμως τώρα είναι

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{c^2} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = i (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

Είναι εδώ η $P(\mathbf{r}, t)$ μια αναγκαστικά θετική συνάρτηση;

ii) Για τη λύση επίπεδου κύματος (1.26) να βρεθούν οι εκφράσεις των P , \mathbf{J} και η μεταξύ τους σχέση.

1.12. Ναδειχθεί ότι για τις στάσιμες καταστάσεις $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}$ η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας \mathbf{J} είναι ανεξάρτητη τόσο από το χρόνο, όσο και από τη θέση.

1.13. Θεωρούμε την κυματοσυνάρτηση (επίπεδο κύμα)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar}$$

i) Να υπολογιστεί η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας \mathbf{J}



ii) Αν η $\psi(\mathbf{r},t)$ περιγράφει την κίνηση ηλεκτρονίων ενέργειας 2KeV , που κινούνται στο επίπεδο $x-y$ υπό γωνία 30° ως προς τον άξονα x και δημιουργούν ρεύμα 1mA/cm^2 , να υπολογιστούν οι ποσότητες E/\hbar , $\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar$ και A και να γραφεί η τελική μορφή της ψ συναρτήσει των x,y,z,t : $\psi(x,y,z,t)$.

iii) Αν η $\psi(\mathbf{r},t)$ περιγράφει την κίνηση πρωτονίων κινητικής ενέργειας 1MeV , που κινούνται κατά μήκος του άξονα x , και ένας ανιχνευτής με εγκάρσια διατομή 20cm^2 μετρά 5000 πρωτόνια/sec, να βρεθεί η τελική μορφή $\psi(x,y,z,t)$ της κυματοσυνάρτησης.

- 1.14. i) Να δειχθεί ότι, εάν το δυναμικό $V(\mathbf{r},t)$ είναι μιγαδική ποσότητα, η εξίσωση συνέχειας παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r},t) + \nabla \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{2}{\hbar} [\text{Im}V(\mathbf{r},t)] P(\mathbf{r},t)$$

Έτσι, εάν $\text{Im} V > 0$, έχουμε την παρουσία πηγών και, εάν $\text{Im} V < 0$, έχουμε την παρουσία σημείων απορρόφησης. Να δειχθεί στη συνέχεια ότι, αν η κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r},t)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, τότε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \frac{2}{\hbar} \int [\text{Im}V(\mathbf{r},t)] P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}$$

ii) Δεχόμενοι ότι το $\text{Im} V$ δεν εξαρτάται από το χρόνο, ότι η $\psi(\mathbf{r},t)$ είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα για $t = 0$ και ότι η $P(\mathbf{r},t)$ αναπτύσσεται γύρω από το $t = 0$ με τη μορφή

$$P(\mathbf{r},t) = P_0(\mathbf{r}) + P_1(\mathbf{r}) t + \dots,$$

να δειχθεί ότι

$$\int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 1 + C t + \dots$$

Να εκφραστεί το C συναρτήσει των $P_0(\mathbf{r})$ και $\text{Im} V(\mathbf{r})$ και, έτσι, να επαληθευτεί ότι, αν το $\text{Im} V$ είναι θετικό ή αρνητικό, το $\int P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}$ αυξάνεται ή μειώνεται με το χρόνο, πράγμα που υποδηλώνει την παρουσία πηγών ή σημείων απορρόφησης, αντίστοιχα.

- 1.15. Αν θεωρήσουμε την κυματοσυνάρτηση σφαιρικού κύματος

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{\pm i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}, \quad \mathbf{p} = p \frac{\mathbf{r}}{r}$$

(+ για το εξερχόμενο, - για το εισερχόμενο κύμα)

να υπολογιστεί

- i) η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας



$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

ii) ο αριθμός των σωματιδίων, που διαπερνούν ανά δευτερόλεπτο την επιφάνεια σφαίρας ακτίνας r . Να δοθεί φυσική ερμηνεία στο αποτέλεσμα.

1.16. Ναδειχθεί ότι η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger για τη $\Phi(\mathbf{p}, t)$ γράφεται

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Phi(\mathbf{p}, t) + \int \tilde{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}', t) \Phi(\mathbf{p}') d\mathbf{p}' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{p}, t)$$

όπου

$$\tilde{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

Για τις στάσιμες καταστάσεις

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \Phi(\mathbf{p}) e^{-iEt/\hbar},$$

ναδειχθεί ότι η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger για τη $\Phi(\mathbf{p})$ γράφεται

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Phi(\mathbf{p}) + \int \tilde{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}') d\mathbf{p}' = E \Phi(\mathbf{p})$$

όπου

$$\tilde{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις Schrödinger στο χώρο των ορμών, επειδή περιέχουν ολοκληρώματα, είναι πολύ πιο δύσκολο να λυθούν από τις αντίστοιχες εξισώσεις Schrödinger στο χώρο των θέσεων. Γι' αυτό οι τελευταίες χρησιμοποιούνται κατά το πλείστον στις εφαρμογές.

1.17. Ναδειχθεί ότι οι τελεστές $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ και $\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}$ είναι πράγματι ερμιτιανοί τελεστές, συνεπώς και η χαμιλτονιανή \hat{H} . Να επαληθευτεί το ίδιο και για τον τελεστή της στροφορμής.

1.18. Να δεχθεί ότι για το κυματοπακέτο

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int e^{i(px - p^2 t/2m)/\hbar} \Phi(p) dp,$$

i) η μέση τιμή $\langle p \rangle$ είναι ανεξάρτητη από το χρόνο, και

ii) η μέση τιμή $\langle x \rangle$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle|_{t=t_0} + \frac{\langle p \rangle}{m} (t - t_0)$$

σε συμφωνία με την αρχή της αντιστοιχίας.



1.19. Θεωρούμε το κυματοπακέτο Gauss

$$\psi(x,t=0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + i \frac{p_0 x}{\hbar}\right)$$

- i) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(x,t=0)$ και να υπολογιστεί η $\Phi(p,t=0)$
- ii) Να υπολογιστούν οι $\psi(x,t)$ και $\Phi(p,t)$, καθώς και οι πιθανότητες $|\psi|^2 dx$ και $|\Phi|^2 dp$ στο χώρο των θέσεων και των ορμών, αντίστοιχα.
- iii) Να υπολογιστούν οι αβεβαιότητες $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ τη χρονική στιγμή t και να γραφεί η σχέση αβεβαιότητας του Heisenberg για θέση - ορμή.
- iv) Αν ένα άτομο υδρογόνου τη χρονική στιγμή $t=0$ περιγράφεται από το κυματοπακέτο Gauss $\psi(x,t=0)$ με εύρος $a=0.53\text{\AA}$, να υπολογιστεί σε πόσο χρόνο το εύρος του θα γίνει 1000 φορές μεγαλύτερο.

1.20. Θεωρούμε την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = C \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad 0 < x < L, \quad n \text{ θετικός ακέραιος.}$$

- i) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(x)$
- ii) Να υπολογιστούν οι αβεβαιότητες στη θέση και την ορμή
 $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$
 $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$
και να γραφεί η σχέση αβεβαιότητας θέσης- ορμής.

1.21. Υποθέτουμε ότι είναι E_i , $\psi_i(x)$, $i = 1,2,3$, οι τρεις πρώτες ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας για ένα μονοδιάστατο σύστημα. Στο χρόνο $t=0$ η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_2(x) + \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_3(x)$$

- i) Να γραφεί η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ για χρόνο t .
- ii) Να βρεθεί η πιθανότητα μια μέτρηση της ενέργειας στο χρόνο t να δώσει την τιμή E_2 .
- iii) Να μελετηθεί ποιά από τις μέσες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$ και $\langle E \rangle$ εξαρτάται από το χρόνο.



- 1.22. Δεδομένου ότι μια κυματοσυνάρτηση μπορεί ν' αναπτυχθεί συναρτήσει επίπεδων κυμάτων, να βρεθεί πώς μετασχηματίζεται κάτω από τους μετασχηματισμούς του Γαλιλαίου

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{v}t$$

$$t = t'$$

- 1.23. Αν \hat{A} είναι ένας ερμιτιανός τελεστής, να δειχθεί ότι

$$\int \psi_{E_1}^* [\hat{H}, \hat{A}] \psi_{E_2} d\mathbf{r} = (E_1 - E_2) \int \psi_{E_1}^* \hat{A} \psi_{E_2} d\mathbf{r}$$

Με βάση την παραπάνω σχέση, να δειχθεί ότι

$$\int \psi_{E_1}^* \hat{p} \psi_{E_2} d\mathbf{r} = \frac{i m (E_1 - E_2)}{\hbar} \int \psi_{E_1}^* \hat{r} \psi_{E_2} d\mathbf{r}$$

- 1.24. Έστω ότι ένας ερμιτιανός τελεστής \hat{A} , που δεν μετατίθεται με τη χαμιλτονιανή \hat{H} , έχει ιδιοτιμές α_1, α_2 με αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{E_1} + \psi_{E_2}), \quad \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{E_1} - \psi_{E_2}).$$

Αν ένα σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση ϕ_1 για $t=0$, να δειχθεί ότι η μέση τιμή του φυσικού μεγέθους A την χρονική στιγμή t είναι

$$\langle A \rangle_t = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}.$$



ΚΕΦΑΛΑΙΟ II

**ΚΑΤΑΣΤΑΤΙΚΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΑ, ΤΕΛΕΣΤΕΣ ΚΑΙ
ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΕΙΣ. Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ
ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ**

Οι βασικές έννοιες της κβαντικής μηχανικής, που γνωρίσαμε στο πρώτο κεφάλαιο, παρουσιάστηκαν με τη χρήση του φορμαλισμού της κβαντικής μηχανικής, που είναι γνωστός σαν κυματομηχανική. Σ' αυτό το κεφάλαιο, θα παρουσιάσουμε τις αρχές της κβαντικής μηχανικής κατά ένα πολύ πιο γενικό τρόπο, χρησιμοποιώντας μια ευρύτερη και αρκετά πιο δυνατή περιγραφή, που είναι γνωστή σαν συμβολισμός Dirac.

Ας εισάγουμε πρώτα την έννοια του καταστατικού διανύσματος. Στην κλασική φυσική, η δυναμική κατάσταση ενός συστήματος προσδιορίζεται σε κάθε χρονική στιγμή από τη γνώση φυσικών ποσοτήτων (δυναμικών μεταβλητών), όπως είναι τα διανύσματα θέσης και ορμής των σωματιδίων που απαρτίζουν το σύστημα. Δεχόμαστε ότι όλες οι δυναμικές μεταβλητές μπορούν κατ' αρχήν να μετρηθούν συγχρόνως με όση θέλουμε ακρίβεια. Στην κβαντική φυσική, όμως, το πρόβλημα είναι πολύ διαφορετικό. Εδώ το κεντρικό ρόλο παίζει η διαδικασία μέτρησης. Πραγματικά, όταν μετράμε μια δυναμική μεταβλητή, η δυναμική κατάσταση του συστήματος εν γένει τροποποιείται κατά ένα απρόβλεπτο τρόπο. Όπως είδαμε στο κεφάλαιο I, οι σχέσεις αβεβαιότητας του Heisenberg θέτουν ένα όριο στην ακρίβεια με την οποία συμπληρωματικές δυναμικές μεταβλητές μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Είμαστε λοιπόν υποχρεωμένοι να εγκαταλείψουμε την κλασική παραδοχή ότι όλες οι δυναμικές μεταβλητές ενός συστήματος έχουν καθορισμένες



τιμές σε κάθε χρονική στιγμή. Έτσι, μια διαδικασία μέτρησης συνοψίζεται εδώ στα εξής: Αρχικά προετοιμάζουμε το σύστημα εκτελώντας μια ταυτόχρονη μέτρηση ενός συνόλου μεταβλητών, που μπορούν να μετρηθούν την ίδια χρονική στιγμή. Το μη εκφυλισμένο αποτέλεσμα μιας τέτοιας μέτρησης ορίζει πλήρως την κατάσταση του συστήματος. Σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή, μπορούμε να κάνουμε μια νέα μέτρηση στο σύστημα, το οποίο βρίσκεται στην ήδη γνωστή κατάσταση. Μετά τη νέα μέτρηση, το σύστημα θα βρεθεί σε μια καινούργια κατάσταση. Για το γεγονός αυτό της διαδικασίας μέτρησης θα υπάρχει ένα πλάτος πιθανότητας, από το οποίο θα μπορεί να προκύπτει η καινούργια κατάσταση από την παλιά. Η κβαντική μηχανική προβλέπει ακριβώς μια στατιστική κατανομή για τα αποτελέσματα μιας τέτοιας διαδικασίας μέτρησης. Για να συγκρίνουμε τέτοιες προβλέψεις με το πείραμα, χρειαζόμαστε ένα γενικό φορμαλισμό, τον οποίο θ' αναπτύξουμε στη συνέχεια.

2.1. Καταστατικά διανύσματα και τελεστές

Το σύνολο των καταστάσεων ενός συστήματος φανταζόμαστε ότι απαρτίζει έναν χώρο, κάθε σημείο του οποίου αντιστοιχεί σε μια κατάσταση του συστήματος. Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από μια, εν γένει, μιγαδική συνάρτηση, την κυματοσυνάρτηση. Επί πλέον, είδαμε ότι κάθε φυσικά παραδεκτή κυματοσυνάρτηση μπορεί ν' αναπτυχθεί συναρτήσει ενός πλήρους συνόλου ιδιοσυναρτήσεων, π.χ. των ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας. Κατ' αντιστοιχία, ο παραπάνω καταστατικός χώρος είναι ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος, του οποίου η διάσταση προσδιορίζεται από το υπό εξέταση φυσικό σύστημα. Ο μέγιστος αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων διανυσμάτων του καταστατικού χώρου αποτελεί τη διάστασή του. Αν οι διαστάσεις του χώρου απειρίζονται, είτε με διάκριτο είτε με συνεχή τρόπο, ο υπό εξέταση χώρος είναι γνωστός σαν χώρος Hilbert, από το μεγάλο μαθηματικό D. Hilbert, που μελέτησε τέτοιους διανυσματικούς χώρους άπειρης διάστασης. Στον καταστατικό χώρο, η κατάσταση του συστήματος παριστάνεται από ένα καταστατικό διάνυσμα, το οποίο, ακολουθώντας τον Dirac, ονομάζουμε διάνυσμα ket και συμβολίζουμε με το σύμβολο $| \chi \rangle$. Αυτό το καταστατικό διάνυσμα ket δεχόμαστε ότι περιέχει ολόκληρη την πληροφορία για τη φυσική κατάσταση του συστήματός μας.

Ένα παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος, όπως η ορμή, παριστάνεται από έναν τελεστή, που δρα στον καταστατικό χώρο των διανυσμάτων ket. Ένας τελεστής δρα από αριστερά πάνω σ' ένα διάνυσμα ket και το πιο γενικό αποτέλεσμα που μπορεί να προκύψει είναι ένα νέο διάνυσμα ket:

$$\hat{A} |\chi\rangle = |\chi'\rangle \quad (2.1)$$



Με την εξαίρεση του τελεστή της αναστροφής του χρόνου (βλ. §5.1), όλοι οι τελεστές της κβαντικής μηχανικής είναι γραμμικοί, δηλαδή ισχύει γι' αυτούς

$$\hat{A} (c_1 |\psi\rangle + c_2 |\chi\rangle) = c_1 \hat{A} |\psi\rangle + c_2 \hat{A} |\chi\rangle \quad (2.2)$$

Όπως για τον τελεστή \hat{H} υπάρχουν οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, έτσι για έναν τελεστή \hat{A} υπάρχουν διανύσματα $\text{ket } |a^i\rangle$ για τα οποία ισχύει

$$\hat{A} |a^i\rangle = a^i |a^i\rangle \quad (2.3)$$

όπου a^i είναι αριθμοί. Οι αριθμοί αυτοί είναι οι ιδιοτιμές και τα διανύσματα $|a^i\rangle$ είναι τα ιδιοδιανύσματα ket του τελεστή \hat{A} . Το σύνολο των ιδιοτιμών $\{a^i\}$ ορίζει το φάσμα των ιδιοτιμών του τελεστή. Το έργο της εύρεσης των ιδιοδιανυσμάτων ket και των ιδιοτιμών ενός τελεστή συνιστά το πρόβλημα ιδιοτιμών.

Όπως σε κάθε κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί η συζυγής μιγαδική της, έτσι εδώ σε κάθε διάνυσμα $\text{ket } | \rangle$ αντιστοιχεί ένα διάνυσμα bra, που συμβολίζεται με το σύμβολο $\langle |$. Το σύνολο των διανυσμάτων bra απαρτίζουν το διανυσματικό χώρο bra, ένα χώρο όπως λέμε "δυσικό" στο χώρο ket. Μπορούμε να πούμε ότι υπάρχει μια αντιστοιχία ένα προς ένα ανάμεσα στο χώρο ket και στο χώρο bra

$$\begin{aligned} c_1 |\psi\rangle &\longleftrightarrow c^* \langle \psi| \\ c_1 |\psi\rangle + c_2 |\chi\rangle &\longleftrightarrow c_1^* \langle \psi| + c_2^* \langle \chi| \end{aligned} \quad (2.4)$$

Με βάση τις παραπάνω έννοιες, ας ορίσουμε μερικές πράξεις, των οποίων η σύνδεση με αυτά που έχουμε δει ως τώρα θα γίνει φανερή στη συνέχεια. Ορίζουμε σαν εσωτερικό (ή βαθμωτό) γινόμενο ενός διανύσματος bra $\langle \chi|$ και ενός διανύσματος ket $|\psi\rangle$ το μιγαδικό αριθμό, που γράφεται $\langle \chi|\psi\rangle$ (πλήρες όνομα bra(c)ket). Παρακάτω θα δώσουμε στο εσωτερικό γινόμενο την φυσική ερμηνεία ενός πλάτους πιθανότητας για την μετάβαση από την κατάσταση $|\psi\rangle$ στην κατάσταση $|\chi\rangle$ και, όπως θα φανεί, δύο βασικές ιδιότητες θα ισχύουν:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad &\langle \chi|\psi\rangle = \langle \psi|\chi\rangle^* \\ \text{ii)} \quad &\langle \psi|\psi\rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Δύο διανύσματα $\text{ket } |\psi\rangle$ και $|\chi\rangle$ λέγονται ορθογώνια, αν το εσωτερικό γινόμενο $\langle \chi|\psi\rangle$ είναι μηδέν:

$$\langle \chi|\psi\rangle = \langle \psi|\chi\rangle^* = 0 \quad (2.6)$$

Δοθέντος ενός μη μηδενικού διανύσματος ket, μπορούμε να σχηματίσουμε το κανονικοποιημένο διάνυσμα ket γράφοντας

$$| \tilde{\psi} \rangle = \frac{|\psi\rangle}{(\langle \psi|\psi\rangle)^{1/2}} \quad (2.7)$$

έτσι ώστε



$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = 1 \quad (2.8)$$

Από φυσική άποψη, τα διανύσματα $|\psi\rangle$ και $\langle\psi|$ παριστάνουν την ίδια φυσική κατάσταση. Έτσι, συνήθως, απαιτούμε τα διανύσματα ket για τις φυσικές καταστάσεις να ικανοποιούν τη σχέση (2.8).

Ένας τελεστής \hat{A} θεωρείται ότι δρα πάντα από δεξιά πάνω σ' ένα διάνυσμα bra και το αποτέλεσμα είναι ένα άλλο διάνυσμα bra :

$$\langle \psi | \hat{A} = \langle \chi | \quad (2.9)$$

Το διάνυσμα $\text{ket } \hat{A}|\psi\rangle$ και το διάνυσμα $\text{bra } \langle \psi | \hat{A}$ δεν ανήκουν, εν γένει, σε "δύϊκούς" χώρους. Γι' αυτό ορίζουμε τον ερμιτιανό συζυγή τελεστή \hat{A}^+ από την αντιστοιχία

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\chi\rangle \longleftrightarrow \langle \psi | \hat{A}^+ = \langle \chi | \quad (2.10)$$

Αν είναι

$$\hat{A} = \hat{A}^+ , \quad (2.11)$$

ο τελεστής λέγεται ερμιτιανός. Είναι εύκολο να δει κανείς ότι για δύο τελεστές \hat{A} και \hat{B} ισχύει

$$(\hat{A} \hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ , \quad (2.12)$$

για και έχουμε την αντιστοιχία

$$\hat{A} \hat{B} |\alpha\rangle = \hat{A} (\hat{B} |\alpha\rangle) \longleftrightarrow (\langle \alpha | \hat{B}^+) \hat{A}^+ = \langle \alpha | \hat{B}^+ \hat{A}^+ \quad (2.13)$$

Για τον πολλαπλασιασμό δύο τελεστών ισχύει, εν γένει, ότι

$$\hat{A} \hat{B} \neq \hat{B} \hat{A} \quad (2.14)$$

Ισχύει όμως η προσεταιριστική ιδιότητα:

$$\hat{A} (\hat{B} \hat{C}) = (\hat{A} \hat{B}) \hat{C} = \hat{A} \hat{B} \hat{C} \quad (2.15)$$

Δεχόμαστε ότι η προσεταιριστική ιδιότητα ισχύει πολύ γενικότερα στις πράξεις με διανύσματα ket , bra και τελεστές. Έτσι

$$\langle \chi | (\hat{A} |\psi\rangle) = (\langle \chi | \hat{A}) (|\psi\rangle) \quad (2.16)$$

Είναι, συνεπώς, περιττό να διακρίνουμε αν η δράση του τελεστή γίνεται πάνω στο διάνυσμα ket ή στο διάνυσμα bra . Γράφουμε απλά

$$\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (2.17)$$

Έχουμε τώρα

$$\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \chi | (\hat{A} | \psi \rangle) = [(\langle \psi | \hat{A}^+) | \chi \rangle]^* = \langle \psi | \hat{A}^+ | \chi \rangle^* \quad (2.18)$$



σχέση που συχνά αποτελεί και ορισμό του ερμιτιανού συζυγούς τελεστή \hat{A}^+ . Για έναν ερμιτιανό τελεστή, θα έχουμε

$$\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle^* \quad (2.19)$$

Γενικά, μπορούμε να πούμε ότι, για να πάρουμε το ερμιτιανό συζυγές ενός γινομένου (συνόλου πράξεων), ακολουθούμε την εξής διαδικασία: αντικαθιστούμε τους αριθμούς με τους μιγαδικούς συζυγείς, τα διανύσματα ket με τα bra και αντίστροφα, τους τελεστές με τους ερμιτιανούς συζυγείς τους, και αντιστρέφουμε τη σειρά όλων των συμβόλων του γινομένου.

Ας θεωρήσουμε τα ιδιοδιανύσματα ket και το φάσμα ιδιοτιμών ενός ερμιτιανού τελεστή. Δεν είναι δύσκολο να δείξουμε ότι:

- i) οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή \hat{A} είναι πραγματικές, και
- ii) τα ιδιοδιανύσματα ket του \hat{A} , που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές, είναι ορθογώνια.

Πράγματι, έχουμε

$$\hat{A} | \alpha^i \rangle = \alpha^i | \alpha^i \rangle \quad (2.20)$$

και, λόγω ερμιτιανότητας,

$$\langle \alpha^j | \hat{A} = \alpha^j{}^* \langle \alpha^j | \quad (2.21)$$

Εάν πολλαπλασιάσουμε τα δύο μέλη της (2.20) από αριστερά με $\langle \alpha^j |$, τα δύο μέλη της (2.21) από δεξιά με $| \alpha^i \rangle$ και αφαιρέσουμε, παίρνουμε

$$(\alpha^i - \alpha^j{}^*) \langle \alpha^j | \alpha^i \rangle = 0 \quad (2.22)$$

Ας διαλέξουμε πρώτα ίδιες ιδιοτιμές: $i = j$. Τότε η (2.22) δίνει

$$\alpha^i = \alpha^i{}^* \quad (2.23)$$

δηλαδή οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές. Ας διαλέξουμε τώρα $i \neq j$. Τότε $\alpha^i - \alpha^j{}^* = \alpha^i - \alpha^j \neq 0$ και, συνεπώς,

$$\langle \alpha^j | \alpha^i \rangle = 0 \quad (i \neq j) \quad (2.24)$$

δηλαδή τα ιδιοδιανύσματα ket που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνια.

Η μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους θα δώσει πραγματικές τιμές. Αυτός είναι ο λόγος, που στην κβαντική μηχανική χρησιμοποιούνται ερμιτιανοί τελεστές για να παραστήσουν φυσικά μεγέθη.



Είναι σύνηθες να κανονικοποιούμε τα ιδιοδιανύσματα ket , έτσι ώστε το σύνολο $\{|a^i\rangle\}$ των ιδιοδιανυσμάτων ket να είναι ορθοκανονικό:

$$\langle a^i | a^j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.25)$$

Το σύνολο $\{|a^i\rangle\}$ των κανονικοποιημένων ιδιοδιανυσμάτων ket ενός ερμιτιανού τελεστή \hat{A} αποτελεί ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο. Αυτό σημαίνει ότι κάθε διάνυσμα ket μπορεί ν' αναπτυχθεί συναρτήσει αυτών των ιδιοδιανυσμάτων. Με άλλα λόγια, τα ιδιοδιανύσματα ket του \hat{A} μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν διανύσματα βάσης, ακριβώς όπως ένα σύνολο αμοιβαία ορθογώνιων μοναδιαίων διανυσμάτων αποτελεί τα διανύσματα βάσης σ' έναν ευκλείδειο χώρο. Έτσι, για ένα αυθαίρετο διάνυσμα ket $|\psi\rangle$ γράφουμε γενικά

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a^i\rangle \quad (2.26)$$

Πολλαπλασιάζοντας με $\langle a^i |$ από αριστερά και χρησιμοποιώντας τις σχέσεις ορθοκανονικότητας, βρίσκουμε για τους συντελεστές c_i ότι

$$c_i = \langle a^i | \psi \rangle \quad (2.27)$$

Έτσι, έχουμε

$$|\psi\rangle = \sum_i |a^i\rangle \langle a^i | \psi \rangle \quad (2.28) \Rightarrow$$

Από φυσική άποψη οι σχέσεις (2.26) και (2.28) εκφράζουν την αρχή της επαλληλίας. Η ιδιότητα της προσεταιριστικότητας μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δούμε τη σχέση (2.28) είτε σαν τον αριθμό $\langle a^i | \psi \rangle$ που πολλαπλασιάζει το $|a^i\rangle$, είτε, ισοδύναμα, σαν τον τελεστή $|a^i\rangle \langle a^i |$ που δρα πάνω στο $|\psi\rangle$. Επειδή το $|\psi\rangle$ είναι αυθαίρετο, συμπεραίνουμε τη σημαντική σχέση

$$\sum_i |a^i\rangle \langle a^i | = I \quad (2.29)$$

όπου το I θα πρέπει να θεωρηθεί σαν ο ταυτοτικός τελεστής. Η εξίσωση (2.29) είναι γνωστή σαν σχέση πληρότητας.

Η χρησιμότητα της σχέσης (2.29) είναι μεγάλη. Σε μια οποιαδήποτε σειρά πράξεων με διανύσματα ket , bra και τελεστές, μπορεί να εισάγει κανένας, όπου κρίνει πρόσφορο, τον ταυτοτικό τελεστή γραμμένο με τη μορφή (2.29). Παραδείγματος χάρη, εκτός από την (2.28) θα μπορούσαμε να γράψουμε

$$\langle \psi | = \sum_i \langle \psi | a^i \rangle \langle a^i | \quad (2.30)$$

ή, ακόμα γενικότερα,



$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_i | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \right) | \psi \rangle = \sum_i | \langle \alpha^i | \psi \rangle |^2 \quad (2.31)$$

Η παραπάνω σχέση δείχνει ότι, εάν το $|\psi\rangle$ είναι κανονικοποιημένο, τότε οι συντελεστές c_i στο ανάπτυγμα (2.26) ικανοποιούν τη συνθήκη

$$\sum_i |c_i|^2 = \sum_i | \langle \alpha^i | \psi \rangle |^2 = 1 \quad (2.32)$$

Με τη μορφή αυτή γνωρίσαμε τη σχέση πληρότητας στο τέλος του πρώτου κεφαλαίου (βλ. σχέση 1.173) για τους συντελεστές C_E στο ανάπτυγμα μιας κυματοσυνάρτησης συναρτήσει των ιδιοσυναρτήσεων ενέργειας.

Γενικά, θα μπορούσε κανείς να θεωρήσει το γινόμενο δύο διανυσμάτων $|\psi\rangle$ και $\langle \chi |$ με τη σειρά αυτή. Το αποτέλεσμα

$$(|\psi\rangle)(\langle \chi |) = |\psi\rangle \langle \chi | \quad (2.33)$$

είναι γνωστό σαν εξωτερικό γινόμενο των $|\psi\rangle$ και $\langle \chi |$. Γνωρίζοντας ήδη και την ερμηνεία της σχέσης πληρότητας (2.29), το γινόμενο $|\psi\rangle \langle \chi |$ νοείται σαν τελεστής. Είναι συνεπώς τελείως διαφορετικό από το εσωτερικό γινόμενο $\langle \chi | \psi \rangle$, που είναι απλά ένας (μγαδικός) αριθμός.

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω θεωρώντας το γινόμενο $| \alpha^i \rangle \langle \alpha^i |$, που εμφανίζεται στη σχέση πληρότητας (2.29). Επειδή αυτό είναι ένα εξωτερικό γινόμενο του τύπου (2.33), θα πρέπει να είναι ένας τελεστής. Ας δράσουμε με αυτόν πάνω στο $|\psi\rangle$:

$$(| \alpha^i \rangle \langle \alpha^i |) | \psi \rangle = | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \psi \rangle = c_i | \alpha^i \rangle \quad (2.34)$$

Έτσι, ο τελεστής $| \alpha^i \rangle \langle \alpha^i |$, δρώντας πάνω στο διάνυσμα $\text{ket } |\psi\rangle$, επιλέγει τη "συνιστώσα" c_i του $|\psi\rangle$ "κατά μήκος" του διανύσματος βάσης $| \alpha^i \rangle$. Γι' αυτό, ο τελεστής $| \alpha^i \rangle \langle \alpha^i |$ είναι γνωστός σαν προβολικός τελεστής "κατά μήκος" του διανύσματος βάσης $| \alpha^i \rangle$ και συμβολίζεται με

$$\hat{P}_i = | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \quad (2.35)$$

Για τον προβολικό τελεστή \hat{P}_i ισχύει προφανώς ότι

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i \quad (2.36)$$

Επίσης είναι ένας ερμιτιανός τελεστής:

$$\hat{P}_i^+ = \hat{P}_i \quad (2.37)$$



Οι παραπάνω δύο ιδιότητες ορίζουν στην πραγματικότητα ένα προβολικό τελεστή. Η σχέση πληρότητας (2.29) γράφεται τώρα:

$$\sum_i \hat{P}_i = I \quad (2.38)$$

Ας σημειωθεί ότι ένα διάνυσμα $ket \psi\rangle$ μπορεί πάντα να γραφεί συναρτήσει δύο ορθογώνιων διανυσμάτων ket με τη χρήση ενός προβολικού τελεστή \hat{P} . Πράγματι, μπορούμε να γράψουμε

$$|\psi\rangle = \hat{P} |\psi\rangle + (I - \hat{P}) |\psi\rangle \quad (2.39)$$

και, προφανώς, ισχύει

$$\langle \psi | \hat{P}^\dagger (I - \hat{P}) |\psi\rangle = \langle \psi | (\hat{P} - \hat{P}^2) |\psi\rangle = 0 \quad (2.40)$$

Ο τελεστής $I - \hat{P}$ είναι επίσης ένας προβολικός τελεστής, γιατί είναι ερμιτιανός και ικανοποιεί τη σχέση $(I - \hat{P})^2 = I - 2\hat{P} + \hat{P}^2 = I - \hat{P}$.

Τέλος, το πρόβλημα ιδιοτιμών ενός προβολικού τελεστή έχει μια πολύ απλή λύση:

$$\hat{P} |\pi\rangle = \pi |\pi\rangle \quad (2.41)$$

απ' όπου συνάγεται

$$0 = (\hat{P}^2 - \hat{P}) |\pi\rangle = \pi(\pi - 1) |\pi\rangle \quad (2.42)$$

και, συνεπώς, οι ιδιοτιμές του \hat{P} είναι 0 και 1. Έτσι, στη σχέση (2.39), το διάνυσμα $\hat{P} |\psi\rangle$ αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα με ιδιοτιμή 1 και το διάνυσμα $(I - \hat{P}) |\psi\rangle$ στο ιδιοδιάνυσμα με ιδιοτιμή 0. Το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων του προβολικού τελεστή είναι πλήρες.

2.2. Κβαντικές μετρήσεις.

Έχοντας διατυπώσει τον μαθηματικό φορμαλισμό των χώρων ket και bra , ας επανέλθουμε να συζητήσουμε τη φυσική διαδικασία μέτρησης σε κβαντικά συστήματα. Το θέμα αυτό περιέχει μερικά εξαιρετικά λεπτά ζητήματα και θα επανέλθουμε σ' αυτό στο τέλος του βιβλίου. Είναι διαφωτιστικό να ξεκινήσουμε με μια πολύ σημαντική πρόταση, που οφείλεται στον Dirac: "Μια μέτρηση αναγκάζει πάντα ένα κβαντικό σύστημα να μεταπηδήσει σε μια ιδιοκατάσταση της δυναμικής μεταβλητής, την οποίαν μετράμε". Ας το διατυπώσουμε αυτό διαφορετικά. Όπως είπαμε και στην αρχή του κεφαλαίου αυτού, πριν την μέτρηση του παρατηρήσιμου



μεγέθους A , το σύστημά μας βρίσκεται σε μια κατάσταση $|\psi\rangle$, που μπορεί να παρασταθεί σαν επαλληλία των ιδιοκαταστάσεων $|\alpha^i\rangle$ του τελεστή \hat{A}

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha^i\rangle = \sum_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i | \psi \rangle \quad (2.43)$$

Όταν γίνεται η μέτρηση, το σύστημα μεταπηδά σε μια από τις ιδιοκαταστάσεις $|\alpha^i\rangle$ του A :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση}} A |\alpha^i\rangle \quad (2.44)$$

Έτσι, η μέτρηση συνήθως αλλάζει την κατάσταση. Εξαιρέση αποτελεί η περίπτωση, που το σύστημα βρίσκεται αρχικά σε μια ιδιοκατάσταση του παρατηρήσιμου μεγέθους A , που μετριέται, οπότε

$$|\alpha^i\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση}} A |\alpha^i\rangle \quad (2.45)$$

Σε κάθε περίπτωση, η μέτρηση οδηγεί σε μια ιδιοκατάσταση του παρατηρήσιμου μεγέθους A , που μετράμε.

Όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\psi\rangle$ και κάνουμε τη μέτρηση του μεγέθους A , δεν ξέρουμε σε ποιά από τις ιδιοκαταστάσεις $|\alpha^i\rangle$ θα μεταπηδήσει το σύστημά μας. Για το γεγονός αυτής της μέτρησης, δεχόμαστε ότι υπάρχει ένα πλάτος πιθανότητας για τη μετάβαση $|\psi\rangle \rightarrow |\alpha^i\rangle$, που δίνεται από τη σχέση

$$\text{πλάτος πιθανότητας} = \langle \alpha^i | \psi \rangle, \quad (2.46)$$

έτσι ώστε η πιθανότητα να είναι

$$\text{πιθανότητα} = |\langle \alpha^i | \psi \rangle|^2, \quad (2.47)$$

αρκεί η κατάσταση $|\psi\rangle$ να είναι κανονικοποιημένη.

Η μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους A σ' ένα σύνολο ανεξάρτητων, όμοια προετοιμασμένων φυσικών συστημάτων, που περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$, θα δώσει μια αναμενόμενη ή μέση τιμή για το A , που ορίζεται από τη σχέση

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (2.48)$$

Είναι εύκολο να δει κανείς ότι αυτή η σχέση οδηγεί πράγματι στην έννοια της μέσης τιμής. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις ορθοκανονικότητας (2.25), έχουμε

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i \sum_j \langle \psi | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \hat{A} | \alpha^j \rangle \langle \alpha^j | \psi \rangle$$



$$= \sum_i \alpha^i \cdot |\langle \alpha^i | \psi \rangle|^2 \quad (2.49)$$

τιμή που μετρήθηκε πιθανότητα για να
μετρηθεί η τιμή α^i

Η σχέση αυτή έχει την ίδια μορφή με τη σχέση (1.174), που είχαμε δει στο τέλος του πρώτου κεφαλαίου για την ειδική περίπτωση της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$. Κατά τη διαδικασία μιας επανειλημμένης μέτρησης ενός φυσικού μεγέθους A , εάν η πρώτη μέτρηση, που καθορίζει την κατάσταση του συστήματος, δώσει την ιδιοτιμή α^i , τότε το ίδιο αποτέλεσμα θα προκύψει, εάν η μέτρηση επαναληφθεί αμέσως μετά. Έτσι το αποτέλεσμα της δεύτερης μέτρησης μπορεί να προβλεφθεί με βεβαιότητα. Επειδή, μετά την πρώτη μέτρηση, το σύστημά μας βρίσκεται στην ιδιοκατάσταση $|\alpha^i\rangle$ του φυσικού μεγέθους A που μετράμε, μιλάμε για μια διαδικασία "φιλτραρίσματος", με την έννοια ότι από όλες τις ιδιοκαταστάσεις του \hat{A} , επιλέγεται μία, η $|\alpha^i\rangle$, και απορρίπτονται όλες οι άλλες, έτσι ώστε οποιαδήποτε και αν ήταν η κατάσταση του συστήματος πριν τη μέτρηση, αμέσως μετά τη μέτρηση το σύστημα βρίσκεται στην ιδιοκατάσταση $|\alpha^i\rangle$. Από μαθηματική άποψη, αυτό διατυπώνεται εφαρμόζοντας τον προβολικό τελεστή $\hat{\Pi}_i$ στην κατάσταση $|\psi\rangle$:

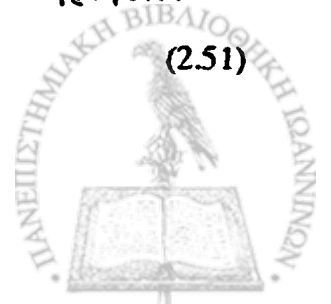
$$\hat{\Pi}_i |\psi\rangle = |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i | \psi \rangle. \quad (2.50)$$

2.3. Συνεχή φάσματα - Η δ -συνάρτηση του Dirac

Στα προηγούμενα θεωρήσαμε παρατηρήσιμα μεγέθη, των οποίων οι ιδιοτιμές χαρακτηρίζονται από έναν δείκτη i , που παίρνει τις διάκριτες τιμές $i = 1, 2, \dots$, δηλαδή μεγέθη των οποίων το φάσμα των ιδιοτιμών είναι διάκριτο. Στην κβαντική μηχανική υπάρχουν, όμως, και παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη με συνεχή φάσματα ιδιοτιμών. Βέβαια, οι μαθηματικές έννοιες διανυσματικών χώρων με άπειρες διαστάσεις είναι εξαιρετικά λεπτές. Στην περίπτωσή μας, ευτυχώς, μπορούμε εύκολα να γενικεύσουμε τα αποτελέσματα, που ισχύουν για διανυσματικούς χώρους πεπερασμένων ή απείρων διαστάσεων με διάκριτα φάσματα ιδιοτιμών, σε διανυσματικούς χώρους απείρων διαστάσεων με συνεχή φάσματα ιδιοτιμών.

Η γενίκευση της σχέσης (2.20) σε συνεχή φάσματα ιδιοτιμών γράφεται

$$\hat{\xi} |\xi\rangle = \xi |\xi\rangle, \quad (2.51)$$



όπου $\hat{\xi}$ είναι ένας τελεστής, ξ η ιδιοτιμή του και $|\xi\rangle$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα ket, ενώ η γενίκευση της σχέσης ορθοκανονικότητας (2.25) στα συνεχή φάσματα γράφεται

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \delta(\xi' - \xi), \quad (2.52)$$

όπου η συνάρτηση στο δεξιό μέλος της παραπάνω σχέσης είναι η δ-συνάρτηση του Dirac. Η ιδιότητα, που ορίζει την δ-συνάρτηση του Dirac, είναι η εξής: για κάθε συνεχή, μονότιμη, τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση $f(\xi)$ ισχύει

$$\int d\xi f(\xi) \delta(\xi' - \xi) = f(\xi') \quad (2.53)$$

Η περιοχή ολοκλήρωσης περιλαμβάνει το σημείο $\xi = \xi'$. Εάν αυτό το σημείο δεν περιλαμβάνεται στην περιοχή ολοκλήρωσης, τότε το ολοκλήρωμα δίνει μηδέν. Μια συνάρτηση, που ορίζεται από μια ολοκληρωτική της ιδιότητα, λέγεται κατανομή. Δεν είναι μια συνηθισμένη συνάρτηση, γιατί πολλές διαφορετικές συναρτήσεις μπορούν να οδηγήσουν στο ίδιο αποτέλεσμα. Με άλλα λόγια, υπάρχουν πολλές αναπαραστάσεις της συνάρτησης δ.

Η φυσική εικόνα της σχέσης (2.52) είναι η εξής: Εάν ξέρει κανείς την ιδιοτιμή ξ ενός φυσικού μεγέθους, τότε σε μια νέα διαδοχική μέτρηση του ίδιου φυσικού μεγέθους δεν μπορεί παρά να βρει την ίδια ιδιοτιμή: το πλάτος πιθανότητας για να βρει άλλη ιδιοτιμή είναι μηδέν

$$\langle \xi' \neq \xi | \xi \rangle = 0 \quad (2.54)$$

Από την άλλη μεριά, η τιμή του εσωτερικού γινομένου $\langle \xi | \xi \rangle$, όταν τα διανύσματα ket και bra αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή, καθορίζεται από τη συνθήκη βεβαιότητας:

$$\langle \xi | \xi \rangle = 1 \quad (2.55)$$

Η σχέση (2.55) σημαίνει ότι το $\langle \xi | \xi \rangle$ γίνεται άπειρο, αλλά με τέτοιο τρόπο ώστε η επιφάνεια που αντιστοιχεί στη διαφορική περιοχή $d\xi$ γύρω από το σημείο $\xi = \xi'$ να είναι πάντα 1. Αυτή είναι ακριβώς η ιδιότητα της δ-συνάρτησης, όπως ορίζεται από τη σχέση (2.53) με $f(\xi) = 1$. Έτσι, πράγματι το εσωτερικό γινόμενο $\langle \xi' | \xi \rangle$ είναι η δ-συνάρτηση $\delta(\xi' - \xi)$.

Πριν δώσουμε στη συνέχεια μερικές βασικές ιδιότητες και αναπαραστάσεις της δ-συνάρτησης, ας γράψουμε για την περίπτωση των συνεχών φασμάτων τις κυριότερες από τις σχέσεις που είδαμε για τα διάκριτα φάσματα. Η αναλογία γίνεται με το ν' αντικαταστήσουμε τ' αθροίσματα πάνω σ' ένα διάκριτο δείκτη i με ολοκληρώματα πάνω σε μια συνεχή μεταβλητή ξ . Έτσι, έχουμε



$$\sum_i \rightarrow \int d\xi$$

$$\sum_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i| = I \rightarrow \int d\xi |\xi\rangle \langle \xi| = I$$

$$|\psi\rangle = \sum_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \int d\xi |\xi\rangle \langle \xi|\psi\rangle$$

$$\sum_i |\langle \alpha^i|\psi\rangle|^2 = 1 \rightarrow \int d\xi |\langle \xi|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (2.56)$$

$$\langle \chi|\psi\rangle = \sum_i \langle \chi|\alpha^i\rangle \langle \alpha^i|\psi\rangle \rightarrow \langle \chi|\psi\rangle = \int d\xi \langle \chi|\xi\rangle \langle \xi|\psi\rangle$$

$$\langle \alpha^j|\hat{A}|\alpha^i\rangle = \alpha_i \delta_{ij} \rightarrow \langle \xi'|\hat{A}|\xi\rangle = \xi \delta(\xi' - \xi)$$

Ας κάνουμε τώρα μια παρένθεση, για να σημειώσουμε ορισμένες βασικές ιδιότητες και αναπαραστάσεις της δ-συνάρτησης του Dirac. Γενικά, η ισοδυναμία δύο κατανομών, όπως είναι η δ-συνάρτηση, αποδεικνύεται από το γεγονός ότι δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα στο ολοκλήρωμα που τις ορίζει. Έτσι, ορίζοντας τη δ-συνάρτηση από τη σχέση:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-y) dx = f(y), \quad (2.57)$$

η πρώτη ιδιότητα

$$i) \quad \delta(x) = \delta(-x) \quad (2.58)$$

έπεται από το ότι $\int f(x) \delta(x) dx = \int f(x) \delta(-x) dx$, γιατί και τα δύο δίνουν $f(0)$.

Η βασική αναπαράσταση της δ-συνάρτησης είναι

$$ii) \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (2.59)$$

Η αναπαράσταση αυτή είναι συνέπεια των σχέσεων των μετασχηματισμών Fourier:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx'} dx' \right] e^{ikx} dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk \right] dx' = \int f(x') \delta(x-x') dx' \end{aligned}$$



Βέβαια, τυπικά το ολοκλήρωμα (2.59) δεν υπάρχει. Μπορούμε όμως να εισάγουμε ένα παράγοντα $e^{-\varepsilon|k|}$ για να κάνουμε το ολοκλήρωμα να συγκλίνει ($\varepsilon > 0$). Γράφοντας

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(ikx - \varepsilon|k|)} dk$$

βρίσκουμε

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{ix + \varepsilon} - \frac{1}{ix - \varepsilon} \right] = \frac{\varepsilon/\pi}{x^2 + \varepsilon^2},$$

απ' όπου βρίσκουμε

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x) dx = 1$$

Συνεπώς, μια αναπαράσταση της δ-συνάρτησης είναι και η

$$\text{iii) } \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int e^{(ikx - \varepsilon|k|)} dk = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon/\pi}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (2.60)$$

Οι παρακάτω σχέσεις αποτελούν μερικές από τις ιδιότητες ή αναπαραστάσεις της δ-συνάρτησης και μπορεί να δειχτούν παρόμοια:

$$\text{iv) } x \delta(x) = 0 \quad (2.61)$$

$$\text{v) } \delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x), \quad \alpha \neq 0 \quad (2.62)$$

$$\text{vi) } \delta[g(x)] = \sum_i \frac{1}{\left| \frac{dg}{dx}(x=x_i) \right|} \delta(x-x_i) \quad (2.63)$$

όπου x_i οι ρίζες της $g(x) = 0$

$$\text{vii) } \delta(x) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\lambda}^{+\lambda} e^{ikx} dk = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi x} \sin \lambda x \quad (2.64)$$

$$\text{viii) } \delta(x) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda \pi x^2} (1 - \cos \lambda x) \quad (2.65)$$

$$\text{ix) } \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx = -f'(0) \quad (2.66)$$

όπου



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

η παράγωγος της δ - συνάρτησης.

$$x) \quad x \delta'(x) = -\delta(x) \quad (2.67)$$

$$xi) \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\theta(x+\varepsilon) - \theta(x)}{\varepsilon} \quad (\varepsilon > 0) \quad (2.68)$$

όπου

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

είναι η θ -συνάρτηση βήματος

$$xii) \quad \int_{x_1}^{x_2} \delta(x-\alpha) dx = \theta(x_2 - \alpha) - \theta(x_1 - \alpha) \quad (2.69)$$

2.4. Κυματοσυναρτήσεις και τελεστές: αναπαραστάσεις θέσης και ορμής

Ας επανέλθουμε τώρα στη φυσική των συνεχών φασμάτων. Θεωρούμε πρώτα τον τελεστή της θέσης: σε μια διάσταση θα έχουμε

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle \quad (2.70)$$

όπου $|x\rangle$ είναι τα ιδιοδιανύσματα \hat{x} του τελεστή \hat{x} της θέσης. Δεχόμαστε ότι τα ιδιοδιανύσματα $|x\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες σύνολο. Τα ιδιοδιανύσματα θέσης $|x\rangle$ ικανοποιούν τη σχέση ορθοκανονικότητας

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) \quad (2.71)$$

Ένα οποιοδήποτε καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ αναπτύσσεται, σύμφωνα και με την αρχή της επαλληλίας, συναρτήσει των ιδιοδιανυσμάτων $|x\rangle$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x | \psi \rangle \quad (2.72)$$

Έτσι, τώρα, η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί ένα σωματίο στη θέση x , όταν περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$, είναι



$$P = |\langle x | \psi \rangle|^2 \quad (2.73)$$

Η πιθανότητα να ανιχνευτεί το σωματίο κάπου μεταξύ $-\infty$ και $+\infty$ είναι

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\langle x | \psi \rangle|^2 \quad (2.74)$$

και είναι μονάδα, όταν το $|\psi\rangle$ είναι κανονικοποιημένο:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\langle x | \psi \rangle|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.75)$$

Στο συμβολισμό του Dirac, η έκφραση (2.73) υποδεικνύει ότι το εσωτερικό γινόμενο $\langle x | \psi \rangle$, ανάμεσα σ' ένα καταστατικό διάνυσμα $\text{ket } |\psi\rangle$ και το διάνυσμα bra $\langle x |$ για τη θέση, είναι αυτό που ονομάσαμε στο πρώτο κεφάλαιο κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων

$$\langle x | \psi \rangle \equiv \psi(x) \quad (2.76)$$

Η σχέση (2.76) αποτελεί τη βάση για την σύνδεση ανάμεσα στο συμβολισμό του Dirac και τη συνηθισμένη, πιο παραδοσιακή, γλώσσα της κυματομηχανικής. Γενικότερα, το εσωτερικό γινόμενο $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$, που παριστάνει το πλάτος πιθανότητας για τη μετάβαση από την κατάσταση $|\psi_1\rangle$ στην κατάσταση $|\psi_2\rangle$, γράφεται

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \psi_2 | x \rangle \langle x | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*(x) \psi_1(x) \quad (2.77)$$

Συνεπώς, το $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$ ταυτίζεται με το γνωστό μας ολοκλήρωμα επικάλυψης ανάμεσα στις δύο κυματοσυναρτήσεις ψ_1 και ψ_2 . Τέλος, το εσωτερικό γινόμενο $\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle$ μπορεί να γραφεί συναρτήσει των κυματοσυναρτήσεων ψ_1 και ψ_2 σαν

$$\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \int dx \int dx' \langle \psi_2 | x' \rangle \langle x' | \hat{A} | x \rangle \langle x | \psi_1 \rangle \quad (2.78)$$

ή

$$\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \int dx \int dx' \psi_2^*(x') \langle x' | \hat{A} | x \rangle \psi_1(x) \quad (2.79)$$

Εάν ο τελεστής \hat{A} είναι συνάρτηση μόνο του τελεστή θέσης \hat{x} , η έκφραση (2.79) απλοποιείται κατά πολύ:

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | f(\hat{x}) | \psi_1 \rangle &= \int dx \int dx' \langle \psi_2 | x' \rangle \langle x' | f(\hat{x}) | x \rangle \langle x | \psi_1 \rangle \\ &= \int dx \int dx' \langle \psi_2 | x' \rangle f(x) \langle x' | x \rangle \langle x | \psi_1 \rangle \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \int dx \int dx' \langle \psi_2 | x' \rangle f(x) \delta(x' - x) \langle x | \psi_1 \rangle \\
&= \int dx \langle \psi_2 | x \rangle f(x) \langle x | \psi_1 \rangle \\
&= \int dx \psi_2^*(x) f(x) \psi_1(x)
\end{aligned} \tag{2.80}$$

Ας θεωρήσουμε στη συνέχεια την περίπτωση των ιδιοκαταστάσεων της ορμής. Αν \hat{p} είναι ο τελεστής της ορμής και $|p\rangle$ το ιδιοδιάνυσμα κει, που αντιστοιχεί σε ορμή p , θα έχουμε τις σχέσεις

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \tag{2.81}$$

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p) \tag{2.82}$$

$$|\phi\rangle = \int dp |p\rangle \langle p | \phi \rangle \tag{2.83}$$

$$\begin{aligned}
\int dp |\langle p | \phi \rangle|^2 &= \int dp \langle \phi | p \rangle \langle p | \phi \rangle = \\
&= \langle \phi | \phi \rangle = 1
\end{aligned} \tag{2.84}$$

όπου έχουμε δεχτεί ότι τα ιδιοδιανύσματα $|p\rangle$, όπως και τα $|x\rangle$, αποτελούν ένα πλήρες σύνολο. Είναι φανερό εδώ ότι, αυτό που ονομάσαμε στο πρώτο κεφάλαιο κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών, γράφεται τώρα

$$\langle p | \phi \rangle \equiv \phi(p) \tag{2.85}$$

Η εξίσωση (2.85) είναι το αντίστοιχο της (2.76) στο χώρο των ορμών για τη σχέση ανάμεσα στο συμβολισμό του Dirac και εκείνον της κβαντομηχανικής.

Ας δούμε τώρα τη σύνδεση ανάμεσα στην αναπαράσταση μας κατάστασης στο χώρο των θέσεων - αναπαράσταση θέσης- και σ' εκείνη στο χώρο των ορμών - αναπαράσταση ορμής. Χρησιμοποιώντας τη σχέση πληρότητας, μπορούμε να γράψουμε

$$\langle x | \psi \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle \tag{2.86}$$

$$\langle p | \psi \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle \tag{2.87}$$

Ο αναγνώστης σημειώνει αμέσως ότι αυτές οι σχέσεις δεν είναι άλλες από τις σχέσεις των μετασχηματισμών Fourier. Ουσιαστικά, οι μετασχηματισμοί Fourier δεν αποτελούν παρά ειδική περίπτωση εφαρμογής της σχέσης πληρότητας. Από τη σύγκριση είναι φανερό ότι μπορούμε να γράψουμε

$$\langle x | p \rangle = N e^{ipx/\hbar} \tag{2.88}$$



Η σταθερά κανονικοποίησης N μπορεί να προσδιοριστεί από αυτό που ονομάζουμε κανονικοποίηση δ-συνάρτησης (θα επανέλθουμε σ' αυτό το σημείο στην §3.1). Ας θεωρήσουμε τη σχέση

$$\langle p' | p \rangle = \int dx \langle p' | x \rangle \langle x | p \rangle \quad (2.89)$$

Τότε, λαμβάνοντας υπ' όψη την (2.88) και την (2.59), έχουμε

$$\delta(p-p') = |N|^2 \int dx e^{ix(p-p')/\hbar} = 2\pi \hbar |N|^2 \delta(p-p') \quad (2.90)$$

Διαλέγοντας το N να είναι πραγματικό και θετικό, έχουμε $N = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ και τελικά

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ixp/\hbar} \quad (2.91)$$

Η $\langle x | p \rangle$ μπορεί να θεωρηθεί σαν η ιδιοκατάσταση της ορμής $|p\rangle$ στην αναπαράσταση θέσης ή απλούστερα, η ιδιοσυνάρτηση ορμής. Έτσι, οι σχέσεις (2.86)-(2.87) γράφονται στην παραδοσιακή γραφή σαν

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dp e^{ixp/\hbar} \psi(p) \quad (2.92)$$

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dx e^{-ixp/\hbar} \psi(x), \quad (2.93)$$

που αποτελούν την γνωστή μας έκφραση για τη σχέση των κυματοσυναρτήσεων στο χώρο των θέσεων και στο χώρο των ορμών.

Σαν εφαρμογή του καινούργιου συμβολισμού, ας εξετάσουμε πρώτα τη μορφή που παίρνει ο τελεστής της ορμής \hat{p} στην αναπαράσταση θέσης. Αυτό φαίνεται εύκολα, αν ξεκινήσει κανείς γράφοντας

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{p} | p \rangle &= p \langle x | p \rangle = pN e^{ixp/\hbar} = \\ &= (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) (N e^{ixp/\hbar}) = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle \end{aligned} \quad (2.94)$$

Συνεπώς, ο τελεστής \hat{p} στην αναπαράσταση θέσης είναι $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ και θα τον συμβολίζουμε με

$$\langle x | \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \quad (2.95)$$

Γενικότερα, θα έχουμε

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \psi \rangle \quad (2.96)$$



Έτσι, παραδείγματος χάρι,

$$\langle x' | \hat{p} | x \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x-x') \quad (2.97)$$

Τέλος, θα ισχύει η ταυτότητα

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_1 \rangle &= \int dx \langle \psi_2 | x \rangle \langle x | \hat{p} | \psi_1 \rangle = \\ &= \int dx \psi_2^*(x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi_1(x) \end{aligned} \quad (2.98)$$

Με επανειλημμένη χρήση του \hat{p} βρίσκουμε ότι

$$\langle \psi_2 | \hat{p}^n | \psi_1 \rangle = \int dx \psi_2^*(x) (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi_1(x) \quad (2.99)$$

Ακολουθώντας τα ίδια βήματα, όπως και στις παραπάνω σχέσεις (2.94) - (2.99), βρίσκουμε ότι για τον τελεστή \hat{x} της θέσης στην αναπαράσταση ορμής θα ισχύει

$$\langle p | \hat{x} | x \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p | x \rangle \quad (2.100)$$

$$\langle p | \hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p | \quad (2.101)$$

$$\langle \psi_2 | \hat{x} | \psi_1 \rangle = \int dp \psi_2^*(p) (i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \psi_1(p) \quad (2.102)$$

$$\langle \psi_2 | \hat{x}^n | \psi_1 \rangle = \int dp \psi_2^*(p) (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \psi_1(p) \quad (2.103)$$

Οι παραπάνω σχέσεις βγίνουν σε μια διάσταση για λόγους απλότητας. Δεν είναι δύσκολο να τις γενικεύσει κανείς στις τρεις διαστάσεις.

Θα έχουμε:

$$\hat{r} | r \rangle = r | r \rangle, \hat{p} | p \rangle = p | p \rangle \quad (2.104)$$

ενώ για τις σχέσεις ορθοκανονικότητας θα ισχύει

$$\langle r' | r \rangle = \delta(r-r'), \langle p' | p \rangle = \delta(p-p') \quad (2.105)$$

όπου $\delta(r-r')$ η τριδιάστατη δ-συνάρτηση

$$\begin{aligned} \delta(r-r') &= \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z') \text{ (καρτεσιανές συντεταγμένες)} \\ &= \frac{1}{r^2} \delta(r-r') \delta(\cos\theta-\cos\theta') \delta(\phi-\phi') \text{ (σφαιρικές συντεταγμένες)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{ik \cdot (r-r')} dk \end{aligned} \quad (2.106)$$

με



$$\int f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = f(\mathbf{r}) \quad (2.107)$$

Μια ενδιαφέρουσα ιδιότητα της τριδιάστατης δ-συνάρτησης είναι η

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (2.108)$$

Οι σχέσεις πληρότητας θα γράφονται

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1, \quad \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = 1 \quad (2.109)$$

και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να αναπτύξουμε ένα καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ σαν

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \psi\rangle \\ &= \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| \psi\rangle \end{aligned} \quad (2.110)$$

Οι συντελεστές $\langle\mathbf{r}| \psi\rangle$ και $\langle\mathbf{p}| \psi\rangle$ στο παραπάνω ανάπτυγμα είναι οι γνωστές κυματοσυναρτήσεις $\psi(\mathbf{r})$ και $\psi(\mathbf{p})$ στο χώρο των θέσεων και των ορμών, αντίστοιχα. Οι τελεστές ορμής και θέσης ανάμεσα στα διανύσματα $|\psi_1\rangle$ και $\langle\psi_2|$ δίνουν

$$\langle\psi_2| \hat{\mathbf{p}} |\psi_1\rangle = \int d\mathbf{r} \psi_2^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla) \psi_1(\mathbf{r}) \quad (2.111)$$

$$\langle\psi_2| \hat{\mathbf{r}} |\psi_1\rangle = \int d\mathbf{p} \psi_2^*(\mathbf{p}) (+i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}) \psi_1(\mathbf{p}) \quad (2.112)$$

Τέλος, η ιδιοσυνάρτηση ορμής είναι

$$\langle\mathbf{r} | \mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (2.113)$$

και, άρα, οι κυματοσυναρτήσεις στην αναπαράσταση θέσης και ορμής γράφονται

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{p}) \quad (2.114)$$

$$\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.115)$$

Βλέπουμε, λοιπόν, ότι ξαναβρίσκουμε τις εκφράσεις για τους τελεστές των διαφόρων παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών στις αναπαραστάσεις θέσης και ορμής, που είχαμε ήδη μελετήσει στο πρώτο κεφάλαιο (βλ. πίνακες 1.1. και 1.2).

Είναι σκόπιμο εδώ ν' ανακεφαλαιώσουμε τις σημασίες που μπορεί να πάρει το σύμβολο $\langle | \rangle$ στο φορμαλισμό του Dirac.



i) Μπορεί να εκφράσει το πλάτος πιθανότητας για τη μετάβαση από μια κατάσταση $| \psi \rangle$ σε μια κατάσταση $| \chi \rangle$, έτσι ώστε το $| \langle \chi | \psi \rangle |^2$ να είναι η αντίστοιχη πιθανότητα μετάβασης.

ii) Μπορεί, επίσης, να εκφράσει την αναπαράσταση μιας κατάστασης. Παραδείγματος χάρη, το $\langle \chi | \psi \rangle = \psi(x)$ εκφράζει την αναπαράσταση θέσης για την κατάσταση $| \psi \rangle$ (κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων) και το $\langle p | \psi \rangle = \psi(p)$ εκφράζει την αναπαράσταση ορμής για την κατάσταση $| \psi \rangle$ (κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών).

Συμβολισμός Dirac

Κυματομηχανική

$\langle \chi | \psi \rangle$

$\psi(x)$: κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων

$\langle p | \psi \rangle$

$\psi(p)$: κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών

Πίνακας 2.1. Αντιστοιχία ανάμεσα στο συμβολισμό Dirac και την κυματομηχανική

2.5. Λύση ενός προβλήματος: εκλογή μιας οποιασδήποτε αναπαράστασης

Ας χρησιμοποιήσουμε αυτά που είδαμε μέχρι τώρα, δείχνοντας ότι η λύση ενός συγκεκριμένου προβλήματος ιδιοτιμών μπορεί να γίνει σε οποιαδήποτε αναπαράσταση θέλουμε (συνήθως διαλέγουμε την πιο βολική). Για απλότητα, θα θεωρήσουμε το μονοδιάστατο μοντέλο ενός σωματιδίου που κινείται σε μια κλειστή τροχιά μήκους L . Η κυματοσυνάρτηση ορμής στην αναπαράσταση θέσης (ιδιοσυνάρτηση ορμής) είναι

$$\langle x | p \rangle = N e^{ipx/\hbar} \quad (2.116)$$

και πρέπει ικανοποιεί τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_0^L |\langle x | p \rangle|^2 dx = 1 \quad (2.117)$$

Από αυτήν προκύπτει ότι η σταθερά κανονικοποίησης είναι $N = 1/\sqrt{L}$ και τελικά έχουμε

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \quad (2.118)$$



Έχουμε εδώ αυτό που ονομάζουμε κανονικοποίηση "κουτιού" (λόγω της κλειστής τροχιάς), και αφορά σε διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών (θα επανέλθουμε και σ' αυτό το είδος κανονικοποίησης στην §3.1). Πράγματι, λόγω των κβαντισμένων τιμών της ορμής (βλ. σχέση (1.6))

$$p = \hbar k = n \frac{h}{L}, \quad (2.119)$$

το καταστατικό διάνυσμα $|p\rangle$ μπορεί να χαρακτηριστεί και από τον δείκτη (κβαντικό αριθμό) n :

$$|p\rangle = |n\rangle \quad (2.120)$$

Το φάσμα των ιδιοτιμών της ορμής είναι διάκριτο. Μια οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi\rangle$ μπορεί να γραφεί:

$$|\psi\rangle = \sum_p |p\rangle \langle p|\psi\rangle \quad (2.121)$$

και η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων είναι

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle = \sum_p \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \sum_p \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \langle p|\psi\rangle = \sum_p \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \psi(p) \quad (2.122)$$

Οι σχέσεις ορθοκανονικότητας γράφονται εδώ

$$\langle p' | p \rangle = \langle n' | n \rangle = \delta_{nn'} \quad (2.123)$$

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) \quad (2.124)$$

Σημειωτέον ότι η μορφή της ιδιοσυνάρτησης ορμής $\langle x | p \rangle$ μπορεί να συναχθεί και διαφορετικά. Στην αναπαράσταση θέσης θα έχουμε

$$\langle x | \hat{p} | p \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x | p \rangle = p \langle x | p \rangle \quad (2.125)$$

Η ισότητα ανάμεσα στο δεύτερο και το τρίτο μέλος στην παραπάνω σχέση οδηγεί σε μια απλή διαφορική εξίσωση για το $\langle x|p\rangle$, από την οποία βρίσκουμε αμέσως

$$\langle x|p\rangle = N e^{ipx/\hbar} \quad (2.126)$$

Από τη συνθήκη κανονικοποίησης προκύπτει τώρα $N = 1/\sqrt{L}$.

Ας θεωρήσουμε τώρα το πρόβλημα ιδιοτιμών για την ενέργεια. Ο χαμιλτονιανός τελεστής \hat{H} είναι εδώ (δεν υπάρχει δυναμικό)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (2.127)$$

και το πρόβλημα ιδιοτιμών συνοψίζεται στη σχέση



$$\hat{H} |E\rangle = E|E\rangle \quad (2.128)$$

όπου E οι ιδιοτιμές της ενέργειας και $|E\rangle$ οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις. Η εξίσωση (2.128) μπορεί να λυθεί είτε στην αναπαράσταση θέσης είτε στην αναπαράσταση ορμής.

α) Λύση στην αναπαράσταση θέσης :

Έχουμε εδώ τις ιδιοσυναρτήσεις $\langle x|E\rangle$, που θα είναι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \langle x|E\rangle = E \langle x|E\rangle \quad (2.129)$$

Η λύση της μας δίνει εύκολα

$$\langle x|E\rangle = A \exp(ix\sqrt{2mE}/\hbar) + B \exp(-ix\sqrt{2mE}/\hbar) \quad (2.130)$$

όπου A και B σταθερές. Επειδή η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι μονοσήμαντη συνάρτηση (ισοδύναμα, περιοδική), θα έχουμε

$$L\sqrt{2mE}/\hbar = 2\pi n \quad (2.131)$$

απ' όπου προκύπτει η έκφραση για τις ενεργειακές στάθμες

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.132)$$

β) Λύση στην αναπαράσταση ορμής:

Εδώ θα έχουμε απλά

$$\frac{p^2}{2m} \langle p|E\rangle = E \langle p|E\rangle \quad (2.133)$$

Προφανώς, λύσεις $\langle p|E\rangle$ υπάρχουν και είναι μη μηδενικές μόνο εφ' όσον $p = \pm \sqrt{2mE} \equiv \pm p_0$ για δοσμένη ενέργεια E .

Η σχέση ανάμεσα στις δύο λύσεις προκύπτει σαν εφαρμογή της σχέσης πληρότητας:

$$\langle x|E\rangle = \sum_p \langle x|p\rangle \langle p|E\rangle = \langle x|p_0\rangle \langle p_0|E\rangle + \langle x|-p_0\rangle \langle -p_0|E\rangle \quad (2.134)$$

Η σχέση αυτή είναι η ίδια με τη λύση (2.130). Η συνθήκη κανονικοποίησης $\langle E|E\rangle = 1$ δίνει εύκολα:

$$|A|^2 + |B|^2 = 1/L$$

και, συνεπώς, έχουμε



$$A\sqrt{L} = \langle p_0 | E \rangle, \quad B\sqrt{L} = \langle -p_0 | E \rangle$$

2.6. Συμβιβαστά και ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη- Γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας

Μετά την εφαρμογή του γενικού φορμαλισμού στο απλό παράδειγμα της προηγούμενης παραγράφου, ας επανέλθουμε στη συζήτηση των γενικών εννοιών. Έχουμε ήδη την εμπειρία των φυσικών μεγεθών θέσης και ορμής, για τα οποία η μέτρηση του ενός επηρεάζει τη μέτρηση του άλλου και ο μεταθέτης των αντίστοιχων τελεστών είναι μη μηδενικός. Γενικά, δύο παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη, που παριστάνονται από τους τελεστές \hat{A} και \hat{B} , θα λέγονται συμβιβαστά όταν οι τελεστές αυτοί μετατίθενται

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (2.135)$$

Αντίθετα, θα λέγονται ασυμβίβαστα, όταν ο μεταθέτης των αντίστοιχων τελεστών είναι μη μηδενικός

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \quad (2.136)$$

Έτσι, παραδείγματος χάρη, οι τελεστές \hat{x} και \hat{p} αντιστοιχούν σε συμβιβαστά φυσικά μεγέθη και η μέτρηση του ενός δεν επηρεάζει τη μέτρηση του άλλου, ενώ οι \hat{x} και \hat{p}_x αντιστοιχούν σε ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη και οι μετρήσεις τους αλληλοεπηρεάζονται.

Δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι, αν δύο φυσικά μεγέθη είναι συμβιβαστά, τότε θα έχουν κοινές ιδιοκαταστάσεις, δηλαδή θα ισχύει σε προφανή συμβολισμό

$$\begin{aligned} \hat{A} | \alpha^i, \beta^j \rangle &= \alpha^i | \alpha^i, \beta^j \rangle \\ \hat{B} | \alpha^i, \beta^j \rangle &= \beta^j | \alpha^i, \beta^j \rangle \end{aligned} \quad (2.137)$$

Οι σχέσεις (2.137) συνεπάγονται πράγματι

$$[\hat{A}, \hat{B}] | \alpha^i, \beta^j \rangle = 0 \quad (2.137\alpha)$$

και, άρα, ο αντίστοιχος μεταθέτης είναι μηδενικός. Ο συμβολισμός των κοινών ιδιοκαταστάσεων με $| \alpha^i, \beta^j \rangle$ είναι ιδιαίτερα κατάλληλος στην περίπτωση που η μέτρηση του φυσικού μεγέθους A δώσει ένα εκφυλισμένο αποτέλεσμα. Τότε, στην πράξη, συνήθως υπάρχει ένα συμβιβαστό με αυτό φυσικό μέγεθος B, του οποίου οι ιδιοτιμές μπορεί να χρησιμοποιηθούν για να άρουν τον εκφυλισμό και να ονοματίσουν τις ιδιοκαταστάσεις $| \alpha^i, \beta^j \rangle$.

Γενικεύοντας, μπορούμε να ορίσουμε ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών σαν το σύνολο που περιλαμβάνει τον μέγιστο αριθμό



παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών, που είναι ανά δύο συμβιβαστά, και για τα οποία θα ισχύει συνεπώς

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = \dots = 0 \quad (2.138)$$

Οι ιδιοκαταστάσεις μπορούν να συμβολιστούν σαν

$$| \alpha^i \beta^j c^k \dots \rangle \quad (2.139)$$

ενώ οι σχέσεις ορθοκανονικότητας και πληρότητας μπορούν να γραφούν

$$\langle \alpha^i \beta^j c^k \dots | \alpha^i \beta^j c^k \dots \rangle = \delta_{ii} \cdot \delta_{jj} \cdot \delta_{kk} \quad (2.140)$$

$$\sum_i \sum_j \sum_k | \alpha^i \beta^j c^k \dots \rangle \langle \alpha^i \beta^j c^k \dots | = I \quad (2.141)$$

Είναι χρήσιμο να θεωρήσουμε τη διαδικασία μέτρησης δύο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών A και B. Αρχικά το σύστημα βρίσκεται σε μια κατάσταση $|\psi\rangle$. Η μέτρηση του A θα δώσει μια ιδιοτιμή α^i . Μια εν συνεχεία μέτρηση του B θα δώσει την ιδιοτιμή β^j . Σε μια καινούργια τώρα μέτρηση του A, θα βρούμε ξανά την ιδιοτιμή α^i , πράγμα που σημαίνει ότι η μέτρηση του B δεν κατέστρεψε την προηγούμενη πληροφορία, που είχαμε αποκτήσει από τη μέτρηση του A. Διαγραμματικά, θα γράφαμε

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση A}} |\alpha^i \dots\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση B}} |\alpha^i \beta^j\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση A}} |\alpha^i \beta^j\rangle$$

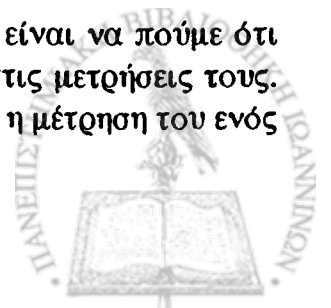
Αν η πρώτη μέτρηση του A δώσει ένα εκφυλισμένο αποτέλεσμα, τότε, αμέσως μετά, το σύστημά μας θα περιγράφεται από μια επαλληλία καταστάσεων, που μπορεί να γραφεί σαν $\sum_{j=1}^n C_{\beta^j} | \alpha^i \beta^j \rangle$, όπου n ο βαθμός εκφυλισμού. Η εν συνεχεία μέτρηση

του B θα επιλέξει έναν από τους όρους της παραπάνω επαλληλίας, ας πούμε τον $|\alpha^i \beta^j\rangle$. Καινούργια μέτρηση του A θα δώσει πάλι την ιδιοτιμή α^i . Διαγραμματικά, θα γράφαμε

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση A}} \sum_{j=1}^n C_{\beta^j} | \alpha^i \beta^j \rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση B}} |\alpha^i \beta^j\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση A}} |\alpha^i \beta^j\rangle$$

Με άλλα λόγια, σε κάθε περίπτωση, μπορούμε να πούμε ότι η μέτρηση του A και η μέτρηση B δεν επηρεάζουν η μία την άλλη, απ' όπου βέβαια και η ονομασία συμβιβαστά φυσικά μεγέθη.

Ένας άλλος τρόπος για να εκφράσουμε τα παραπάνω είναι να πούμε ότι για δύο συμβιβαστά φυσικά μεγέθη δεν υπάρχει αβεβαιότητα στις μετρήσεις τους. Αντίθετα, για δύο ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη περιμένουμε ότι η μέτρηση του ενός



θα επηρεάσει την μέτρηση του άλλου και, συνεπώς, θα υπάρχει αβεβαιότητα στις μετρήσεις τους. Για την περίπτωση αυτή, μπορούμε να βρούμε τη σχέση, που θα συνδέει τις αβεβαιότητες για τα δύο αυτά φυσικά μεγέθη με τον αντίστοιχο μεταθέτη, σχέση που θα αποτελεί και τη γενικότερη μορφή των σχέσεων αβεβαιότητας (ή απροσδιοριστίας) του Heisenberg (μια πρώτη γνωριμία είχαμε κάνει με τη σχέση (1.142)).

Ορίζουμε αρχικά τον τελεστή

$$\hat{\Delta}A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad (2.142)$$

όπου η αναμενόμενη (ή μέση) τιμή για τον τελεστή \hat{A} λαμβάνεται ως προς την (κανονικοποιημένη) κατάσταση του συστήματός μας. Η αβεβαιότητα ΔA για το φυσικό μέγεθος A ορίζεται από την αναμενόμενη τιμή του $(\hat{\Delta}A)^2$:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle (\hat{\Delta}A)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \end{aligned} \quad (2.143)$$

(βλ. και σχέση (1.135)). Φυσικά, η αβεβαιότητα είναι μηδέν, όταν η κατάσταση ως προς την οποία παίρνουμε τις αναμενόμενες τιμές είναι ιδιοκατάσταση του \hat{A} . Η γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας του Heisenberg για δύο ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη A και B θα δούμε τώρα ότι είναι

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |^2 \quad (2.144)$$

Για να αποδείξουμε την παραπάνω σχέση, ας ορίσουμε τις καταστάσεις

$$\begin{aligned} | \alpha \rangle &= \hat{\Delta}A | \psi \rangle \\ | \beta \rangle &= \hat{\Delta}B | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.145)$$

όπου $|\psi\rangle$ μπορεί να είναι οποιαδήποτε κατάσταση και, ειδικότερα, η κατάσταση του συστήματός μας, ως προς την οποία παίρνουμε τις αναμενόμενες τιμές. Για τις καταστάσεις $|\alpha\rangle$ και $|\beta\rangle$, εφαρμόζουμε την ανισότητα του Schwarz

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq | \langle \alpha | \beta \rangle |^2 \quad (2.146)$$

Η σχέση αυτή συνάγεται εύκολα, αν γράψουμε τη γνωστή ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου

$$\langle \alpha | \lambda + \lambda^* \langle \beta | \rangle (| \alpha \rangle + \lambda | \beta \rangle) \geq 0 \quad (2.147)$$

όπου λ τυχαίος μιγαδικός αριθμός, και διαλέξουμε να είναι $\lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle}$. Τότε η (2.147) συνεπάγεται την (2.146). Έτσι, η (2.146) μας δίνει για τις καταστάσεις (2.145)

$$\langle (\hat{\Delta}A)^2 \rangle \langle (\hat{\Delta}B)^2 \rangle \geq | \langle \hat{\Delta}A \cdot \hat{\Delta}B \rangle |^2 \quad (2.148)$$



Για να υπολογίσουμε το δεξιό μέλος της παραπάνω σχέσης, γράφουμε την ταυτότητα

$$\hat{A} \cdot \hat{B} = \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} \{ \hat{A}, \hat{B} \} \quad (2.149)$$

όπου $\{ \hat{A}, \hat{B} \}$ είναι ο αντιμεταθέτης των δύο τελεστών

$$\{ \hat{A}, \hat{B} \} = \hat{A} \cdot \hat{B} + \hat{B} \cdot \hat{A} \quad (2.150)$$

Επαληθεύουμε αμέσως ότι ο αντιμεταθέτης είναι ένας ερμιτιανός τελεστής

$$(\{ \hat{A}, \hat{B} \})^+ = \{ \hat{A}, \hat{B} \} \quad (2.151)$$

ενώ ο μεταθέτης είναι ένας αντιερμιτιανός τελεστής

$$([\hat{A}, \hat{B}])^+ = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.152)$$

Από τη σχέση (2.19) προκύπτει τώρα ότι η αναμενόμενη τιμή ενός ερμιτιανού τελεστή είναι καθαρά πραγματική και η αναμενόμενη τιμή ενός αντιερμιτιανού τελεστή είναι καθαρά φανταστική. Συνεπώς, θα έχουμε

$$\langle \hat{A} \cdot \hat{B} \rangle = \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle + \frac{1}{2} \langle \{ \hat{A}, \hat{B} \} \rangle \quad (2.153)$$

φανταστική
πραγματική

Συνδυάζοντας την (2.148) και την (2.153) προκύπτει αμέσως η σχέση αβεβαιότητας (2.144).

Έχουμε ήδη δει τις σχέσεις μετάθεσης για τους τελεστές θέσης και ορμής

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0, [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.154)$$

Οι σχέσεις αυτές αποτελούν τις θεμελιώδεις σχέσεις μετάθεσης της κβαντικής μηχανικής και συχνά ονομάζονται κανονικές σχέσεις μετάθεσης. Η γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας για τη θέση και την ορμή είναι, συνεπώς,

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.155)$$

Αξίζει εδώ να σημειώσουμε ότι οι σχέσεις μετάθεσης της κβαντικής μηχανικής προκύπτουν από τις αντίστοιχες εκφράσεις της κλασικής μηχανικής, αντιστοιχώντας στις αγκύλες Poisson τον κβαντομηχανικό μεταθέτη, σύμφωνα με την αντιστοιχία

$$\frac{1}{i\hbar} (\text{Κβαντομηχανικός μεταθέτης}) \rightarrow (\text{Κλασική αγκύλη Poisson}) \quad (2.156)$$

Υπενθυμίζουμε ότι η κλασική αγκύλη Poisson για δύο συναρτήσεις $A(q,p)$ και $B(q,p)$ των συντεταγμένων q και p θέσης και ορμής, αντίστοιχα, ορίζεται σαν



$$[A(q,p), B(q,p)]_{\text{κλασ.}} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \quad (2.157)$$

Παραδείγματος χάρη, για τη θέση και την ορμή ισχύει

$$[x_i, p_j]_{\text{κλασ.}} = \delta_{ij}, \quad (2.158)$$

και ο κβαντομηχανικός μεταθέτης (2.154) συνδέεται πράγματι με την (2.158) μέσω της αντιστοιχίας (2.156). Η κλασική αγκύλη Poisson είναι βέβαια καθαρά πραγματική, ενώ ο κβαντομηχανικός μεταθέτης είναι ένας αντιερμιτιανός τελεστής και η αναμενόμενη τιμή του είναι καθαρά φανταστική. Αυτό καθορίζει και την παρουσία του συντελεστή $1/i\hbar$ στην αντιστοιχία (2.156).

Οι συνιστώσες του τελεστή της στροφορμής

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \quad (2.159)$$

είναι

$$\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x \quad (2.160)$$

Ισοδύναμα, μπορεί να γραφούν (επαναλαμβανόμενοι δείκτες αθροίζονται)

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \quad (i = 1, 2, 3 \text{ για } x, y, z) \quad (2.161)$$

όπου ο μοναδιαίος αντισυμμετρικός τανυστής τριών δεικτών ϵ_{ijk} ορίζεται σαν

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 \text{ για } ijk \text{ άρτια μετάθεση των } 1, 2, 3 \\ -1 \text{ για } ijk \text{ περιττή μετάθεση των } 1, 2, 3 \\ 0 \text{ για δύο δείκτες ίσους} \end{cases} \quad (2.162)$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες για τους μεταθέτες από το πρόβλημα 2.4, είναι ζήτημα άλγεβρας να δειχτούν οι σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (2.163)$$

και

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad (2.164)$$

όπου $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ ο τελεστής του τετραγώνου της στροφορμής. Οι σχέσεις μετάθεσης (2.163) - (2.164) δείχνουν ότι μπορεί κανείς να διαλέξει έναν από τους τελεστές \hat{L}_i και τον \hat{L}^2 σαν συμβιβαστά φυσικά μεγέθη, που θα έχουν συνεπώς κοινές ιδιοκαταστάσεις. Όπως θα δούμε αργότερα στο κεφάλαιο της στροφορμής, σαν τέτοια παίρνουμε τα φυσικά μεγέθη \hat{L}^2 και \hat{L}_z .



2.7. Αναπαράσταση με πίνακες

Ας θυμηθούμε το ανάπτυγμα ενός καταστατικού διανύσματος $|\psi\rangle$ συναρτήσει ενός πλήρους συνόλου διανυσμάτων βάσης $|\alpha^i\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i | \psi \rangle \quad (2.165)$$

Είναι φανερό ότι μπορούμε να παραστήσουμε το διάνυσμα $\text{ket } |\psi\rangle$ μ' έναν πίνακα μιας στήλης με N στοιχεία, όπου N η διάσταση του διανυσματικού χώρου:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle \alpha^1 | \psi \rangle \\ \langle \alpha^2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.166)$$

Αντίστοιχα, ένα διάνυσμα $\text{bra } \langle \chi |$ θα παριστάνεται μ' έναν πίνακα μιας γραμμής, με N στοιχεία:

$$\begin{aligned} \langle \chi | &= (\langle \chi | \alpha^1 \rangle, \langle \chi | \alpha^2 \rangle, \dots) \\ &= (\langle \alpha^1 | \chi \rangle^*, \langle \alpha^2 | \chi \rangle^*, \dots) \equiv (\chi_1^*, \chi_2^*, \dots) \end{aligned} \quad (2.167)$$

Έτσι, το εσωτερικό γινόμενο $\langle \chi | \psi \rangle$ μπορεί να παρασταθεί σαν το γινόμενο του πίνακα γραμμής, που παριστάνει το $\langle \chi |$, με τον πίνακα στήλης, που παριστάνει το $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \chi | \psi \rangle &= \sum_i \langle \chi | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \psi \rangle = \\ &= (\langle \chi | \alpha^1 \rangle, \langle \chi | \alpha^2 \rangle, \dots) \begin{pmatrix} \langle \alpha^1 | \psi \rangle \\ \langle \alpha^2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \chi_1^* \psi_1 + \chi_2^* \psi_2 + \dots \end{aligned} \quad (2.168)$$

Προφανώς, πολλαπλασιάζοντας τη γραμμή, που παριστάνει το $\langle \chi |$, με τη στήλη, που παριστάνει το $|\psi\rangle$, θα πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο $\langle \chi | \psi \rangle$, που θα είναι



πράγματι το μιγαδικό συζυγές του $\langle \chi | \psi \rangle$, σε συμφωνία με τη βασική ιδιότητα (2.6) του εσωτερικού γινομένου.

Γενικότερα, ως θεωρήσουμε το εσωτερικό γινόμενο $\langle \chi | \hat{X} | \psi \rangle$. Θα έχουμε

$$\langle \chi | \hat{X} | \psi \rangle = \sum_i \sum_j \langle \chi | \alpha^i \rangle \langle \alpha^j | \hat{X} | \alpha^j \rangle \langle \alpha^j | \psi \rangle \quad (2.169)$$

Έτσι, έναν τελεστή \hat{A} μπορούμε να τον παραστήσουμε μ' έναν τετραγωνικό πίνακα $N \times N$ με στοιχεία $\langle \alpha^i | \hat{X} | \alpha^j \rangle$:

$$\hat{X} = X_{ij} = \begin{matrix} & & & j \\ & & & \left(\begin{array}{l} \langle \alpha^1 | \hat{X} | \alpha^1 \rangle \quad \langle \alpha^1 | \hat{X} | \alpha^2 \rangle \dots \\ \langle \alpha^2 | \hat{X} | \alpha^1 \rangle \quad \langle \alpha^2 | \hat{X} | \alpha^2 \rangle \dots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right) \\ & & & \end{matrix} \quad (2.170)$$

Το εσωτερικό γινόμενο (2.169) μπορεί να θεωρηθεί τότε σαν γινόμενο πινάκων

$$\langle \chi | \hat{X} | \psi \rangle = \sum_i \sum_j \chi_i^* X_{ij} \psi_j \quad (2.171)$$

Με τον ίδιο τρόπο μπορεί κανένας να παραστήσει το γινόμενο περισσότερων του ενός τελεστών. Παραδείγματος χάρη, θα έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \chi | \hat{X} \hat{Y} | \psi \rangle &= \sum_i \sum_j \sum_k \langle \chi | \alpha^i \rangle \langle \alpha^j | \hat{X} | \alpha^j \rangle \langle \alpha^j | \hat{Y} | \alpha^k \rangle \langle \alpha^k | \psi \rangle \\ &= \sum_{i,j,k} \chi_i^* X_{ij} Y_{jk} \psi_k \end{aligned} \quad (2.172)$$

Για τον ερμιτιανό συζυγή \hat{X}^+ ενός τελεστή \hat{X} έχουμε εξ ορισμού

$$\langle \alpha^i | \hat{X} | \alpha^j \rangle = \langle \alpha^j | \hat{X}^+ | \alpha^i \rangle^* \quad (2.173)$$

ή, με τη μορφή στοιχείων πίνακα,

$$X_{ij} = (X^+)_{ji}^* \quad (2.173')$$



Αν ο τελεστής \hat{X} είναι ερμιτιανός $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$, τότε έχουμε

$$\langle \alpha^i | \hat{X} | \alpha^j \rangle = \langle \alpha^j | \hat{X} | \alpha^i \rangle^* \quad (2.174)$$

ή, με τη μορφή στοιχείων πίνακα,

$$X_{ij} = X_{ji}^* \quad (2.175)$$

που αποτελεί και τον οικείο ορισμό για τα στοιχεία ενός ερμιτιανού πίνακα.

Τέλος, για το εξωτερικό γινόμενο $|\chi\rangle\langle\psi|$ δύο διανυσμάτων, που όπως ξέρουμε είναι τελεστής, θα έχουμε

$$\begin{aligned} |\chi\rangle\langle\psi| &= \begin{pmatrix} \langle \alpha^1 | \chi \rangle \\ \langle \alpha^2 | \chi \rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} (\langle \alpha^1 | \psi \rangle^* , \langle \alpha^2 | \psi \rangle^* , \dots) = \\ &= \begin{pmatrix} \langle \alpha^1 | \chi \rangle \langle \alpha^1 | \psi \rangle^* & \langle \alpha^1 | \chi \rangle \langle \alpha^2 | \psi \rangle^* \dots \\ \langle \alpha^2 | \chi \rangle \langle \alpha^1 | \psi \rangle^* & \langle \alpha^2 | \chi \rangle \langle \alpha^2 | \psi \rangle^* \dots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \chi_1 \psi_1^* & \chi_1 \psi_2^* \dots \\ \chi_2 \psi_1^* & \chi_2 \psi_2^* \dots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.176)$$

Έτσι, πράγματι ο τελεστής $|\chi\rangle\langle\psi|$ παριστάνεται από έναν τετραγωνικό πίνακα, τον (2.176). Δεν είναι δύσκολο να δείξει ο αναγνώστης ότι το ίχνος του τετραγωνικού αυτού πίνακα είναι $\text{Tr}(|\chi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\chi\rangle$.

Το πρόβλημα ιδιοτιμών ενός τελεστή \hat{A} παίρνει μια ιδιαίτερα απλή μορφή στην αναπαράσταση με πίνακες. Θέλουμε να βρούμε τις ιδιοτιμές λ και τα ιδιοδιανύσματα $|\lambda\rangle$ ενός τελεστή \hat{A} με την ιδιότητα

$$\hat{A} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (2.177)$$



Χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση με πίνακες, έχουμε

$$\sum_j \langle \alpha^i | \hat{A} | \alpha^j \rangle \langle \alpha^j | \lambda \rangle = \lambda \langle \alpha^i | \lambda \rangle$$

ή

$$\sum_j A_{ij} \lambda_j = \lambda \lambda_i \quad (2.178)$$

Όπως είναι γνωστό από την άλγεβρα, το πρόβλημα αυτό έχει μη τετριμμένες λύσεις, μόνον εφ' όσον ικανοποιείται η συνθήκη

$$\det (\Lambda - \lambda I) = 0 \quad (2.179)$$

Αυτή δίνει μια αλγεβρική εξίσωση, γνωστή σαν χαρακτηριστική εξίσωση, N-στής τάξης ως προς λ , οι ρίζες της οποίας αποτελούν τις ιδιοτιμές του τελεστή \hat{A} . Από αυτές, μπορούμε να βρούμε τα ιδιοδιανύσματα $|\lambda\rangle = \{ \lambda_i \equiv \langle \alpha^j | \lambda \rangle \}$, που θα περιέχουν εν γένει μια σταθερά, η οποία μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνθήκη κανονικοποίησης.

Ας θεωρήσουμε τώρα δύο ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη A και B. Αν τα διανύσματα βάσης $|\alpha^i\rangle$ είναι ιδιοδιανύσματα του τελεστή \hat{A} , τότε σ' αυτή τη βάση ο πίνακας που παριστάνει τον \hat{A} είναι διαγώνιος (διαγώνια αναπαράσταση):

$$A_{ij} = \langle \alpha^i | \hat{A} | \alpha^j \rangle = \alpha^j \langle \alpha^i | \alpha^j \rangle = \alpha^j \delta_{ij} \quad (2.180)$$

Αξίζει εδώ να σημειώσουμε ότι στη διαγώνια αναπαράσταση μπορούμε να γράψουμε για τον τελεστή \hat{A} ότι

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_{i,j} |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i | \hat{A} | \alpha^j \rangle \langle \alpha^j | \\ &= \sum_{i,j} \alpha^j |\alpha^i\rangle \delta_{ij} \langle \alpha^j | \\ &= \sum_i \alpha^i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i | = \sum_i \alpha^i \hat{\Pi}_i \end{aligned} \quad (2.181)$$

Η σχέση (2.181) λέγεται φασματική αναπαράσταση του τελεστή \hat{A} . Αν τώρα τα ιδιοδιανύσματα $|\beta^i\rangle$ του τελεστή \hat{B} αποτελέσουν μια δεύτερη βάση, τότε αλλαγή από τα διανύσματα βάσης $|\alpha^i\rangle$ στα διανύσματα βάσης $|\beta^i\rangle$ θα λέμε ότι αποτελεί μια αλλαγή βάσης ή αλλαγή αναπαράστασης. Η αλλαγή αυτή θα γίνεται μέσω ενός τελεστή μετασχηματισμού.



Αν έχουμε τις δύο βάσεις $|\alpha^i\rangle$ και $|\beta^i\rangle$, που ικανοποιούν σχέσεις ορθοκανονικότητας και πληρότητας, υπάρχει πάντα ένας τελεστής μετασχηματισμού \hat{U}

$$|\beta^i\rangle = \hat{U} |\alpha^i\rangle, \quad (2.182)$$

που να ικανοποιεί τη σχέση

$$\hat{U}^\dagger + \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger + = I \quad (2.183)$$

Τελεστές \hat{U} , που ικανοποιούν τη σχέση (2.183), λέγονται μοναδιακοί. Η φυσική σημασία και η μεγάλη χρησιμότητά τους θα φανεί αμέσως παρακάτω. Πριν από αυτό όμως, ας δούμε ότι ένας τέτοιος τελεστής πράγματι υπάρχει. Ο τελεστής

$$\hat{U} = \sum_i |\beta^i\rangle \langle \alpha^i| \quad (2.184)$$

είναι εύκολο να δει κανείς ότι επαληθεύει τις σχέσεις (2.182) και (2.183). Έχουμε πράγματι

$$\hat{U} |\alpha^i\rangle = \sum_j |\beta^j\rangle \langle \alpha^j | \alpha^i\rangle = \sum_j |\beta^j\rangle \delta_{ji} = |\beta^i\rangle$$

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \sum_{j,i} |\alpha^j\rangle \langle \beta^j | \beta^i\rangle \langle \alpha^i| =$$

$$= \sum_{j,i} |\alpha^j\rangle \delta_{ji} \langle \alpha^i| = \sum_i |\alpha^i\rangle \langle \alpha^i| = I$$

και, όμοια, $\hat{U} \hat{U}^\dagger = I$.

Ένα τυχαίο καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ γράφεται στην βάση $|\beta^i\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i |\beta^i\rangle \langle \beta^i | \psi\rangle \quad (2.185)$$

απ' όπου προκύπτει ότι τα στοιχεία πίνακα του $|\psi\rangle$ στη βάση $|\beta^i\rangle$ είναι

$$\langle \beta^i | \psi\rangle = \sum_j \langle \beta^i | \alpha^j\rangle \langle \alpha^j | \psi\rangle$$

$$= \sum_j \langle \alpha^i | \hat{U}^\dagger | \alpha^j\rangle \langle \alpha^j | \psi\rangle \quad (2.186)$$

ή, συμβολικά,

$$\psi^\beta \equiv \psi^\beta_j = \sum_j U^+_{ij} \psi_j^\alpha \equiv U^+ \psi^\alpha \quad (2.187)$$

Για τα στοιχεία πίνακα ενός τελεστή \hat{X} θα έχουμε



$$\begin{aligned}
\langle \beta^i | \hat{X} | \beta^j \rangle &= \sum_{k,l} \langle \beta^i | \alpha^k \rangle \langle \alpha^k | \hat{X} | \alpha^l \rangle \langle \alpha^l | \beta^j \rangle \\
&= \sum_{k,l} \langle \alpha^l | \hat{U}^\dagger | \alpha^k \rangle \langle \alpha^k | \hat{X} | \alpha^l \rangle \langle \alpha^l | \hat{U} | \beta^j \rangle
\end{aligned} \tag{2.188}$$

ή, συμβολικά,

$$\begin{aligned}
X^\beta &\equiv X_{ij}^\beta = \sum_{k,l} U_{ik}^+ X_{kl}^\alpha U_{lj} \\
&\equiv U^+ X^\alpha U
\end{aligned} \tag{2.189}$$

Ο τύπος μετασχηματισμού (2.189) είναι ο γνωστός τύπος των μετασχηματισμών ομοιότητας στη θεωρία πινάκων. Για το μοναδιακό τελεστή \hat{U} προκύπτει από τον ορισμό (2.183) ότι

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \tag{2.190}$$

όπου \hat{U}^{-1} ο αντίστροφος του \hat{U} . Συνεπώς, η σχέση (2.189) γράφεται και σαν

$$X^\beta = U^{-1} X^\alpha U \tag{2.191}$$

Μετασχηματισμοί αυτού του τύπου έχουν δύο βασικές ιδιότητες: διατηρούν το ίχνος και την ορίζουσα των πινάκων, δηλαδή γι' αυτούς έχουμε

$$\text{Tr } X^\beta = \text{Tr}(U^{-1} X^\alpha U) = \text{Tr}(U U^{-1} X^\alpha) = \text{Tr } X^\alpha \tag{2.192}$$

και

$$\det X^\beta = \det(U^{-1} X^\alpha U) = \det(U U^{-1} X^\alpha) = \det X^\alpha \tag{2.192'}$$

Στην αναπαράσταση, όπου ο πίνακας X είναι διαγώνιος, το ίχνος θα είναι το άθροισμα των ιδιοτιμών του \hat{X} και η ορίζουσα το γινόμενο τους.

Είδαμε, λοιπόν, ότι χρησιμοποιώντας τον μοναδιακό μετασχηματισμό \hat{U} της σχέσης (2.182) από μια βάση $|\alpha^i\rangle$ σε μια άλλη $|\beta^i\rangle$, μπορούμε να κατασκευάσουμε από ένα καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ ένα άλλο $|\psi'\rangle$ και από έναν οποιοδήποτε τελεστή \hat{X} έναν άλλο \hat{X}' με τις σχέσεις

$$\begin{aligned}
|\psi'\rangle &= \hat{U}^\dagger |\psi\rangle = \hat{U}^{-1} |\psi\rangle \\
\hat{X}' &= \hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{U} = \hat{U}^{-1} \hat{X} \hat{U}
\end{aligned} \tag{2.193}$$

Σε μια φυσική περιγραφή, η ισοδυναμία ανάμεσα στην παλιά βάση $|\alpha^i\rangle$ και τον αρχικό τελεστή \hat{X} από τη μια, και τη νέα βάση $|\beta^i\rangle$ και το νέο τελεστή \hat{X}' από την άλλη, φαίνεται από τα παρακάτω βασικά συμπεράσματα που μπορούμε να βγάλουμε:

1. Αν ο \hat{X} είναι ερμιτιανός τελεστής, τότε και ο \hat{X}' είναι ερμιτιανός.



Αυτό φαίνεται αμέσως:

$$\hat{X}'^+ = (\hat{U}^+ \hat{X} \hat{U})^+ = \hat{U}^+ \hat{X} \hat{U} = \hat{X}' \quad (2.194)$$

2. Εξισώσεις, που περιλαμβάνουν τελεστές, παραμένουν αναλλοίωτες.

Παραδείγματος χάρη, από τη σχέση

$$\hat{X} = c_1 \hat{Y} + c_2 \hat{Z} \hat{Q} \quad (2.195)$$

συνάγεται ότι

$$\hat{U}^+ \hat{X} \hat{U} = c_1 \hat{U}^+ \hat{Y} \hat{U} + c_2 \hat{U}^+ \hat{Z} \hat{U} \hat{U}^+ \hat{Q} \hat{U} \quad (2.196)$$

ή

$$\hat{X}' = c_1 \hat{Y}' + c_2 \hat{Z}' \hat{Q}' \quad (2.197)$$

Ειδικά, σχέσεις μετάθεσης παραμένουν αναλλοίωτες κάτω από μοναδιακούς μετασχηματισμούς

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = [\hat{X}', \hat{Y}'] = c \quad (2.198)$$

3. Οι ιδιοτιμές του \hat{X}' είναι οι ίδιες με εκείνες του \hat{X} .

Έτσι αν

$$\hat{X} |\chi\rangle = \chi |\chi\rangle, \quad (2.199)$$

θα έχουμε και

$$(\hat{U}^+ \hat{X} \hat{U}) (\hat{U}^+ |\chi\rangle) = \chi (\hat{U}^+ |\chi\rangle) \quad (2.200)$$

$$\hat{X}' |\chi'\rangle = \chi |\chi'\rangle \quad (2.201)$$

δηλαδή η ιδιοτιμή χ παραμένει η ίδια.

4. Τα εσωτερικά γινόμενα διατηρούνται.

Παραδείγματος χάρη, έχουμε

$$\langle \chi' | \hat{X}' | \psi' \rangle = (\langle \chi | \hat{U}^+) (U^+ \hat{X} U) (\hat{U}^+ |\psi\rangle) = \langle \chi | \hat{X} | \psi \rangle \quad (2.202)$$

Ειδικά, όταν $\hat{X} = I$, θα ισχύει

$$\langle \chi' | \psi' \rangle = \langle \chi | \psi \rangle, \quad (2.203)$$

που σημαίνει ότι στους μοναδιακούς μετασχηματισμούς διατηρείται η συνθήκη κανονικοποίησης.

Οι παραπάνω ιδιότητες των μοναδιακών μετασχηματισμών δείχνουν τη φυσική σημασία, που αυτοί έχουν, και υπογραμμίζουν τη μεγάλη χρησιμότητά τους. Έτσι, φυσικές ποσότητες, όπως οι ιδιοτιμές και οι αναμενόμενες τιμές, μπορούν να υπολογιστούν σε οποιαδήποτε αναπαράσταση κρίνει κανένας κατάλληλη. Ιδιαίτερα, παραμένουν αναλλοίωτες οι θεμελιώδεις σχέσεις μετάθεσης (2.154).



Όπως είδαμε, δύο ερμιτιανοί τελεστές, που συνδέονται μ' ένα μοναδιακό μετασχηματισμό, έχουν ίδιες ιδιοτιμές. Αυτή η ιδιότητα, στη γλώσσα των ερμιτιανών πινάκων, έχει την αντιστοιχία της στο πρόβλημα ιδιοτιμών: το να λύσει κανείς την εξίσωση ιδιοτιμών (2.178)-(2.179) είναι ισοδύναμο με το να βρει ένα μοναδιακό μετασχηματισμό, που θα μετατρέψει έναν ερμιτιανό πίνακα Λ σ' έναν άλλο $\Lambda'_{\delta} = U^{\dagger} \Lambda U$, που θα είναι διαγώνιος. Υπάρχουν δύο θεμελιώδη θεωρήματα στην άλγεβρα των πινάκων:

1. Κάθε ερμιτιανός πίνακας X μπορεί να διαγωνιοποιηθεί μ' ένα μοναδιακό μετασχηματισμό U .
2. Δύο ερμιτιανοί πίνακες X και Y μπορούν να διαγωνιοποιηθούν με τον ίδιο μοναδιακό μετασχηματισμό, εάν και μόνον εάν μετατίθενται $[X, Y] = 0$.

Θα πρέπει, τέλος, ν' αναφέρουμε ότι οι βασικές έννοιες αυτής της παραγράφου γενικεύονται άμεσα στην περίπτωση καταστατικών διανυσματικών χώρων με άπειρη διάσταση.

Θα ήταν χρήσιμο ν' ανακεφαλαιώσουμε, σημειώνοντας παραστατικά την αντιστοιχία που υπάρχει ανάμεσα στο συμβολισμό του Dirac και την άλγεβρα των πινάκων, που αποτελεί, όπως έχουμε ήδη πει, μian άλλη, ισοδύναμη, γλώσσα της κβαντικής μηχανικής (μηχανική των πινάκων). Υπενθυμίζουμε τη σύνδεση του συμβολισμού του Dirac με την άλλη, ισοδύναμη επίσης, γλώσσα της κβαντικής μηχανικής, την κυματομηχανική, όπως τη συνοψίσαμε στο τέλος της §2.4 (βλέπε πίνακα 2.1). Έχουμε, λοιπόν, την αντιστοιχία

Συμβολισμός Dirac

Άλγεβρα πινάκων

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$$

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

$$\sum_k \langle \alpha | \beta^k \rangle \langle \beta^k | \alpha \rangle = \delta_{ij}$$

$$U U^{-1} = I$$

$$\sum_k \sum_l \langle \beta^i | \alpha^k \rangle \langle \alpha^k | \beta^l \rangle \langle \alpha^l | \beta^j \rangle =$$

$$U^{\dagger} B U = \beta I$$

$$= \beta^i \delta_{ij}$$

Πίνακας 2.2. Αντιστοιχία ανάμεσα στο συμβολισμό Dirac και τη μηχανική των πινάκων.

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω σ' ένα απλό πρόβλημα.

Πρόβλημα Θεωρούμε ένα τριδιάστατο διανυσματικό καταστατικό χώρο. Σε μια βάση, οι τελεστές A και B παριστάνονται από τους πίνακες



$$A = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\beta \\ 0 & i\beta & 0 \end{pmatrix}$$

όπου α και β πραγματικοί αριθμοί. Ναδειχθεί ότι οι A και B μετατίθενται και να λυθεί το πρόβλημα ιδιοτιμών τους. Ποιός ο μοναδιακός μετασχηματισμός U , που διαγωνιοποιεί ταυτόχρονα τους δυο πίνακες; Να προσδιοριστούν οι ιδιοτιμές, που χαρακτηρίζουν καθένα από τα τρία ιδιοδιανύσματα ket . Ποια από τα εξής σύνολα τελεστών: $\{\hat{A}\}$, $\{\hat{B}\}$, $\{\hat{A}, \hat{B}\}$, $\{\hat{A}^2, \hat{B}\}$, $\{\hat{A} + \hat{B}\}$, αποτελούν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών.

Λύση. Ότι οι πίνακες A και B μετατίθενται επαληθεύεται αμέσως. Συνεπώς, τα δύο αντίστοιχα φυσικά μεγέθη θα είναι συμβιβαστά και θα χαρακτηρίζονται από ένα σύνολο κοινών ιδιοδιανυσμάτων. Οι ιδιοτιμές του A είναι προφανώς οι $\alpha, -\alpha, -\alpha$ (εκφυλισμένο φάσμα), ενώ του B θα δίνονται από τη λύση της χαρακτηριστικής εξίσωσης

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

απ' όπου προκύπτουν οι ιδιοτιμές β (διπλή ρίζα) και $-\beta$ (επίσης εκφυλισμένο φάσμα). Από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$B|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle,$$

βρίσκουμε τα ορθοκανονικά ιδιοδιανύσματα ket

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Ο πίνακας U , που αντιστοιχεί στα παραπάνω ιδιοδιανύσματα, είναι ο

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

και επαληθεύεται εύκολα ότι είναι μοναδιακός $U^\dagger U = 1$ και ότι διαγωνιοποιεί ταυτόχρονα τους A και B . Τα ιδιοδιανύσματα ket χαρακτηρίζονται από τις ιδιοτιμές

$$|1\rangle = |\alpha, \beta\rangle, \quad |2\rangle = |-\alpha, +\beta\rangle, \quad |3\rangle = |-\alpha, -\beta\rangle$$



Τέλος, από τα σύνολα που μας δίνονται, μόνο τα $\{A, B\}$ και $\{A+B\}$ αποτελούν πλήρη σύνολα συμβιβαστών φυσικών μεγεθών, με μη εκφυλισμένο φάσμα ιδιοτιμών $[(\alpha, \beta), (-\alpha, \beta), (-\alpha, -\beta)]$ και $[\alpha+\beta, -\alpha+\beta, -\alpha-\beta]$, αντίστοιχα.

2.8. Εξέλιξη με το χρόνο: Κβαντική δυναμική

Μέχρι τώρα σ' αυτό το κεφάλαιο δεν εξετάσαμε πως εξελίσσεται ένα φυσικό σύστημα με το χρόνο. Σ' αυτή και την επόμενη παράγραφο, εξετάζουμε ακριβώς την δυναμική εξέλιξη της κατάστασης ενός φυσικού συστήματος, μέσω της χρονικής εξέλιξης των καταστατικών διανυσμάτων και των τελεστών των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών. Με άλλα λόγια, μελετούμε τις εξισώσεις της κίνησης των κβαντικών συστημάτων.

Ας υποθέσουμε ότι ένα φυσικό σύστημα σε μια αρχική χρονική στιγμή t_0 βρίσκεται στην κατάσταση $|\psi(t_0)\rangle$. Δεχόμαστε γενικά ότι η κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ του συστήματός μας σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή $t > t_0$ θα συνδέεται με την προηγούμενη $|\psi(t_0)\rangle$ μ' ένα τελεστή χρονικής εξέλιξης $\hat{U}(t, t_0)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.204)$$

Ποιές ιδιότητες θα πρέπει να έχει ο τελεστής $\hat{U}(t, t_0)$; Κατ' αρχήν, θα πρέπει να είναι μοναδιακός:

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) = I \quad (2.205)$$

Αυτό προκύπτει από τη διατήρηση της πιθανότητας

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (2.206)$$

Μπορούμε να πούμε ότι η έννοια της μοναδιακότητας είναι ισοδύναμη με την διατήρηση της πιθανότητας. Μια άλλη ιδιότητα είναι η ιδιότητα της σύνθεσης

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \quad (t_2 > t_1 > t_0). \quad (2.207)$$

Είναι λογικό να πούμε ότι η εξέλιξη του συστήματός μας από t_0 έως t_2 μπορεί επίσης να προκύψει με το να θεωρήσουμε την εξέλιξη πρώτα από t_0 έως t_1 και έπειτα από t_1 έως t_2 . Θα πρέπει, τέλος, σε μια απειροστή χρονική μεταβολή, όπου

$$|\psi(t_0+dt)\rangle = \hat{U}(t_0+dt, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (2.208)$$

να ισχύει η σχέση συνέχειας

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \hat{U}(t_0+dt, t_0) = I \quad (2.209)$$



Όλες οι παραπάνω απαιτήσεις ικανοποιούνται, αν θεωρήσει κανείς την έκφραση

$$\hat{U}(t_0+dt, t_0) = I - i \hat{F} dt \quad (2.210)$$

όπου ο τελεστής \hat{F} , γνωστός σαν γεννήτορας του μετασχηματισμού, είναι ερμιτιανός (βλ. και πρόβλημα 2.10)

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (2.211)$$

Ο τελεστής \hat{F} έχει διαστάσεις αντιστρόφου χρόνου (δηλαδή συχνότητας). Η σχέση $E = \hbar\omega$ και το γεγονός ότι στην κλασική μηχανική η χαμιλτονιανή είναι πράγματι ο γεννήτορας της χρονικής εξέλιξης, μας οδηγεί στο φυσικό συσχετισμό

$$\hat{F} = \hat{H} / \hbar \quad (2.212)$$

Συνεπώς, ο τελεστής της χρονικής εξέλιξης για απειροστή χρονική μεταβολή γράφεται

$$\hat{U}(t_0+dt, t_0) = I - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} \quad (2.213)$$

Είναι εύκολο τώρα να συνάγει κανείς τη θεμελιώδη διαφορική εξίσωση, στην οποία υπακούει ο τελεστής της χρονικής εξέλιξης $\hat{U}(t, t_0)$. Έχουμε

$$\hat{U}(t+dt, t_0) = \hat{U}(t+dt, t) \hat{U}(t, t_0) = \left(I - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} \right) \hat{U}(t, t_0) \quad (2.214)$$

απ' όπου προκύπτει αμέσως

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (2.215)$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι η εξίσωση του Schrödinger για τον τελεστή χρονικής εξέλιξης. Η χρονική εξέλιξη κάθε κβαντικού συστήματος έπεται από αυτή τη βασική εξίσωση.

Από την (2.215), πολλαπλασιάζοντας από δεξιά με $|\psi(t_0)\rangle$, παίρνουμε

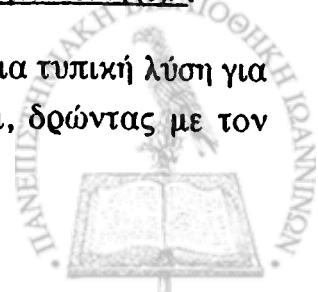
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.216)$$

Επειδή η $|\psi(t_0)\rangle$ είναι ανεξάρτητη από το χρόνο, έχουμε τελικά

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.217)$$

που είναι η εξίσωση του Schrödinger για το καταστατικό διάνυσμα $|\psi(t)\rangle$.

Βέβαια, αντί να λύσει κανείς τη (2.217), μπορεί να βρει μια τυπική λύση για τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $\hat{U}(t, t_0)$ από την (2.215). Έτσι, δρώντας με τον



$\hat{U}(t, t_0)$ πάνω στην αρχική κατάσταση $|\psi(t_0)\rangle$, βρίσκουμε την κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ σε μια οποιαδήποτε μετέπειτα χρονική στιγμή $t > t_0$. Στις στοιχειώδεις εφαρμογές πρακτικού ενδιαφέροντος, ο χαμιλτονιανός τελεστής \hat{H} είναι ανεξάρτητος από το χρόνο (γενικότερη περίπτωση, όπου ο \hat{H} εξαρτάται από το χρόνο, θα συναντήσουμε αργότερα, βλ. § 3.10, §7.2 και κεφάλαιο X). Σ' αυτή την περίπτωση, η λύση της (2.215) είναι

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}, \quad (2.218)$$

όπως εύκολα ελέγχεται. Η ίδια έκφραση προκύπτει θεωρώντας επανειλημμένους απειροστούς μετασχηματισμούς, οπότε

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i\hat{H}}{\hbar} \frac{(t-t_0)}{N} \right]^N = \exp \left[\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right].$$

Έτσι, η λύση της (2.217), που δίνει τη χρονική εξέλιξη των καταστάσεων του συστήματός μας, γράφεται

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (2.219)$$

Οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας αποτελούν τη λύση του προβλήματος ιδιοτιμών

$$\hat{H} | E_i \rangle = E_i | E_i \rangle \quad (2.220)$$

Παίρνοντας για απλότητα $t_0 = 0$, ο τελεστής χρονικής εξέλιξης γράφεται, συναρτήσει των ιδιοκαταστάσεων ενέργειας, σαν

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}t/\hbar} &= \sum_i \sum_j | E_j \rangle \langle E_j | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | E_i \rangle \langle E_i | = \\ &= \sum_i | E_i \rangle \langle E_i | e^{-iE_i t/\hbar} \end{aligned} \quad (2.221)$$

Έτσι, εάν αρχικά γράψουμε για μια οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi(0)\rangle$ ότι

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_i | E_i \rangle \langle E_i | \psi(0)\rangle \\ &= \sum_i C_{E_i}(0) | E_i \rangle, \end{aligned} \quad (2.222)$$

τότε σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή t θα έχουμε



$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \sum_i |E_i\rangle \langle E_i|\psi(0)\rangle e^{-iE_i t/\hbar} \\
 &= \sum_i C_{E_i}(0) e^{-iE_i t/\hbar} |E_i\rangle
 \end{aligned} \tag{2.223}$$

Οι συντελεστές λοιπόν ανάπτυξης $C_{E_i}(t)$ στην έκφραση

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i C_{E_i}(t) |E_i\rangle \tag{2.224}$$

εξελίσσονται με το χρόνο σύμφωνα με τη σχέση

$$C_{E_i}(t) = C_{E_i}(0) e^{-iE_i t/\hbar}, \tag{2.224α}$$

που βέβαια έχουμε ήδη συναντήσει στο πρώτο κεφάλαιο (σχέση (1.171)).

Εάν ένα φυσικό μέγεθος \hat{A} είναι συμβιβαστό με τη χαμιλτονιανή του συστήματος \hat{H} , οπότε

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0, \tag{2.225}$$

τότε οι ιδιοκαταστάσεις του \hat{A} είναι κοινές με τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας. Έτσι, εάν η αρχική κατάσταση του συστήματός μας συμβεί να είναι μια από τις $|E_i\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = |E_i\rangle, \tag{2.226}$$

τότε σε μεταγενέστερο χρόνο θα είναι

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_i t/\hbar} |E_i\rangle \tag{2.227}$$

Αυτό σημαίνει ότι το σύστημά μας εξακολουθεί και μετά από χρόνο t να περιγράφεται από μία κοινή ιδιοκατάσταση των \hat{A} και \hat{H} . Η μόνη διαφορά ανάμεσα στην παλιά και τη νέα ιδιοκατάσταση έγκειται στην αλλαγή φάσης $e^{-iE_i t/\hbar}$. Μ' αυτή την έννοια, ένα παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος συμβιβαστό με την \hat{H} αποτελεί μια σταθερά της κίνησης. Το συσχετισμό αυτό θα τον δούμε και στην αμέσως επόμενη παράγραφο.

Εάν τώρα έχουμε και ένα άλλο φυσικό μέγεθος \hat{B} , που δεν είναι αναγκαία συμβιβαστό με το \hat{A} ή με την \hat{H} , τότε θα έχουμε

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \hat{B} | \psi(t) \rangle &= \langle E_i | \hat{U}^\dagger(t,0) \hat{B} \hat{U}(t,0) | E_i \rangle \\
 &= \langle E_i | e^{iE_i t/\hbar} \hat{B} e^{-iE_i t/\hbar} | E_i \rangle \\
 &= \langle E_i | \hat{B} | E_i \rangle
 \end{aligned} \tag{2.228}$$



Η αναμενόμενη τιμή του \hat{B} ως προς τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας είναι συνεπώς ανεξάρτητη από το χρόνο t . Αυτός είναι ο λόγος που οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας (2.227) λέγονται στάσιμες καταστάσεις (βλ. και σχέση 1.92 στο πρώτο κεφάλαιο).

Απεναντίας, εάν θεωρήσουμε μια επαλληλία στάσιμων καταστάσεων (2.223), τότε η αναμενόμενη τιμή του \hat{B} θα είναι

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{B} | \psi(t) \rangle &= \sum_i \sum_j \langle E_j | C_j^* E_j(0) e^{iE_j t/\hbar} \hat{B} C_i E_i(0) e^{-iE_i t/\hbar} | E_i \rangle \\ &= \sum_i \sum_j C_j^* E_j(0) C_i E_i(0) \langle E_j | \hat{B} | E_i \rangle e^{-i(E_i - E_j) t/\hbar} \end{aligned} \quad (2.229)$$

Συνεπώς, σ' αυτή την περίπτωση, η αναμενόμενη τιμή εξαρτάται από το χρόνο μέσω των όρων ταλάντωσης κυκλικής συχνότητας $\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{\hbar}$ (βλ. και σχέση (1.172)).

Ας δούμε τώρα πως προκύπτουν οι κυματικές εξισώσεις του Schrödinger, που γνωρίσαμε ήδη στο πρώτο κεφάλαιο. Δεν έχει κανείς παρά να πάρει την εξίσωση του Schrödinger (2.217) για το καταστατικό διάνυσμα $\text{ket } |\psi(t)\rangle$ στην αναπαράσταση θέσης. Τότε έχουμε

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{H} | \psi(t) \rangle \quad (2.230)$$

Εάν ο χαμιλτονιανός τελεστής \hat{H} είναι

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}, t) \quad (2.231)$$

τότε η (2.230) δίνει

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right] \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle, \quad (2.232)$$

που είναι η εξαρτημένη από το χρόνο κυματική εξίσωση του Schrödinger και που είχαμε γράψει στο πρώτο κεφάλαιο με τη μορφή

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.233)$$

Η κβαντική μηχανική, βασισμένη στην κυματική εξίσωση (2.233), είναι η γνωστή μας κυματομηχανική, που γνωρίσαμε στο πρώτο κεφάλαιο.



Εξ άλλου, όπως είδαμε προηγούμενα, η χρονική εξάρτηση μιας στάσιμης κατάστασης δίνεται μέσω του όρου $e^{-iE_i t/\hbar}$. Συνεπώς, γράφουμε

$$\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{r} | E_i \rangle e^{-iE_i t/\hbar} \quad (2.234)$$

Αντικαθιστώντας την (2.234) στην εξίσωση (2.232), παίρνουμε (δυναμικό ανεξάρτητο από το χρόνο)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \langle \mathbf{r} | E_i \rangle = E_i \langle \mathbf{r} | E_i \rangle \quad (2.235)$$

Η εξίσωση (2.235) είναι η ανεξάρτητη από το χρόνο κυματική εξίσωση του Schrödinger. Είναι η διαφορική εξίσωση που ικανοποιούν οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας. Στη γλώσσα της κυματομηχανικής, την είχαμε γράψει στο πρώτο κεφάλαιο με τη μορφή

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (2.236)$$

Για να λυθεί η (2.236), πρέπει να επιβάλουμε κάποιες οριακές συνθήκες (το γνωστό πρόβλημα οριακών τιμών της μαθηματικής φυσικής). Ας υποθέσουμε ότι ψάχνουμε λύση της (2.236) με

$$E < \lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} V(\mathbf{r}) \quad (2.237)$$

Η κατάλληλη οριακή συνθήκη είναι εδώ

$$\psi_E(\mathbf{r}) \rightarrow 0, \text{ όταν } |\mathbf{r}| \rightarrow \infty. \quad (2.238)$$

Από φυσική άποψη αυτό σημαίνει ότι το σύστημά μας είναι περιορισμένο μέσα σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου. Είναι γνωστό ότι σ' αυτή την περίπτωση υπάρχουν μη τετριμμένες λύσεις της (2.236) μόνο για ένα διάκριτο φάσμα τιμών της E (θα επανέλθουμε αναλυτικότερα σ' αυτό το σημείο στην § 3.2). Μ' αυτή την έννοια, η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger οδηγεί στην κβάντωση των ενεργειακών επιπέδων. Στο επόμενο κεφάλαιο, θα γνωρίσουμε βασικές λύσεις της κυματικής εξίσωσης του Schrödinger.

2.9. Εικόνα Schrödinger -Εικόνα Heisenberg

Είδαμε ότι υπάρχουν πολλές αναπαραστάσεις για τα καταστατικά διανύσματα και τους τελεστές των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών, που συνδέονται μεταξύ τους με μοναδιακούς μετασχηματισμούς. Ιδιαίτερα, είδαμε ότι οι μοναδιακοί μετασχηματισμοί διατηρούν τα εσωτερικά γινόμενα και τις ιδιοτιμές, πράγμα που έχει μεγάλη φυσική σημασία, γιατί με αυτά γίνεται η



σύγκριση με το πείραμα. Ανάμεσα στους μοναδιακούς μετασχηματισμούς, υπάρχει μια ειδική κατηγορία, που είναι γνωστή σαν εικόνες ή περιγραφές και που διαφέρουν μεταξύ τους στον τρόπο που χρησιμοποιούν τον τελεστή της χρονικής εξέλιξης ενός συστήματος.

Έτσι, ας θεωρήσουμε το μοναδιακό μετασχηματισμό (2.204)

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.239)$$

Αυτός, βέβαια, διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (2.240)$$

Για ένα τελεστή \hat{A} έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | (\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (2.241)$$

Η τελευταία σχέση μας υποδεικνύει δύο τρόπους περιγραφής της εξέλιξης ενός συστήματος:

1ος τρόπος περιγραφής:

καταστατικά διανύσματα μεταβαλλόμενα	$ \psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0)\rangle,$	
τελεστές αμετάβλητοι	\hat{A}	(2.242)

2ος τρόπος περιγραφής:

καταστατικά διανύσματα αμετάβλητα	$ \psi(t_0)\rangle,$	
τελεστές μεταβαλλόμενοι	$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$	(2.243)

Θα πρέπει εδώ να σημειώσουμε ότι στην κλασική φυσική δεν χρησιμοποιούμε καταστατικά διανύσματα, ενώ βέβαια μιλάμε για τη χρονική εξέλιξη φυσικών παρατηρήσιμων μεγεθών. Έτσι, φαίνεται ότι ο δεύτερος τρόπος περιγραφής μπορεί να μας επιτρέψει μια πλησιέστερη σύνδεση με την κλασική φυσική, σύμφωνα και με την αρχή της αντιστοιχίας.

Ας δούμε τώρα και το πρόβλημα ιδιοτιμών. Για ένα τελεστή \hat{A} θα έχουμε

$$\hat{A} |\alpha^i\rangle = \alpha^i |\alpha^i\rangle \quad (2.244)$$

Από τη σχέση αυτή προκύπτει ότι



$$(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}) (\hat{U}^+ |a^i\rangle = a^i (\hat{U}^+ |a^i\rangle) \quad (2.245)$$

Τις σχέσεις (2.244) και (2.245) μπορούμε επίσης να τις δούμε με τους δύο παραπάνω τρόπους περιγραφής:

1ος τρόπος περιγραφής: τελεστές αμετάβλητοι \hat{A} ,
διανύσματα βάσης αμετάβλητα $|a^i\rangle$ (2.246)

2ος τρόπος περιγραφής: τελεστές μεταβαλλόμενοι $\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}$,
διανύσματα βάσης μεταβαλλόμενα $\hat{U}^+ |a^i\rangle$ (2.247)

Οι δύο παραπάνω τρόποι περιγραφής αποτελούν ισοδύναμους τρόπους περιγραφής της κβαντικής δυναμικής εξέλιξης ενός συστήματος. Ο πρώτος τρόπος αντιστοιχεί σ' αυτό που ονομάζουμε εικόνα ή περιγραφή Schrödinger και είναι αυτή η περιγραφή που γνωρίσαμε μέχρι τώρα στα προηγούμενα. Ο δεύτερος τρόπος αντιστοιχεί σ' αυτό που ονομάζουμε εικόνα ή περιγραφή Heisenberg και μπορούμε, ισοδύναμα, με αυτό τον τρόπο να μελετήσουμε τη χρονική εξέλιξη ενός συστήματος. Συνοψίζοντας, έχουμε

	<u>εικόνα Schrödinger</u>	<u>εικόνα Heisenberg</u>
Καταστατικά διανύσματα	$ \psi(t) \rangle_S = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) \rangle$ μεταβαλλόμενα	$ \psi(t) \rangle_H = \hat{U}^+(t, t_0) \psi(t) \rangle_S$ $= \psi(t_0) \rangle$ αμετάβλητα
Τελεστές	\hat{A}_S αμετάβλητοι	$\hat{A}_H = \hat{U}^+(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0)$ μεταβαλλόμενοι
Διανύσματα βάσης	$ a^i \rangle_S$ αμετάβλητα	$ a^i \rangle_H = \hat{U}^+(t, t_0) a^i \rangle_S$ μεταβαλλόμενα

Πίνακας 2.3. Εικόνα Schrödinger και εικόνα Heisenberg

Μέχρι τώρα είδαμε τις εξισώσεις, που περιγράφουν την χρονική εξέλιξη των καταστατικών διανυσμάτων $| \psi(t) \rangle_S$ στην εικόνα Schrödinger. Είναι βέβαια η εξίσωση Schrödinger (2.217) ή, ισοδύναμα, η (2.219). Μας μένει τώρα να βρούμε τις εξισώσεις, που περιγράφουν την χρονική εξέλιξη των μεταβαλλόμενων ποσοτήτων στην εικόνα Heisenberg.

Ας θεωρήσουμε τη σχέση

$$\hat{A}_H = \hat{U}^+ \hat{A}_S \hat{U} \quad (2.248)$$

Από αυτή προκύπτει ότι



$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{A}_H}{dt} &= \left(\frac{\partial\hat{U}^+}{\partial t}\right)\hat{A}_s\hat{U} + \hat{U}^+\hat{A}_s\left(\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\right) + \hat{U}^+\left(\frac{\partial\hat{A}_s}{\partial t}\right)\hat{U} \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\hat{U}\hat{U}^+\hat{A}_s\hat{U} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\hat{U}^+\hat{A}_s\hat{U}\hat{U}^+\hat{H}\hat{U} + \hat{U}^+\left(\frac{\partial\hat{A}_s}{\partial t}\right)\hat{U} \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_H\hat{A}_H + \frac{1}{i\hbar}\hat{A}_H\hat{H}_H + \hat{U}^+\left(\frac{\partial\hat{A}_s}{\partial t}\right)\hat{U}
\end{aligned} \tag{2.249}$$

όπου $\hat{H}_H = \hat{U}^+\hat{H}\hat{U}$ η χαμιλτονιανή στην εικόνα Heisenberg. Συνεπώς έχουμε

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H \tag{2.250}$$

Αυτή είναι η εξίσωση κίνησης του Heisenberg για τον τελεστή \hat{A}_H . Στις περισσότερες περιπτώσεις φυσικού ενδιαφέροντος, ο τελεστής \hat{A}_s δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από το χρόνο και ο δεύτερος όρος του δεύτερου μέλους της παραπάνω εξίσωσης δεν υπάρχει.

Είναι εύκολο να δειχθεί ότι η ανάλογη εξίσωση που ικανοποιούν τα διανύσματα βάσης είναι

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a^i\rangle_H = -\hat{H}_H |a^i\rangle_H \tag{2.251}$$

Αξίζει εδώ να παρατηρήσουμε ότι η εξίσωση κίνησης του Heisenberg παραπέμπει στην αντίστοιχη εξίσωση της κλασικής μηχανικής

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{κλασ}} \tag{2.252}$$

όπου A ένα φυσικό μέγεθος, συνάρτηση των q και p , και $[,]_{\text{κλασ}}$ η κλασική αγκύλη Poisson (2.157). Η αντιστοιχία γίνεται με τη σχέση (2.156), δηλαδή

$$\frac{1}{i\hbar} [,]_{\text{κβαν}} \rightarrow [,]_{\text{κλασ}} \tag{2.253}$$

όπου $[,]_{\text{κβαν}}$ είναι ο αντίστοιχος κβαντομηχανικός μεταθέτης. Θα πρέπει να τονίσουμε ότι η σωστή αντιστοιχία γίνεται με την (2.253) και όχι αντίστροφα: οι εξισώσεις της κλασικής μηχανικής μπορεί να προκύψουν από εκείνες της κβαντικής μηχανικής, αλλά το αντίστροφο δεν είναι σωστό, γιατί υπάρχουν περιπτώσεις που δεν έχουν κλασικό ανάλογο (π.χ. ο τελεστής του σπιν, που θα γνωρίσουμε αργότερα, δεν μπορεί να γραφεί σαν συνάρτηση των q και p και, συνεπώς, δεν έχει κλασικό ανάλογο).



Ας επανέλθουμε τώρα στην εξίσωση κίνησης του Heisenberg. Από αυτή μπορούμε αμέσως να συνάγουμε τις εξισώσεις κίνησης για τις αναμενόμενες ή μέσες τιμές των διαφορών φυσικών μεγεθών. Έτσι, έχουμε

$$\langle \psi |_{\text{H}} \frac{d\hat{A}_{\text{H}}}{dt} | \psi \rangle_{\text{H}} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi |_{\text{H}} [\hat{A}_{\text{H}}, \hat{H}_{\text{H}}] | \psi \rangle_{\text{H}} + \langle \psi |_{\text{H}} \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right)_{\text{H}} | \psi \rangle_{\text{H}} \quad (2.254)$$

Επειδή οι αναμενόμενες τιμές είναι ανεξάρτητες από τις εικόνες ή περιγραφές που χρησιμοποιούμε, θα έχουμε γενικά

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (2.255)$$

Στην περίπτωση που ο τελεστής \hat{A} δεν εξαρτάται εκλεφρασμένα από το χρόνο (δηλαδή $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$), έχουμε

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (2.256)$$

Ειδικότερα, από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι, εάν $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ και ο τελεστής \hat{A} μετατίθεται με τη χαμιλτονιανή \hat{H} : $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, τότε η αναμενόμενη τιμή του \hat{A} δεν μεταβάλλεται με το χρόνο: $\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = 0$. Σ' αυτή την περίπτωση, λέμε ότι το φυσικό μέγεθος A είναι μια σταθερά της κίνησης (βλ. και τη συζήτηση γύρω από τις σχέσεις (2.225)-(2.227)).

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω στην περίπτωση που το φυσικό μέγεθος A είναι η θέση, r και η ορμή p ενός σωματιδίου, αντίστοιχα. Θα έχουμε

$$\frac{d\hat{r}_{\text{H}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{r}_{\text{H}}, \hat{H}_{\text{H}}] \quad (2.257)$$

$$\frac{d\hat{p}_{\text{H}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_{\text{H}}, \hat{H}_{\text{H}}] \quad (2.258)$$

ή, ακόμα,

$$\frac{d}{dt} \langle r \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [r, \hat{H}] \rangle \quad (2.259)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [p, \hat{H}] \rangle \quad (2.260)$$

Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι οι σχέσεις μετάθεσης είναι αναλλοίωτες κάτω από μοναδιακούς μετασχηματισμούς και τα αποτελέσματα του προβλήματος 2.6, οι παραπάνω σχέσεις δίνουν για τη χαμιλτονιανή



$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.261)$$

ότι

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \nabla_p \hat{H}_H \quad (2.262)$$

$$\frac{d\hat{r}_H}{dt} = -\nabla \hat{H}_H \quad (2.263)$$

ή, ακόμα,

$$\frac{d\langle r \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad (2.264)$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \nabla V \rangle \quad (2.265)$$

Οι εξισώσεις (2.262) -(2.263) αποτελούν το κβαντομηχανικό ανάλογο των εξισώσεων Hamilton της κλασικής μηχανικής, ενώ οι εξισώσεις (2.264)-(2.265) το κβαντομηχανικό ανάλογο των θεμελιωδών εξισώσεων του Newton. Οι δύο τελευταίες σχέσεις συνιστούν το θεώρημα του Ehrenfest. Όλα τα παραπάνω είναι σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

Θα τελειώσουμε αναφέροντας ότι μπορούμε να ορίσουμε μια άλλη εικόνα ή περιγραφή, στην οποία ο μοναδιακός μετασχηματισμός που εφαρμόζεται στα καταστατικά διανύσματα χρησιμοποιεί μέρος μόνο της ολικής χαμιλτονιανής, ενώ το υπόλοιπο μέρος της αντιστοιχεί στον μοναδιακό μετασχηματισμό που εφαρμόζεται στους τελεστές. Τέτοιες μεικτές εικόνες ονομάζονται εικόνες ή περιγραφές αλληλεπίδρασης. Δεν θα ασχοληθούμε περισσότερο με αυτές σ' αυτό το σημείο, αλλά θα επανέλθουμε στην §10.1.

Προβλήματα

- 2.1. Ξεκινώντας από τη σχέση $\langle x' | x \rangle = \sum_p \langle x' | p \rangle \langle p | x \rangle$, να βρεθεί μια έκφραση για το $\langle x' | x \rangle$ και ναδειχτεί ότι αυτή δίνει πράγματι τη δ-συνάρτηση $\delta(x' - x)$.
- 2.2. Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίδιο είναι περιορισμένο να κινείται μόνο στο διάστημα $0 < x < \frac{L}{2}$ μιας κλειστής τροχιάς μήκους L .
- i) Γιατί η κυματοσυνάρτησή του είναι



$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(2\pi n x/L), \quad 0 \leq x \leq \frac{L}{2}$$

Γράφοντας $\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | \psi \rangle$, να βρεθούν και να ερμηνευτούν τα $\langle x | n \rangle$ και $\langle n | \psi \rangle$.

ii) Να γραφεί η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου τη χρονική στιγμή που, ενώ βρίσκεται στην κατάσταση με $n = 2$, αφήνεται να κινηθεί σε όλο το μήκος της διαδρομής $0 \leq x \leq L$. Να βρεθεί στη συνέχεια το πλάτος πιθανότητας για να έχει το σωματίδιο ορμή $p = n \frac{h}{L}$ σε μια αμέσως επόμενη μέτρηση. Να γίνει εφαρμογή για

$$p = 2 \frac{h}{L}, -2 \frac{h}{L}, 3 \frac{h}{L}, 4 \frac{h}{L}.$$

2.3. Ας υποθέσουμε ότι στην κίνηση κλειστής τροχιάς μήκους L οι θέσεις $x = 0$ και $x = L$ δεν επιτρέπονται: $0 < x < L$.

i) Να λυθεί σ' αυτή την περίπτωση το πρόβλημα ιδιοτιμών (2.128), βρίσκοντας τις ενεργειακές στάθμες E και τις κυματοσυναρτήσεις $\langle x | E \rangle$

ii) Να βρεθούν οι αβεβαιότητες

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad \Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

και να διατυπωθεί η σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής.

2.4. Να επαληθευτούν οι παρακάτω χρήσιμες σχέσεις για τους μεταθέτες:

i) $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$

ii) $[\hat{A}, c] = 0$, $c =$ σταθερός αριθμός

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

iv) $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$

v) $[\hat{A}, \hat{B} \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}]$

vi) $[\hat{A} \hat{B}, \hat{C} \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B} \hat{D} + \hat{C} [\hat{A}, \hat{D}] \hat{B} + \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] \hat{D} + \hat{C} \hat{A} [\hat{B}, \hat{D}]$

vii) $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ (ταυτότητα Jacobi)

2.5. i) Να δειχθεί η σχέση

$$e^{\mu \hat{A}} \hat{B} e^{-\mu \hat{A}} = \hat{B} + \mu [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\mu^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]$$

$$+ \frac{\mu^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots,$$



όπου A, \hat{B} είναι τελεστές και μ μιγαδικός αριθμός.

ii) Εάν ο μεταθέτης δύο τελεστών $[\hat{A}, \hat{B}] = \lambda$ είναι μιγαδικός αριθμός, να δειχθεί ότι

$$e^{\mu(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\mu\hat{A}} e^{\mu\hat{B}} e^{-\mu^2[\hat{A},\hat{B}]/2} = e^{\mu\hat{A}} e^{\mu\hat{B}} e^{-\mu^2\lambda/2}.$$

2.6. Να δειχθούν οι σχέσεις μετάθεσης

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad [p_i, G(\mathbf{r})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$$

και να συγκριθούν με τις αντίστοιχες εκφράσεις για τις κλασικές αγκύλες Poisson.

2.7. Να δειχθεί ότι στη γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας (2.144) η ισότητα (σχέση ελάχιστης αβεβαιότητας) ισχύει αν ικανοποιείται η συνθήκη

$$\Delta A | \Psi \rangle = c \Delta B | \Psi \rangle$$

όπου c ένας καθαρά φανταστικός αριθμός. Για την περίπτωση όπου $\hat{A} = \hat{x}$ και $\hat{B} = \hat{p}$, να δειχθεί ότι η κυματοσυνάρτηση $\langle x | \psi \rangle$, για την οποία ισχύει η σχέση ελάχιστης αβεβαιότητας, είναι της μορφής Gauss

$$\langle x | \psi \rangle = N e^{i\langle p \rangle x / \hbar - (x - \langle x \rangle)^2 / (2\lambda \hbar)}, \quad (\lambda > 0).$$

2.8. Σ' ένα φυσικό σύστημα, οι τελεστές της χαμιλτονιανής \hat{H} και δύο άλλων παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών \hat{A} και \hat{B} παριστάνονται από τους πίνακες

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \hbar \omega, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\alpha \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{pmatrix}$$

όπου α, β πραγματικοί αριθμοί.

i) Να λυθεί το πρόβλημα ιδιοτιμών των H, A, B

ii) Αν το σύστημα βρίσκεται, σε μια χρονική στιγμή, στην κατάσταση που περιγράφεται από το κανονικοποιημένο καταστατικό διάνυσμα

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle + c_3 |3\rangle$$

όπου c_1, c_2, c_3 σταθερές, και



$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

να βρεθούν οι αναμενόμενες (ή μέσες) τιμές για τα H, A και B.

iii) Αν κατά τη χρονική αυτή στιγμή γίνει μια μέτρηση της ενέργειας και βρεθεί η τιμή $\hbar\omega$, ποιά θα είναι η κατάσταση του συστήματός μας αμέσως μετά.

2.9. Αν $A = \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 9 \end{pmatrix}$ παριστάνει δυναμική μεταβλητή και $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ καταστατικό διάνυσμα με $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, να υπολογιστεί η μέση τιμή $\langle A^2 \rangle$ με δύο τρόπους:

i) Κατευθείαν $\langle \psi | A^2 | \psi \rangle$

ii) Με το να βρεθούν τα ιδιοδιανύσματα $|a_i\rangle$ και οι ιδιοτιμές a_i του A: $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$, και ν' αναπτυχθεί το $|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle$ συναρτήσει αυτών.

Να συγκριθούν τα δύο αποτελέσματα.

2.10. Αν ένας μοναδιακός τελεστής \hat{U} γραφεί σαν

$$\hat{U} = e^{-i\theta\hat{F}}, \theta \text{ πραγματική παράμετρος,}$$

να δειχθεί ότι ο \hat{F} πρέπει να είναι ερμιτιανός $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$. Για απειροστούς μετασχηματισμούς $\theta \ll 1$, να δειχθεί ότι η μεταβολή σ' ένα καταστατικό διάνυσμα $\text{ket } |\Psi\rangle$ και έναν τελεστή \hat{A} είναι

$$\delta|\Psi\rangle = i\theta\hat{F}|\Psi\rangle$$

$$\delta\hat{A} = i\theta[\hat{F}, \hat{A}]$$

Ο ερμιτιανός τελεστής \hat{F} είναι γνωστός σαν γεννήτορας του μετασχηματισμού.

2.11. Εστω ότι $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ είναι οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις του χαμιλτονιανού τελεστή \hat{H} με ιδιοτιμές E_1 και E_2 , αντίστοιχα.

i) Να δειχθεί ότι οι $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ είναι ορθογώνιες

ii) Για την κατάσταση

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle),$$



να υπολογιστούν η αναμενόμενη (ή μέση) τιμή της ενέργειας $\langle E \rangle$, καθώς επίσης η αβεβαιότητα $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$

iii) Έστω το φυσικό μέγεθος A για το οποίο ισχύει

$$\hat{A} |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle, \quad \hat{A} |\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$$

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές α του \hat{A} και να κατασκευαστούν οι ιδιοκαταστάσεις του.

iv) Για $t = 0$ η κατάσταση του συστήματος είναι

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_-\rangle$$

με ιδιοτιμή $\alpha = -1$. Ποιά είναι η κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ μετά χρόνο t ; Ποιά είναι η πιθανότητα να βρεθεί η ίδια ιδιοτιμή $\alpha = -1$ σε μια νέα μέτρηση τη χρονική στιγμή t ;

v) Στην αναπαράσταση με πίνακες, ποιά είναι η μορφή του \hat{A} και ποιά των $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ και $|\psi_-\rangle$

- 2.12. Χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις Heisenberg, ναδειχθεί ότι για ένα ελεύθερο σωματίδιο μάζας m η ορμή είναι μια σταθερά της κίνησης. Στη συνέχεια, μελετώντας την εξίσωση κίνησης για τη θέση ναδειχθεί η σχέση

$$(\Delta x)_t^2 (\Delta x)_{t=0}^2 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

για τις θέσεις του σωματιδίου τη χρονική στιγμή $t = 0$ και τη χρονική στιγμή t . Να σχολιαστεί η παραπάνω σχέση.

- 2.13. Έστω $|\psi\rangle$ η κατάσταση ενός συστήματος. Ναδειχθεί ότι η αβεβαιότητα ΔE της ενέργειας και η αβεβαιότητα ΔA ενός οποιουδήποτε άλλου παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους ικανοποιούν τη σχέση

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{dt} \right|$$

- 2.14. Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο μάζας m , που κινείται μέσα σε ένα δυναμικό $V(r)$ με χαμιλτονιανή

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

i) Ναδειχθεί ότι

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x}_i^2 \rangle = \frac{1}{m} (\langle \hat{x}_i \hat{p}_i \rangle + \langle \hat{p}_i \hat{x}_i \rangle)$$

ii) Υπολογίζοντας το μεταθέτη $[\hat{p}_i, \hat{H}]$, ναδειχθεί ότι



$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} \rangle = \langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \rangle - \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle = 2\langle T \rangle - \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle,$$

όπου T είναι η κινητική ενέργεια και $-\mathbf{r} \cdot \nabla V$ η δυναμική ενέργεια. Να βρεθεί τότε μηδενίζεται το πρώτο μέλος της παραπάνω εξίσωσης και, συνεπώς, τότε ισχύει η σχέση

$$2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle$$

Η παραπάνω σχέση αποτελεί το κβαντομηχανικό ανάλογο του θεωρήματος virial της κλασικής μηχανικής. Αν το δυναμικό $V(\mathbf{r})$ είναι μια ομογενής συνάρτηση βαθμού k , ναδειχθεί ότι το θεώρημα virial γράφεται

$$2\langle T \rangle = k\langle V \rangle$$

- 2.15. Έστω ότι η χαμιλτονιανή $\hat{H}(\lambda)$, η αντίστοιχη ιδιοτιμή $E(\lambda)$ και η αντίστοιχη κανονικοποιημένη ιδιοκατάσταση $|\psi(\lambda)\rangle$ είναι συναρτήσεις μιας παραμέτρου λ .

i) Να δειχθεί ότι

$$\langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{dE(\lambda)}{d\lambda}$$

Η σχέση αυτή είναι γνωστή σαν θεώρημα Feynman-Hellman.

ii) Για ένα σωματίο που κινείται μέσα σ' ένα κεντρικό δυναμικό $V(|\mathbf{r}|)$ με χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(|\mathbf{r}|) \equiv \hat{T} + \hat{V}$$

να δειχθεί ότι κάτω από το μετασχηματισμό $\mathbf{r} \rightarrow \lambda \mathbf{r}$ η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση Schrödinger παίρνει τη μορφή

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2} \nabla^2 + V(\lambda|\mathbf{r}|) \right] \psi(\lambda\mathbf{r}) = E \psi(\lambda\mathbf{r})$$

iii) Αν το δυναμικό έχει τη μορφή $V = V_0|\mathbf{r}|^k$, να δειχθεί χρησιμοποιώντας τα παραπάνω και θέτοντας στο τέλος του υπολογισμού $\lambda=1$ ότι

$$2\langle T \rangle = k \langle V \rangle$$

Με τον τρόπο αυτό έχουμε μιαν άλλη απόδειξη του θεωρήματος virial.

Να εφαρμοστεί η τελευταία σχέση στο δυναμικό Coulomb $V = -\frac{e^2}{r}$ και στο δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή $V = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$.

- 2.16 Θεωρούμε την κίνηση ενός σωματιδίου μέσα στο γραμμικό δυναμικό $V=fx$, όπου f σταθερά.



i) Να βρεθούν οι εκφράσεις για τις ποσότητες $\frac{d\langle x \rangle}{dt}$ και $\frac{d\langle p \rangle}{dt}$ και ναδειχθεί ότι η αβεβαιότητα $(\Delta p)^2$ δεν μεταβάλλεται με το χρόνο.

ii) Λύνοντας την εξίσωση Schrödinger στην αναπαράσταση ορμής, να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση $\Phi(p,t)$ στο χώρο των ορμών.

2.17 Υποθέτουμε ότι οι τελεστές δύο φυσικών μεγεθών A_1, A_2 δεν μετατίθενται μεταξύ τους $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] \neq 0$, ενώ καθένας μετατίθεται με την χαμιλτονιανή $[\hat{A}_1, \hat{H}] = [\hat{A}_2, \hat{H}] = 0$.

Να δειχθεί ότι οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας $|E_n\rangle$ είναι, εν γένει, εκφυλισμένες.

Υπάρχουν εξαιρέσεις και πότε; Ν' αναφερθεί ένα παράδειγμα.

2.18 Υποθέτουμε ότι ένα κβαντικό σύστημα μπορεί να υπάρξει σε δύο καταστάσεις $|\alpha_0\rangle$ και $|\alpha_1\rangle$, που είναι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις ενός παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους A με ιδιοτιμές 0 και 1, αντίστοιχα.

i) Ο τελεστής ενός δεύτερου παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους B ορίζεται από τις σχέσεις

$$\hat{B}|\alpha_0\rangle = 7|\alpha_0\rangle - 24i|\alpha_1\rangle$$

$$\hat{B}|\alpha_1\rangle = 24i|\alpha_0\rangle - 7|\alpha_1\rangle$$

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές και οι ιδιοκαταστάσεις του B .

ii) Αν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\alpha_0\rangle$, όταν γίνεται μια μέτρηση του B , και αμέσως μετά γίνεται μια μέτρηση του A , να βρεθεί η πιθανότητα η μέτρηση του A να δώσει την τιμή 0.

2.19 Ένα κβαντικό σύστημα μπορεί να βρεθεί σε δύο καταστάσεις $|\alpha_0\rangle$ και $|\alpha_1\rangle$, που αποτελούν ιδιοκαταστάσεις ενός παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους A με ιδιοτιμές 0 και 1, αντίστοιχα. Η χαμιλτονιανή του συστήματος ικανοποιεί τις σχέσεις

$$\hat{H}|\alpha_0\rangle = \alpha|\alpha_0\rangle + \beta|\alpha_1\rangle$$

$$\hat{H}|\alpha_1\rangle = \beta|\alpha_0\rangle + \alpha|\alpha_1\rangle$$

όπου α, β σταθερές (υποθέτουμε ότι τα $|\alpha_0\rangle, |\alpha_1\rangle$ είναι κανονικοποιημένα).

α) Αν για $t=0$ το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\alpha_0\rangle$, να δειχθεί ότι μετά από χρόνο t θα βρεθεί στην κατάσταση



$$e^{-iat/\hbar} [\cos(\beta t/\hbar) |\alpha_0\rangle - i \sin(\beta t/\hbar) |\alpha_1\rangle].$$

β) Το μέγεθος A μετριέται τις χρονικές στιγμές $t = T$ και $t = 2T$. Ποιά είναι η πιθανότητα η δεύτερη μέτρηση να δώσει την ιδιοτιμή 0 ανεξάρτητα από το αποτέλεσμα της πρώτης μέτρησης;

Αξίζει να σημειωθεί ότι σε μια μόνο μέτρηση του μεγέθους A την χρονική στιγμή $t = T$, το σύστημα έχει πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση $|\alpha_1\rangle$ ίση με $\sin^2(\beta T/\hbar)$. Αντίθετα, σε πολλές επαναλαμβανόμενες ανεξάρτητες μετρήσεις με χρονικά βήματα $\Delta t = T/N$, η πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση $|\alpha_1\rangle$ είναι (γινόμενο επιμέρους πιθανοτήτων) $[\sin^2(\beta \Delta t/\hbar)]^N = (\beta T/N\hbar)^{2N} \rightarrow 0$ (για N πολύ μεγάλο). Δηλαδή, το σύστημα θα παραμείνει στην αρχική κατάσταση $|\alpha_0\rangle$. Η ιδιότητα αυτή συνιστά το λεγόμενο κβαντικό φαινόμενο του Ζίνωνα.



ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΙΙ

ΒΑΣΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΤΗΣ ΚΥΜΑΤΙΚΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ SCHRODINGER

Σ' αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε μερικά βασικά παραδείγματα επίλυσης της χρονικά εξαρτημένης κυματικής εξίσωσης Schrödinger (2.232)-(2.233) ή (για στάσιμες καταστάσεις) της χρονικά ανεξάρτητης κυματικής εξίσωσης Schrödinger (2.235)-(2.236). Πολλές φορές θεωρεί κανείς τη μονοδιάστατη αντίστοιχη εξίσωση και αυτό γιατί διάφορες, φυσικά ενδιαφέρουσες, περιπτώσεις είναι ουσιαστικά μονοδιάστες ή, ακόμη, γιατί μερικά περισσότερο περίπλοκα προβλήματα μπορούν ν' αναχθούν στη λύση εξισώσεων όμοιων με τη μονοδιάστατη κυματική εξίσωση. Ειδικότερα, η τριδιάστατη εξίσωση Schrödinger μπορεί ν' αναχθεί σε εξισώσεις χαμηλότερης διάστασης, αν το δυναμικό μπορεί να είναι τέτοιο, που να επιτρέπει να εφαρμοστεί η τεχνική του διαχωρισμού των μεταβλητών για την επίλυση της τριδιάστατης εξίσωσης, που είναι μια διαφορική εξίσωση με μερικές παραγώγους. Αντίθετα, η μονοδιάστατη εξίσωση είναι μια συνηθισμένη διαφορική εξίσωση. Τα παραπάνω περιλαμβάνουν όλα τα παραδείγματα με φυσικό ενδιαφέρον, που θα μας απασχολήσουν εδώ και αργότερα.

3.1. Το ελεύθερο σωματίδιο

Θεωρούμε την τριδιάστατη κυματική εξίσωση Schrödinger σ' ένα χρονικά ανεξάρτητο δυναμικό $V(\mathbf{r})$:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$



Όπως έχουμε ήδη δείξει, ψάχνουμε για λύσεις στάσιμων καταστάσεων

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \psi_E(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (3.2)$$

όπου E η ενέργεια της στάσιμης κατάστασης. Η γενική λύση της (3.1) είναι μια επαλληλία στάσιμων καταστάσεων (3.2). Η $\psi_E(\mathbf{r})$ είναι λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

Υπενθυμίζουμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας, που συνδέεται με την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$, δίνεται από τη σχέση

$$P(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 \quad (3.4)$$

και ότι η αντίστοιχη πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας (πιθανότητα ροής) είναι

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi(\mathbf{r},t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r},t) - \Psi^*(\mathbf{r},t) \nabla \Psi(\mathbf{r},t) \right] \quad (3.5)$$

Είναι προφανές ότι για τις στάσιμες καταστάσεις (3.2) τόσο η P , όσο και η \mathbf{J} , είναι χρονικά ανεξάρτητες ποσότητες.

As θεωρήσουμε πρώτα την πιο απλή περίπτωση, δηλαδή την κίνηση ενός ελεύθερου σωματιδίου μάζας m . Σ' αυτή την περίπτωση έχουμε $V=0$ σε όλο το χώρο (εν γένει $V=V_0$, αλλά χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορούμε να πάρουμε τη σταθερά V_0 να είναι μηδέν, επειδή είναι εύκολο να δούμε ότι πρόσθεση μιας σταθεράς στη δυναμική ενέργεια μετατοπίζει απλά τις ιδιοτιμές της ενέργειας στην εξίσωση Schrödinger κατά το ίδιο ποσό και αφήνει αναλλοίωτες τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_E(\mathbf{r})$).

Για τη μονοδιάστατη περίπτωση, πρώτα, λύνουμε την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) = E \psi_E(x) \quad (3.6)$$

Η γενική λύση της (3.6) είναι βέβαια ο γραμμικός συνδυασμός

$$\psi_E(x) = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar} \quad (3.7)$$

όπου A, B σταθερές και

$$p = (2mE)^{1/2} \quad (3.8)$$

Επειδή $E = \frac{p^2}{2m}$, έχουμε να κάνουμε μ' ένα συνεχές φάσμα ενεργειών, που εκτείνεται από το 0 έως το $+\infty$. Το φάσμα αυτό είναι διπλά εκφυλισμένο, γιατί για κάθε E έχουμε δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $e^{ipx/\hbar}$ και $e^{-ipx/\hbar}$ (αυτό φαίνεται, επίσης, αν λύσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle$ όχι στην αναπαράσταση θέσης, όπως εδώ, αλλά στην αναπαράσταση ορμής, βλ. §2.5)



Αντικαθιστώντας την (3.7) στην (3.2), βρίσκουμε ότι μια στάσιμη κατάσταση ενέργειας $E > 0$ για ένα ελεύθερο σωματίδιο έχει την γενική μορφή

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= (A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar}) e^{-iEt/\hbar} = \\ &= A e^{i(px-Et)/\hbar} + B e^{-i(px+Et)/\hbar}\end{aligned}\quad (3.9)$$

Για να δώσουμε φυσική ερμηνεία στις λύσεις ελεύθερου σωματιδίου (3.9), ας θεωρήσουμε πρώτα την ειδική περίπτωση $B=0$. Η προκύπτουσα λύση

$$\Psi(x,t) = A e^{i(px-Et)/\hbar}\quad (3.10)$$

παριστάνει το επίπεδο κύμα, που συνδέεται με την κίνηση του ελεύθερου σωματιδίου κατά μήκος του άξονα x στην θετική κατεύθυνση με ταχύτητα $v = p/m$ (ίση με την ομαδική ταχύτητα $v_{ομ} = dE/dp$ του κυματοπακέτου, που σχηματίζεται θεωρώντας μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων). Η πυκνότητα πιθανότητας είναι

$$P = |\Psi(x,t)|^2 = |A|^2, \quad (3.11)$$

πράγμα που σημαίνει ότι η θέση του σωματιδίου πάνω στον άξονα x είναι τελείως άγνωστη. Αυτό είναι σε συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg, από την οποία συνάγεται ότι ένα σωματίδιο, που κινείται κατά μήκος του άξονα x με απόλυτα καθορισμένη ορμή p ($\Delta p=0$), δεν μπορεί να εντοπιστεί στο χώρο ($\Delta x=\infty$). Από την άλλη μεριά, η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας είναι

$$J = \frac{p}{m} |A|^2 = v |A|^2 \quad (3.12)$$

και είναι ανεξάρτητη, όχι μόνο από το χρόνο t , αλλά και από τη θέση x (το τελευταίο ισχύει στη μονοδιάστατη περίπτωση και προκύπτει από την εξίσωση συνέχειας (1.102)). Η (3.12) είναι η γνωστή (και από άλλες περιοχές της φυσικής) σχέση ανάμεσα στη ροή, την ταχύτητα και την αντίστοιχη πυκνότητα, που εδώ εφαρμόζεται για ένα ελεύθερο σωματίδιο που κινείται στη θετική κατεύθυνση του άξονα x .

Ανάλογη φυσική ερμηνεία έχουμε για την άλλη ειδική περίπτωση, όπου $A=0$:

$$\Psi(x,t) = B e^{-i(px+Et)/\hbar}$$

$$P = |\Psi(x,t)|^2 = |B|^2$$

$$J = -\frac{p}{m} |B|^2 = -v |B|^2 \quad (3.13)$$

Εδώ, έχουμε να κάνουμε μ' ένα ελεύθερο σωματίδιο, που κινείται κατά μήκος του άξονα x στην αρνητική κατεύθυνση.

Μια άλλη ενδιαφέρουσα ειδική περίπτωση είναι αυτή για την οποία ισχύει $A=B$:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= A(e^{ipx/\hbar} + e^{-ipx/\hbar}) e^{-iEt/\hbar} \\ &= 2A \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) e^{-iEt/\hbar}\end{aligned}\quad (3.14)$$



Η κυματοσυνάρτηση αυτή παριστάνει ένα στάσιμο κύμα και μηδενίζεται στα σημεία

$$x_n = \pm \frac{\hbar}{p} \left(\frac{\pi}{2} + n\pi \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

όπου η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο είναι μηδέν. Αυτό προφανώς είναι αποτέλεσμα συμβολής των δύο τρεχόντων κυμάτων, που κινούνται σε αντίθετες κατευθύνσεις και συμβάλλουν για να δώσουν το στάσιμο κύμα (3.14). Η πυκνότητα πιθανότητας είναι

$$P = 4 |A|^2 \cos^2 \left(\frac{px}{\hbar} \right) \quad (3.16)$$

και μηδενίζεται στα σημεία (3.15), ενώ η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας είναι μηδέν:

$$J = \frac{p}{m} (|A|^2 - |A|^2) = 0 \quad (3.17)$$

Η ποσότητα J γενικά μηδενίζεται κάθε φορά που η $\psi(x)$ είναι πραγματική (ανεξάρτητα από πολλαπλασιαστική σταθερά).

Ανάλογη ερμηνεία έχουμε και για την ειδική περίπτωση, όπου $A=B$:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= A(e^{ipx/\hbar} - e^{-ipx/\hbar}) e^{-iEt/\hbar} \\ &= 2iA \sin \left(\frac{px}{\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Εδώ, έχουμε για την πυκνότητα πιθανότητας

$$P = 4 |A|^2 \sin^2 \left(\frac{px}{\hbar} \right) \quad (3.19)$$

και αυτή μηδενίζεται στις θέσεις $x_n = \pm \frac{\hbar}{p} n\pi$, ($n = 0, 1, 2, \dots$). Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας J είναι ίση με μηδέν.

Η πιο γενική περίπτωση αντιστοιχεί σε $A \neq B$:

$$\Psi(x,t) = (Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.20)$$

για την οποία παίρνουμε τις εκφράσεις

$$P = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ipx/\hbar} + A^* B e^{-2ipx/\hbar}, \quad (3.21)$$

$$J = \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2) = v (|A|^2 - |B|^2). \quad (3.22)$$

Η έκφραση (3.21) παρουσιάζει τα φαινόμενα συμβολής των δύο επίπεδων κυμάτων, ενώ η (3.22) είναι απλά το αλγεβρικό άθροισμα των (3.12) και (3.13).

Θα ήταν χρήσιμο εδώ να υπογραμμίσουμε πως γίνεται ο προσδιορισμός των σταθερών κανονικοποίησης των κυματοσυναρτήσεων. Η κανονικοποίηση γίνεται γενικά με δύο τρόπους:



α) Ο πρώτος τρόπος αφορά σε σωματίδιο μέσα σ' ένα "κουτί" μήκους L , επιβάλλοντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες $\psi(x+L) = \psi(x)$. Ισοδύναμα, θεωρούμε ότι το σωματίδιο κινείται σε μια κλειστή τροχιά μήκους L , όπως στο απλουστευμένο μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε ήδη στα προηγούμενα κεφάλαια. Ο τρόπος αυτός κανονικοποίησης "κουτιού" με περιοδικές συνοριακές συνθήκες οδηγεί (βλ. και §2.5) στο διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών της ορμής και της ενέργειας

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.23)$$

και στην τιμή $L^{1/2}$ για την σταθερά κανονικοποίησης του επίπεδου κύματος (ιδιοσυνάρτησης ορμής):

$$\int_0^L |\psi_p(x)|^2 dx = 1, \quad \psi_p(x) = \frac{1}{L^{1/2}} e^{ipx/\hbar} \quad (3.24)$$

β) Ο άλλος τρόπος είναι η κανονικοποίηση δ-συνάρτησης, που αφορά σε κυματοσυναρτήσεις με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών (βλ. και σχέση (2.91)), δηλαδή

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) dx = \delta(p-p') \quad \psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar} \quad (3.25)$$

Θα τελειώσουμε γενικεύοντας για ένα ελεύθερο σωματίδιο σε τρεις διαστάσεις. Για να λύσουμε την εξίσωση (3.3) με $V=0$ παντού, ψάχνουμε για λύσεις με τη μέθοδο του διαχωρισμού των μεταβλητών γράφοντας

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(x) \psi(y) \psi(z) \quad (3.26)$$

Τότε, η τριδιάστατη εξίσωση Schrödinger (3.3) ανάγεται στις τρεις συνηθισμένες διαφορικές εξισώσεις

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= E_1 \psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \psi(y) &= E_2 \psi(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) &= E_3 \psi(z) \end{aligned} \quad (3.27)$$

με τη συνθήκη

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \quad (3.28)$$



Έτσι, βλέπουμε αμέσως ότι η γενική λύση της τριδιάστατης εξίσωσης Schrödinger είναι μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων, που έχουν τη μορφή

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar}, \quad (3.29)$$

με τη συνθήκη

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} \quad (3.30)$$

Το φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές από 0 έως $+\infty$. Κάθε μια ιδιοτιμή της ενέργειας παρουσιάζει εκφυλισμό άπειρης τάξης, γιατί η συνθήκη (3.30) εξαρτάται μόνο από το μέγεθος και όχι από τον προσανατολισμό του διανύσματος της ορμής.

Η κανονικοποίηση δ-συνάρτησης για το συνεχές φάσμα παίρνει εδώ τη μορφή

$$\int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \quad (3.31)$$

Εάν, αντίθετα, εργαζόμαστε με διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών, τότε μπορούμε να περιορίσουμε τα επίπεδα κύματα (3.29) μέσα σε ένα πεπερασμένο κυβικό "κουτί" όγκου L^3 , εφαρμόζοντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες στα τοιχώματά του. Τότε θα έχουμε

$$\int_0^L |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 dx dy dz = 1,$$

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \quad (3.32)$$

3.2. Γενικά χαρακτηριστικά των λύσεων της κυματικής εξίσωσης Schrödinger

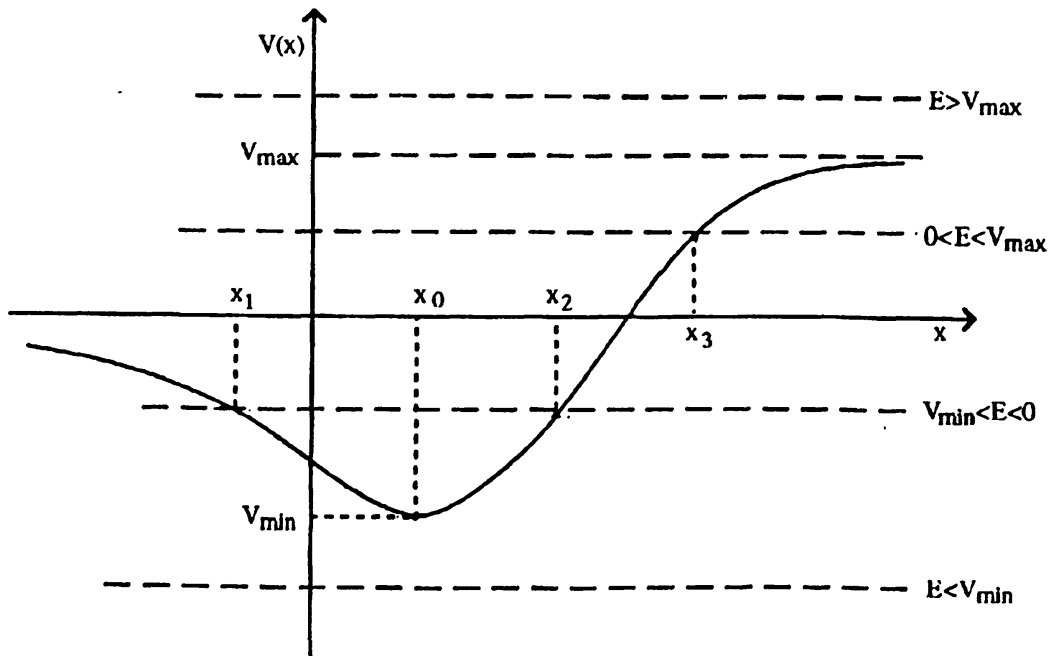
Πριν προχωρήσουμε σε χαρακτηριστικά παραδείγματα λύσεων της κυματικής εξίσωσης Schrödinger, ας δούμε πρώτα (πιο πολύ ποιοτικά) τα γενικά χαρακτηριστικά που παρουσιάζουν οι λύσεις του προβλήματος ιδιοτιμών της ενέργειας μέσα σ' ένα μη μηδενικό δυναμικό.

Για απλότητα, ας θεωρήσουμε τη μονοδιάστατη περίπτωση και ας γράψουμε την εξίσωση Schrödinger με τη μορφή

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi_E(x) \quad (3.33)$$



Η εξίσωση (3.33) είναι μια γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης και, συνεπώς, έχει για κάθε E δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις. Αν το $V(x)$ είναι παντού πεπερασμένο, τότε και η $\nabla(d^2\psi_E(x), dx^2)$ είναι πεπερασμένη και, συνεπώς, η $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ και η $\psi_E(x)$ είναι συνεχείς για κάθε x . Επί πλέον, για να μπορούμε να δώσουμε τη γνωστή φυσική ερμηνεία στην $\psi_E(x)$ (πλάτος πιθανότητας), θα πρέπει οι λύσεις της (3.33) να είναι πεπερασμένες και μονότιμες συναρτήσεις. Γενικά, λοιπόν, οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας $\psi_E(x)$, που είναι λύσεις της (3.33), πρέπει να είναι πεπερασμένες και συνεχείς συναρτήσεις και να έχουν συνεχή παράγωγο σε ολόκληρη την περιοχή από $-\infty$ έως $+\infty$.



Σχ. 3.1 Παράδειγμα μονοδιάστατου δυναμικού.

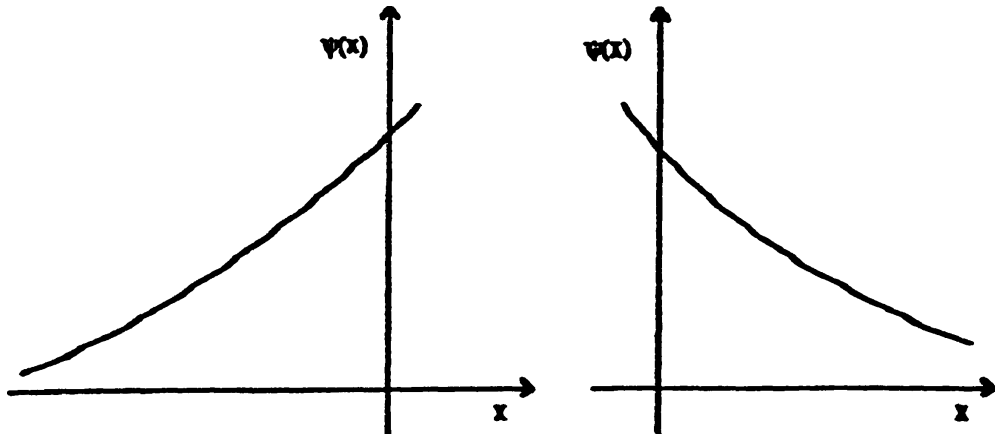
Για να δούμε τα γενικά χαρακτηριστικά τους, αρκεί για E και $V(x)$ πραγματικά να θεωρήσουμε μόνο πραγματικές ιδιοσυναρτήσεις-λύσεις της (3.33) (μια και τότε, αν η $\psi_E(x)$ είναι λύση της (3.33), το ίδιο θα ισχύει και για την $\psi_E^*(x)$, και, συνεπώς, και οι πραγματικές συναρτήσεις $\text{Re}\psi_E(x) = [\psi_E(x) + \psi_E^*(x)]/2$ και $\text{Im}\psi_E(x) = [\psi_E(x) - \psi_E^*(x)]/2i$ θα είναι επίσης λύσεις της (3.33)).

Έτσι, ας θεωρήσουμε το αρκετά κατατοπιστικό παράδειγμα του δυναμικού $V(x)$ του σχήματος 3.1 και ας διακρίνουμε τις παρακάτω τέσσερις διαφορετικές περιπτώσεις ανάλογα με την τιμή της ενέργειας E (σχ. 3.1), που καλύπτουν όλες τις δυνατότητες.



i) $E < V_{\min}$.

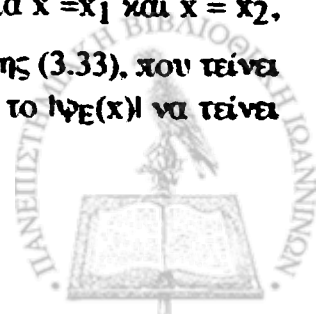
Δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι δεν υπάρχουν φυσικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger (3.33) όταν $E < V(x)$ για κάθε x (επειδή η κινητική ενέργεια $E - V(x)$ είναι τότε αρνητική παντού, δεν υπάρχει σ' αυτή την περίπτωση ούτε κλασική κίνηση). Αυτό φαίνεται εύκολα αν παρατηρήσουμε ότι, επειδή $V(x) - E > 0$ παντού, η $\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2}$, που έχει το πρόσημο της ποσότητας $V(x) - E$, είναι επίσης θετική παντού. Συνεπώς, η $\psi_E(x)$ τοπικά συμπεριφέρεται με τέτοιο τρόπο, ώστε να στρέφει την κυρτή πλευρά της πάντοτε προς τον άξονα x . Έτσι, είναι φανερό ότι λύση $\psi_E(x)$ της (3.33), που να παραμένει πεπερασμένη παντού, δεν μπορεί να βρεθεί. Το καλύτερο που μπορούμε να πετύχουμε είναι να διαλέξουμε, ανάμεσα σε δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις της (3.33), δύο συναρτήσεις $\psi_E(x)$ τέτοιες, που το $|\psi_E(x)|$ να συμπεριφέρεται όπως στο σχήμα 3.2, απειριζόμενο είτε για $x \rightarrow -\infty$, είτε για $x \rightarrow +\infty$.



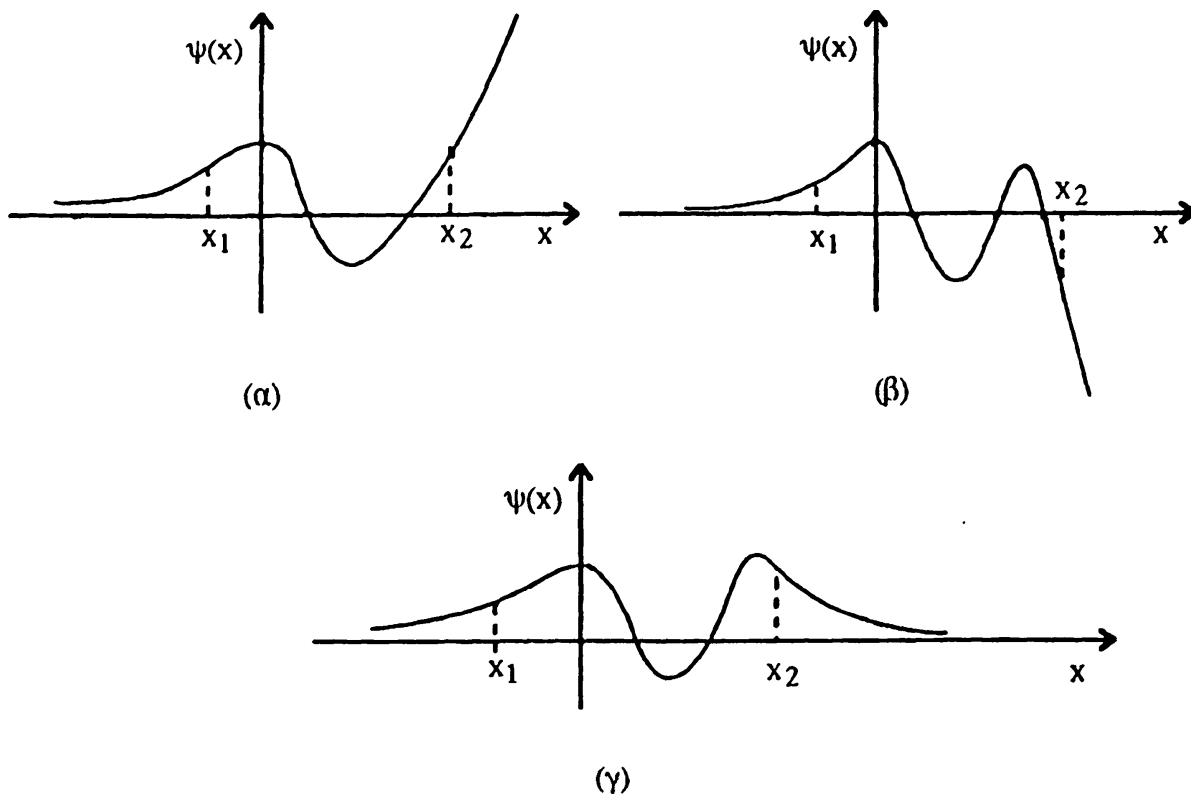
Σχ. 3.2. Φυσικά μη παραδεκτές λύσεις $\psi_E(x)$ για $E < V_{\min}$ ($\psi_E(x) > 0$).

ii) $V_{\min} < E < 0$.

Κλασικά, η κίνηση περιορίζεται ανάμεσα στα σημεία x_1 και x_2 (σχ. 3.1). Κβαντομηχανικά, είναι εύκολο να δούμε ότι φυσικά αποδεκτές λύσεις υπάρχουν μόνο για ορισμένες διάκριτες τιμές της ενέργειας E . Το σχετικό είναι όμοιο με αυτό της προηγούμενης περίπτωσης: Επειδή μεταξύ x_1 και x_2 είναι $V(x) - E < 0$, η $\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2}$ είναι αρνητική και, συνεπώς, η $\psi_E(x)$ συμπεριφέρεται τοπικά με τέτοιο τρόπο, ώστε να στρέφει την κοίλη πλευρά της πάντοτε προς τον άξονα x . Έτσι, για $x_1 < x < x_2$ η $\psi_E(x)$ παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά. Απεναντίας, για $x < x_1$ ή για $x > x_2$ έχουμε τη συμπεριφορά της προηγούμενης περίπτωσης i). Ικανοποιώντας τώρα τη συνθήκη συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στα σημεία $x = x_1$ και $x = x_2$, βλέπουμε ότι, εν γένει, για δοθείσα τιμή της E μια λύση $\psi_E(x)$ της (3.33), που τείνει στο μηδέν για $x \rightarrow -\infty$, θα συμπεριφέρεται στο $x \rightarrow +\infty$ έτσι ώστε το $|\psi_E(x)|$ να τείνει



εκεί στο άπειρο (σχ. 3.3(α) και 3.3(β)). Μια τέτοια λύση είναι βέβαια φυσικά απαράδεκτη. Επειδή, όμως, η $\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2}$ εξαρτάται από την ενέργεια E , θα μπορεί να υπάρχουν ορισμένες διάκριτες τιμές της E , για τις οποίες η λύση στο διάστημα $x_1 < x < x_2$ να ενώνεται ομαλά με τις λύσεις στις περιοχές $x < x_1$ και $x > x_2$, έτσι ώστε η $\psi_E(x)$ να τείνει στο μηδέν για $x \rightarrow \pm\infty$ (σχ.3.3(γ)). Τέτοιες λύσεις αποτελούν φυσικά αποδεκτές ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας με διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών (πεπερασμένο ή άπειρο). Επειδή για τη φυσικά παραδεκτή λύση ισχύει $P(x)=|\psi_E(x)|^2 \rightarrow 0$ για $|x| \rightarrow \infty$, οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές λέμε ότι παριστάνουν δέσμιες καταστάσεις και οι αντίστοιχες ενέργειες λέγονται ενέργειες δέσμιων καταστάσεων.



Σχ. 3.3 (α) και (β) φυσικά απαράδεκτες λύσεις, (γ) φυσικά παραδεκτή λύση. Η (α) αντιστοιχεί σ' ενέργεια λίγο μικρότερη, η (β) σ' ενέργεια λίγο μεγαλύτερη και η (γ) σ' ενέργεια ίση με την ενέργεια μιας δέσμιας κατάστασης.

Αξίζει εδώ να τονίσουμε ότι, σε μια διάσταση, το διάκριτο φάσμα ενεργειών δέσμιων καταστάσεων είναι μη εκφυλισμένο. Αυτό μπορούμε να το δείξουμε ως εξής: Ας υποθέσουμε ότι $\psi_1(x), \psi_2(x)$ είναι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις της (3.33), που αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή E . Τότε θα έχουμε (ο τόνος συμβολίζει παραγωγή)

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} (V-E) = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} \quad (3.34)$$



και, συνεπώς,

$$\psi_1(x) \psi_2'(x) - \psi_2(x) \psi_1'(x) = (\psi_1(x) \psi_2'(x))' - (\psi_2(x) \psi_1'(x))' = 0 \quad (3.35)$$

Ολοκληρώνοντας έχουμε

$$\psi_1(x) \psi_2'(x) - \psi_2(x) \psi_1'(x) = \text{σταθ.} \quad (3.36)$$

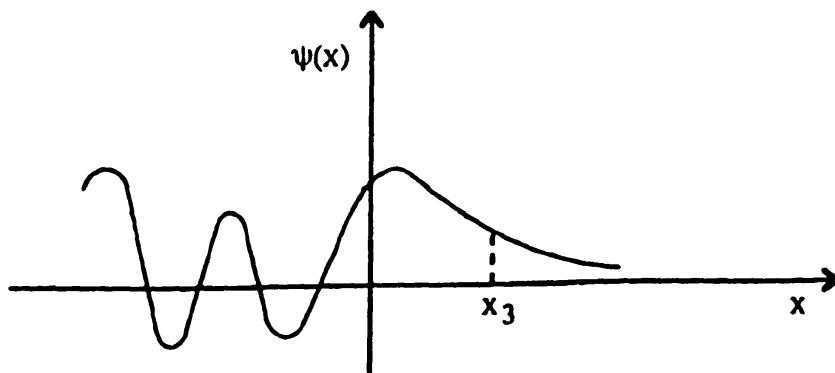
Όμως η σταθερά θα πρέπει να είναι εδώ ίση με μηδέν, μια και έχουμε να κάνουμε με δέσμιες καταστάσεις ($\psi(x) \rightarrow 0$ για $x \rightarrow \infty$). Έτσι, θα ισχύει ότι η ορίζουσα Wronski για τις δύο λύσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ θα είναι μηδέν:

$$\begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.37)$$

Συνεπώς, οι δύο λύσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ δεν μπορεί να είναι γραμμικά ανεξάρτητες μεταξύ τους, όπως υποθέσαμε. Θα πρέπει, όμως, να σημειώσουμε ότι τα παραπάνω ισχύουν μόνο για μια διάσταση και ότι σε περισσότερες από μια διαστάσεις το φάσμα μπορεί να είναι εκφυλισμένο, όπως θα δούμε σε παραδείγματα στη συνέχεια.

iii) $0 < E < V_{\max}$

Κλασικά, η κίνηση περιορίζεται στην περιοχή $x < x_3$ (σχ.3.1). Κβαντομηχανικά, επαναλαμβάνοντας τα ίδια επιχειρήματα, όπως πριν, και ικανοποιώντας τη συνθήκη συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στο σημείο $x = x_3$, βλέπουμε ότι μπορούμε να ενώσουμε ομαλά την ταλαντωτική συμπεριφορά της λύσης για $x < x_3$ με την ασυμπτωτικά μηδενιζόμενη μορφή για $x > x_3$, όπως στο σχήμα 3.4.



Σχ. 3.4. Τυπική ιδιοσυνάρτηση για $0 < E < V_{\max}$

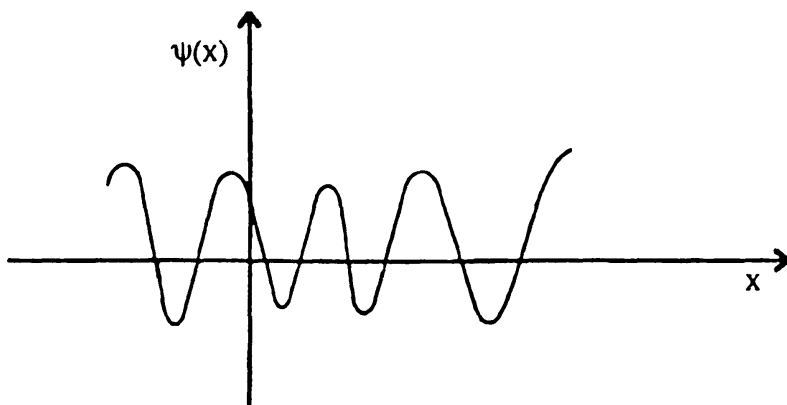
Αυτή η "ομαλή ένωση" μπορεί να γίνει για κάθε τιμή της ενέργειας μεταξύ 0 και V_{\max} και, συνεπώς, το φάσμα είναι συνεχές και μη εκφυλισμένο. Κυματοσυναρτήσεις της μορφής του σχήματος 3.4, που είναι μη μηδενικές και



πεπερασμένες στο άπειρο (εδώ στο $x \rightarrow \infty$) λέμε ότι αντιστοιχούν σε καταστάσεις σκέδασης.

iv) $E > V_{\max}$

Εδώ η κινητική ενέργεια $E - V(x)$ είναι θετική παντού και, συνεπώς, κλασικά η κίνηση μπορεί να γίνει και προς τις δύο κατευθύνσεις. Κβαντομηχανικά, έχουμε επίσης δύο γραμμικά ανεξάρτητες ταλαντωτικές λύσεις της (3.33), που πραγματοποιούνται για κάθε τιμή της ενέργειας (φάσμα συνεχές και διπλά εκφυλισμένο). Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις είναι μη μηδενικές και πεπερασμένες για $|x| \rightarrow \infty$ και περιγράφουν καταστάσεις σκέδασης για όλη την περιοχή (σχ. 3.5).



Σχ. 3.5. Τυπική ιδιοσυναρτηση για $E > V_{\max}$

Συνοψίζοντας, μπορούμε να πούμε ότι φυσικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger (3.33), δηλαδή φυσικά αποδεκτές ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, αντιστοιχούν είτε σε δέσμιες καταστάσεις, όταν μηδενίζονται στο άπειρο, είτε σε καταστάσεις σκέδασης, όταν είναι πεπερασμένες στο άπειρο. Το αντίστοιχο ενεργειακό φάσμα ιδιοτιμών E είναι διάκριτο για δέσμιες καταστάσεις (κβάντωση ενεργειακών επιπέδων) και συνεχές για καταστάσεις σκέδασης. Σ' ένα διάκριτο φάσμα, το χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο αποτελεί τη βασική κατάσταση του συστήματος, ενώ όλα τα ανώτερα ενεργειακά επίπεδα αποτελούν τις διεγερμένες καταστάσεις.

Τελειώνοντας, θα πρέπει να τονίσουμε δύο σημεία, χρήσιμα για τη συνέχεια. Το πρώτο είναι ότι μπορούμε εύκολα να φθάσουμε σ' όμοια συμπεράσματα για την περίπτωση ενός σωματιδίου, που κινείται σε τρεις διαστάσεις μέσα σ' ένα δυναμικό $V(\mathbf{r})$. Το δεύτερο αφορά στην περίπτωση, όπου το δυναμικό γίνεται άπειρο σε κάποιο σημείο. Σ' αυτή την περίπτωση, λόγω της άπειρης ασυνέχειας του $V(\mathbf{r})$, οι συνοριακές συνθήκες τροποποιούνται: το μόνο που θ' απαιτούμε είναι η $\psi_E(\mathbf{r})$ να είναι μηδέν εκεί όπου $V = \infty$, ενώ η πρώτη παράγωγός της θα παραμένει απροσδιόριστη εκεί, λόγω ακριβώς της άπειρης ασυνέχειας του δυναμικού.



και, συνεπώς,

$$\psi_1(x) \psi_2'(x) - \psi_2(x) \psi_1'(x) = (\psi_1(x) \psi_2'(x))' - (\psi_2(x) \psi_1'(x))' = 0 \quad (3.35)$$

Ολοκληρώνοντας έχουμε

$$\psi_1(x) \psi_2'(x) - \psi_2(x) \psi_1'(x) = \text{σταθ.} \quad (3.36)$$

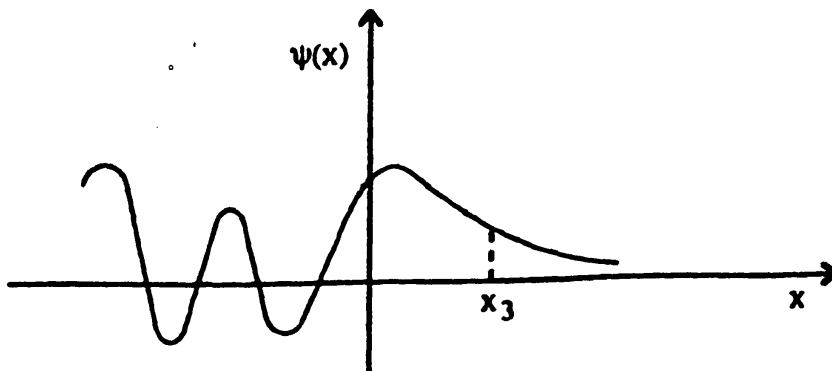
Όμως η σταθερά θα πρέπει να είναι εδώ ίση με μηδέν, μια και έχουμε να κάνουμε με δέσιμες καταστάσεις ($\psi(x) \rightarrow 0$ για $x \rightarrow \infty$). Έτσι, θα ισχύει ότι η ορίζουσα Wronski για τις δύο λύσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ θα είναι μηδέν:

$$\begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.37)$$

Συνεπώς, οι δύο λύσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ δεν μπορεί να είναι γραμμικά ανεξάρτητες μεταξύ τους, όπως υποθέσαμε. Θα πρέπει, όμως, να σημειώσουμε ότι τα παραπάνω ισχύουν μόνο για μια διάσταση και ότι σε περισσότερες από μια διαστάσεις το φάσμα μπορεί να είναι εκφυλισμένο, όπως θα δούμε σε παραδείγματα στη συνέχεια.

iii) $0 < E < V_{\max}$

Κλασικά, η κίνηση περιορίζεται στην περιοχή $x < x_3$ (σχ.3.1). Κβαντομηχανικά, επαναλαμβάνοντας τα ίδια επιχειρήματα, όπως πριν, και ικανοποιώντας τη συνθήκη συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στο σημείο $x = x_3$, βλέπουμε ότι μπορούμε να ενώσουμε ομαλά την ταλαντωτική συμπεριφορά της λύσης για $x < x_3$ με την ασυμπτωτικά μηδενιζόμενη μορφή για $x > x_3$, όπως στο σχήμα 3.4.



Σχ. 3.4. Τυπική ιδιοσυνάρτηση για $0 < E < V_{\max}$

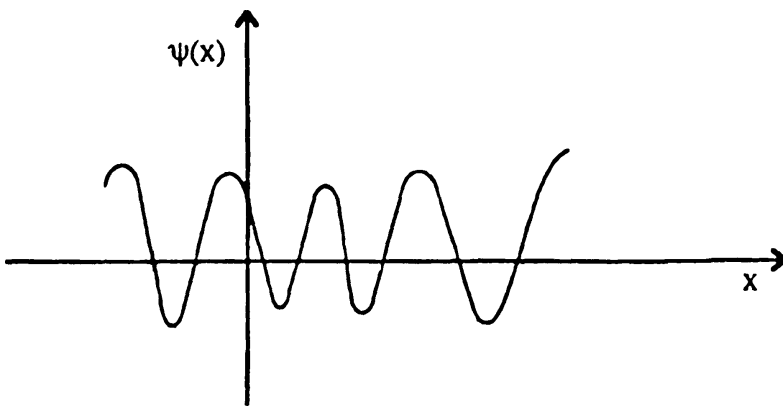
Αυτή η "ομαλή ένωση" μπορεί να γίνει για κάθε τιμή της ενέργειας μεταξύ 0 και V_{\max} και, συνεπώς, το φάσμα είναι συνεχές και μη εκφυλισμένο. Κυματοσυναρτήσεις της μορφής του σχήματος 3.4, που είναι μη μηδενικές και



πεπερασμένες στο άπειρο (εδώ στο $x \rightarrow \infty$) λέμε ότι αντιστοιχούν σε καταστάσεις σκέδασης.

iv) $E > V_{\max}$

Εδώ η κινητική ενέργεια $E - V(x)$ είναι θετική παντού και, συνεπώς, κλασικά η κίνηση μπορεί να γίνει και προς τις δύο κατευθύνσεις. Κβαντομηχανικά, έχουμε επίσης δύο γραμμικά ανεξάρτητες ταλαντωτικές λύσεις της (3.33), που πραγματοποιούνται για κάθε τιμή της ενέργειας (φάσμα συνεχές και διπλά εκφυλισμένο). Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις είναι μη μηδενικές και πεπερασμένες για $|x| \rightarrow \infty$ και περιγράφουν καταστάσεις σκέδασης για όλη την περιοχή (σχ. 3.5).



Σχ. 3.5. Τυπική ιδιοσυνάρτηση για $E > V_{\max}$

Συνοψίζοντας, μπορούμε να πούμε ότι φυσικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger (3.33), δηλαδή φυσικά αποδεκτές ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, αντιστοιχούν είτε σε δέσμιες καταστάσεις, όταν μηδενίζονται στο άπειρο, είτε σε καταστάσεις σκέδασης, όταν είναι πεπερασμένες στο άπειρο. Το αντίστοιχο ενεργειακό φάσμα ιδιοτιμών E είναι διάκριτο για δέσμιες καταστάσεις (κβάντωση ενεργειακών επιπέδων) και συνεχές για καταστάσεις σκέδασης. Σ' ένα διάκριτο φάσμα, το χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο αποτελεί τη βασική κατάσταση του συστήματος, ενώ όλα τα ανώτερα ενεργειακά επίπεδα αποτελούν τις διεγερμένες καταστάσεις.

Τελειώνοντας, θα πρέπει να τονίσουμε δύο σημεία, χρήσιμα για τη συνέχεια. Το πρώτο είναι ότι μπορούμε εύκολα να φθάσουμε σ' όμοια συμπεράσματα για την περίπτωση ενός σωματιδίου, που κινείται σε τρεις διαστάσεις μέσα σ' ένα δυναμικό $V(\mathbf{r})$. Το δεύτερο αφορά στην περίπτωση, όπου το δυναμικό γίνεται άπειρο σε κάποιο σημείο. Σ' αυτή την περίπτωση, λόγω της άπειρης ασυνέχειας του $V(\mathbf{r})$, οι συνοριακές συνθήκες τροποποιούνται: το μόνο που θ' απαιτούμε είναι η $\psi_E(\mathbf{r})$ να είναι μηδέν εκεί όπου $V = \infty$, ενώ η πρώτη παράγωγός της θα παραμένει απροσδιόριστη εκεί, λόγω ακριβώς της άπειρης ασυνέχειας του δυναμικού.



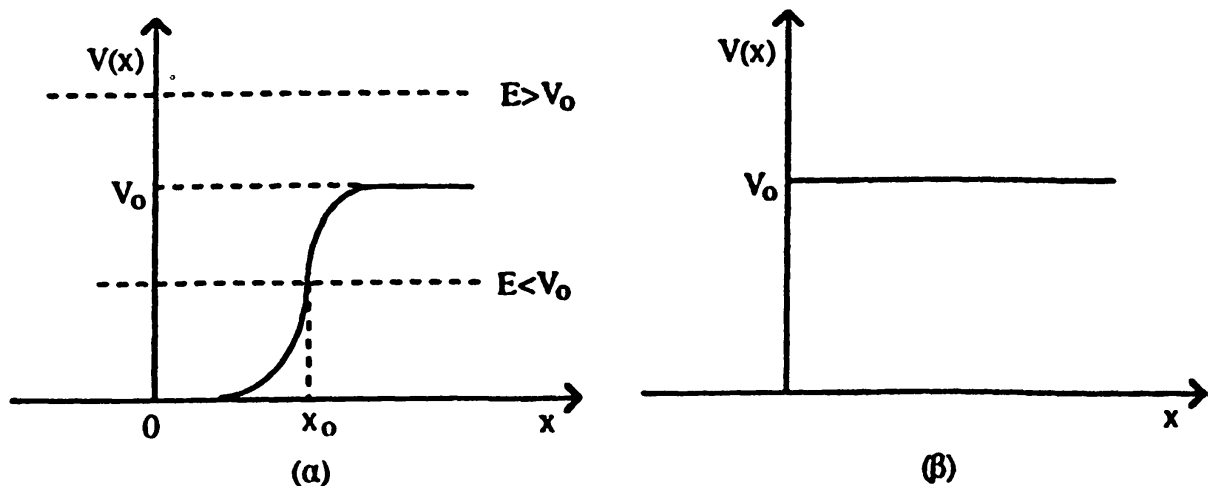
3.3. Βήμα (σκαλοπάτι) δυναμικού

Το παράδειγμα ενός ομαλά μεταβαλλόμενου δυναμικού, που παρουσιάζει άπειρο εύρος (σχ. 3.6(α)), θα είναι το πρώτο που θα μας απασχολήσει. Κλασικά, για ενέργεια του σωματιδίου $E < V_0$, όπου V_0 το τελικό ύψος του δυναμικού, το σωματίδιο θα ανακλαστεί στο σημείο x_0 , όπου μηδενίζεται η κινητική του ενέργεια και η περιοχή $x > x_0$ θα είναι απαγορευμένη γι' αυτό. Για $E > V_0$, το σωματίδιο ποτέ δεν ανακλάται, αλλά διέρχεται πάντα.

Κβαντομηχανικά, θα δούμε ότι η εικόνα είναι διαφορετική. Για να λύσουμε την κυματική εξίσωση Schrödinger (3.33) και να βρούμε την $\psi_E(x)$, έτσι ώστε η ολική κυματοσυνάρτηση να μπορεί να γραφεί $\Psi(x,t) = \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$ (στάσιμη κατάσταση), απλοποιούμε το έργο της επίλυσης αντικαθιστώντας το ομαλά μεταβαλλόμενο δυναμικό του σχ. 3.6 (α) με το βήμα (σκαλοπάτι) δυναμικού του σχ. 3.6 (β):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \quad (3.38)$$

Το δυναμικό (3.38) είναι το πιο απλό παράδειγμα ενός τμηματικά σταθεροῦ δυναμικού. Για την επίλυση του προβλήματος αυτού, υπενθυμίζουμε ότι δεν υπάρχουν φυσικά αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger (3.33) για $E < 0$. Συνεπώς, στη συνέχεια θα μελετήσουμε τη λύση του προβλήματος για τις δύο περιπτώσεις: $0 < E < V_0$ και $E > V_0$.



Σχ. 3.6. (α) Ομαλά μεταβαλλόμενο δυναμικό άπειρου εύρους. (β) Βήμα (σκαλοπάτι) δυναμικού πεπερασμένου ύψους V_0



Περίπτωση 1: $0 < E < V_0$

Έχουμε, για τις δύο περιοχές $x < 0$ και $x > 0$, τις εξισώσεις

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad p = \sqrt{2mE}, \quad x < 0 \quad (3.39)$$

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} - \frac{q^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad q = \sqrt{2m(V_0 - E)}, \quad x > 0 \quad (3.40)$$

Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων είναι, αντίστοιχα,

$$\psi_E(x) = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar}, \quad x < 0 \quad (3.41)$$

$$\psi_E(x) = C e^{qx/\hbar} + D e^{-qx/\hbar}, \quad x > 0 \quad (3.42)$$

Η λύση (3.42) για να είναι φυσικά αποδεκτή πρέπει να παραμένει πεπερασμένη για $x \rightarrow +\infty$. Συνεπώς, πρέπει να εκλέξουμε $C=0$. Θα έχουμε λοιπόν

$$\psi_E(x) = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar}, \quad x < 0 \quad (3.43)$$

$$\psi_E(x) = D e^{-qx/\hbar}, \quad x > 0 \quad (3.44)$$

Για να ενώσουμε ομαλά τις λύσεις στις δύο περιοχές $x < 0$ και $x > 0$, επιβάλλουμε τη συνέχεια της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στο σημείο $x=0$ (όπου το δυναμικό παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια), οπότε βρίσκουμε τις σχέσεις

$$\begin{aligned} A + B &= D \\ i p(A - B) &= -q D \end{aligned} \quad (3.45)$$

απ' όπου συνάγουμε ότι

$$A = \frac{1+i\frac{q}{p}}{2} D, \quad B = \frac{1-i\frac{q}{p}}{2} D \quad (3.46)$$

Με τις σχέσεις (3.46) για τους συντελεστές A, B (συναρτήσει του D) η ταλαντωτική λύση (3.43) ενώνεται ομαλά με την εκθετική (3.44) για όλες τις τιμές της ενέργειας E μεταξύ 0 και V_0 και, συνεπώς, έχουμε να κάνουμε με συνεχές φάσμα.

Λύνοντας ως προς B/A βρίσκουμε ότι

$$\frac{B}{A} = \frac{1-i\frac{q}{p}}{1+i\frac{q}{p}} = \frac{1-i(\frac{V_0}{E}-1)^{1/2}}{1+i(\frac{V_0}{E}-1)^{1/2}} \quad (3.47)$$

Επειδή το B/A έχει μέτρο μονάδα, μπορούμε να γράψουμε



$$\frac{B}{A} = e^{i\alpha}, \quad \alpha = 2 \tan^{-1} \left[- \left(\frac{V_0}{E} - 1 \right)^{1/2} \right] \quad (3.48)$$

οπότε θα είναι και

$$\frac{D}{A} = \frac{2}{1+i\frac{q}{p}} = \frac{2}{1+i\left(\frac{V_0}{E}-1\right)^{1/2}} = 1 + e^{i\alpha} \quad (3.49)$$

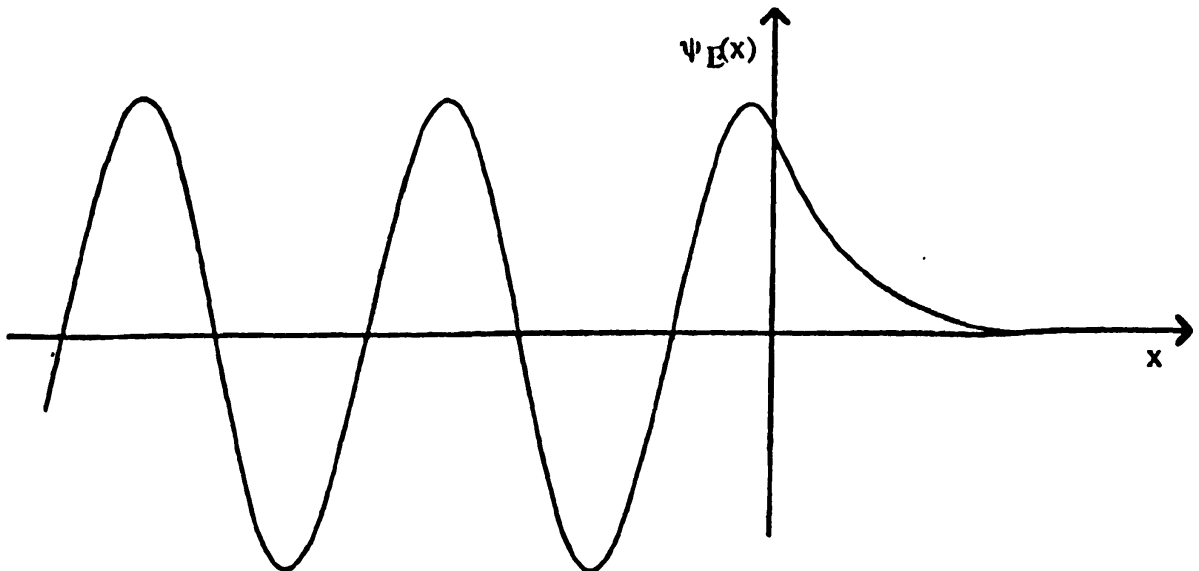
Έτσι, η τελική μορφή των ιδιοσυναρτήσεων μπορεί να γραφεί

$$\psi_E(x) = \begin{cases} 2Ae^{i\alpha/2} \cos\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{\alpha}{2}\right) & x < 0 \\ 2Ae^{i\alpha/2} \cos\frac{\alpha}{2} e^{-qx/\hbar} & x > 0 \end{cases} \quad (3.50)$$

Η γραφική τους παράσταση φαίνεται στο σχ. 3.7

Η φυσική ερμηνεία των παραπάνω αποτελεσμάτων είναι απλή. Πρώτα, για την περιοχή $x < 0$ έχουμε για την πυκνότητα πιθανότητας και για την πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας τις εκφράσεις

$$P(x) = 4|A|^2 \cos^2\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{\alpha}{2}\right) \quad (3.51)$$



Σχ. 3.7 Η ιδιοσυνάρτηση (3.50)

$$J = \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2) = v(|A|^2 - |B|^2) \quad (3.52)$$

Η έκφραση (3.51) δείχνει μια ταλαντωτική συμπεριφορά για την πυκνότητα πιθανότητας και είναι βέβαια αποτέλεσμα συμβολής του προσπίπτοντος $Ae^{ipx/\hbar}$ και του ανακλώμενου $Be^{-ipx/\hbar}$ επίπεδου κύματος. Μπορούμε να ορίσουμε σχετικά



το συντελεστή ανάκλασης R σαν το λόγο της πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας του ανακλώμενου κύματος προς την αντίστοιχη ποσότητα του προσπίπτοντος κύματος:

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (3.53)$$

Από την (3.48) έχουμε ότι $|A|^2 = |B|^2$, έτσι είναι $R = 1$ και αυτό σημαίνει ότι έχουμε ολική ανάκλαση. Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με την κλασική μηχανική, σύμφωνα με την οποία για $E < V_0$ έχουμε πράγματι πλήρη ανάκλαση. Παράλληλα έχουμε $J = 0$. Αυτό το τελευταίο ισχύει και για την περιοχή $x > 0$. Έτσι, υπάρχει συνολικά μηδενική πιθανότητα ροής προς τη μια ή την άλλη κατεύθυνση για την κατάσταση, που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση (3.50). Αυτό οφείλεται βέβαια στο ότι η κυματοσυνάρτηση (3.50) είναι πραγματική (ανεξάρτητα από το σταθερό συντελεστή της).

Για την περιοχή $x > 0$ το ενδιαφέρον φαινόμενο είναι ότι η πυκνότητα πιθανότητας

$$P(x) = |D|^2 e^{-2qx/\hbar} \quad (3.54)$$

είναι μη μηδενική. Αν και η έκφραση (3.54) ελαττώνεται γρήγορα όσο αυξάνεται το x , υπάρχει παρ' όλα αυτά μια πεπερασμένη πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή $x > 0$. Αυτό το καθαρά κβαντομηχανικό φαινόμενο της διείσδυσης σε φράγμα δυναμικού έχει μεγάλη φυσική σημασία σε πολλές περιπτώσεις και θα το δούμε ξανά στα επόμενα. Στο παράδειγμα που συζητάμε εδώ, πάντως, δεν μπορεί να επιβεβαιωθεί πειραματικά, μια και η έκφραση (3.54) συνεπάγεται αβεβαιότητα στην ενέργεια ίση με

$$\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{\Delta x} \right)^2 \approx \frac{1}{2m} q^2 = V_0 - E \quad (3.55)$$

και δεν μπορούμε πια να μιλάμε για ενέργεια E του σωματίδιου μικρότερη από V_0 .

Παρουσιάζει ενδιαφέρον να δούμε την περίπτωση ενός δυναμικού άπειρου ύψους $V_0 \rightarrow +\infty$. Τότε έχουμε $q \rightarrow +\infty$, $B = -A$ και $D = 0$, και η κυματοσυνάρτηση παίρνει τη μορφή

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A(e^{ipx/\hbar} - e^{-ipx/\hbar}) & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}, \quad (3.56)$$

που είναι σύμφωνη με τις παρατηρήσεις που κάναμε στο τέλος της προηγούμενης παραγράφου.

Περίπτωση 2: $E > V_0$

Σ' αυτή την περίπτωση έχουμε τις εξισώσεις



$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad p = \sqrt{2mE}, \quad x < 0 \quad (3.57)$$

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{q'^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad q' = \sqrt{2m(E-V_0)}, \quad x > 0 \quad (3.58)$$

Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων είναι

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ Ce^{iq'x/\hbar} + De^{-iq'x/\hbar} & x > 0 \end{cases} \quad (3.59)$$

Και στις δύο περιοχές του χώρου, οι λύσεις έχουν ταλαντωτική μορφή, όπως αναμένεται ($E > V_0$).

Για να μελετήσουμε παραπέρα το πρόβλημά μας, πρέπει να προσδιορίσουμε τη φυσική κατάσταση του συστήματός μας. Έτσι, ας υποθέσουμε ότι το σωματίδιο προσπίπτει πάνω στο βήμα δυναμικού από αριστερά. Αυτό σημαίνει ότι, επειδή δεν υπάρχει τίποτα για μεγάλα x που να προκαλεί ανάκλαση, θα πρέπει να θέσουμε $D = 0$. Η κυματοσυνάρτηση $\psi_E(x)$ παίρνει τότε τη μορφή

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ Ce^{iq'x/\hbar} & x > 0 \end{cases} \quad (3.60)$$

Εφαρμόζοντας τη συνθήκη συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στο σημείο $x = 0$, παίρνουμε τις σχέσεις

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ p(A - B) &= q' C, \end{aligned} \quad (3.61)$$

απ' όπου έχουμε

$$\frac{B}{A} = \frac{p - q'}{p + q'}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2p}{p + q'} \quad (3.62)$$

Με αυτές τις σχέσεις, οι λύσεις στις δύο περιοχές $x < 0$ και $x > 0$ μπορούν να ενωθούν ομαλά για κάθε τιμή της ενέργειας $E > V_0$ και, συνεπώς, το φάσμα είναι και εδώ συνεχές.

Για την πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας βρίσκουμε

$$J = \begin{cases} \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2) = v(|A|^2 - |B|^2) & x < 0 \\ \frac{q'}{m} |C|^2 = v' |C|^2 & x > 0 \end{cases} \quad (3.63)$$

Από τις σχέσεις (3.62) προκύπτει ότι

$$v(|A|^2 - |B|^2) = v' |C|^2 \quad (3.64)$$



και, συνεπώς, η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας έχει την ίδια σταθερή τιμή παντού, όπως περιμένουμε για μια μοναδιάστατη στάσιμη κατάσταση. Σε αντίθεση πάντως με την προηγούμενη περίπτωση $E < V_0$, εδώ έχουμε σταθερή μη μηδενική ροή.

Για το συντελεστή ανάκλασης R , που είναι ο λόγος της ανακλώμενης προς την προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας, έχουμε

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(p-q')^2}{(p+q')^2} = \frac{[1-(1-\frac{V_0}{E})^{1/2}]^2}{[1+(1-\frac{V_0}{E})^{1/2}]^2} \quad (3.65)$$

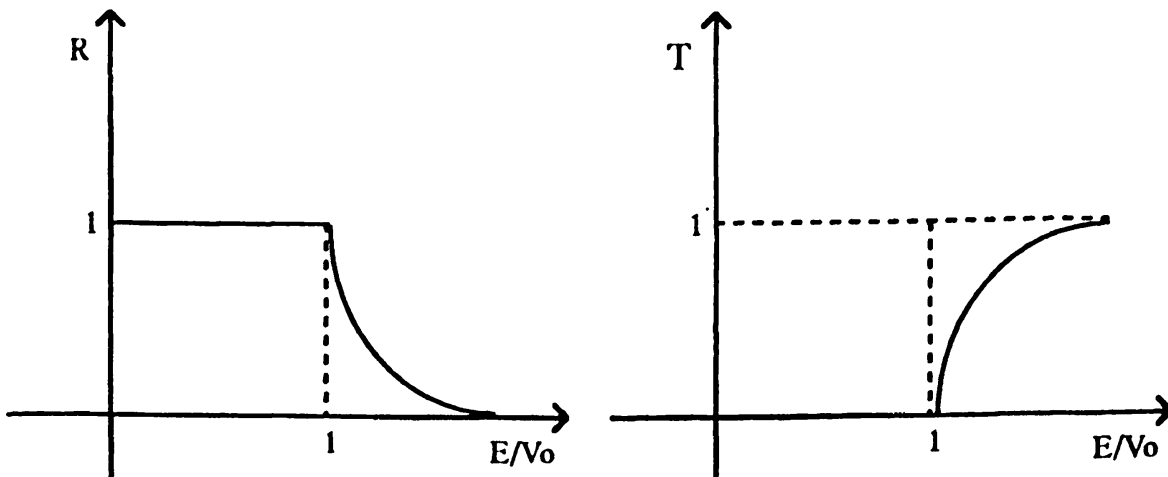
Παράλληλα, μπορούμε να ορίσουμε το συντελεστή διέλευσης T σαν το λόγο της διερχόμενης πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας προς την προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας. Έτσι είναι

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{4pq'}{(p+q')^2} = \frac{4(1-\frac{V_0}{E})^{1/2}}{[1+(1-\frac{V_0}{E})^{1/2}]^2} \quad (3.66)$$

Τόσο ο R , όσο και ο T , εξαρτώνται μόνο από το λόγο $\frac{V_0}{E}$, συνδέονται δε με τη σχέση

$$R + T = 1 \quad (3.67)$$

Το σχ. 3.8 δείχνει την εξάρτησή τους από το λόγο E/V_0 .



Σχ. 3.8 Οι συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T , σαν συναρτήσεις του λόγου E/V_0 .

Η τελευταία σχέση (3.67) εκφράζει τη διατήρηση της συνολικής πιθανότητας ροής. Το σωματίδιο που προσπίπτει πάνω στο βήμα δυναμικού δεν μοιράζεται βέβαια σε δύο μέρη, μια και κάθε φορά που ανιχνεύεται

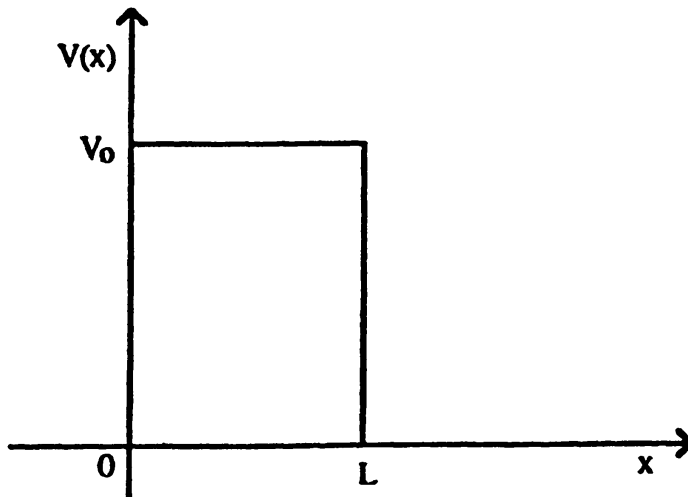


πειραματικά, ανιχνεύεται ολόκληρο. Αλλά, το σωματίδιο είτε θα ανακλαστεί είτε θα περάσει το βήμα δυναμικού και η πιθανότητα να ανακλαστεί δίνεται από το R , ενώ η πιθανότητα να περάσει από το T . Το γεγονός ότι κβαντομηχανικά ανάκλαση μπορεί να συμβεί ακόμη και για $E > V_0$, οφείλεται στο συμπληρωματικό κυματικό χαρακτήρα του σωματιδίου.

3.4. Φράγμα δυναμικού

Το δεύτερο παράδειγμα αφορά στην κίνηση ενός σωματιδίου μέσα σ' ένα δυναμικό $V(x)$, που έχει τη μορφή ενός ορθογώνιου φράγματος δυναμικού (σχ.3.9) ύψους $V_0 > 0$ και εύρους L

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < L \\ 0 & x > L \end{cases} \quad (3.68)$$



Σχ.3.9. Ορθογώνιο φράγμα δυναμικού.

Κλασικά, ένα σωματίδιο ενέργειας E , που πέφτει πάνω στο φράγμα, θα ανακλαστεί για $E < V_0$, ενώ θα περάσει για $E > V_0$. Κβαντομηχανικά, όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα, θα δούμε ότι η εικόνα είναι διαφορετική. Ειδικότερα, θα δούμε ότι ανάκλαση και διέλευση συμβαίνουν πάντα με πεπερασμένη πιθανότητα για τις περισσότερες τιμές της ενέργειας του σωματιδίου.

Το πρόβλημά μας είναι ένα μονοδιάστατο πρόβλημα σκέδασης, που προκαλείται από ένα δυναμικό πεπερασμένου εύρους. Για τις εξωτερικές περιοχές $x < 0$ και $x > L$, η λύση της εξίσωσης Schrödinger (3.33) είναι προφανώς

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ Ce^{ipx/\hbar} + De^{-ipx/\hbar} & x > L \end{cases} \quad (3.69)$$



όπου $p = \sqrt{2mE}$. Για να προχωρήσουμε παραπέρα στη μελέτη του προβλήματος, θα υποθέσουμε ότι το σωματίδιο πέφτει πάνω στο φράγμα δυναμικού από αριστερά. Έτσι, θα θέσουμε $D = 0$ και η κυματοσυνάρτηση στις εξωτερικές περιοχές θα έχει τη μορφή

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ Ce^{ipx/\hbar} & x > L \end{cases} \quad (3.70)$$

Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας, που αντιστοιχεί στην (3.70), είναι

$$J = \begin{cases} v(|A|^2 - |B|^2) & x < 0 \\ v|C|^2 & x > L \end{cases}, \quad (3.71)$$

ενώ οι συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T δίνονται από τις εκφράσεις

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad (3.72)$$

δεδομένου ότι η ταχύτητα $v = p/m$ του σωματιδίου είναι η ίδια στις δύο περιοχές $x < 0$ και $x > L$.

Ας ενώσουμε τώρα τις λύσεις (3.70) των εξωτερικών περιοχών με τη λύση για την εσωτερική περιοχή. Διακρίνουμε:

Περίπτωση 1: $E < V_0$

Η λύση της εξίσωσης Schrödinger (3.33) για την εσωτερική περιοχή $0 < x < L$ είναι

$$\Psi_E(x) = F e^{qx/\hbar} + G e^{-qx/\hbar} \quad 0 < x < L \quad (3.73)$$

όπου $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Εφαρμόζοντας τη συνθήκη συνέχειας της $\Psi_E(x)$ και της $\frac{d\Psi_E(x)}{dx}$ στα σημεία $x = 0$ και $x = L$, παίρνουμε τις σχέσεις

$$\left. \begin{aligned} A + B &= F + G \\ ip(A - B) &= q(F - G) \end{aligned} \right\} \quad \text{για } x = 0$$

$$\left. \begin{aligned} Ce^{ipL/\hbar} &= Fe^{qL/\hbar} + Ge^{-qL/\hbar} \\ ipCe^{ipL/\hbar} &= q(Fe^{qL/\hbar} - Ge^{-qL/\hbar}) \end{aligned} \right\} \quad \text{για } x = L \quad (3.74)$$

Απαλείφοντας τα F και G και λύνοντας ως προς $\frac{B}{A}$ και $\frac{C}{A}$, βρίσκουμε

$$\frac{B}{A} = \frac{(p^2 + q^2)(e^{2qL/\hbar} - 1)}{e^{2qL/\hbar}(p + iq)^2 - (p - iq)^2}$$



$$\frac{C}{A} = \frac{4ipq e^{-ipL/\hbar} e^{qL/\hbar}}{e^{2qL/\hbar} (p+iq)^2 - (p-iq)^2} \quad (3.75)$$

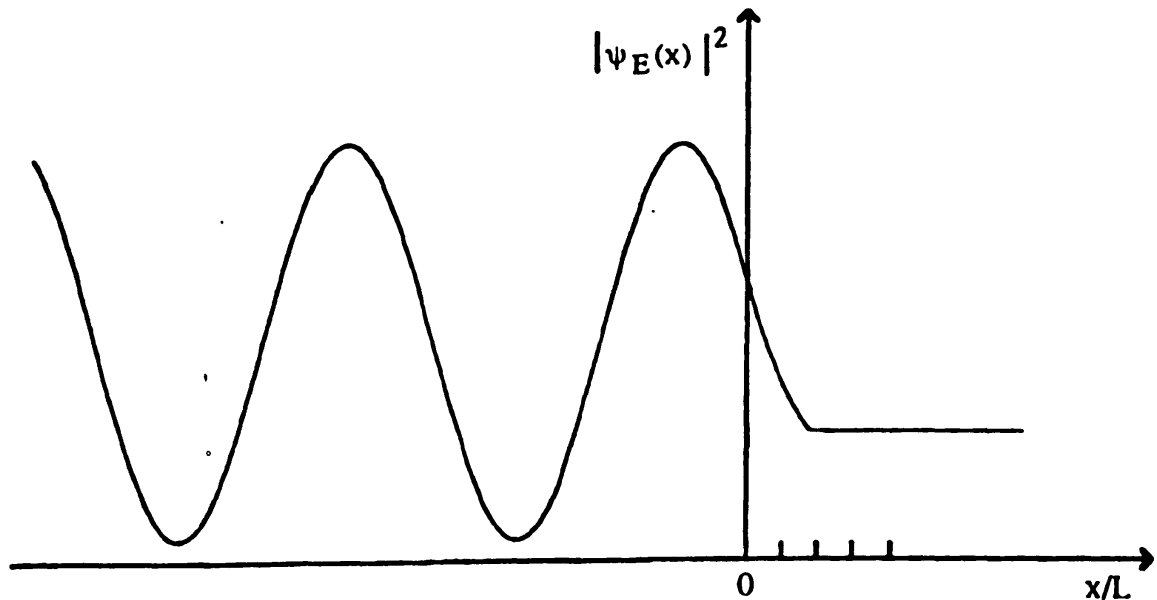
Από τις σχέσεις αυτές έχουμε για τους συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T τις εκφράσεις

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4p^2q^2}{(p^2+q^2)^2 \sinh^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{4E(V_0-E)}{V_0^2 \sinh^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)} \right]^{-1} \quad (3.76)$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(p^2+q^2)^2 \sinh^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)}{4p^2q^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)}{4E(V_0-E)} \right]^{-1} \quad (3.77)$$

Εύκολα επαληθεύεται κι εδώ ότι $R + T = 1$, πράγμα που εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας ροής.

Το σημαντικό συμπέρασμα από τις παραπάνω εξισώσεις είναι ότι υπάρχει πεπερασμένη πιθανότητα το σωματίδιο να περάσει το φράγμα δυναμικού και να βρεθεί στην άλλη πλευρά. Το σχ. 3.10 δείχνει τη μορφή της $|\psi_E(x)|^2$, που περιγράφει την αντίστοιχη φυσική κατάσταση.



Σχ. 3.10 Η μορφή του τετραγώνου του μέτρου της κυματοσυνάρτησης $|\psi_E(x)|^2$ για ένα ορθογώνιο φράγμα δυναμικού.

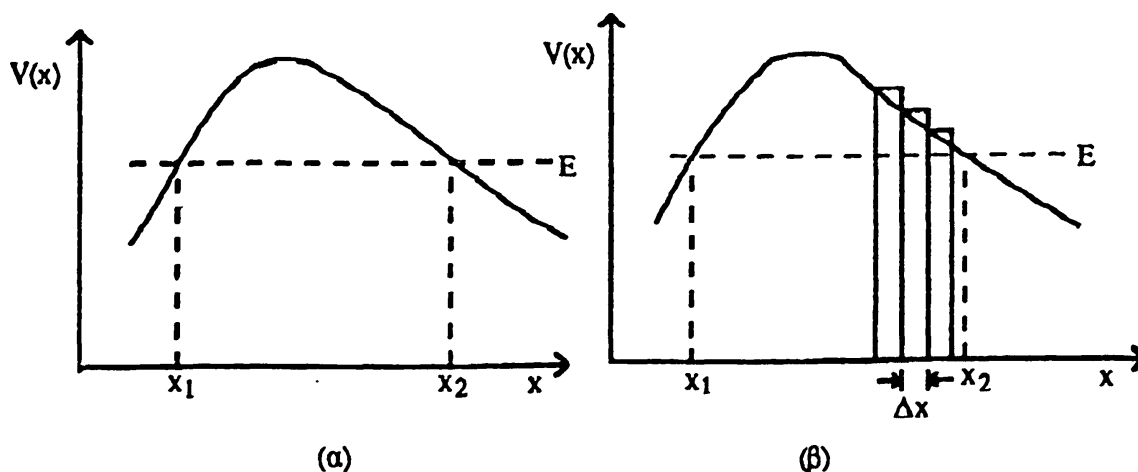
Το φαινόμενο αυτό της διέλευσης μέσα από φράγμα δυναμικού, από τα πιο χαρακτηριστικά της κβαντικής μηχανικής, είναι γνωστό σαν φαινόμενο σήραγγας και εκδηλώνεται σε αναρίθμητες περιοχές της κβαντικής φυσικής, όπως θα έχουμε την ευκαιρία να δούμε επανειλημμένα.



Προς το παρόν, ας αρκεστούμε σε μία χρήσιμη προσέγγιση. Εάν $qL/\hbar \gg 1$, τότε μπορούμε να γράψουμε $\sinh\left(\frac{qL}{\hbar}\right) \approx \frac{1}{2} e^{qL/\hbar}$, οπότε ο συντελεστής διέλευσης παίρνει τη μορφή

$$T \approx \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-2qL/\hbar} \ll 1 \quad (3.78)$$

Η σχέση (3.78) είναι μια προσέγγιση για $qL/\hbar \gg 1$ της έκφρασης (3.77), που δίνει τον συντελεστή διέλευσης T για διέλευση ενός σωματιδίου μέσα από ένα ορθογώνιο φράγμα δυναμικού. Μπορούμε εδώ να δώσουμε μια απλή ανάλυση για το πως αυτό το αποτέλεσμα μπορεί να επεκταθεί, για να πάρουμε μια κατά προσέγγιση τιμή για το συντελεστή διέλευσης T για γενικότερα μη ορθογώνια φράγματα δυναμικού που μεταβάλλονται αργά (βλ. π.χ. το σχ. 3.11).



Σχ. 3.11. (α) Φράγμα δυναμικού αυθαίρετου σχήματος. (β) Προσέγγιση του(α) με διαδοχικά λεπτά ορθογώνια φράγματα

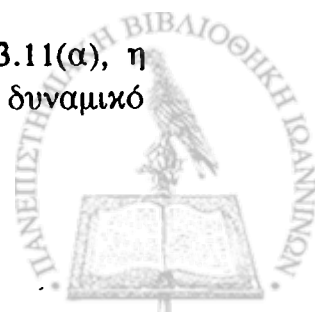
Όταν ο συντελεστής του εκθετικού στη σχέση (3.78) δεν μεταβάλλεται σημαντικά σε σύγκριση με το εκθετικό, μπορούμε να γράψουμε κατά προσέγγιση

$$T \approx e^{-2qL/\hbar} = e^{-2\sqrt{2m(V-E)} L/\hbar} \quad (3.79)$$

Η έκφραση (3.79), αν λάβουμε υπ' όψη την εκθετική μείωση της κυματοσυνάρτησης μέσα στο φράγμα δυναμικού, μπορεί να γραφεί

$$T \approx e^{-2qL/\hbar} \approx \left| \frac{\psi_E(L)}{\psi_E(0)} \right|^2 \quad (3.79a)$$

Για το γενικότερο τώρα αργά μεταβαλλόμενο δυναμικό του σχ. 3.11(α), η παραπάνω έκφραση μπορεί να γενικευτεί αμέσως. Προσεγγίζοντας το δυναμικό



του σχ. 3.11(α) μ' ένα σύνολο διαδοχικών λεπτών ορθογώνιων φραγμάτων (σχ. 3.11(β)), παίρνουμε την έκφραση

$$\psi_E(x+\Delta x) = \psi_E(x) e^{-q(x)\Delta x/\hbar}, \quad q(x) = \sqrt{2m[V(x)-E]} \quad (3.80)$$

Απ' αυτή προκύπτει ότι (για μικρά Δx)

$$\psi_E(x) + \frac{d\psi_E(x)}{dx} \Delta x = \psi_E(x) [1 - q(x)\Delta x/\hbar] \quad (3.81)$$

ή

$$\frac{d\psi_E(x)}{dx} = -\frac{q(x)}{\hbar} \psi_E(x) \quad (3.82)$$

Ολοκληρώνοντας βρίσκουμε

$$\frac{\psi_E(x_2)}{\psi_E(x_1)} = \exp\left[-\int_{x_1}^{x_2} \frac{q(x)}{\hbar} dx\right] = \exp\left[-\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar} dx\right] \quad (3.83)$$

Συνεπώς, ο συντελεστής διέλευσης θα δίνεται από την έκφραση

$$T = \left|\frac{\psi_E(x_2)}{\psi_E(x_1)}\right|^2 = \exp\left[-2\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar} dx\right] \quad (3.84)$$

Μια ακόμα καλύτερη, αλλά πιο περίπλοκη, προσέγγιση είναι η μέθοδος WKB, που θα δούμε αργότερα (βλ. § 9.6). Αλλά στις περιπτώσεις μικρής τιμής για τον συντελεστή διέλευσης T , το αποτέλεσμα κυριαρχείται από το εκθετικό του τύπου (3.84), που αποτελεί και το σημείο αφετηρίας για τους σχετικούς υπολογισμούς. Άλλωστε, το αποτέλεσμα αυτό συμπίπτει με αυτό που παίρνουμε με τη μέθοδο WKB. Εκεί θα δούμε και μερικές φυσικά ενδιαφέρουσες εφαρμογές.

Περίπτωση 2: $E > V_0$

Η λύση για την εξίσωση Schrödinger στην εσωτερική περιοχή είναι

$$\psi_E(x) = F e^{iq'x/\hbar} + G e^{-iq'x/\hbar}, \quad 0 < x < L \quad (3.85)$$

όπου $q' = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Η συνθήκη συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στα σημεία $x = 0$ και $x = L$ μας δίνει τέσσερις σχέσεις, από τις οποίες απαλείφοντας τα F και G λύνουμε ως προς $\frac{B}{A}$ και $\frac{C}{A}$. Ισοδύναμα, φαίνεται αμέσως ότι μπορούμε να

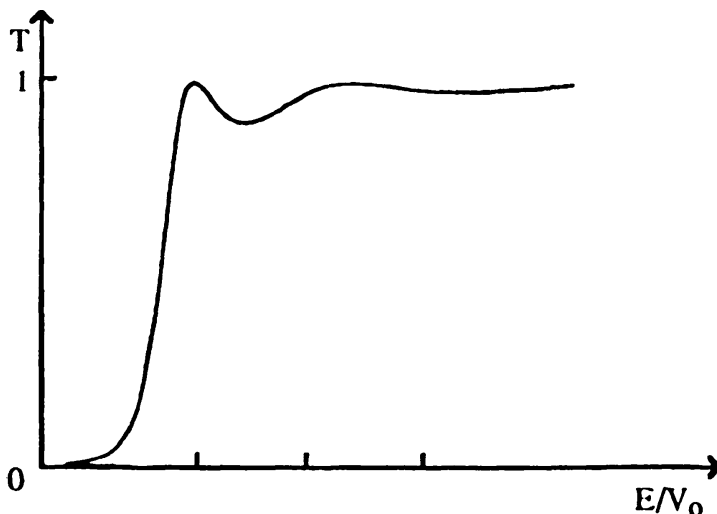


πάρουμε τους παραπάνω λόγους από τις αντίστοιχες εκφράσεις (3.75) με την αντικατάσταση $q \rightarrow iq'$. Βρίσκουμε έτσι ότι

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4p^2 q'^2}{(p^2 - q'^2)^2 \sin^2\left(\frac{q' L}{\hbar}\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{4E(E-V_0)}{V_0^2 \sin^2\left(\frac{q' L}{\hbar}\right)} \right]^{-1} \quad (3.86)$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(p^2 - q'^2)^2 \sin^2\left(\frac{q' L}{\hbar}\right)}{4p^2 q'^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2\left(\frac{q' L}{\hbar}\right)}{4E(E-V_0)} \right]^{-1}$$

Βλέπουμε πάντα ότι $R + T = 1$. Επίσης, εν γένει, είναι $T < 1$ και μόνο για ορισμένες τιμές της ενέργειας (συντονισμοί), που αντιστοιχούν στη συνθήκη $\frac{q' L}{\hbar} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$, ισχύει $T = 1$ (σχ. 3.12)



Σχ.3.12. Ο συντελεστής διέλευσης T για ένα ορθογώνιο φράγμα δυναμικού.

3.5. Γραμμικό δυναμικό - Σταθερή δύναμη

Μέχρι τώρα, είδαμε παραδείγματα όπου οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger (3.33) υπάρχουν για κάθε θετική τιμή της ενέργειας, είχαμε δηλαδή να κάνουμε μ' ένα συνεχές φάσμα ιδιοτιμών. Αυτές είναι περιπτώσεις όπου η αντίστοιχη κλασική κίνηση δεν περιορίζεται σε μια δοσμένη περιοχή του χώρου. Με άλλα λόγια, περιπτώσεις που αντιστοιχούν σ' αυτό που ονομάσαμε καταστάσεις σκέδασης. Αντίθετα, στη συνέχεια, θα δούμε παραδείγματα με δέσμιες καταστάσεις, όπου η αντίστοιχη κλασική κίνηση περιορίζεται σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου και είναι περιοδική. Σε αντιδιαστολή, όμως, με την κλασική μηχανική, οι λύσεις της

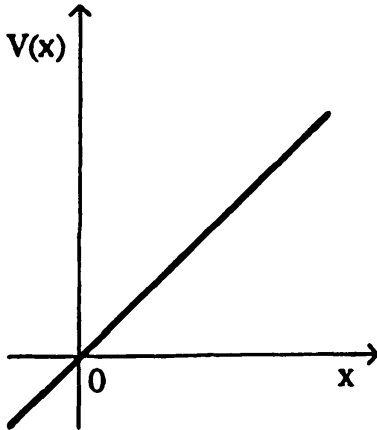


εξίσωσης Schrödinger (3.33) θα δούμε ότι υπάρχουν μόνο για ένα διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας.

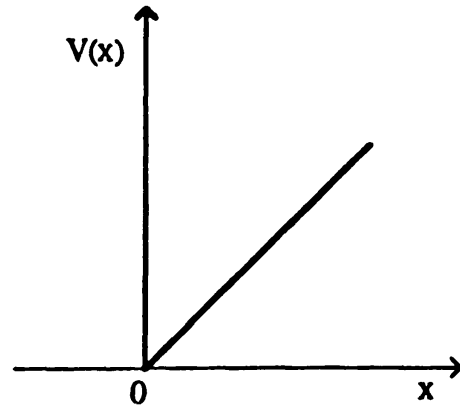
Ας εξετάσουμε, πρώτα, την περίπτωση του γραμμικού δυναμικού (σχ. 3.13)

$$V(x) = fx, \quad f > 0 \quad (3.87)$$

που δίνει μια σταθερή δύναμη $-f \hat{e}_x$ (f είναι σταθερά, που παίρνουμε θετική). Γνωστά παραδείγματα είναι η κίνηση ενός σωματιδίου μέσα σε ομογενές ηλεκτρικό και βαρυντικό πεδίο. Επίσης, ένα γραμμικό δυναμικό θα μπορούσε να περιγράψει την αλληλεπίδραση μεταξύ κουάρκ και αντικουάρκ (βλ. § 6.5). Ακόμη, όπως θα δούμε αργότερα, υπάρχουν προσεγγιστικές μέθοδοι που χρησιμοποιούν ένα γραμμικό δυναμικό για να παραστήσουν σε μια μικρή περιοχή ένα πιο πολύπλοκο δυναμικό (βλ. § 9.6). Είναι ενδιαφέρον, λοιπόν να δούμε τι γίνεται μ' ένα γραμμικό δυναμικό (βλ. και πρόβλημα 2.16)



Σχ. 3.13. Δυναμικό (3.87)-Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας.



Σχ. 3.14. Δυναμικό (3.95)- Διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας

Η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + fx \psi_E(x) = E \psi_E(x) \quad (3.88)$$

Επειδή το $V \rightarrow \pm\infty$, καθώς το $x \rightarrow \pm\infty$, έχουμε εδώ ένα συνεχές φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας από $-\infty$ έως $+\infty$. Η κίνηση είναι περιορισμένη στην κατεύθυνση $x \rightarrow +\infty$ και απεριόριστη στην κατεύθυνση $x \rightarrow -\infty$. Είναι βολικό, εδώ, να εισάγουμε τις αδιάστατες μεταβλητές

$$\xi = x \left(\frac{2mf}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad \epsilon = E \left(\frac{2m}{f^2 \hbar^2} \right)^{1/3} \quad (3.89)$$

και από αυτές την μεταβλητή (μετατόπιση της αρχής των αξόνων)

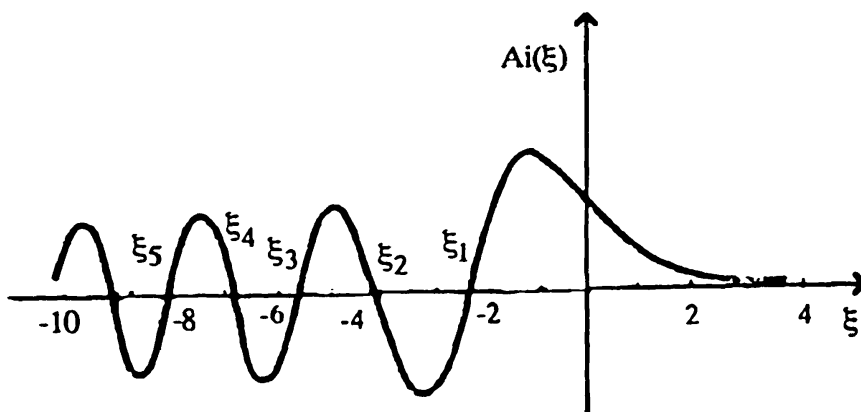
$$\xi = \zeta - \epsilon = \left(x - \frac{E}{f} \right) \left(\frac{2mf}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (3.90)$$



Τότε, η (3.88) γίνεται

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \xi u = 0, \quad u(\xi) = \psi(x) \quad (3.91)$$

Η διαφορική εξίσωση (3.91) είναι γνωστή στη μαθηματική βιβλιογραφία σαν εξίσωση Airy και οι λύσεις της είναι οι συναρτήσεις Airy. Ας δούμε, πρώτα, ποιοτικά πως περιμένουμε να συμπεριφέρεται μια φυσικά αποδεκτή λύση της (3.91). Για $\xi < 0$ είναι $V = \sqrt{\xi} < E$ και, συνεπώς, η λύση θα είναι ταλαντωτική. Όσο πιο αρνητικό είναι το ξ , τόσο μικρότερη γίνεται η V ως προς την E και, άρα, τόσο μεγαλύτερη η κινητική ενέργεια. Συνεπώς, το αντίστοιχο μήκος κύματος de Broglie και το πλάτος θα γίνονται μικρότερα. Το σημείο $\xi = 0$, για το οποίο $V = E$, είναι σημείο καμπής. Για $\xi > 0$ είναι $V > E$ (κλασικά απαγορευμένη περιοχή) και περιμένουμε η κυματοσυνάρτηση να μηδενίζεται ασυμπτωτικά. Στο παράδειγμα με το σταθερό δυναμικό της § 3.3 είδαμε ότι η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται ασυμπτωτικά σαν $e^{-\alpha x}$. Από την άλλη μεριά, όπως θα δούμε στο κεφάλαιο IV, για το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή $V \propto x^2$ η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται ασυμπτωτικά σαν $e^{-\beta x^2}$. Έτσι, εδώ που έχουμε γραμμικό δυναμικό $V \propto x$, περιμένουμε ότι θα έχουμε μια ενδιάμεση ασυμπτωτική συμπεριφορά. Επειδή $V \rightarrow +\infty$, καθώς $x \rightarrow +\infty$, η περιοχή των μεγάλων x είναι ουσιαστικά απροσπέλαστη και το ρεύμα πιθανότητας J θα πρέπει να είναι μηδέν (δεν υπάρχει ροή σωματιδίων). Άρα η κυματοσυνάρτηση θα είναι πραγματική. Πράγματι, όλα τα παραπάνω ποιοτικά χαρακτηριστικά τα συναντάμε αν σαν λύση της (3.91) πάρουμε από τις δύο γραμμικά ανεξάρτητες συναρτήσεις Airy $Ai(\xi)$ και $Bi(\xi)$ εκείνη που μηδενίζεται για $\xi \rightarrow +\infty$. Αυτή είναι η $Ai(\xi)$ και παριστάνεται στο σχήμα 3.15.



Σχήμα 3.15. Η συνάρτηση Airy $Ai(\xi)$

Η συνάρτηση $Ai(\xi)$ έχει την ολοκληρωτική αναπαράσταση

$$Ai(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{1}{3}u^3 + \xi u\right) du \quad (3.92)$$



και η ασυμπτωτική της συμπεριφορά είναι:

$$\text{Για } \xi \rightarrow +\infty : \text{Ai}(\xi) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} \xi^{1/4}} e^{-(2/3)\xi^{3/2}}$$

$$\text{Για } \xi \rightarrow -\infty : \text{Ai}(\xi) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi} |\xi|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.93)$$

Τα πρώτα πέντε σημεία, που μηδενίζουν την $\text{Ai}(\xi)$, είναι:

$$\xi_1 = -2.338, \quad \xi_2 = -4.088, \quad \xi_3 = -5.521, \quad \xi_4 = -6.787, \quad \xi_5 = -7.944, \quad (3.94)$$

Ας έλθουμε, τώρα, στο δυναμικό (σχ. 3.14)

$$V(x) = \begin{cases} fx & x \geq 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases} \quad (3.95)$$

Εδώ το σωματίδιο δεν μπορεί να διαφύγει ούτε προς τη θετική, ούτε προς την αρνητική κατεύθυνση. Έχουμε, συνεπώς, να κάνουμε με δέσιμες καταστάσεις και μ' ένα διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας. Τα ενεργειακά επίπεδα μπορεί να βρεθούν συναρτήσει των σημείων ξ_n , που μηδενίζουν την $\text{Ai}(\xi)$.

Πράγματι, εκτός από την συνθήκη $\psi(x = +\infty) = u(\xi = +\infty) = 0$, που βέβαια ικανοποιείται από την $\text{Ai}(\xi)$, θα πρέπει να ισχύει και $\psi(x=0) = 0$, δηλαδή $u(\xi=-\epsilon) = 0$. Ο μηδενισμός της $u(\xi)$ συμβαίνει στα σημεία ξ_n και, συνεπώς, παίρνουμε για τις ιδιοτιμές

$$E_n = |\xi_n| \left(\frac{f^2 h^2}{2m}\right)^{1/3} \quad (3.96)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι, τότε,

$$\psi_n(x) = c \text{Ai}\left(\xi = \left(\frac{2mf}{h^2}\right)^{1/3} x - |\xi_n|\right) \quad (3.97)$$

όπου c σταθερά κανονικοποίησης.

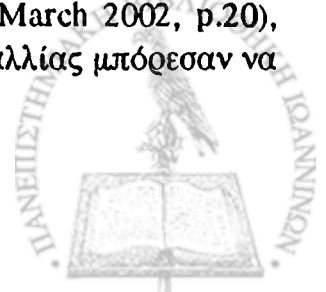
Αξίζει να σημειώσουμε ότι για το γραμμικό δυναμικό που συζητάμε, έχουμε από το θεώρημα virial (βλ. προβλήματα 2.14-2.15)

$$2\langle T \rangle_n = f \langle x \rangle_n \quad (3.98)$$

και, επομένως,

$$2\langle T \rangle_n = f \langle x \rangle_n = \frac{2}{3} E_n \quad (3.99)$$

Όπως αναφέραμε στην αρχή, ένα γραμμικό δυναμικό του τύπου (3.95) είναι χρήσιμο στην περιγραφή του ενεργειακού φάσματος δέσιμων καταστάσεων στο πεδίο βαρύτητας. Πολύ πρόσφατα (βλ. π.χ. Physics Today, March 2002, p.20), ερευνητές στο Ινστιτούτο Laue-Langevin στην Grenoble της Γαλλίας μπόρεσαν να



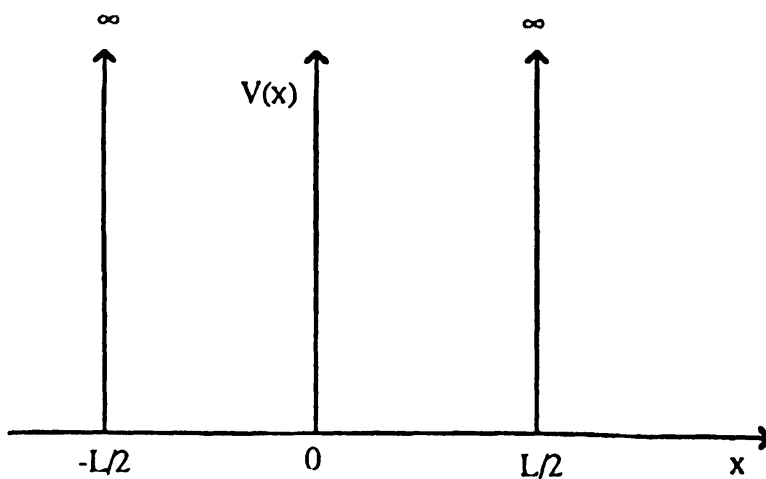
μετρήσουν το διάκριτο ενεργειακό φάσμα υπέροψηχρων νετρονίων παγιδευμένων κατάλληλα μέσα στο βαρυτικό πεδίο της Γης. Βρήκαν ότι η ενέργεια της βασικής κατάστασης είναι 1.41×10^{-12} eV, που αντιστοιχεί σε κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας των νετρονίων 1.7 cm sec^{-1} . Η τιμή αυτή είναι πράγματι σε συμφωνία με τις προβλέψεις της κβαντικής θεωρίας (βλ. πρόβλημα 3.6).

Ένα γραμμικό συναμικό του τύπου (3.95) είναι, επίσης, χρήσιμο στο σύστημα κουάρκ-αντικουάρκ (§6.5). Στο τελευταίο, η δύναμη f βρίσκεται εμπειρικά να έχει την τιμή $f \approx 1 \text{ GeV/fm} \approx 1.6 \times 10^5 \text{ N}$, μια εξαιρετικά μεγάλη τιμή, συγκρινόμενη παραδείγματος χάρη με τη βαρυτική δύναμη 1N για σωματίδιο μάζας $m \approx 0.1 \text{ Kg}$.

3.6. Φρέαρ (πηγάδι) δυναμικού άπειρου βάθους - Ομοτιμία ιδιοσυναρτήσεων

Ας θεωρήσουμε, τώρα, το παράδειγμα ενός φρέατος δυναμικού με άπειρο βάθος και με εύρος L (σχ. 3.16).

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \infty & |x| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.100)$$



Σχ. 3.16. Φρέαρ (πηγάδι) δυναμικού άπειρου βάθους

Είναι φανερό ότι η κυματοσυνάρτηση $\psi_E(x)$ είναι μηδέν για $|x| > \frac{L}{2}$ και χρειάζεται μόνο να λύσουμε την εξίσωση Schrödinger (3.33) για την περιοχή $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$. Έτσι, οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger



$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad p = \sqrt{2mE}, \quad -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \quad (3.101)$$

μπορούν να γραφούν

$$\psi_E(x) = C_1 e^{ipx/\hbar} + C_2 e^{-ipx/\hbar} = A \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) + B \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) \quad (3.102)$$

Είναι πιο πρόσφορο, σ' αυτό το πρόβλημα, να γράψουμε τη γενική λύση συναρτήσει των πραγματικών μερικών λύσεων, όπως στο τελευταίο μέρος της έκφρασης (3.102) (βλ. και αργότερα στο τέλος αυτής της παραγράφου). Η συνθήκη που έχουμε να ικανοποιήσουμε εδώ είναι η οριακή συνθήκη

$$\psi_E(x) = 0 \quad \text{για} \quad x = \pm \frac{L}{2}, \quad (3.103)$$

που θα δούμε αμέσως ότι οδηγεί στην κβάντωση της ενέργειας. Σημειωτέον ότι η $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ δεν μπορεί να είναι μηδέν για $x = \pm \frac{L}{2}$, γιατί αυτό θα σήμαινε ότι η ιδιοσυνάρτηση $\psi_E(x)$ θα ήταν η τετριμμένη λύση $\psi_E = 0$. Πράγματι, η $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ είναι απροσδιόριστη στα σημεία $x = \pm \frac{L}{2}$, μια και εκεί το δυναμικό παρουσιάζει άπειρη ασυνέχεια.

Η εφαρμογή της οριακής συνθήκης (3.103) στη λύση (3.102) συνεπάγεται τις σχέσεις

$$A \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = B \sin\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = 0 \quad (3.104)$$

Για να ικανοποιήσουμε τις σχέσεις (3.104), φαίνεται αμέσως ότι μπορούμε να διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

$$i) \quad B = 0, \quad \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = 0 \quad (3.105)$$

απ' όπου βρίσκουμε ότι θα πρέπει να είναι

$$p_n = n \frac{\pi\hbar}{L}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.106)$$

Η κανονικοποιημένη ιδιοσυνάρτηση $\psi_n(x)$ είναι τότε

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.107)$$

$$ii) \quad A = 0, \quad \sin\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = 0, \quad (3.108)$$

που συνεπάγεται ότι



$$p_n = n \frac{\pi \hbar}{L}, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.109)$$

και

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.110)$$

Αξίζει να σημειώσουμε ότι τόσο στη μια, όσο και στην άλλη περίπτωση, δεν χρειάζεται να θεωρήσουμε αρνητικές τιμές του n , γιατί αυτές δεν οδηγούν σε άλλες γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις από εκείνες που αντιστοιχούν σε θετικές τιμές του n . Τέλος, κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $x \rightarrow x' = \frac{L}{2} + x$, βλέπουμε ότι οι δύο λύσεις (3.107) και (3.110) μπορούν να γραφούν σ' ενιαία μορφή

$$\psi_n(x') = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x'\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.111)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψη και τις δύο κατηγορίες λύσεων, έχουμε $p_n = n \frac{\pi \hbar}{L}$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Αυτό σημαίνει ότι τα αντίστοιχα μήκη κύματος de Broglie είναι $\lambda_n = \frac{2\pi \hbar}{p_n} = \frac{2L}{n}$, έτσι ώστε οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ να λαμβάνονται μόνον κάθε φορά που ένας ημισακέραιος ή ακέραιος αριθμός μηκών κύματος de Broglie ταιριάζει στις διαστάσεις του φρέατος δυναμικού. Βρίσκουμε λοιπόν ότι, κβαντομηχανικά, η ενέργεια θα πρέπει να είναι κβαντισμένη με ιδιοτιμές που δίνονται από τη σχέση

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 2\pi^2}{2m} \frac{n^2}{L^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.112)$$

Η έκφραση (3.112) συνιστά το διάκριτο φάσμα των ιδιοτιμών των ενεργειών δέσμιων καταστάσεων. Το ενεργειακό φάσμα είναι μη εκφυλισμένο, όπως αναμένεται για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα, μια και είναι φανερό ότι μόνο μια ιδιοσυναρτηση αντιστοιχεί σε κάθε τιμή της ενέργειας. Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ είναι προφανώς ορθοκανονικές:

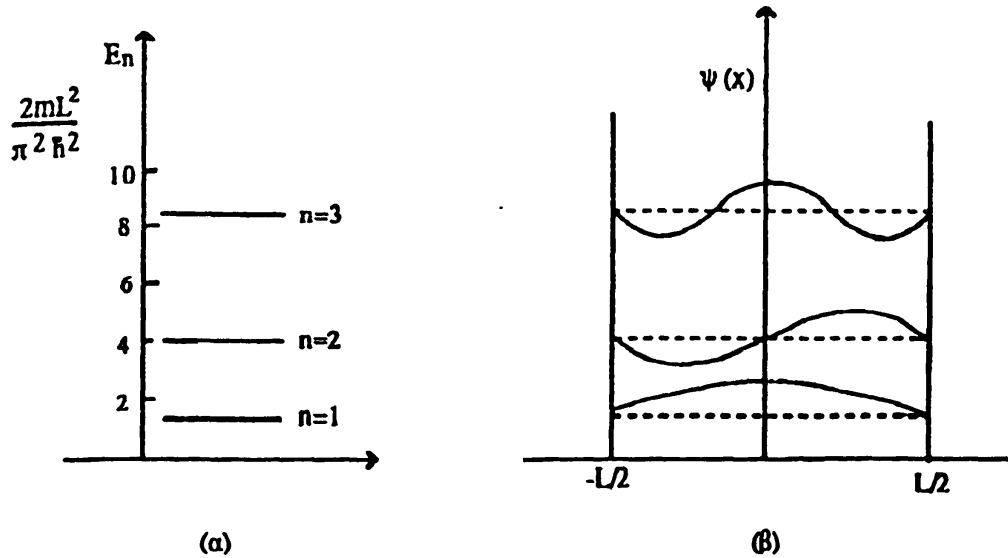
$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (3.113)$$

Το σχήμα (3.17) δείχνει τις πρώτες ιδιοτιμές του ενεργειακού φάσματος και τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις. Αξίζει να σημειωθεί ότι η κατώτερη τιμή ενέργειας

(ενέργεια μηδενικού σημείου ή βασικής κατάστασης) είναι μη μηδενική $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$.



Αυτό είναι σε συμφωνία με τις απαιτήσεις της αρχής της αβεβαιότητας. Πράγματι, για $\Delta x \approx L/2$, έχουμε $\Delta p \geq \frac{\hbar}{L/2}$ και $\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{2\hbar^2}{mL^2}$, σε συμφωνία με την κατώτατη τιμή E_1 . Να σημειωθεί, επίσης, ότι το ενεργειακό φάσμα που βρήκαμε ταυτίζεται μ' εκείνο της §2.5 για την περίπτωση που εκεί οι θέσεις $x=0, L$ δεν επιτρέπονται (βλ. πρόβλημα 2.3).



Σχ. 3.17 (α) Ενεργειακά επίπεδα για το φρέαρ δυναμικού άπειρου βάθους
(β) Αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$

Στο σημείο αυτό είναι σημαντικό να διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις των ιδιοσυναρτήσεων (3.107) και (3.110). Η διαφοροποίηση μεταξύ τους έγκειται στο γεγονός ότι η (3.107) είναι άρτια συνάρτηση του x , ενώ η (3.110) είναι περιττή συνάρτηση. Η διαφορά αυτή χαρακτηρίζεται από τη διαφορετική ιδιοτιμή, που αντιστοιχεί σ' αυτές τις ιδιοσυναρτήσεις, σε ότι αφορά τη δράση του τελεστή αναστροφής του χώρου ή τελεστή ομοτιμίας \hat{P} , που ορίζεται από τη σχέση

$$\hat{P} \psi(x) = \langle x | \hat{P} | \psi \rangle = \langle -x | \psi \rangle = \psi(-x) \quad (3.114)$$

Οι ιδιοτιμές του τελεστή \hat{P} είναι εύκολο να δούμε ότι είναι ± 1 . Πράγματι, επειδή $\hat{P}^2 = 1$, αν είναι P , $\psi_P(x)$ οι ιδιοτιμές, αντίστοιχα ιδιοσυναρτήσεις του \hat{P} , τότε

$$\hat{P}^2 \psi_P(x) = \hat{P} (\hat{P} \psi_P(x)) = P^2 \psi_P(x) = \psi_P(x) \quad (3.115)$$

απ' όπου συνάγεται $P^2 = 1$ και $P = \pm 1$. Οι ιδιοσυναρτήσεις με ιδιοτιμή $+1$ (ομοτιμία $P=+1$) είναι άρτιες συναρτήσεις, ενώ αυτές με ιδιοτιμή -1 (ομοτιμία $P=-1$) είναι περιττές συναρτήσεις:

$$\hat{P} \psi_+(x) = \psi_+(-x) = \psi_+(x) \quad (3.116)$$

$$\hat{P} \psi_-(x) = \psi_-(-x) = -\psi_-(x)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_+(x)$ και $\psi_-(x)$ είναι μεταξύ τους ορθογώνιες:



$$\begin{aligned} \int \psi_+^*(x) \psi_-(x) dx &= \int \psi_+^*(-x) \psi_-(-x) dx = \\ &= - \int \psi_+^*(x) \psi_-(x) dx \end{aligned} \quad (3.117)$$

απ' όπου

$$\int \psi_+^*(x) \psi_-(x) dx = 0 \quad (3.118)$$

Επίσης, αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων, μια και για κάθε συνάρτηση $\psi(x)$ ισχύει

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{2} [\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2} [\psi(x) - \psi(-x)] \\ &= \psi_+(x) + \psi_-(x) \end{aligned} \quad (3.119)$$

Όπως ξέρουμε, τα παραπάνω πρέπει να είναι αποτέλεσμα του γεγονότος ότι ο τελεστής \hat{P} είναι ερμιτιανός. Πράγματι, έχουμε

$$\begin{aligned} \int \phi^*(x) \hat{P} \psi(x) dx &= \int \phi^*(x) \psi(-x) dx = \int \phi^*(-x) \psi(x) dx = \\ &= \int [\hat{P} \phi(x)]^* \psi(x) dx, \end{aligned} \quad (3.120)$$

δηλαδή

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P} \quad (3.121)$$

Επίσης, λόγω του $\hat{P}^2 = 1$, ο \hat{P} είναι και μοναδιακός:

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1} \quad (3.122)$$

Έτσι, είναι φανερό ότι οι λύσεις (3.107) και (3.110) είναι ακριβώς ιδιοσυναρτήσεις της μορφής $\psi_+(x)$ και $\psi_-(x)$ με ομοτιμία +1 και -1, αντίστοιχα. Θα δούμε τώρα ότι αυτό είναι αποτέλεσμα του γεγονότος ότι το δυναμικό $V(x)$ είναι συμμετρικό: $V(x) = V(-x)$, γύρω από το σημείο $x=0$. Πράγματι, σ' αυτή την περίπτωση ο τελεστής \hat{H} είναι αναλλοίωτος κάτω από τη δράση του \hat{P} : $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$. Άρα οι ιδιοσυναρτήσεις του \hat{H} είναι και ιδιοσυναρτήσεις του \hat{P} και, συνεπώς, έχουν καθορισμένη ομοτιμία. Ας το δούμε αυτό και διαφορετικά. Αν στην εξίσωση Schrödinger

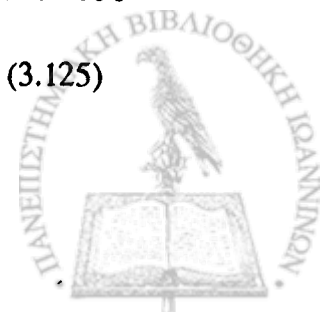
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) + V(x) \psi_E(x) = E \psi_E(x), \quad (3.123)$$

κάνουμε την αλλαγή $x \rightarrow -x$, θα πάρουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E(-x) + V(x) \psi_E(-x) = E \psi_E(-x). \quad (3.124)$$

Συνεπώς, για ένα μη εκφυλισμένο φάσμα ιδιοτιμών (όπως αυτό του παραδείγματός μας) θα έχουμε

$$\psi_E(-x) = C \psi_E(x) \quad (3.125)$$



και η σταθερά C , σύμφωνα με τα προηγούμενα, δεν μπορεί παρά να είναι ± 1 . Έτσι, οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας για ένα πρόβλημα ιδιοτιμών με συμμετρικό δυναμικό και μη εκφυλισμένο φάσμα θα έχουν καθορισμένη ομοτιμία και θα είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις. Όπως φαίνεται και στο σχήμα 3.17 για το παράδειγμα που συζητάμε, οι ιδιοσυναρτήσεις θα είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές, με την ιδιοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης να είναι πάντα άρτια.

Κλείνοντας θα πρέπει να σημειώσουμε ότι, ακόμα και στην περίπτωση που το φάσμα είναι εκφυλισμένο και σε μια ιδιοτιμή αντιστοιχούν περισσότερες της μιας γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις χωρίς καθορισμένη ομοτιμία, μπορούμε πάντα να διαλέξουμε γραμμικούς συνδυασμούς τέτοιων ιδιοσυναρτήσεων, που όμως να έχουν καθορισμένη ομοτιμία. Πράγματι, μπορούμε πάντα από μια ιδιοσυνάρτηση $\psi_E(x)$ χωρίς καθορισμένη ομοτιμία να θεωρήσουμε τους γραμμικούς συνδυασμούς

$$\psi_+(x) = \frac{1}{2} [\psi_E(x) + \psi_E(-x)]$$

$$\psi_-(x) = \frac{1}{2} [\psi_E(x) - \psi_E(-x)] \quad (3.126a)$$

με ομοτιμία $+1$ και -1 , αντίστοιχα. Είναι εύκολο να δούμε ότι οι $\psi_+(x)$ και $\psi_-(x)$ είναι χωριστά λύσεις της εξίσωσης Schrödinger. Πράγματι, αντικαθιστώντας την

$$\psi_E(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x) \quad (3.126b)$$

στην εξίσωση Schrödinger (3.110a), έχουμε

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] [\psi_+(x) + \psi_-(x)] = E[\psi_+(x) + \psi_-(x)] \quad (3.127)$$

Κάνοντας την αλλαγή $x \rightarrow -x$, παίρνουμε (είναι $V(-x) = V(x)$, $\psi_+(-x) = \psi_+(x)$, $\psi_-(-x) = -\psi_-(x)$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] [\psi_+(x) - \psi_-(x)] = E[\psi_+(x) - \psi_-(x)] \quad (3.128)$$

Έτσι, προσθέτοντας ή αφαιρώντας κατά μέλη τις (3.127) και (3.128), βλέπουμε ότι οι $\psi_+(x)$ και $\psi_-(x)$ είναι, χωριστά, λύσεις της (3.123) για την ίδια ιδιοτιμή E .

3.7. Σωματίδιο μέσα σε "κουτί"

Ας θεωρήσουμε τώρα το παράδειγμα ενός σωματιδίου, που περιορίζεται από αδιαπέραστα τοιχώματα μέσα σ' ένα ορθογώνιο "κουτί" με πλευρές L_1, L_2, L_3 . Μέσα στο κουτί η δυναμική ενέργεια είναι σταθερή και την εκλέγουμε ίση με μηδέν, ενώ στα τοιχώματα είναι άπειρη. Έτσι, το πρόβλημα αυτό είναι μια τριδιάστατη γενίκευση του προβλήματος για το μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού της προηγούμενης παραγράφου.



Για να εφαρμόσουμε τη μέθοδο επίλυσης διαφορικών εξισώσεων με μερικές παραγώγους, που είναι γνωστή σαν μέθοδος διαχωρισμού των μεταβλητών, θα πρέπει το δυναμικό $V(\mathbf{r})$ να έχει τη μορφή

$$V(\mathbf{r}) = V(x) + V(y) + V(z) \quad (3.129)$$

Τότε, η τριδιάστατη εξίσωση Schrödinger γράφεται

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} + V(x) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial y^2} + V(y) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z^2} + V(z) \right] \right\} \psi_{E(x,y,z)} = E \psi_{E(x,y,z)} \quad (3.130)$$

Ψάχνουμε, σ' αυτή την περίπτωση, για λύσεις της μορφής

$$\psi_{E(x,y,z)} = \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(y) \psi_{E_3}(z) \quad (3.131)$$

Η τριδιάστατη εξίσωση (3.130) ανάγεται έτσι σε τρεις συνηθισμένες διαφορικές εξισώσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_1}(x) + V(x) \psi_{E_1}(x) = E_1 \psi_{E_1}(x) \quad (3.132\alpha)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \psi_{E_2}(y) + V(y) \psi_{E_2}(y) = E_2 \psi_{E_2}(y) \quad (3.132\beta)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi_{E_3}(z) + V(z) \psi_{E_3}(z) = E_3 \psi_{E_3}(z) \quad (3.132\gamma)$$

με τη συνθήκη

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \quad (3.133)$$

Το δυναμικό του προβλήματός μας είναι

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L_1 \\ \infty & x < 0 \text{ } x > L_1 \end{cases}$$

$$V(y) = \begin{cases} 0 & 0 < y < L_2 \\ \infty & y < 0 \text{ } y > L_2 \end{cases} \quad (3.134)$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 < z < L_3 \\ \infty & z < 0 \text{ } z > L_3 \end{cases}$$

και, σύμφωνα με την ανάλυση της προηγούμενης παραγράφου, οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας είναι

$$\psi_n(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{L_1} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{L_2} y\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{L_3} z\right) \quad (3.135)$$



και οι ιδιοτιμές της

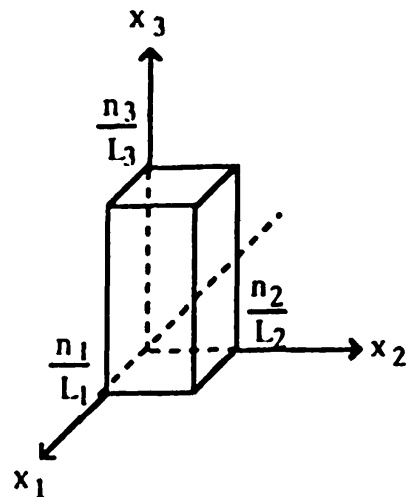
$$E_n = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots \quad (3.136)$$

Είναι φανερό ότι το ενεργειακό φάσμα (3.136) είναι ένα διάκριτο φάσμα, που μπορεί να είναι εκφυλισμένο, αν στην ίδια ιδιοτιμή E αντιστοιχούν περισσότερες ιδιοσυναρτήσεις. Π.χ. για $L_1 = L_2$ οι δύο ιδιοσυναρτήσεις που παίρνονται με εναλλαγή των n_1, n_2 στις σχέσεις (3.135) - (3.136) αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή. Για την ειδική περίπτωση ενός κυβικού κουτιού ($L_1 = L_2 = L_3 = L$), βλέπουμε εύκολα ότι η βασική κατάσταση $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ είναι μη εκφυλισμένη, η πρώτη διεγερμένη κατάσταση παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης 3: ($n_1 = 2, n_2 = n_3 = 1$), ($n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 1$), ($n_1 = n_2 = 1, n_3 = 2$), η δεύτερη διεγερμένη κατάσταση παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης 6: (1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1), (3,1,2), (3,2,1) κ.ο.κ. Τα παραπάνω είναι σε συμφωνία με την ιδιότητα ότι, σε περισσότερες από μία διαστάσεις, το διάκριτο φάσμα δέσμιων καταστάσεων μπορεί να είναι εκφυλισμένο. Βέβαια, εκφυλισμός δεν υπάρχει αν $L_1 \neq L_2 \neq L_3$. Έτσι, έχουμε εδώ ένα πρώτο παράδειγμα όπου η παρουσία εκφυλισμού συνδέεται με την ύπαρξη κάποιας συμμετρίας (βλ. σχετικά §5.1).

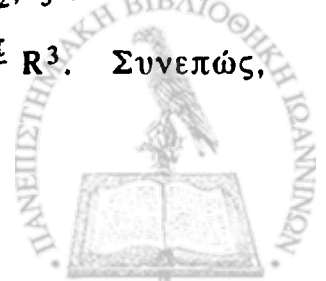
Τελειώνοντας αυτή την παράγραφο, κρίνουμε σκόπιμο να σημειώσουμε μια χρήσιμη σχέση, που αφορά στην αρίθμηση των ενεργειακών καταστάσεων, για τις οποίες η κινητική ενέργεια E ενός σωματιδίου δέσμιου μέσα σ' ένα όγκο $V = L_1 L_2 L_3$ είναι μικρότερη από μια δοσμένη τιμή E_0 . Θα ισχύει τότε

$$\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} < \frac{2mE_0}{\pi^2 \hbar^2} \quad (3.137)$$

Μπορούμε να αντιστοιχίσουμε σε κάθε κατάσταση ένα σημείο μέσα σ' ένα χώρο με συντεταγμένες $\frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3}$. Έτσι, στη μονάδα όγκου αυτού του χώρου υπάρχουν $L_1 L_2 L_3$ καταστάσεις. Για να μετρήσουμε τώρα τον αριθμό των καταστάσεων, που ικανοποιούν τη σχέση



(3.137), παρατηρούμε ότι οι καταστάσεις αυτές αντιστοιχούν στο εσωτερικό μιας σφαίρας ακτίνας $R = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\pi \hbar}$. Πιο συγκεκριμένα, επειδή n_1, n_2, n_3 είναι θετικοί ακέραιοι αριθμοί, ο αντίστοιχος όγκος είναι $\frac{1}{8} \cdot 4 \frac{\pi}{3} R^3$. Συνεπώς,



πολλαπλασιάζοντας με τον αριθμό $L_1 L_2 L_3$ των καταστάσεων στη μονάδα όγκου έχουμε ότι ο συνολικός αριθμός N των ενεργειακών καταστάσεων, για τις οποίες $E < E_0$, είναι

$$N(E < E_0) = L_1 L_2 L_3 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{2mE_0}}{\pi \hbar} \right)^3$$

$$= \frac{L_1 L_2 L_3 \cdot \frac{4\pi}{3} \rho_0^3}{h^3} \quad (3.138)$$

όπου $\rho_0 = \sqrt{2mE_0}$. Αν θεωρήσουμε τον εξαδιάστατο χώρο με συντεταγμένες x, y, z, p_x, p_y, p_z , που είναι γνωστός σαν χώρος των φάσεων, τότε από τη σχέση (3.138) μπορούμε να πούμε ότι ο αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων με $E < E_0$ είναι ίσος με τον όγκο του χώρου των φάσεων διαιρεμένο με την τρίτη δύναμη της σταθεράς του Planck. Έτσι, γενικεύοντας, μπορούμε να γράψουμε ότι μέσα σ' ένα όγκο $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ του χώρου των φάσεων, ο αριθμός των ανεξάρτητων ενεργειακών καταστάσεων είναι

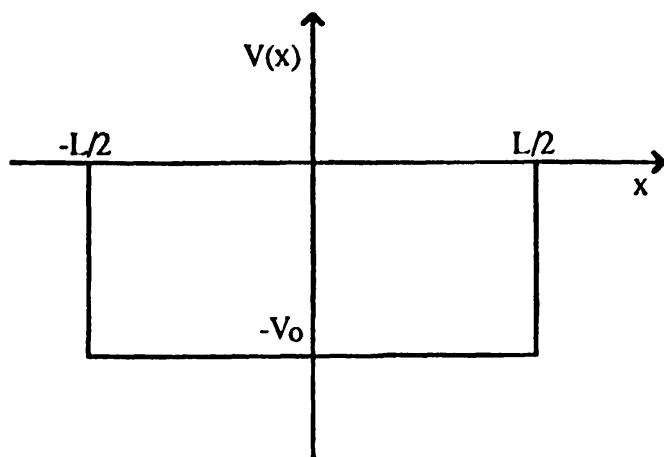
$$\Delta N = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{h^3} \quad (3.139)$$

Η σχέση (3.139) είναι βασική και βρίσκει μεγάλη εφαρμογή σε αρκετές περιοχές της κβαντικής φυσικής, όπως θα δούμε στις §8.2 και ΠΙ.7.

3.8. Τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού

Ας θεωρήσουμε τώρα το τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού, για το οποίο (σχ. 3.18)

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < \frac{L}{2} \\ 0 & |x| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.140)$$



Σχ. 3.18. Τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού



Όπως και στα προηγούμενα παραδείγματα, διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις: $-V_0 < E < 0$ και $E > 0$. Η πρώτη αντιστοιχεί σε δέσμιες καταστάσεις, η δεύτερη σε καταστάσεις σκέδασης.

i) $-V_0 \leq E < 0$

Οι εξισώσεις Schrödinger παίρνουν τη μορφή

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad p = \sqrt{2m(V_0 + E)} = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}, \quad |x| < \frac{L}{2} \quad (3.141)$$

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} - \frac{q^2}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0, \quad q = \sqrt{-2mE} = \sqrt{2m|E|}, \quad |x| > \frac{L}{2} \quad (3.142)$$

όπου $|E| = -E$ είναι η ενέργεια δέσμιας κατάστασης για το σωματίδιο. Επειδή το δυναμικό είναι άρτια συνάρτηση του x , $V(x) = V(-x)$, οι λύσεις θα έχουν καθορισμένη ομοτιμία. Έτσι, μπορούμε να γράψουμε για τις άρτιες λύσεις των (3.141)-(3.142) ότι

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} \psi(x) = A \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) & |x| < \frac{L}{2} \\ \psi(x) = C e^{-q|x|/\hbar} & |x| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.143)$$

Η συνθήκη της συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στα σημεία $x = \pm L/2$ συνεπάγεται

$$\begin{aligned} A \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) &= C e^{-qL/2\hbar} \\ -pA \sin\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) &= -qC e^{-qL/2\hbar}, \end{aligned} \quad (3.144)$$

απ' όπου προκύπτει ότι

$$\tan\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = \frac{q}{p} \quad (3.145)$$

Αντίστοιχα, για τις περιττές λύσεις έχουμε τις εκφράσεις

$$\psi_E^{(-)}(x) = \begin{cases} \psi(x) = C e^{qx/\hbar} & x < -\frac{L}{2} \\ \psi(x) = B \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \psi(x) = -C e^{-qx/\hbar} & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$B \sin\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = C e^{-qL/2\hbar},$$



$$pB \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = -qCe^{-qL/2\hbar} \quad (3.146)$$

απ' όπου προκύπτει ότι

$$\cot\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) = -\frac{q}{p} \quad (3.147)$$

Έτσι, οι συνθήκες από τις οποίες προκύπτουν οι ενεργειακές στάθμες του προβλήματός μας είναι οι σχέσεις (3.145) και (3.147). Επειδή αυτές είναι υπερβατικές εξισώσεις, η λύση τους μπορεί να γίνει είτε αριθμητικά είτε γραφικά. Για μια απλή γραφική λύση, εισάγουμε τις (αδιάστατες) μεταβλητές

$$\xi = \frac{pL}{2\hbar}, \quad \eta = \frac{qL}{2\hbar} \quad (3.148)$$

που ικανοποιούν τη σχέση

$$\xi^2 + \eta^2 = \left(\frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}\right) \equiv \gamma^2 \quad (3.149)$$

Μ' αυτές τις μεταβλητές οι εξισώσεις που έχουμε να λύσουμε για τον προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων είναι

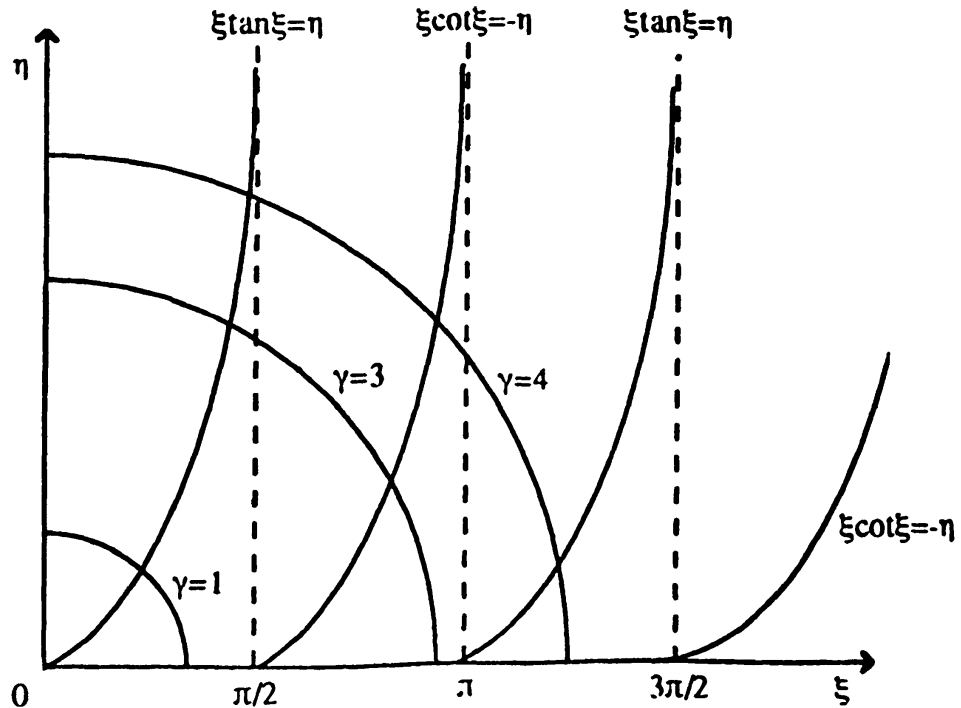
$$\xi \tan \xi = \eta \quad (\text{για άρτιες ιδιοσυναρτήσεις}) \quad (3.150\alpha)$$

$$\xi \cot \xi = -\eta \quad (\text{για περιττές ιδιοσυναρτήσεις}) \quad (3.150\beta)$$

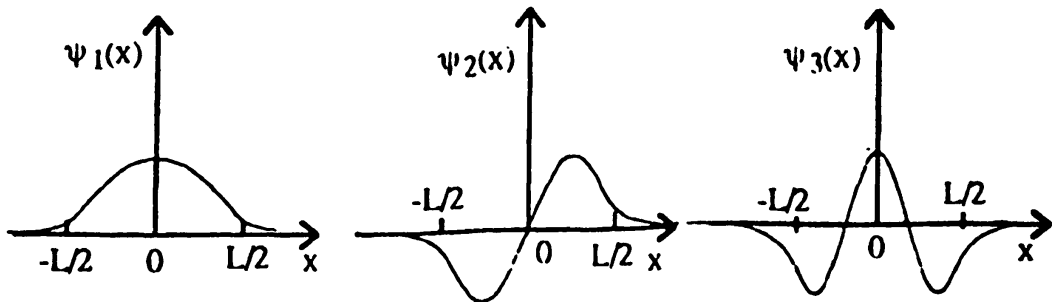
όπου οι μεταβλητές ξ , η υπακούουν κάθε φορά στη σχέση (3.149), με την τιμή του γ να εξαρτάται από τα δεδομένα του προβλήματος. Το σχήμα (3.19(α)) σκιαγραφεί το γραφικό προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων, τα οποία λαμβάνονται από τα σημεία τομής των κύκλων $\xi^2 + \eta^2 = \gamma^2$, γνωστής ακτίνας $\gamma = \sqrt{mV_0L^2/2\hbar^2}$, με τις καμπύλες $\xi \tan \xi = \eta$ και $\xi \cot \xi = -\eta$. Η γραφική παράσταση γίνεται για τις χαρακτηριστικές τιμές $\gamma=1$, $\gamma=3$, και $\gamma=4$.

Από την παραπάνω γραφική λύση συνάγεται αμέσως ότι: i) οι ενεργειακές στάθμες είναι μη εκφυλισμένες, όπως αναμένεται για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα. ii) Υπάρχει κάθε φορά ένας πεπερασμένος αριθμός καταστάσεων, που εξαρτάται από την τιμή του γ , που αποτελεί μια "παράμετρο ισχύος" του δυναμικού. Π.χ. για $\gamma = 1$ έχουμε μία, για $\gamma = 3$ δύο και για $\gamma = 4$ τρεις δέσμιες καταστάσεις. Όπως εύκολα μπορεί να προκύψει από τη σχέση αβεβαιότητας (βλ. πρόβλημα 3.14), η τιμή $\gamma \geq 1$ αποτελεί την ελάχιστη τιμή της παραμέτρου γ . Γενικά ισχύει $(N-1) \frac{\pi}{2} \leq \gamma \leq N \frac{\pi}{2}$, όπου N ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων. iii) Το φάσμα των δέσμιων καταστάσεων αποτελείται εναλλάξ από άρτιες και περιττές ιδιοσυναρτήσεις, με τη βασική κατάσταση να είναι άρτια, την επόμενη περιττή κ.ο.κ. Οι ιδιοσυναρτήσεις για τα τρία πρώτα ενεργειακά επίπεδα φαίνονται στο σχήμα (3.19(β)).





(α)



(β)

Σχ. 3.19. (α) Γραφική λύση για το προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων στο πρόβλημα του τετραγωνικού φρέατος δυναμικού. (β) Οι ιδιοσυναρτήσεις για τα τρία πρώτα ενεργειακά επίπεδα.

Τέλος, για να μελετήσουμε την οριακή περίπτωση όπου $V_0 \rightarrow \infty$ (συνεπώς $\gamma \rightarrow \infty$), μπορούμε να κάνουμε την αλλαγή $V(x)=0$ για $|x| < L/2$ και $V(x) = V_0$ για $|x| > L/2$ στο πρόβλημα του τετραγωνικού φρέατος δυναμικού. Αυτό ισοδυναμεί με το να προσθέσουμε μια σταθερά V_0 στο δυναμικό $V(x)$, κάτι που, όπως παρατηρήσαμε και σε προηγούμενο παράδειγμα, απλά μετατοπίζει τις ενεργειακές στάθμες κατά V_0 , ενώ δεν αλλάζει τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας. Έτσι, οι δέσμες καταστάσεις συμβαίνουν τώρα για $0 \leq E < V_0$ και προσδιορίζονται πάντα από



τις συνθήκες (3.150), όπου τώρα $p = \sqrt{2mE}$ και $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Όταν $V_0 \rightarrow \infty$, οι λύσεις των εξισώσεων (3.150) δίνονται από τη σχέση

$$\xi_n = n \frac{\pi}{2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.151)$$

απ' όπου προκύπτει ότι οι αντίστοιχες ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (3.152)$$

Το αποτέλεσμα αυτό είναι όμοιο με το αποτέλεσμα του φρέατος δυναμικού άπειρου βάθους της §3.6, όπως θα περιμέναμε.

ii) $E > 0$.

Για το πρόβλημα σκέδασης $E > 0$, υποθέτοντας ότι η πρόσπτωση του σωματιδίου πάνω στο φρέαρ δυναμικού γίνεται από αριστερά, παίρνουμε τις λύσεις

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar} & x < -\frac{L}{2} \\ C e^{ipx/\hbar} & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.153)$$

$$\psi_E(x) = F e^{iqx/\hbar} + G e^{-iqx/\hbar}, \quad -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \quad (3.154)$$

όπου $p = \sqrt{2mE}$ και $q = \sqrt{2m(V_0 + E)}$. Ως συνήθως, εφαρμογή της συνθήκης συνέχειας της $\psi_E(x)$ και της $\frac{d\psi_E(x)}{dx}$ στα σημεία $x = \pm \frac{L}{2}$ μας δίνει τέσσερις σχέσεις, από τις οποίες απαλείφοντας τα F, G και λύνοντας ως προς $B/A, C/A$, βρίσκουμε για τους συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T τις εκφράσεις

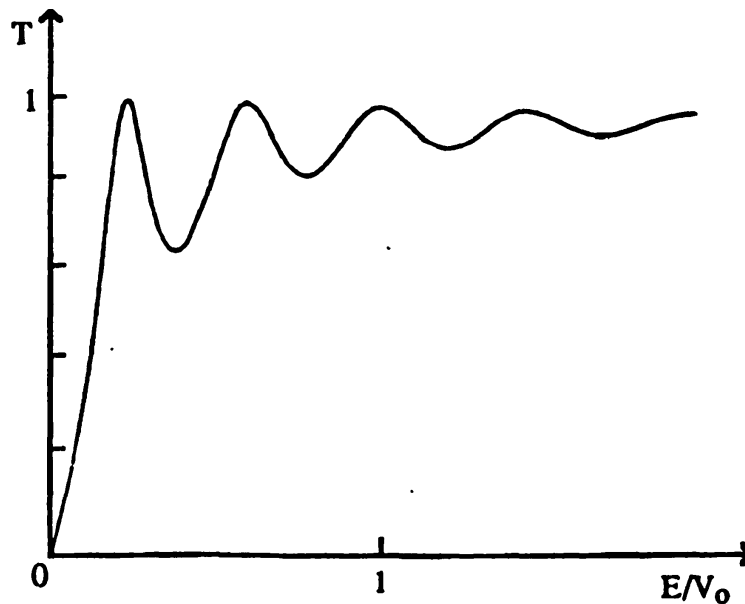
$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4p^2 q^2}{(p^2 - q^2)^2 \sin^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{4E(V_0 + E)}{V_0^2 \sin^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)} \right]^{-1} \quad (3.155)$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(p^2 - q^2)^2 \sin^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)}{4p^2 q^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2\left(\frac{qL}{\hbar}\right)}{4E(V_0 + E)} \right]^{-1} \quad (3.156)$$

Εύκολα επαληθεύουμε ότι πάντα ισχύει $R + T = 1$. Το σημαντικό και εδώ είναι ότι, εν γένει, ο συντελεστής διέλευσης είναι $T < 1$, σε αντίθεση με το κλασικό αποτέλεσμα. Ο συντελεστής T είναι μονάδα (τέλεια διέλευση) μόνο για ορισμένες τιμές της ενέργειας (συντονισμοί), που αντιστοιχούν στη συνθήκη $\frac{qL}{\hbar} = n\pi$ ($n =$

$1, 2, 3, \dots$). Αντίθετα, για $\frac{qL}{\hbar} = (2n+1)\frac{\pi}{2}$, ο συντελεστής T παρουσιάζει ελάχιστα. Η τυπική συμπεριφορά του T φαίνεται στο σχήμα 3.20.

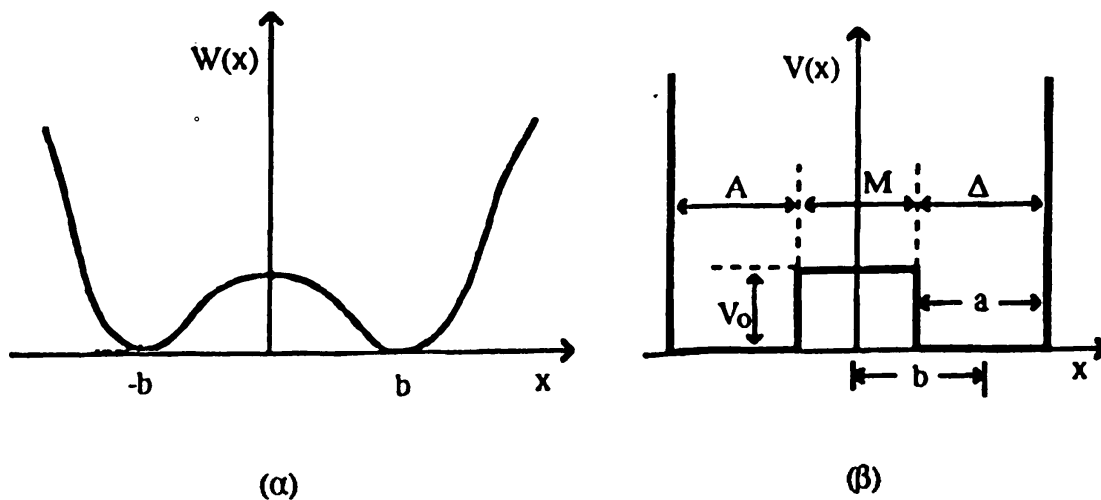




Σχ. 3.20. Ο συντελεστής διέλευσης για ένα τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού.

3.9. Το μόριο της αμμωνίας - Διπλό φρέαρ δυναμικού.

Το μόριο της αμμωνίας NH_3 , που θα συζητήσουμε αναλυτικότερα στην επόμενη παράγραφο, έχει σχήμα πυραμίδας, της οποίας τη βάση σχηματίζουν τα τρία άτομα του υδρογόνου και την κορυφή κατέχει το άτομο του αζώτου (σχ. 3.25). Αν x είναι ο άξονας, που περνά από την κορυφή κάθετα στη βάση, και b το ύψος της πυραμίδας με αρχή την κορυφή της, τότε το δυναμικό $W(x)$, που περιγράφει το μόριο της αμμωνίας, εικονίζεται στο σχ. 3.21 (α).



Σχ. 3.21. (α) Το δυναμικό $W(x)$ για το μόριο της αμμωνίας NH_3 (β) Το διπλό φρέαρ δυναμικού - προσέγγιση του δυναμικού του μορίου της αμμωνίας.



Το σημείο $x=b$ είναι σημείο ευσταθούς ισορροπίας, όπου το δυναμικό παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο. Όσο ελαττώνουμε το x , τόσο το δυναμικό αυξάνει και περνάει από ένα τοπικό μέγιστο για $x = 0$, που αποτελεί σημείο ασταθούς ισορροπίας. Για x αρνητικό, το μόριο έχει αναστραφεί στο χώρο σαν ομπρέλα και το δυναμικό είναι συμμετρικό ως προς την αρχή, μ' ένα άλλο τοπικό ελάχιστο στο σημείο $x=-b$. Εμείς εδώ, θα προσεγγίσουμε ένα τέτοιο πραγματικό δυναμικό $W(x)$ με το απλοποιημένο δυναμικό του σχήματος 3.21(β), που παριστάνει ένα διπλό φρέαρ δυναμικού και του οποίου η μελέτη αναπαράγει τα κύρια χαρακτηριστικά του πραγματικού δυναμικού $W(x)$ του μορίου της αμμωνίας. Ας σημειωθεί ότι ανάλογη μελέτη μπορεί να γίνει με βάση το πιο πολύπλοκο σύστημα του διπλού αρμονικού ταλαντωτή, στον οποίο θ' αναφερθούμε στην §4.5.

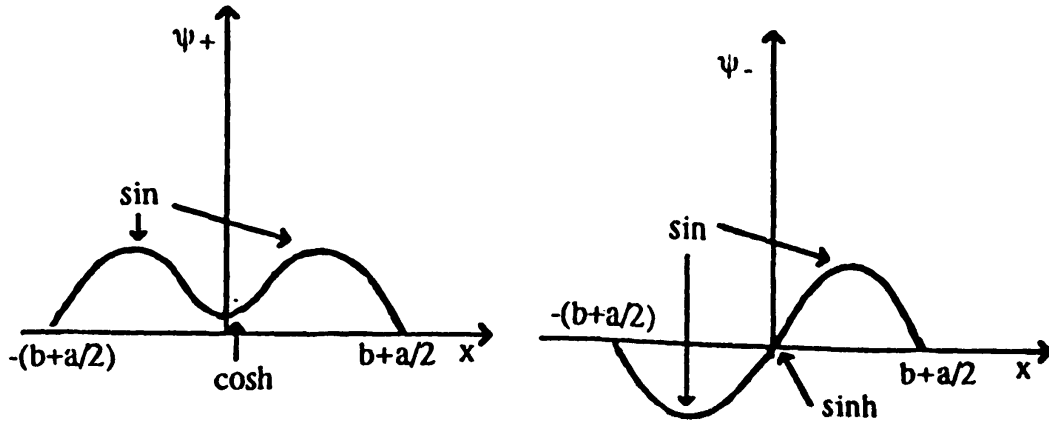
Για τη μελέτη του δυναμικού διπλού φρέατος (σχ. 3.21 (β)), περιοριζόμαστε στη φυσικά ενδιαφέρουσα περίπτωση όπου $E < V_0$, για την οποία κλασικά το σωματίδιο παραμένει στο ένα ή στο άλλο φρέαρ δυναμικού (αριστερά Α ή δεξιά Δ). Κβαντομηχανικά, επειδή το δυναμικό είναι συμμετρικό, οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για τις τρεις περιοχές του σχήματος μπορούν να γραφούν (οι ιδιοσυναρτήσεις μηδενίζονται στα σημεία $x = \pm(b + \frac{a}{2})$)

$$\psi_+(x) = \begin{cases} C_1 \sin \left[\frac{p}{\hbar} \left(x + b + \frac{a}{2} \right) \right] & \text{περιοχή Α} \\ C_2 \cosh \frac{qx}{\hbar} & \text{περιοχή Μ} \\ C_1 \sin \left[\frac{p}{\hbar} \left(-x + b + \frac{a}{2} \right) \right] & \text{περιοχή Δ} \end{cases}$$

$$\psi_-(x) = \begin{cases} -C_1 \sin \left[\frac{p}{\hbar} \left(x + b + \frac{a}{2} \right) \right] & \text{περιοχή Α} \\ C_2 \sinh \frac{qx}{\hbar} & \text{περιοχή Μ} \\ C_1 \sin \left[\frac{p}{\hbar} \left(-x + b + \frac{a}{2} \right) \right] & \text{περιοχή Δ} \end{cases} \quad (3.157)$$

όπου $p = \sqrt{2mE}$ και $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Έτσι, συνολικά, οι ιδιοσυναρτήσεις που παίρνουμε από τις παραπάνω εκφράσεις αντιστοιχούν σε συμμετρικές $\psi_+(x)$ (ομοτιμία +1) και αντισυμμετρικές $\psi_-(x)$ (ομοτιμία -1) συναρτήσεις, όπως φαίνεται στο σχήμα (3.22).





Σχ. 3.22. Άρτιες και περιττές ιδιοσυναρτήσεις δυναμικού διπλού φρέατος

Εφαρμόζοντας τη συνθήκη συνέχειας για την $\psi_{\pm}(x)$ και την $\frac{d\psi_{\pm}(x)}{dx}$ στα σημεία $x = \pm(b - \frac{a}{2})$, βρίσκουμε τις σχέσεις

$$\tan\left(\frac{pa}{\hbar}\right) = -\frac{p}{q} \cot h\left[\frac{q}{\hbar}\left(b - \frac{a}{2}\right)\right] \quad \text{για } \psi_+ \quad (3.158\alpha)$$

$$\tan\left(\frac{pa}{\hbar}\right) = -\frac{p}{q} \tan h\left[\frac{q}{\hbar}\left(b - \frac{a}{2}\right)\right] \quad \text{για } \psi_- \quad (3.158\beta)$$

Οι σχέσεις (3.158) αποτελούν τη συνθήκη, απ' όπου προσδιορίζονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας για άρτιες και περιττές ιδιοσυναρτήσεις, αντίστοιχα. Ας υποθέσουμε στη συνέχεια ότι $E \ll V_0$, δηλαδή ότι $q \gg p$, $q = \sqrt{2mV_0}$. Τότε, οι συνθήκες (3.158) για τον προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων γίνονται

$$\tan\left(\frac{pa}{\hbar}\right) \approx -\frac{pa}{\hbar} \frac{1 \pm 2e^{-(q/\hbar)(2b-a)}}{(qa/\hbar)} \quad (3.159)$$

όπου τα \pm αντιστοιχούν στις ιδιοσυναρτήσεις ψ_{\pm} , αντίστοιχα. Θέτοντας $\xi = \frac{pa}{\hbar}$, η

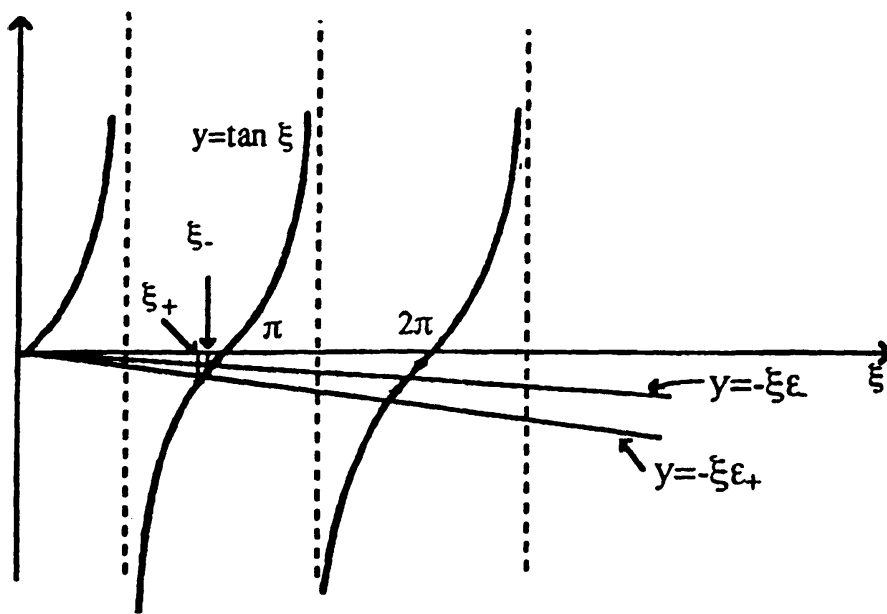
παραπάνω εξίσωση γράφεται

$$\tan \xi \approx -\xi \frac{1 \pm 2e^{-(q/\hbar)(2b-a)}}{(qa/\hbar)} \quad (3.160)$$

Η γραφική λύση της (3.160) φαίνεται στο σχ. (3.23).

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας προκύπτουν από τα σημεία τομής των καμπυλών $y = \tan \xi$ και των ευθειών $y = -\xi \epsilon_{\pm}$, όπου ϵ_{\pm} είναι δύο σταθερές πολύ μικρές σε σχέση με τη μονάδα, γειτονικές μεταξύ τους και τέτοιες ώστε $\epsilon_- < \epsilon_+$, όπως φαίνεται από την (3.160). Όπως προκύπτει και από τη γραφική λύση, οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_{\pm} με τις πιο μικρές ιδιοτιμές ενέργειας E_{\pm} αντιστοιχούν στα σημεία ξ_{\pm} του σχήματος, τα οποία είναι λίγο μικρότερα του π . Στην προσέγγιση που εργαζόμαστε,





Σχ. 3.23. Γραφική λύση της (3.160) για τον προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων του δυναμικού διπλού φρέατος.

αναπτύσσοντας κατά Taylor επαληθεύουμε εύκολα ότι

$$\xi_+ \approx \frac{\pi}{1+\epsilon_+}, \quad \xi_- \approx \frac{\pi}{1+\epsilon_-} \quad (3.161)$$

απ' όπου προκύπτει ότι για τις ενεργειακές στάθμες με τις μικρότερες ιδιοτιμές έχουμε

$$\begin{aligned} \Delta E = E_- - E_+ &\approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[\frac{1}{(1+\epsilon_-)^2} - \frac{1}{(1+\epsilon_+)^2} \right] \\ &\approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \frac{4e^{-(q/\hbar)(2b-a)}}{(qa/\hbar)} \end{aligned} \quad (3.162)$$

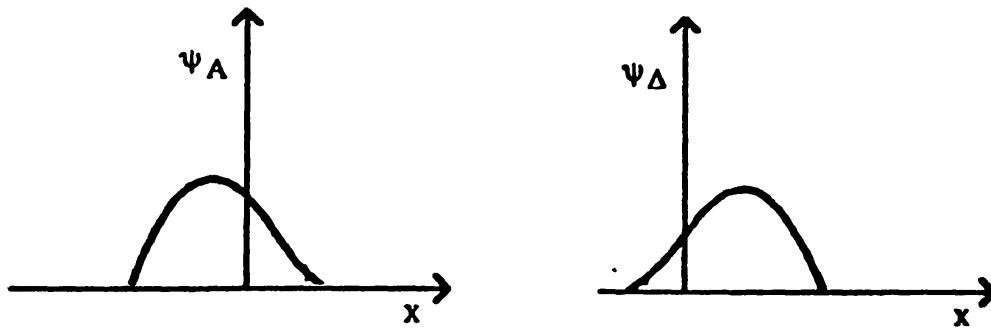
Όπως πάντα, η ιδιοτιμή που αντιστοιχεί στη συμμετρική (άρτια) ιδιοσυνάρτηση είναι μικρότερη από την αμέσως επόμενη, που αντιστοιχεί στην αντισυμμετρική (περιττή) ιδιοσυνάρτηση: $E_+ < E_-$.

Είναι φανερό από τα παραπάνω ότι έχουμε εδώ άλλη μια εκδήλωση του φαινομένου σήραγγας. Ας το δούμε αυτό πιο καθαρά. Από τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας ψ_{\pm} μπορούμε να κατασκευάσουμε τους γραμμικούς συνδυασμούς

$$\begin{aligned} \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+ - \psi_-) \\ \psi_{\Delta} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+ + \psi_-) \end{aligned} \quad (3.163)$$

Οι συναρτήσεις ψ_A, ψ_{Δ} παριστάνουν καταστάσεις, για τις οποίες το σωματίδιο έχει τη μέγιστη πιθανότητα να βρεθεί στην αριστερή ή δεξιά περιοχή, αντίστοιχα (σχ. (3.24))





Σχ. 3.24. Οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_A και ψ_Δ .

Ας υποθέσουμε ότι για $t = 0$ η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t=0)$ συμπίπτει με την ψ_Δ , έτσι ώστε το σωματίδιο να βρίσκεται στη δεξιά περιοχή. Τότε, μετά από χρόνο t , η κυματοσυνάρτηση θα είναι

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + \psi_- e^{-iE_- t/\hbar} \right] \\ &= \frac{e^{-iE_+ t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[\psi_+ + \psi_- e^{-i\Delta E t/\hbar} \right] \end{aligned} \quad (3.164)$$

Μετά από χρόνο

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{\Delta E}, \quad (3.165)$$

η κυματοσυνάρτηση θα είναι

$$\Psi(x, \tau) = \frac{e^{-iE_+ \tau/\hbar}}{\sqrt{2}} (\psi_+ - \psi_-) = \psi_A e^{-iE_+ \tau/\hbar}, \quad (3.166)$$

και, συνεπώς,

$$|\Psi(x, \tau)|^2 = |\psi_A|^2 \quad (3.167)$$

Έτσι, το σωματίδιο θα βρεθεί στην αριστερή περιοχή. Με άλλα λόγια, η επαλληλία (3.164) παριστάνει ένα σωματίδιο, που εκτελεί ταλάντωση από δεξιά προς τα αριστερά με περίοδο $T = 2\tau$.

Από τα προηγούμενα συνάγεται ότι το μόριο της αμμωνίας, από το οποίο ξεκινήσαμε, ευρισκόμενο σε μία αρχική κατάσταση αναστρέφεται περιοδικά στο χώρο και αυτό γίνεται δυνατό μέσω του φαινομένου σήραγγας. Για το μόριο της αμμωνίας είναι $\Delta E \approx 10^{-4}$ eV, αντίστοιχη συχνότητα $\nu = (\Delta E/\hbar) \approx 24.000$ MHz και χρόνος αναστροφής ίσος με $\tau = \frac{1}{2\nu} \approx 2.1 \times 10^{-11}$ sec. Το αντίστοιχο μήκος κύματος είναι $\lambda = 1.25$ cm. Τα μεγέθη αυτά αντιστοιχούν στην περιοχή των μικροκυμάτων και γι' αυτό το λόγο το παραπάνω φαινόμενο παίζει βασικό ρόλο στην κατασκευή του μείζεο αμμωνίας (MASER - Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation - Ενίσχυση μικροκυμάτων με εξαναγκασμένη εκπομπή ακτινοβολίας) (βλ. τις δύο επόμενες παραγράφους).



Ας εξετάσουμε τα παραπάνω χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση με πίνακες. Είναι φανερό ότι το σύστημά μας είναι ένα σύστημα δύο καταστάσεων και ας πάρουμε σαν βάση τις καταστάσεις $|\psi_+\rangle$ και $|\psi_-\rangle$:

$$|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.168)$$

Μια οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi\rangle$ μπορεί να γραφεί σαν επαλληλία

$$|\psi\rangle = C_1 |\psi_+\rangle + C_2 |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix},$$

με

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1 \quad (3.169)$$

Η χαμιλτονιανή \hat{H} είναι προφανώς διαγώνια στην παραπάνω βάση με ιδιοτιμές E_+ και E_- :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix} \quad (3.170)$$

Η εξίσωση Schrödinger για το καταστατικό διάνυσμα $|\psi(t)\rangle$ είναι

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.171)$$

και, αν για $t=0$ η κατάσταση είναι η (3.169), η λύση σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή είναι

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= C_1 e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+(t)\rangle + C_2 e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-(t)\rangle \\ &= e^{-iE_+t/\hbar} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 e^{-i\Delta E t/\hbar} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.172)$$

Οι καταστάσεις $|\psi_\Delta\rangle$ και $|\psi_A\rangle$, που παριστάνουν ένα σωματίδιο "δεξιά" ή "αριστερά", αντίστοιχα, ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} |\psi_\Delta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |\psi_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+\rangle - |\psi_-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.173)$$

Οι καταστάσεις (3.173) αποτελούν ιδιοκαταστάσεις του τελεστή - πίνακα

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.174\alpha)$$

(βλ. και πρόβλημα 2.11)

με ιδιοτιμές

$$\hat{X} |\psi_\Delta\rangle = |\psi_\Delta\rangle, \quad \hat{X} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (3.174\beta)$$



Η ιδιοτιμή +1 αντιστοιχεί στο γεγονός "το σωματίδιο είναι στο δεξιό φρέαρ" και η ιδιοτιμή -1 στο γεγονός "το σωματίδιο είναι στο αριστερό φρέαρ". Η μέση τιμή του τελεστή \hat{X} ως προς την κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ τη χρονική στιγμή t είναι

$$\langle \hat{X} \rangle = C_1^* C_2 e^{-i\Delta E t/\hbar} + C_1 C_2^* e^{i\Delta E t/\hbar} \quad (3.175)$$

Έτσι, αν αρχικά για $t = 0$ το σωματίδιο βρίσκεται στο δεξιό φρέαρ, οπότε $C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, τότε η μέση τιμή του \hat{X} είναι

$$\langle \hat{X} \rangle = \cos(\Delta E t/\hbar) \quad (3.176)$$

Αυτό σημαίνει ότι μετά από χρόνο

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{\Delta E}, \quad (3.177)$$

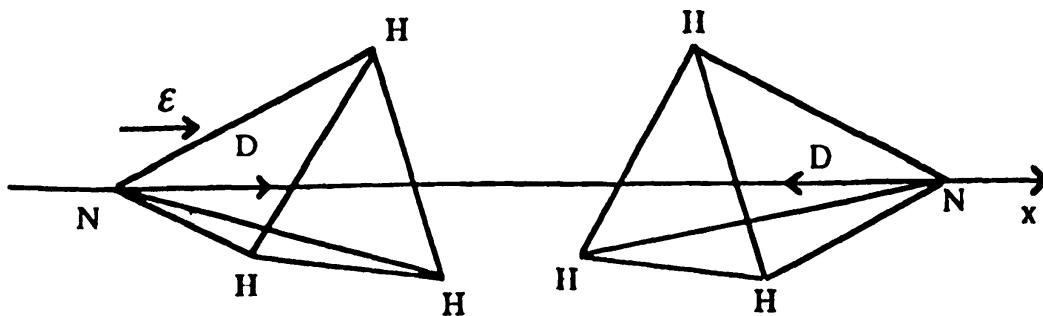
το σωματίδιο θα βρεθεί στο αριστερό φρέαρ και η περίοδος της ταλάντωσης δεξιά-αριστερά είναι

$$T = 2\tau = \frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \quad (3.178)$$

Για το μόριο της αμμωνίας σημειώσαμε ήδη ότι $\Delta E \approx 10^{-4}$ eV και ο χρόνος αναστροφής του είναι $\tau \approx 2.1 \times 10^{-11}$ sec.

3.10. Αρχή του φαινομένου μείζερ.

Είμαστε τώρα σε θέση να δούμε τη βασική αρχή του φαινομένου μείζερ, ενός φαινομένου με μεγάλη επίπτωση στη φυσική των ερτζιανών κυμάτων, των τηλεπικοινωνιών και της αστροφυσικής. Ας φανταστούμε πρώτα ότι τοποθετούμε ένα μόριο αμμωνίας μέσα σ' ένα στατικό ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} , που δρα κατά μήκος του άξονα x , ο οποίος περνά από την κορυφή του μορίου της αμμωνίας κάθετα στη βάση (σχ. 3.25)



Σχ. 3.25. Το μόριο της αμμωνίας μέσα σ' ένα στατικό ηλεκτρικό πεδίο

Για το μέγεθος της ηλεκτρικής διπολικής ροπής D του μορίου της αμμωνίας μπορούμε να γράψουμε



$$\hat{D} = d_0 \hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & d_0 \\ d_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.179)$$

οπότε οι ιδιοτιμές για τις δύο καταστάσεις $|\psi_{\Delta}\rangle$ και $|\psi_A\rangle$ είναι $\pm d_0$, αντίστοιχα, όπως περιμένουμε από φυσική άποψη. Σε απουσία ηλεκτρικού πεδίου, η κυματοσυνάρτηση είναι είτε άρτια είτε περιττή και $\langle D \rangle = 0$. Η δυναμική ενέργεια του μορίου μέσα στο ηλεκτρικό πεδίο είναι τότε

$$\hat{W}_{\text{δυν}} = -\varepsilon \hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & -d_0 \varepsilon \\ -d_0 \varepsilon & 0 \end{pmatrix} \quad (3.180)$$

Συνεπώς, η ολική χαμιλτονιανή του μορίου μέσα στο πεδίο είναι

$$H = \begin{pmatrix} E_+ & -d_0 \varepsilon \\ -d_0 \varepsilon & E_- \end{pmatrix} \quad (3.181)$$

Για τη χαμιλτονιανή (3.181) βρίσκουμε εύκολα για τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις

$$E'_{+} = \frac{E_+ + E_-}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Delta E}{2}\right)^2 + (d_0 \varepsilon)^2}, \quad |\psi_{+}\rangle' = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} \quad (3.182)$$

και

$$E'_{-} = \frac{E_+ + E_-}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Delta E}{2}\right)^2 + (d_0 \varepsilon)^2}, \quad |\psi_{-}\rangle' = \begin{pmatrix} \sin\theta \\ -\cos\theta \end{pmatrix} \quad (3.183)$$

όπου

$$\tan\theta = \frac{d_0 \varepsilon}{\frac{\Delta E}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Delta E}{2}\right)^2 + (d_0 \varepsilon)^2}} \quad (3.184)$$

Στο όριο ασθενούς πεδίου $d_0 \varepsilon \ll \frac{\Delta E}{2}$ έχουμε για τα δύο ενεργειακά επίπεδα

$$E'_{+} \approx E_+ - \frac{(d_0 \varepsilon)^2}{\Delta E}, \quad |\psi_{+}\rangle' \approx |\psi_{+}\rangle \quad (3.185)$$

$$E'_{-} \approx E_- + \frac{(d_0 \varepsilon)^2}{\Delta E}, \quad |\psi_{-}\rangle' \approx |\psi_{-}\rangle \quad (3.186)$$

ενώ για τη μέση τιμή της διπολικής ροπής βρίσκουμε

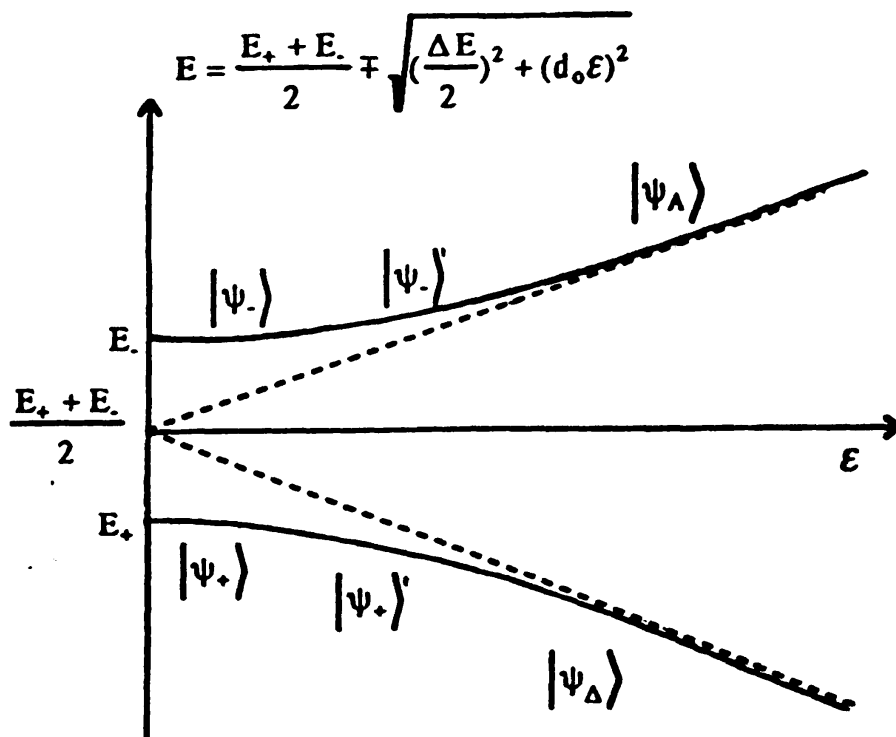
$$\langle \psi_{+}|' \hat{D} |\psi_{+}\rangle' \approx \frac{2d_0^2 \varepsilon}{\Delta E}, \quad \langle \psi_{-}|' \hat{D} |\psi_{-}\rangle' \approx -\frac{2d_0^2 \varepsilon}{\Delta E} \quad (3.187)$$

Αντίθετα, στο όριο ισχυρού πεδίου $d_0 \varepsilon \gg \frac{\Delta E}{2}$ παίρνουμε τις αντίστοιχες εκφράσεις.



$$\begin{aligned}
 E'_+ &\approx \frac{E_+ + E_-}{2} - \left(d_0 \mathcal{E} + \frac{\Delta E^2}{8d_0 \mathcal{E}} \right), |\psi_{+>' } \approx |\psi_{\Delta}> \\
 E'_- &\approx \frac{E_+ + E_-}{2} + \left(d_0 \mathcal{E} + \frac{\Delta E^2}{8d_0 \mathcal{E}} \right), |\psi_{->' } \approx |\psi_A> \\
 \langle \psi_{+>' } | \hat{D} | \psi_{+>' } \rangle &\approx d_0, \quad \langle \psi_{->' } | \hat{D} | \psi_{->' } \rangle \approx d_0
 \end{aligned}
 \tag{3.188}$$

Σ' αυτή την περίπτωση οι ενέργειες είναι κατά προσέγγιση γραμμικές ως προς το πεδίο, όπως για ένα κλασικό δίπολο. Από τα παραπάνω βλέπουμε ότι, στο όριο ασθενούς πεδίου, το φαινόμενο σήραγγας κυριαρχεί και οι καταστάσεις τείνουν να είναι είτε $|\psi_{+>}$ είτε $|\psi_{->}$. Αντίθετα, στο όριο ισχυρού πεδίου, το πεδίο πολώνει το μόριο και οι καταστάσεις τείνουν να είναι είτε $|\psi_{\Delta}>$ είτε $|\psi_A>$, όπως θα περίμενε κανείς κλασικά. Για ενδιάμεσες τιμές του ηλεκτρικού πεδίου, έχουμε μια εξισορρόπηση ανάμεσα στις δύο αυτές περιπτώσεις, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα που δείχνει την εξάρτηση των ενεργειακών επιπέδων από την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου \mathcal{E} .



Το τελευταίο βήμα για να περάσουμε στο φαινόμενο μείζερ είναι να δούμε πως μόρια αμιμονίας ευρισκόμενα στην κατάσταση $|\psi_{->}$ αποδίδουν την ενέργεια ΔE μεταπίπτοντας στην κατάσταση $|\psi_{+>}$. Ας τοποθετήσουμε, λοιπόν, τώρα τα μόρια μέσα σ' ένα ταλαντούμενο ηλεκτρικό πεδίο κυκλικής συχνότητας ω

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$$

Η ολική χαμιλτονιανή είναι τώρα



$$H = \begin{pmatrix} E_+ & -d_0 \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ -d_0 \mathcal{E}_0 \cos \omega t & E_- \end{pmatrix} \quad (3.190)$$

Σ' αυτή την περίπτωση θα πρέπει να λύσουμε την χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$, στην οποία η χαμιλτονιανή εξαρτάται από το χρόνο. Σ' αυτή την περίπτωση, αν θέσουμε

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}, \quad (3.191)$$

η εξίσωση Schrödinger ανάγεται σ' ένα σύστημα δύο εξισώσεων

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) &= E_+ c_1(t) - d_0 \mathcal{E}_0 c_2(t) \cos \omega t \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) &= E_- c_2(t) - d_0 \mathcal{E}_0 c_1(t) \cos \omega t \end{aligned} \quad (3.192)$$

Εισάγοντας τις κυκλικές συχνότητες

$$\omega_0 = \frac{\Delta E}{\hbar}, \quad \omega_1 = \frac{d_0 \mathcal{E}_0}{\hbar} \quad (3.193)$$

και τους μετασχηματισμούς

$$\begin{aligned} C_1(t) &= e^{iE_+ t/\hbar} c_1(t) \\ C_2(t) &= e^{iE_- t/\hbar} c_2(t), \end{aligned} \quad (3.194)$$

οι παραπάνω εξισώσεις γράφονται

$$\begin{aligned} i \frac{dC_1(t)}{dt} &= -\frac{\omega_1 C_2(t)}{2} \left[e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t} \right] \\ i \frac{dC_2(t)}{dt} &= -\frac{\omega_1 C_1(t)}{2} \left[e^{-i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t} \right] \end{aligned} \quad (3.195)$$

Η γενική λύση αυτών των εξισώσεων είναι λίγο πολύπλοκη, αλλά απλοποιείται κατά πολύ όταν $\omega \approx \omega_0$, οπότε οι πρώτοι όροι στο δεξιό μέλος των εξισώσεων (3.195) μεταβάλλονται με το χρόνο πολύ πιο αργά σε σύγκριση με τους δεύτερους, που ταλαντώνονται αρκετά γρήγορα και έτσι η συνεισφορά τους είναι μηδενική, κατά μέσο όρο, με το πέρασμα του χρόνου. Αγνοώντας λοιπόν αυτούς τους όρους, οι εξισώσεις απλοποιούνται στο σύστημα

$$\begin{aligned} i \frac{dC_1(t)}{dt} &= -\frac{\omega_1 C_2(t)}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ i \frac{dC_2(t)}{dt} &= -\frac{\omega_1 C_1(t)}{2} e^{-i(\omega-\omega_0)t} \end{aligned} \quad (3.196)$$

Για τη λύση του συστήματος αυτού μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους μετασχηματισμούς

$$C_1(t) = \lambda e^{i(\omega-\omega_0)t/2}, \quad C_2(t) = \mu e^{-i(\omega-\omega_0)t/2}, \quad (3.197)$$



οπότε προκύπτει ένα σύστημα εξισώσεων με σταθερούς συντελεστές.

Ας υποθέσουμε ότι για $t=0$ η αρχική κατάσταση $|\psi(0)\rangle$ είναι

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_{-}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.198)$$

Τότε η λύση $|\psi(t)\rangle$ μετά από χρόνο t βρίσκουμε ότι είναι

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}$$

$$c_1(t) = i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{i(\omega-\omega_0)t/2}$$

$$c_2(t) = \frac{\omega_1}{\Omega} \left[\frac{\Omega}{\omega_1} \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \frac{i(\omega-\omega_0)}{\omega_1} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-i(\omega-\omega_0)t/2}, \quad (3.199)$$

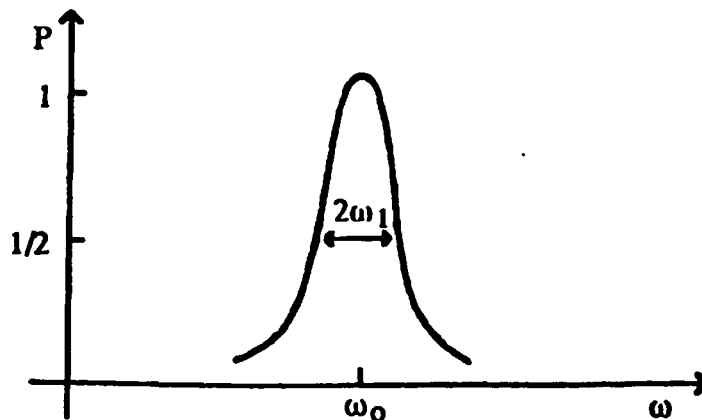
όπου

$$\Omega = \sqrt{(\omega-\omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad (3.200)$$

Η πιθανότητα, λοιπόν, που έχουν τα μόρια της αμμωνίας να μεταπηδήσουν μετά από χρόνο t από την αρχική κατάσταση $|\psi_{-}\rangle$ στην κατάσταση $|\psi_{+}\rangle$ και ν' αποδώσουν την ενέργεια ΔE , είναι

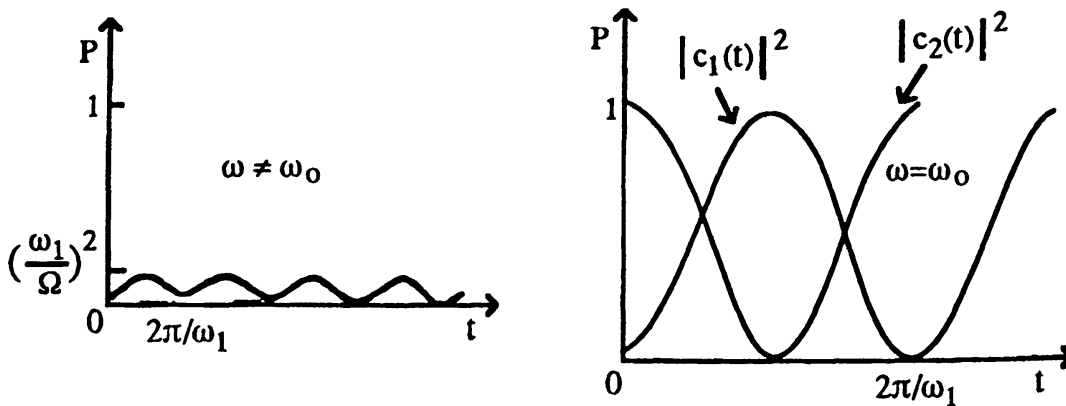
$$P = |\langle \psi_{+} | \psi(t) \rangle|^2 = |c_1(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{(\omega-\omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\sqrt{(\omega-\omega_0)^2 + \omega_1^2} t/2\right) \quad (3.201)$$

Ο τύπος αυτός είναι γνωστός σαν τύπος του Rabi. Φαίνεται αμέσως ότι η πιθανότητα P παρουσιάζει μέγιστο για $\omega=\omega_0$ (συντονισμός, σχ. 3.26) και γι' αυτή την περίπτωση μετά από χρόνο $T = \pi/\omega_1$ (σχ. 3.27) όλα τα μόρια έχουν μεταπηδήσει στην κατάσταση $|\psi_{+}\rangle$ και έχουν έτσι αποδώσει την ενέργεια ΔE . Αυτή η εκπομπή ενέργειας γίνεται με τη μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (συχνότητας 24.000 MHz για την αμμωνία, που μελετάμε) και είναι γνωστή σαν εξαναγκασμένη εκπομπή. Η εξαναγκασμένη εκπομπή αποτελεί τη βάση του φαινομένου μείζερ.



Σχ. 3.26. Καμπύλη συντονισμού



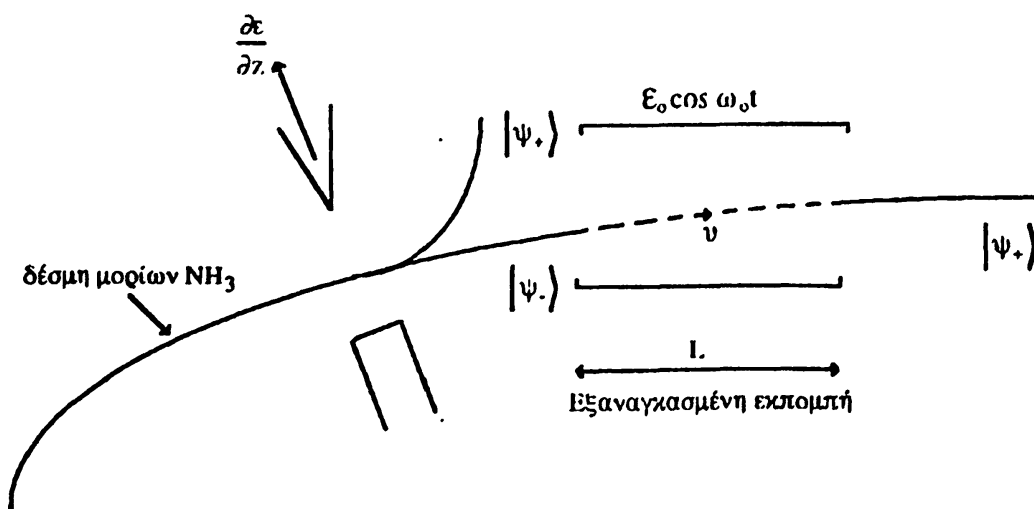


Σχ. 3.27. Χρονική εξέλιξη της πιθανότητας μετάβασης από $|\psi\rangle$ σε $|\psi_+\rangle$ για (α) $\omega \neq \omega_0$ και (β) $\omega = \omega_0$ (συντονισμός)

3.11. Μείζερο - Λέιζερο

Ας θεωρήσουμε μια δέσμη μορίων αμμωνίας, που περνά μέσα από μια περιοχή με ανομοιογενές πεδίο (σχ. 3.28). Η αρχική δέσμη αποτελείται από μόρια, που βρίσκονται και στις δύο καταστάσεις $|\psi_+\rangle$ και $|\psi_-\rangle$. Πάνω στα μόρια θα εξασκηθεί μια δύναμη, που είναι ίση με (όριο ασθενούς πεδίου)

$$(F_z)_\pm = \pm \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{d_0^2 \mathcal{E}^2}{\Delta E} \right) = \pm 2 \left(\frac{d_0^2}{\Delta E} \right) \mathcal{E} \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} \right) \quad (3.202)$$



Σχ. 3.28. Διάταξη μείζερο αμμωνίας.

Η δύναμη αυτή έχει σημείο αντίθετο για μόρια στην κατάσταση $|\psi_+\rangle$ απ' ό,τι για μόρια στη κατάσταση $|\psi_-\rangle$. Έτσι, στην έξοδο του πεδίου η αρχική δέσμη των μορίων της αμμωνίας θα έχει διαχωριστεί σε δύο δέσμες, από τις οποίες η μια θ' αποτελείται από μόρια ευρισκόμενα στην κατάσταση $|\psi_-\rangle$ και η άλλη από μόρια ευρισκόμενα στην κατάσταση $|\psi_+\rangle$. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται αναστροφή πληθυσμών, μια και μ' αυτή επιτυγχάνουμε ένα πληθυσμό μορίων που βρίσκονται εξ ολοκλήρου στην κατάσταση $|\psi_-\rangle$. Η δράση του μείζερ αμμωνίας συνίσταται τώρα στην εξαναγκασμένη εκπομπή κατά τη μετάβαση από την ενεργειακή στάθμη E_- στην E_+ , που συμβαίνει όταν αναγκάσουμε τη δέσμη $|\psi_-\rangle$ να περάσει με ταχύτητα v μέσα από μια κοιλότητα, όπου εφαρμόζεται ένα πεδίο $E_0 \cos \omega t$. Το μήκος L της κοιλότητας ικανοποιεί τη σχέση $L/v = (2n+1) T = (2n+1)\pi/\omega_1$. Στην έξοδο της κοιλότητας, που είναι γνωστή εδώ σαν κοιλότητα μικροκυμάτων, η αρχική δέσμη $|\psi_-\rangle$ έχει μετατραπεί σε δέσμη $|\psi_+\rangle$ και έχει έτσι προκύψει η εξαναγκασμένη εκπομπή.

Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να ενισχύσουμε ένα πολύ ασθενές αρχικό σήμα χωρίς καθόλου, όπως λέμε, θόρυβο υποβάθρου. Από αυτό προκύπτουν και οι σημαντικές εφαρμογές των μείζερ, παραδείγματος χάρη στην ραδιοαστρονομία (βλ. §Π-Ι.5). Επίσης, μπορούμε να πάρουμε ένα εξαιρετικά σταθερό αυτοδιατηρούμενο σύστημα ταλαντωτή, με εφαρμογές λόγου χάρη στ' ατομικά ρολόγια.

Υπάρχουν και άλλοι τύποι μείζερ, που βασίζονται σε διαφορετικά φυσικά φαινόμενα, αλλά των οποίων η μαθηματική διαπραγμάτευση είναι παρόμοια με αυτή του συστήματος δύο καταστάσεων που εξετάσαμε για το μόριο της NH_3 (π.χ. υπάρχουν συστήματα τριών, τεσσάρων καταστάσεων κ.λ.π.).

Η αρχή του μείζερ, που μόλις είδαμε, είναι παρόμοια με αυτή του λέιζερ, με τη διαφορά ότι στο λέιζερ η συχνότητα ακτινοβολίας είναι στο οπτικό φάσμα (LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation - Ενίσχυση φωτός με εξαναγκασμένη εκπομπή ακτινοβολίας). Κατ' αρχήν, ας διατυπώσουμε διαφορετικά την έννοια της αναστροφής πληθυσμών, που είδαμε στο μείζερ αμμωνίας. Σύμφωνα με την κλασική στατιστική φυσική, σ' ένα σύστημα σωματιδίων σε θερμική ισορροπία ο αριθμός N_i των σωματιδίων, που βρίσκονται στο ενεργειακό επίπεδο E_i σε μια χρονική στιγμή, δίνεται από την κατανομή Maxwell-Boltzmann

$$N_i = C g_i e^{-E_i/kT} \quad , \quad (3.203)$$

όπου g_i είναι ο βαθμός εκφυλισμού, k η σταθερά Boltzmann και T η απόλυτη θερμοκρασία. Η σταθερά C μπορεί να υπολογισθεί συναρτήσει του ολικού αριθμού

$$N = \sum_i N_i \text{ των σωματιδίων}$$



$$C = N \left(\sum g_i e^{-E_i/kT} \right)^{-1} \quad (3.204)$$

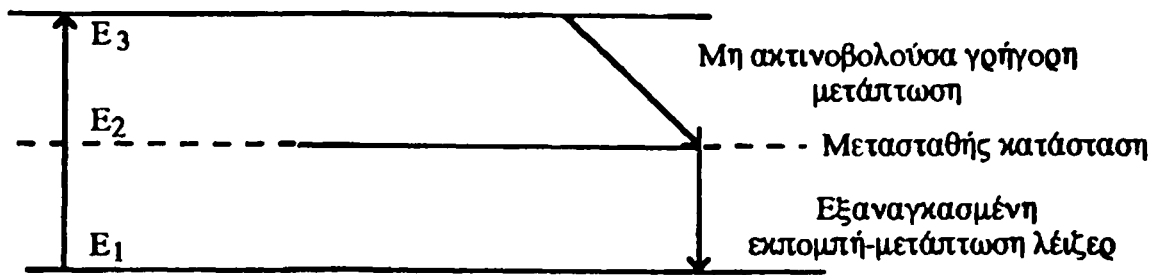
Η κατανομή Maxwell-Boltzmann είναι μια σχέση της κλασικής στατιστικής μηχανικής και σε ορισμένες περιπτώσεις χρειάζεται να λάβουμε υπ' όψη κβαντομηχανικά φαινόμενα (βλ. Παράρτημα II). Αλλά, σε θερμοκρασίες δωματίου, η (3.203) αποτελεί μια ικανή περιγραφή για την κατανομή σωματιδίων στις διάφορες καταστάσεις που μας ενδιαφέρουν. Έτσι, αν έχουμε δύο μη εκφυλισμένα ενεργειακά επίπεδα E_1 και E_2 ($E_2 > E_1$), θα είναι

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(E_2-E_1)/kT} \quad (3.205)$$

και, συνεπώς, επειδή $E_2 > E_1$, έπεται ότι $N_2 < N_1$. Για να έχουμε εξαναγκασμένη εκπομπή και ενίσχυση, θα πρέπει να επιτύχουμε αναστροφή πληθυσμών με $N_2 > N_1$, οπότε βέβαια το σύστημά μας δεν θα είναι πλέον σε θερμική ισορροπία. Στην περίπτωση του μείζερ αμμωνίας, ο πληθυσμός του ενεργειακού επιπέδου E_+ είναι ελαφρά μεγαλύτερος από εκείνον του ενεργειακού επιπέδου E_- . Η αναστροφή πληθυσμών επιτυγχάνεται τότε με τη μέθοδο διαχωρισμού της αρχικής δέσμης, έτσι ώστε μόνο μόρια στην κατάσταση $|h\rangle$ να εισέρχονται στην κοιλότητα μικροκυμάτων.

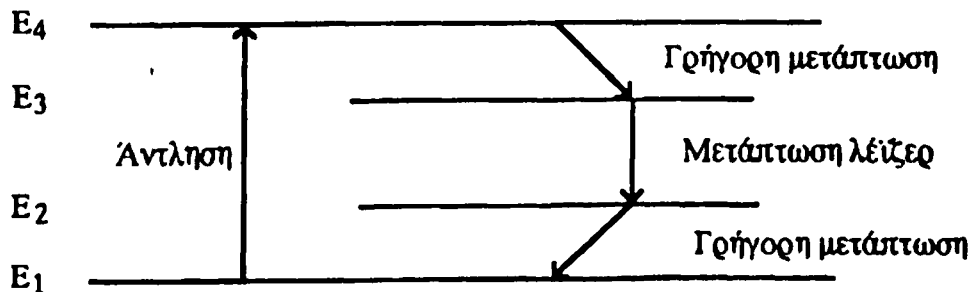
Η αρχή του λέιζερ είναι παρόμοια, μόνο που η διαδικασία αναστροφής πληθυσμών είναι διαφορετική και η ακτινοβολία είναι στο οπτικό φάσμα. Στις διατάξεις λέιζερ (όπως και στις σημερινές πλέον διατάξεις μείζερ), το υλικό που εκπέμπει την οπτική ακτινοβολία παραμένει στάσιμο μέσα στην κοιλότητα ακτινοβολίας (αντί να εκτοξεύεται μέσα σ' αυτή, όπως στο μείζερ αμμωνίας). Στις διατάξεις λέιζερ πρέπει να έχουμε συστήματα τουλάχιστον τριών καταστάσεων. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα με τρία ενεργειακά επίπεδα $E_1 < E_2 < E_3$ (σχ. 3.29), με μια γρήγορη μετάπτωση από το επίπεδο E_3 στο E_2 και μια αργή από το E_2 στο E_1 . Χρησιμοποιώντας μια προσπίπτουσα ακτινοβολία κυκλικής συχνότητας $\omega = \frac{E_3-E_1}{\hbar}$, αναγκάζουμε όσο γίνεται περισσότερα άτομα να διεγερθούν από την κατάσταση E_1 στην E_3 . Η διαδικασία αυτή είναι γνωστό σαν άντληση. Αν το σύστημα αποδιεγείρεται γρήγορα από την κατάσταση E_3 στην E_2 (με τη μορφή εκπομπής όχι φωτονίων, αλλά φωνονίων, τα οποία είναι κβάντα ταλάντωσης των ατόμων του κρυσταλλικού πλέγματος γύρω από τις μέσες θέσεις τους, βλ. §4.6), μπορούμε να έχουμε μια αναστροφή πληθυσμών μεταξύ των επιπέδων E_2 και E_1 .





Σχ.3.29. Η αρχή του λέιζερ

Αν είχαμε μόνο δύο επίπεδα E_3 και E_1 , μια τέτοια αναστροφή πληθυσμών δεν θα ήταν δυνατή, γιατί όταν ο αριθμός N_3 των ατόμων στην κατάσταση E_3 γίνει ίσος με τον αριθμό N_1 των ατόμων στην κατάσταση E_1 , η απορρόφηση ακτινοβολίας εξισορροπείται από την εξαναγκασμένη εκπομπή. Το λέιζερ από ρουμπίνι παρέχει μια τέτοια ακριβώς διάταξη τριών ενεργειακών επιπέδων και ήταν το πρώτο που κατασκευάστηκε το 1960. Λέιζερ αερίων παρέχουν άλλα παραδείγματα σχετικών διατάξεων με περισσότερα από τρία ενεργειακά επίπεδα. Παραδείγματος χάρη, το λέιζερ He-Ne αποτελεί ένα σημαντικό ακόμη και σήμερα παράδειγμα με τέσσερα ενεργειακά επίπεδα. Τέσσερα ενεργειακά επίπεδα (σχ. 3.30) με μια γρήγορη μετάπτωση μεταξύ των επιπέδων 4 και 3 και μεταξύ των 2 και 1, έτσι ώστε να διευκολύνεται η αναστροφή πληθυσμών μεταξύ των επιπέδων 3 και 2, που δημιουργούν τη μετάπτωση λέιζερ, αποτελούν μια διάταξη ευκολότερης εκπομπής ακτινοβολίας λέιζερ.

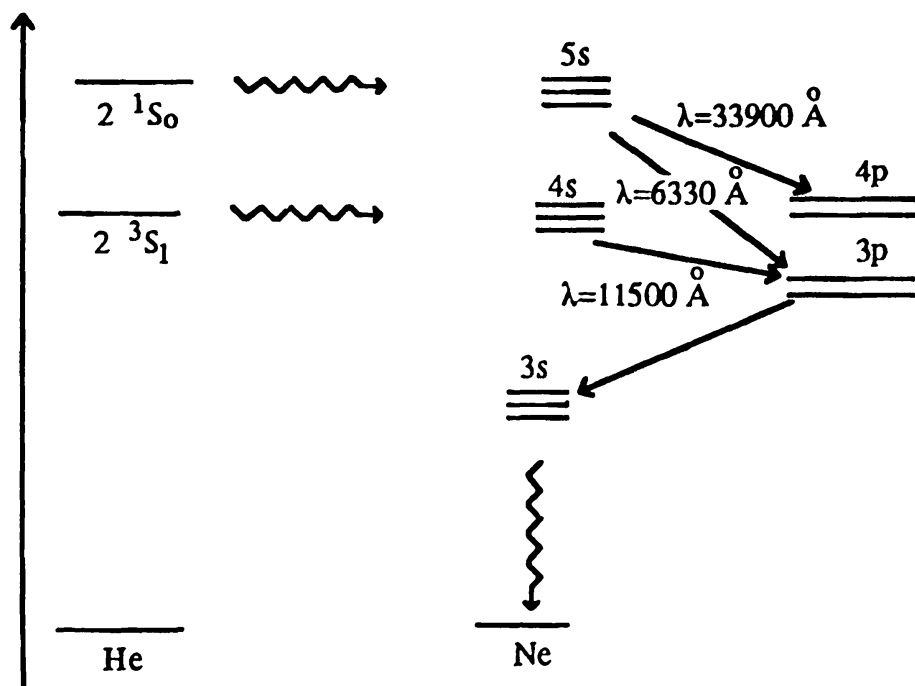


Σχ. 3.30 Λέιζερ τεσσάρων ενεργειακών επιπέδων.

Έτσι, στο λέιζερ He-Ne (σχ. 3.31), στο οποίο έχουμε μείγμα των δύο αερίων σε χαμηλή πίεση, τα ενεργειακά επίπεδα $2(^3S_1)$ και $2(^1S_0)$ του He (βλ. §8.1, §12.1 και §12.2) σχεδόν συμπίπτουν με ορισμένα ενεργειακά επίπεδα 4s και 5s του Ne, αντίστοιχα. Με ηλεκτρική εκκένωση τα άτομα του He διεγείρονται στα επίπεδα $2(^3S_1)$ και $2(^1S_0)$, τα οποία είναι μετασταθή. Τα διεγερμένα άτομα του He συγκρουόμενα με τα άτομα της βασικής κατάστασης του Ne μεταφέρουν εύκολα την



ενέργειά τους στα επίπεδα 4s και 5s του Ne. Με τον τρόπο αυτό δημιουργείται μια αναστροφή πληθυσμών ανάμεσα στα ενεργειακά επίπεδα 4s και 5s, αφ' ενός, και στα χαμηλότερα ενεργειακά επίπεδα 3p και 4p, αφ' ετέρου.



Σχ. 3.31 Τα ενεργειακά επίπεδα του λέιζερ He-Ne

Το μείγμα He-Ne φτιάχνει έτσι ένα διπλό σύστημα τεσσάρων ενεργειακών επιπέδων, με την ακτινοβολία λέιζερ να δημιουργείται κατά τις μεταπτώσεις μεταξύ των επιπέδων 5s και 4p ή 5s και 3p ή 4s και 3p. Τα αντίστοιχα μήκη κύματος των εκπεμπομένων φωτονίων δείχνονται στο σχήμα 3.31. Τα φωτόνια αυτά παγιδεύονται ανάμεσα σε καθρέφτες, δημιουργώντας έτσι στη συνέχεια τις προϋποθέσεις για την ενίσχυση της εκπομπής. Μ' αυτό τον τρόπο παίρνουμε έντονες, μονοχρωματικές, σύμφωνες δέσμες φωτονίων.

Πράγματι το φως, που εκπέμπει μια συσκευή λέιζερ, έχει μεγάλη ένταση (χάρη στην οποία βρίσκει μεγάλες εφαρμογές στη μηχανική και την ιατρική), είναι εξαιρετικά μονοχρωματικό, παρουσιάζει μεγάλη κατευθυντικότητα και χαρακτηρίζεται από συμφωνία φάσης. Στις δύο τελευταίες ιδιότητες βασίζεται κύρια η εφαρμογή της ακτινοβολίας λέιζερ στην ολογραφία και τη μετάδοση τηλεπικοινωνιακών σημάτων μέσα από οπτικές ίνες.

3.12. Περιοδικό δυναμικό

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα σωματίδιο μάζας m μέσα σ' ένα περιοδικό δυναμικό περιόδου x_0

$$V(x) = V(x + x_0)$$

(3.206)



Πριν συζητήσουμε την εφαρμογή ενός τέτοιου περιοδικού δυναμικού σαν μοντέλου για την αλληλεπίδραση ενός ηλεκτρονίου με το κρυσταλλικό πλέγμα ενός στερεού, ας δούμε μερικά βασικά χαρακτηριστικά που παρουσιάζει η κυματοσυνάρτηση σε μια τέτοια περίπτωση.

Πρώτα, ας ορίσουμε τον τελεστή μετατόπισης στο χώρο των θέσεων: είναι ο τελεστής \hat{T}_{x_0} που δρώντας πάνω σε μια κατάσταση $|\psi\rangle$ εκφρασμένη στην αναπαράσταση θέσης την μετατοπίζει στο χώρο των θέσεων κατά x_0

$$\langle x | \hat{T}_{x_0} | \psi \rangle = \langle x + x_0 | \psi \rangle \quad (3.207a)$$

ή, διαφορετικά,

$$\hat{T}_{x_0} \psi(x) = \psi(x + x_0) \quad (3.207b)$$

Για να βρούμε τη μορφή που παίρνει ο \hat{T}_{x_0} μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αναπαράσταση θέσης και ν' αναπτύξουμε κατά Taylor. Έχουμε τότε

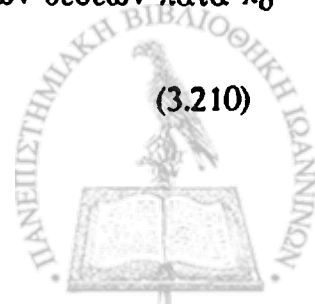
$$\begin{aligned} \langle x | \hat{T}_{x_0} | \psi \rangle &= \langle x + x_0 | \psi \rangle = \psi(x + x_0) \\ &= \psi(x) + x_0 \frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{1}{2!} x_0^2 \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \dots \\ &= \left[1 + \left(\frac{i\hat{p}x_0}{\hbar} \right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\hat{p}x_0}{\hbar} \right)^2 + \dots \right] \psi(x) \\ &= \exp \left(\frac{i\hat{p}x_0}{\hbar} \right) \psi(x) \\ &= \langle x | \exp \left(\frac{i\hat{p}x_0}{\hbar} \right) | \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.208)$$

Στην ίδια μορφή καταλήγουμε χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση ορμής :

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{T}_{x_0} | \psi \rangle &= \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \hat{T}_{x_0} | \psi \rangle \\ &= \int dx N^* e^{-ipx/\hbar} \langle x + x_0 | \psi \rangle \\ &= e^{ipx_0/\hbar} \int dx' N^* e^{-ipx'/\hbar} \langle x' | \psi \rangle \\ &= e^{ipx_0/\hbar} \int dx' \langle p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \\ &= e^{ipx_0/\hbar} \langle p | \psi \rangle \\ &= \langle p | e^{i\hat{p}x_0/\hbar} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.209)$$

Συνεπώς, ο τελεστής που δημιουργεί μετατόπιση στο χώρο των θέσεων κατά x_0 παίρνει τη μορφή

$$\hat{T}_{x_0} = e^{i\hat{p}x_0/\hbar} \quad (3.210)$$



Λόγω της μορφής αυτής, λέμε ότι ο τελεστής \hat{p} είναι ο γεννήτορας των μετατοπίσεων στο χώρο των θέσεων (βλ. και πρόβλημα 2.10).

Δέν είναι δύσκολο να δούμε ότι η χαμιλτονιακή του προβλήματος μας $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$ μετατίθεται με τον τελεστή μετατόπισης \hat{T}_{x_0} . Πράγματι έχουμε

$$[\hat{T}_{x_0}, \hat{H}] = [\hat{T}_{x_0}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{T}_{x_0}, V(x)] \quad (3.211)$$

Ο πρώτος όρος είναι προφανώς μηδέν. Το ίδιο μηδενίζεται και ο δεύτερος όρος, γιατί για μια τυχαία κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ είναι

$$\begin{aligned} [\hat{T}_{x_0}, V(x)] \psi(x) &= [\hat{T}_{x_0} V(x) - V(x) \hat{T}_{x_0}] \psi(x) \\ &= V(x + x_0) \psi(x + x_0) - V(x) \psi(x + x_0) = 0 \end{aligned} \quad (3.212)$$

λόγω της περιοδικότητας (3.206) του δυναμικού. Συνεπώς, παίρνουμε

$$[\hat{T}_{x_0}, \hat{H}] = 0 \quad (3.213)$$

Να σημειωθεί ότι η (3.213) συνεπάγεται $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$ και η ορμή \hat{p} είναι μια σταθερά της κίνησης (βλ. §2.8-2.9). Αυτό βέβαια οφείλεται στο ότι, λόγω της περιοδικότητας του δυναμικού, ολόκληρη η χαμιλτονιακή είναι συμμετρική κάτω από μετατοπίσεις στο χώρο των θέσεων. Στη σχέση συμμετριών και διατηρούμενων ποσοτήτων θα επανέλθουμε στην §5.1.

Αυτό που μας ενδιαφέρει τώρα εδώ είναι το γεγονός ότι, λόγω της (3.213), οι τελεστές \hat{T}_{x_0} και \hat{H} έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις και, άρα, οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας είναι και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της μετατόπισης. Έτσι, αν λ_1, λ_2 είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή \hat{T}_{x_0} που αντιστοιχούν στις δύο γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας $\psi_1(x), \psi_2(x)$, θα έχουμε

$$\begin{aligned} \hat{T}_{x_0} \psi_1(x) &= \psi_1(x + x_0) = \lambda_1 \psi_1(x) \\ \hat{T}_{x_0} \psi_2(x) &= \psi_2(x + x_0) = \lambda_2 \psi_2(x) \end{aligned} \quad (3.214)$$

Για τις δύο γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις $\psi_1(x), \psi_2(x)$ η ορίζουσα Wronski είναι (βλ. σχέση 3.36)

$$W(x) = \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} = \text{σταθ.} \quad (3.215)$$

Λόγω και της (3.224) έχουμε

$$W(x) = W(x + x_0) = \lambda_1 \lambda_2 W(x) \quad (3.216)$$

Συνεπώς, θα ισχύει ότι



$$\lambda_1 \lambda_2 = 1 \quad (3.217)$$

Όμως, εκτός από αυτό είναι εύκολο να δούμε ότι για φυσικά αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις θα πρέπει να ισχύει επίσης η σχέση

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1 \quad (3.218)$$

Μπορούμε να πεισθούμε γι' αυτό αν γράψουμε ότι

$$\psi_i(x + nx_0) = \lambda^n \psi_i(x), \quad i = 1, 2 \quad (3.219)$$

όπου $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Φαίνεται τότε ότι δεν μπορεί να είναι $|\lambda_i| > 1$ ή $|\lambda_i| < 1$, γιατί τότε η $\psi_i(x + nx_0)$ θα αύξανε ή θα ελαττώνονταν απεριόριστα καθώς $x \rightarrow \pm \infty$, ανάλογα. Λαμβάνοντας υπ' όψη τις (3.217)-(3.218) μπορούμε να γράψουμε τις λ_1, λ_2 με τη μορφή

$$\lambda_1 = e^{iKx_0}, \quad \lambda_2 = e^{-iKx_0} \quad (3.220)$$

όπου K πραγματικός αριθμός, που θα δούμε παρακάτω ότι μπορεί να περιοριστεί στο διάστημα

$$-\frac{\pi}{x_0} \leq K \leq \frac{\pi}{x_0} \quad (3.221)$$

Έτσι, για την τυχαία φυσικά αποδεκτή κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x)$ θα ισχύει η σχέση

$$\psi(x + nx_0) = e^{inKx_0} \psi(x), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.222)$$

Η σχέση αυτή είναι γνωστή σαν συνθήκη Bloch. Γράφοντας στη συνέχεια την $\psi(x)$ σαν

$$\psi(x) = e^{iKx} \phi_K(x) \quad (3.223)$$

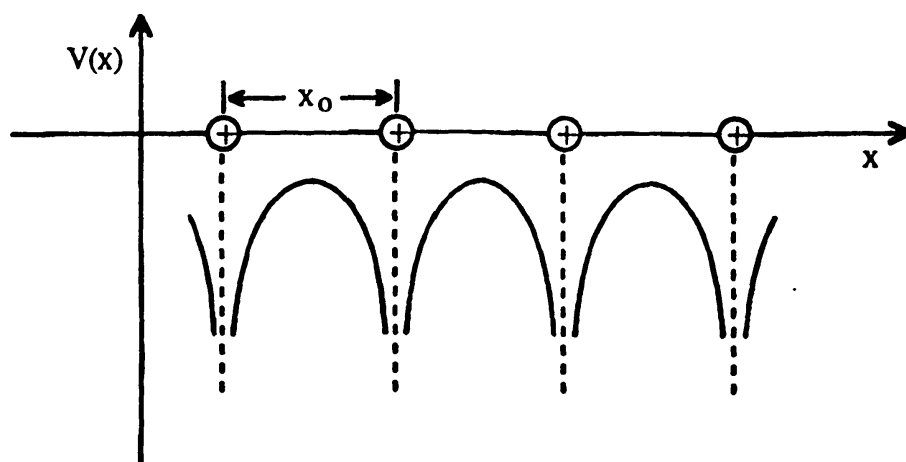
βλέπουμε αμέσως με βάση την (3.222) ότι η $\phi_K(x)$ είναι περιοδική με περίοδο x_0 :

$$\phi_K(x) = \phi_K(x + x_0) \quad (3.224)$$

Η ιδιότητα αυτή είναι γνωστή σαν θεώρημα Bloch (θεώρημα Floquet στην μαθηματική βιβλιογραφία). Η $\psi(x)$ παριστάνει ένα τρέχον κύμα, γνωστό σαν κύμα Bloch, με μήκος κύματος $\lambda = 2\pi/K$ και πλάτος $\phi_K(x)$ περιοδικό με την ίδια περίοδο όπως το δυναμικό. Να σημειωθεί, όμως, ότι το hK δεν είναι η ορμή των ιδιοκαταστάσεων (3.223), μια και η $\phi_K(x)$ εξαρτάται επίσης από την θέση (βλ. και πρόβλημα 3.24).

Ας επανέλθουμε τώρα να συζητήσουμε την κίνηση ενός ηλεκτρονίου μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα ενός στερεού. Το σχήμα 3.32 δείχνει ποιοτικά την δυναμική ενέργεια ενός τέτοιου ηλεκτρονίου. Παραδείγματος χάρη, ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα μέταλλο λιθίου. Το άτομο του λιθίου, όπως θα δούμε

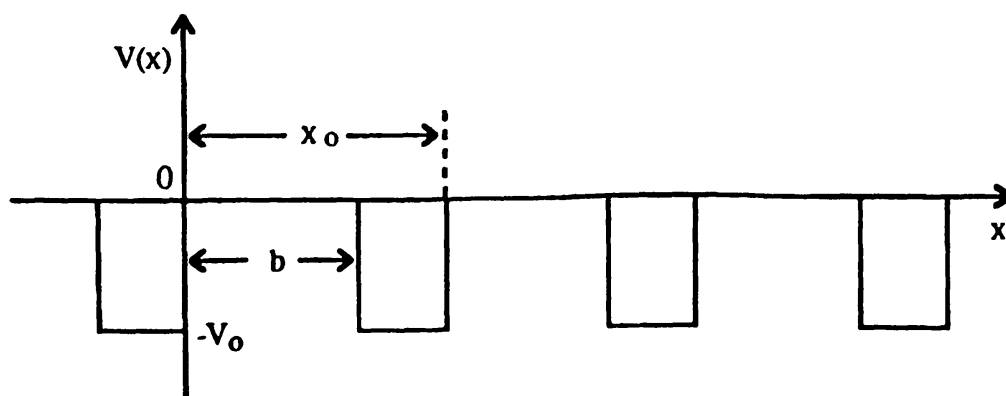




Σχ. 3.32 Η δυναμική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα ενός μετάλλου.

αναλυτικότερα στο κεφάλαιο XII (§12.2), συνίσταται από ένα σχεδόν σταθερό ιόν, μ' έναν πυρήνα και δύο εσωτερικά ηλεκτρόνια στον K φλοιό και ένα ηλεκτρόνιο σθένους στον L φλοιό. Τα δύο εσωτερικά ηλεκτρόνια είναι ισχυρά δεσμευμένα με τον πυρήνα, ενώ το ηλεκτρόνιο σθένους με πολύ μικρότερη ενέργεια σύνδεσης είναι χαλαρά δεσμευμένο στο άτομο. Η δυναμική ενέργεια ενός τέτοιου ηλεκτρονίου ανάμεσα σε δύο μεμονωμένα ιόντα λιθίου Li^+ (όπως δίνεται π.χ. από το άθροισμα των ενεργειών Coulomb μεταξύ του ηλεκτρονίου και των θετικών ιόντων) φαίνεται ποιοτικά στο σχήμα 3.32. Η περίοδος του δυναμικού είναι σ' αυτή την περίπτωση $x_0 \sim 3\text{\AA}$.

Βέβαια, η μελέτη των ηλεκτρονίων μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα των στερεών απαιτεί μια ποικιλία προσεγγιστικών μεθόδων και υπολογιστικών τεχνικών. Πάντως, πολύ απλά μοντέλα μπορούν να δώσουν τα κύρια φυσικά χαρακτηριστικά που παρατηρούνται σχετικά. Έτσι, την ποιοτική εικόνα του δυναμικού στο σχήμα 3.32 μπορούμε να την προσεγγίσουμε με το περιοδικό δυναμικό διαδοχικών τετραγωνικών φρεάτων του σχήματος 3.33, γνωστό σαν



Σχ. 3.33. Δυναμικό Kronig-Penney



δυναμικό Kronig-Penney. Τα φρέατα εδώ παριστάνουν σχηματικά την έλξη που εξασκούν τα άτομα (ιόντα) του κρυσταλλικού πλέγματος πάνω στα ηλεκτρόνια. Ανάλογη μελέτη με όμοια αποτελέσματα μπορεί να γίνει με βάση το μοντέλο δ-συνάρτησης ενός περιοδικού δυναμικού, όπως εκτίθεται στο πρόβλημα 3.25.

Με την εκλογή που φαίνεται στο σχήμα 3.33 διακρίνουμε δύο περιπτώσεις : -
 $V_0 < E < 0$ και $E > 0$.

$$i) -V_0 < E < 0$$

Οι εξισώσεις Schrödinger παίρνουν τη μορφή

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad \text{εντός φρέατος} \quad (3.225\alpha)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \kappa^2 \psi(x) = 0 \quad \text{εκτός φρέατος} \quad (3.225\beta)$$

όπου

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \quad , \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (3.226)$$

Οι λύσεις των εξισώσεων (3.225) είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} , & b - x_0 < x < 0 \\ C e^{kx} + D e^{-kx} , & 0 < x < b \end{cases} \quad (3.227)$$

Από την συνθήκη Bloch (3.222) συμπεραίνουμε ότι στην περιοχή $b < x < x_0$ η λύση γράφεται

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{iKx_0} \psi(x - x_0) = \\ &= e^{iKx_0} [A e^{ik(x-x_0)} + B e^{-ik(x-x_0)}] , \quad b < x < x_0 \end{aligned} \quad (3.228)$$

Η ένωση των λύσεων στα σημεία $x = 0$ και $x = b$ απαιτεί την συνέχεια εκεί της $\psi(x)$ και της πρώτης παραγώγου της. Έτσι, θα πάρουμε τέσσερις ομογενείς εξισώσεις με τους τέσσερις αγνώστους A, B, C, D . Για να έχουμε μια μη τετριμμένη λύση θα πρέπει η ορίζουσα των συντελεστών των A, B, C, D να μηδενίζεται. Αυτό μας δίνει τη συνθήκη για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών της ενέργειας E , που βρίσκουμε ότι είναι

$$\cos K x_0 = \cos [k(x_0 - b)] \cosh(\kappa b) - \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \sin[k(x_0 - b)] \sinh(\kappa b) \quad (3.229)$$

$$ii) E > 0$$

Γίνεται φανερό ότι τώρα θέτοντας $\kappa = ik'$, όπου $k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$, η συνθήκη (3.229) παίρνει τη μορφή (είναι $\sin(i\beta) = i \sinh \beta$, $\cos(i\beta) = \cosh \beta$)

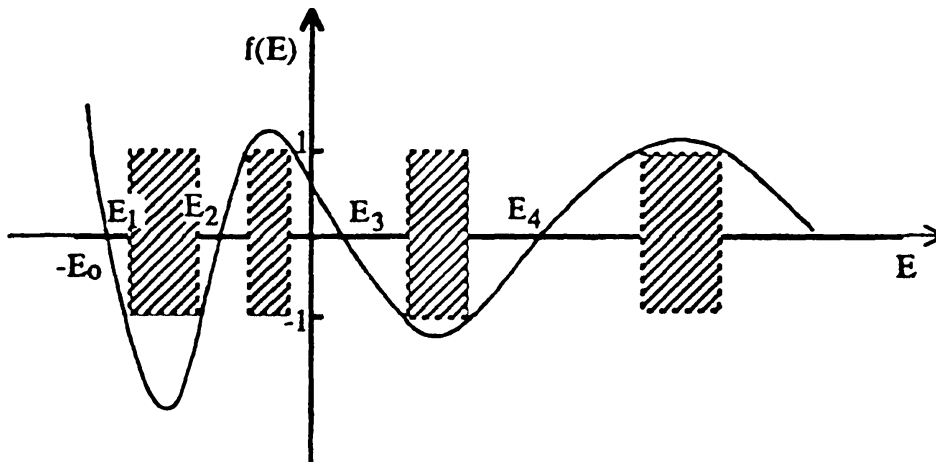
$$\cos K x_0 = \cos [k(x_0 - b)] \cos(k' b) - \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin[k(x_0 - b)] \sin(k' b) \quad (3.230)$$



Τόσο η (3.229), όσο και η (3.230), είναι μιά πεπλεγμένη εξίσωση για την ιδιοτιμή E της ενέργειας. Μπορούμε να γράψουμε και τις δύο με τη μορφή

$$\cos K x_0 = f(E) \quad (3.231)$$

όπου η συνάρτηση $f(E)$ παριστάνει το δεξιό μέλος των εξισώσεων (3.229) και (3.230). Αυτό είναι δυνατόν γιατί τα δύο αυτά δεξιά μέλη ενώνονται ομαλά στο σημείο $E = 0$. Η συνάρτηση $f(E)$ απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα 3.34.



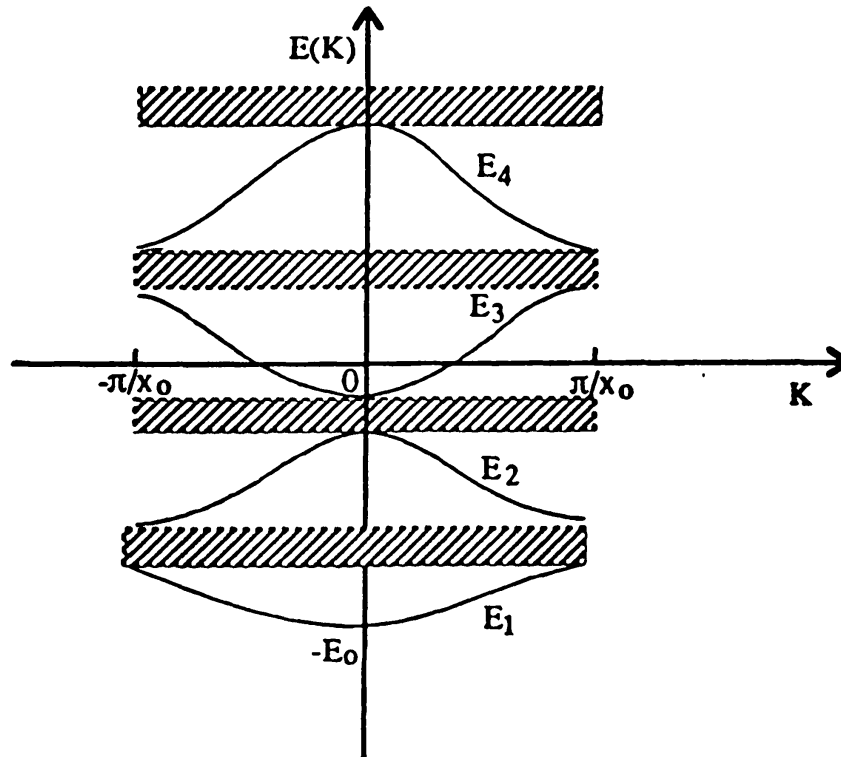
Σχ. 3.34. Η συνάρτηση $f(E)$ που παριστάνει το δεξιό μέλος των εξισώσεων (3.229) και (3.230). Οι παχύτερες γραμμές δείχνουν τις επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας, που διαχωρίζονται από απαγορευμένες ζώνες (γραμμοσκιασμένες περιοχές).

Προκύπτει εδώ το βασικό χαρακτηριστικό: οι επιτρεπόμενες τιμές της E , που ικανοποιούν την (3.231), εμφανίζονται κατά ζώνες, οι οποίες διακόπτονται από απαγορευμένα ενεργειακά κενά στα οποία τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να έχουν τιμές ενέργειας. Αυτό φαίνεται αμέσως από το γεγονός ότι θα πρέπει να είναι $|\cos K x_0| \leq 1$. Ένα άλλο χαρακτηριστικό που προκύπτει από το σχήμα 3.34 είναι ότι οι ενεργειακές ζώνες που αντιστοιχούν στις χαμηλότερες ιδιοτιμές της ενέργειας είναι και οι πιο στενές. Αυτό είναι εύκολο να κατανοηθεί, γιατί προφανώς οφείλεται στο γεγονός ότι τα ηλεκτρόνια που είναι πιο ισχυρά δεσμευμένα στα άτομα είναι λιγότερο πιθανό να διαταραχθούν από την παρουσία των άλλων ατόμων. Να σημειωθεί ότι τα ηλεκτρόνια με τις χαμηλότερες αρνητικές ιδιοτιμές της ενέργειας μπορούν να περάσουν από το ένα άτομο στο άλλο μόνο λόγω φαινομένου σήραγγας διαμέσου του φράγματος δυναμικού ανάμεσα στα φρέατα. Τέλος, αξίζει να παρατηρήσουμε ότι υπάρχει μια κατώτατη τιμή για την ενέργεια: $E > -E_0$. Αυτό φαίνεται αν παρατηρήσουμε ότι η συνάρτηση $f(E)$ που παριστάνει το αριστερό μέλος της (3.229) αυξάνει χωρίς όριο πέρα από μια ορισμένη τιμή του κ .

Τα παραπάνω χαρακτηριστικά απεικονίζονται και στο διάγραμμα που μπορούμε να κάνουμε της ενέργειας E συναρτήσεως της παραμέτρου K . Καταρχήν, όπως φαίνεται από τις σχέσεις (3.222) και (3.231), τόσο οι κυματοσυναρτήσεις



$\psi(x)$, όσο και οι ιδιοτιμές της ενέργειας E δεν μεταβάλλονται αν το K αυξηθεί ή ελαττωθεί κατά $2\pi/x_0$. Έτσι, μπορούμε χωρίς βλάβη της γενικότητας να υποθέσουμε ότι το K περιορίζεται στο διάστημα (3.221). Το διάστημα αυτό είναι γνωστό σαν (πρώτη) ζώνη Brillouin (βλ. και § 8.3). Στο διάγραμμα του σχήματος 3.35 φαίνεται το ενεργειακό φάσμα $E(K)$ συναρτήσει του K στην (πρώτη) ζώνη Brillouin. Απαρτίζεται από τις επιτρεπόμενες συνεχείς ενεργειακές ζώνες που διαχωρίζονται από απαγορευμένες ενεργειακές περιοχές.



Σχ. 3.35. Η ενέργεια $E(K)$ σαν συνάρτηση του K για τις κατώτερες ενεργειακές ζώνες στην (πρώτη) ζώνη Brillouin.

Η ύπαρξη επιτρεπόμενων ενεργειακών ζωνών - ζώνες αγωγιμότητας - εξηγεί πολλές από τις βασικές ιδιότητες στη φυσική της στερεάς κατάστασης και την ηλεκτρική αγωγιμότητα των μετάλλων (αγωγοί, ημιαγωγοί, μονωτές), οι οποίες διαφορετικά θ' αποτελούσαν μυστήριο (βλ και § 8.3). Έτσι, έχουμε εδώ μερικές από τις πιο θεαματικές εφαρμογές της κβαντικής μηχανικής.

Προβλήματα

- 3.1. i) Εκφράζοντας την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ συναρτήσει του πραγματικού πλάτους $A(\mathbf{r},t)$ και της φάσης $S(\mathbf{r},t)$
- $$\Psi(\mathbf{r},t) = A(\mathbf{r},t) e^{iS(\mathbf{r},t)/\hbar}$$
- ναδειχθεί ότι η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ είναι



$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = A^2 \frac{\nabla S}{m}$$

ii) Η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ δεν προσδιορίζεται μονοσήμαντα από την εξίσωση συνέχειας $\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r},t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = 0$, γιατί προφανώς αυτή ικανοποιείται και από την έκφραση $\mathbf{J}(\mathbf{r},t) + \mathbf{f}(\mathbf{r},t)$, όπου $\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r},t) = 0$ με την $\mathbf{f}(\mathbf{r},t)$ αυθαίρετη κατά τα άλλα συνάρτηση.

Να εξηγηθεί γιατί μόνο σε μία διάσταση είναι $\mathbf{f} = 0$ και η $J(x,t)$ προσδιορίζεται μονοσήμαντα σ' αυτή την περίπτωση.

iii) Χρησιμοποιώντας τον τελεστή της ορμής $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ στην έκφραση της πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$, ναδειχθεί ότι το ολοκλήρωμα της $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ σε ολόκληρο το χώρο των θέσεων είναι ίσο με την μέση τιμή της ταχύτητας:

$$\int \mathbf{J}(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right\rangle = \langle \hat{\mathbf{v}} \rangle.$$

3.2. Να μελετηθεί η περίπτωση που ένα σωματίδιο προσπίπτει από δεξιά πάνω στο δυναμικό (3.38). Ναδειχθεί ότι οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης δίνονται από τις ίδιες εκφράσεις, όπως και στην περίπτωση που το σωματίδιο προσπίπτει από αριστερά.

Το γεγονός αυτό δείχνει ότι ανάκλαση συμβαίνει όχι μόνο όταν έχουμε πρόσπτωση πάνω σε δυναμικό που παρουσιάζει αύξηση κατά την κατεύθυνση της κίνησης, αλλά γενικότερα κάθε φορά που έχουμε οποιαδήποτε απότομη μεταβολή στο δυναμικό.

3.3. i) Ναδειχθεί ότι για ένα μιγαδικό δυναμικό $V(x,t)$ η εξίσωση συνέχειας παίρνει τη μορφή

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

ii) Θεωρούμε το δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -V_0 - iU & x \geq 0 \end{cases}$$

Για ένα σωματίδιο που έρχεται από αριστερά, να γραφούν οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger και να επαληθευτεί η εξίσωση συνέχειας για $x \geq 0$. Να δοθεί φυσική ερμηνεία στο αποτέλεσμα.

3.4. i) Ένας ποδηλάτης, μάζας $m = 70 \text{ Kg}$, που κινείται με ταχύτητα $v = 36 \text{ Km/h}$, φθάνει μπροστά σε ένα λόφο ύψους 20 m και πλάτους 50 m . Ναδειχθεί ότι η πιθανότητα, που έχει να περάσει το λόφο, λόγω φαινομένου



σήραγγας, είναι $T \approx e^{-6.7 \times 10^{38}}$. Η αμελητέα αυτή ποσότητα δείχνει βέβαια ότι τα κβαντικά φαινόμενα είναι ασήμαντα για μακροσκοπικά αντικείμενα.

ii) Ναδειχθεί ότι η πιθανότητα να υπάρξει διέλευση, λόγω φαινομένου σήραγγας, για ένα πρωτόνιο μάζας $m_p = 1.7 \times 10^{-27}$ Kg και ενέργειας $E = 1\text{eV}$, που πέφτει πάνω σ' ένα δυναμικό ύψους $V_0 = 5\text{eV}$ και πλάτους 1\AA , είναι $T \approx 10^{-38}$

iii) Τέλος, ναδειχθεί ότι το αντίστοιχο πρόβλημα για ένα ηλεκτρόνιο μάζας $m_e = 9.10 \times 10^{-31}$ Kg δίνει $T \approx 0.33$. Βλέπουμε ότι όσο μικρότερη είναι η μάζα του σωματιδίου, τόσο πιο σημαντικό γίνεται το κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγας. Τα κβαντικά φαινόμενα είναι ακριβώς πιο έκδηλα, όσο πιο μικρή είναι η μάζα ενός σωματιδίου.

3.5. Σωματίδια μάζας m πέφτουν από αριστερά πάνω στο δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -\frac{\alpha}{2} \\ V_0 & -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ V_1 & x > \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

με ενέργεια E , όπου $0 < V_1 < E < V_0$.

i) Να γραφούν οι κυματοσυναρτήσεις στις τρεις περιοχές και οι συνθήκες ένωσης τους στα σημεία $x = -\frac{\alpha}{2}$ και $x = \frac{\alpha}{2}$.

ii) Να βρεθεί η έκφραση για τον συντελεστή διέλευσης.

3.6. Το δυναμικό (3.95) μπορεί να περιγράψει την κίνηση ενός σωματιδίου μάζας m μέσα στο πεδίο βαρύτητας, καθώς αναπηδά πάνω στην επιφάνεια της Γης. Είναι τότε $f = mg$.

i) Για ένα ηλεκτρόνιο να υπολογιστούν τα δύο πρώτα ενεργειακά επίπεδα E_1, E_2 και να βρεθεί η συχνότητα $\nu = (E_2 - E_1)/\hbar$ του φωτονίου, που εκπέμπεται ή απορροφάται κατά τις μεταβάσεις μεταξύ των δύο αυτών επιπέδων. Ποιά είναι η τάξη μεγέθους του μέσου ύψους $\langle x \rangle_1$ του ηλεκτρονίου από την επιφάνεια της Γης για τη βασική κατάσταση E_1 ;

ii) Να επαναληφθεί το ίδιο για ένα πρωτόνιο ή για ένα νετρόνιο.

Να σχολιαστούν τα αποτελέσματα.

3.7. Ναδειχθεί, χρησιμοποιώντας αποκλειστικά το συμβολισμό του Dirac, ότι ο τελεστής \hat{P} είναι ερμιτιανός, ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του είναι ορθογώνιες και ότι για ένα συμμετρικό δυναμικό $V(x) = V(-x)$ οι ιδιοσυναρτήσεις της



ενέργειας για ένα μη εκφυλισμένο φάσμα ιδιοτιμών είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις.

- 3.8. i) Ναδειχθεί ότι ο τελεστής συμμετροποίησης \hat{S} που ορίζεται από τη σχέση $\hat{S}\psi(x) = \frac{1}{2} [\psi(x) + \psi(-x)]$ είναι ένας προβολικός τελεστής, δηλαδή ικανοποιεί τις σχέσεις $\hat{S}^2 = S$ και $\hat{S}^+ = S$.

Να γίνει το ίδιο για τον τελεστή αντισυμμετροποίησης $\hat{A}\psi(x) = \frac{1}{2} [\psi(x) - \psi(-x)]$

ii) Να αιτιολογηθεί γιατί, αν μια κατάσταση $\psi(x,t)$ για $t=0$ έχει καθορισμένη ενέργεια και ομοτιμία, εξακολουθεί σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή t να έχει την ίδια ομοτιμία.

iii) Ναδειχθεί ότι, αν η $\psi(x,t)$ δεν έχει καθορισμένη ομοτιμία, η μέση τιμή της ομοτιμίας $\langle \hat{P} \rangle$ είναι ανεξάρτητη από το χρόνο όταν $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$.

- 3.9. i) Ένα σωματίδιο κινείται μέσα σ' ένα μονοδιάστατο δυναμικό, το οποίο είναι μηδέν για $-L \leq x \leq L$ και άπειρο παντού αλλού. Σε μια χρονική στιγμή t η κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{5L}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) + 2\sqrt{\frac{1}{5L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Ποιές είναι οι δυνατές τιμές που προκύπτουν από μια μέτρηση της ενέργειας του συστήματος και με ποιά πιθανότητα η κάθε μια. Ποιά είναι η μέση τιμή $\langle E \rangle$ της ενέργειας. Ποιά είναι η μορφή της κυματοσυνάρτησης αμέσως μετά από μια μέτρηση της ενέργειας. Σε μια καινούργια μέτρηση της ενέργειας αμέσως μετά, ποιά είναι το αποτέλεσμα και με ποιά πιθανότητα.

ii) Να γίνει το ίδιο για την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = C \left(\cos \frac{\pi x}{2L} + \frac{1}{4} \cos \frac{3\pi x}{2L} + \sin \frac{3\pi x}{L} \right)$$

αφού κανονικοποιηθεί.

- 3.10. Ένα σωματίδιο μάζας m κινείται μέσα σ' ένα φρέαρ δυναμικού με άπειρο βάθος και πλάτος L (με αρχή το $x=0$). Αν για $t=0$ η κυματοσυνάρτηση είναι $\psi(x,t=0) = A(L^2 - x^2)$,

i) να βρεθεί η πιθανότητα P_n να πάρουμε την ιδιοτιμή E_n της ενέργειας του σωματιδίου, και

ii) να προσδιοριστεί η μέση τιμή $\langle E \rangle$ της ενέργειας.



- 3.11. Στο προηγούμενο πρόβλημα, αν για $t=0$ η κυματοσυνάρτηση είναι $\psi(x,t=0)=Ax(L-x)$,
- να βρεθεί η πιθανότητα P_n να πάρουμε την ιδιοτιμή E_n της ενέργειας του σωματιδίου, και
 - να βρεθούν οι μέσες τιμές $\langle E \rangle$ και $\langle E^2 \rangle$ και η αβεβαιότητα της ενέργειας $\Delta E = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)^{1/2}$.

- 3.12. Υποθέτουμε ότι ένα σωματίδιο βρίσκεται στη βασική κατάσταση $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right)$ ενός φρέατος δυναμικού άπειρου βάθους
- $$V(x) = \begin{cases} 0 & -L < x < L \\ \infty & |x| > L \end{cases}$$

Ξαφνικά το εύρος του φρέατος διπλασιάζεται : $L \rightarrow 2L$. Να υπολογιστεί η πιθανότητα μετάβασης στη βασική, στην πρώτη διεγερμένη και στη δεύτερη διεγερμένη κατάσταση του διευρυμένου φρέατος δυναμικού.

- 3.13. Ένα σωματίδιο βρίσκεται στη βασική κατάσταση $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right)$ του φρέατος δυναμικού άπειρου βάθους του προηγούμενου προβλήματος. Υπολογίζοντας την κυματοσυνάρτηση $\phi_1(p)$ στο χώρο των ορμών, να δειχθεί ότι σε μια μέτρηση της ορμής η πιθανότητα να βρεθεί μια τιμή μεταξύ p και $p + dp$ είναι

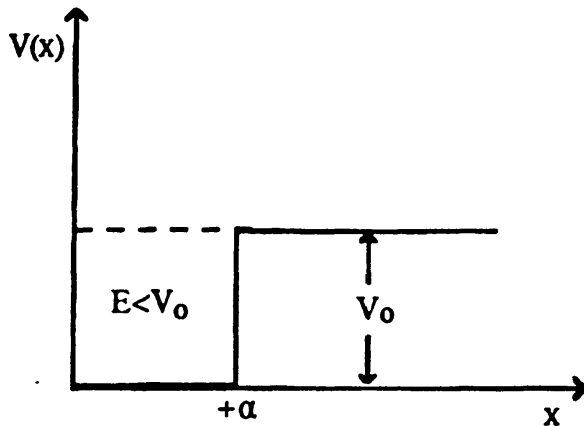
$$P(p)dp = \frac{\pi}{2 \hbar L^3} \frac{\cos^2\left(\frac{Lp}{\hbar}\right)}{\left(\frac{\pi^2}{4L^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2} dp$$

Ποιά μορφή παίρνει η έκφραση αυτή για μια διεγερμένη κατάσταση $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ όπου n περιττός ακέραιος; Τι μπορεί να συμπεράνει κανείς από αυτήν για μεγάλα n ;

- 3.14. i) Για το τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού της §3.8, να δειχθεί με βάση τη σχέση αβεβαιότητας ότι η ελάχιστη τιμή της παραμέτρου γ είναι $\gamma \geq 1$. Πόσες δέσμες καταστάσεις υπάρχουν για την ελάχιστη τιμή; Για ένα ηλεκτρόνιο μέσα σ' ένα τέτοιο δυναμικό με $V_0 = 10 \text{ eV}$ και $L = 8 \times 10^{-10} \text{ m}$, πόσες δέσμες καταστάσεις υπάρχουν;



ii) Για το δυναμικό του σχήματος, ναδειχθεί ότι υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις μόνο αν $V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$.



Αν δεχτούμε ότι το δυναμικό αλληλεπίδρασης για τις δέσμιες καταστάσεις ενός συστήματος μάζας $m = 500 \text{ MeV}$ είναι αυτό του σχήματος με $a = 2 \times 10^{-15} \text{ m}$ και ενέργεια σύνδεσης $V_0 - E = 2.22 \text{ MeV}$, να βρεθεί η αντίστοιχη τιμή του V_0 . Πόσες δέσμιες καταστάσεις υπάρχουν για ένα τέτοιο σύστημα; Δίνεται η λύση $x = 1.82$ για την εξίσωση $x \cot x = -0.46$.

3.15. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο φρέαρ δυναμικού

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq |x| < a \\ V_0 & a < |x| < b \\ \infty & |x| > b \end{cases},$$

όπου V_0 , a , b ποσότητες θετικές και $b > a$. Η ενέργεια του σωματιδίου είναι $0 < E < V_0$. Να βρεθούν οι κανονικοποιημένες άρτιες $\psi_n^+(x)$ και περιττές $\psi_n^-(x)$

ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, καθώς και οι εκφράσεις, που επιτρέπουν τον προσδιορισμό των αντίστοιχων ενεργειακών επιπέδων E_n^+ και E_n^- . Να

δειχθεί ότι για $a=b$ ξαναβρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές της ενέργειας του φρέατος δυναμικού με άπειρο βάθος.

3.16. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο μονοδιάστατο δυναμικό

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

όπου V_0 θετική ποσότητα. Εξετάζουμε δέσμιες καταστάσεις



i) Να γραφούν οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger και η συνθήκη από την οποία υπολογίζουμε τα ενεργειακά επίπεδα. Να περιγραφεί πως γίνεται γραφική λύση της συνθήκης αυτής.

ii) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(x)$ και να υπολογιστεί η μέση τιμή της θέσης $\langle x \rangle$. Πόση περίπτωση είναι η $\langle x \rangle$, πρώτα στο όριο που το δυναμικό είναι ελάχιστα βαθύ, και ύστερα στο όριο που είναι πολύ βαθύ.

3.17. Να μελετηθεί η εικόνα του διπλού φρέατος δυναμικού της §3.9 για το μόριο της αμμωνίας, χρησιμοποιώντας σαν βάση τις καταστάσεις

$$|\psi_{\Delta}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_{\Lambda}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

3.18. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο δυναμικό δ -συνάρτησης $V(x) = \lambda \delta(x)$ με $\lambda < 0$. Ενδιαφερόμαστε για δέσμιες καταστάσεις $E < 0$.

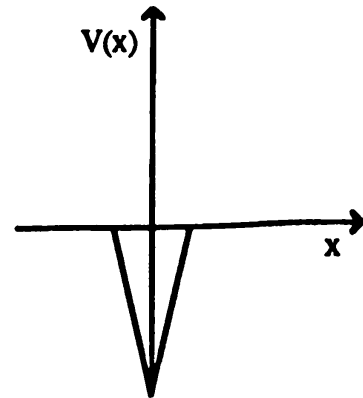
i) Υποθέτοντας ότι η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ είναι συνεχής για $x=0$, ναδειχθεί ότι για την ασυνέχεια της παραγώγου $\psi'(x)$ στο $x=0$ ισχύει

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda \psi(0)$$

ii) Ναδειχθεί ότι υπάρχει μια δέσμια κατάσταση με ιδιοτιμή της ενέργειας $E = -m\lambda^2/(2\hbar^2)$ και ιδιοσυνάρτηση

$$\psi_E(x) = \sqrt{-\frac{m\lambda}{\hbar^2}} e^{(m\lambda/\hbar^2)|x|}$$

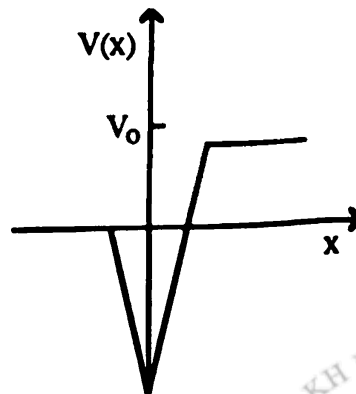
iii) Ναλυθεί το ίδιο πρόβλημα στην αναπαράσταση ορμής χρησιμοποιώντας τ' αποτελέσματα του προβλήματος 1.16.



3.19. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο δυναμικό $V(x) = \lambda \delta(x) + V'$, όπου

$$V' = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > 0 & x > 0 \end{cases}$$

i) Να γραφούν για τις περιοχές $x > 0$ και $x < 0$ οι λύσεις $\psi(x)$ της εξίσωσης Schrödinger που αντιστοιχούν σε



ενέργεια $E_0 < 0$. Επίσης, να γραφούν οι συνθήκες για την ένωση των δύο λύσεων στο $x=0$.

ii) Ναδειχθεί ότι η συνθήκη, που πρέπει να ικανοποιεί το λ για να υπάρχει

μια δέσμη κατάσταση, είναι $\lambda \leq -\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} V_0}$. Για τη δέσμη κατάσταση, να υπολογιστεί η ενέργεια E_0 , η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, η μέση τιμή $\langle x \rangle$ και η πιθανότητα να έχουμε $x > 0$. Να ερμηνευτούν τ' αποτελέσματα.

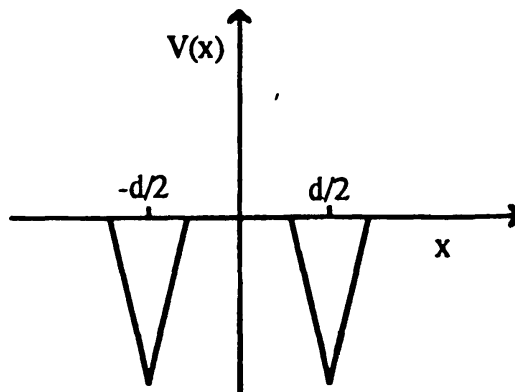
iii) Για ένα σωματίδιο μάζας m , που πέφτει από αριστερά πάνω στο δυναμικό $V(x)$ με ενέργεια πρόσπτωσης $E > V_0 > 0$, να υπολογιστούν οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης και να επαληθευτεί η συνθήκη διατήρησης της συνολικής πιθανότητας ροής.

3.20. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο διπλό δυναμικό δ -συνάρτησης

$$V(x) = \lambda \left(\delta\left(x + \frac{d}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{d}{2}\right) \right), \quad \lambda < 0$$

i) Να γραφεί η γενική μορφή των ιδιοσυναρτήσεων για τις δέσμιες καταστάσεις.

ii) Ποιά η συνθήκη κβάντωσης απ' όπου προσδιορίζουμε τις ενεργειακές στάθμες;



iii) Να συζητηθεί ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων συναρτήσει της απόστασης d . Για ποιές τιμές του d προσεγγίζουμε το πρόβλημα 3.18 και για ποιές το μοντέλο του μορίου της αμμωνίας της §3.9.

3.21. Στην κβαντική στατιστική φυσική (βλ. Παράρτημα II), για ένα σύστημα ηλεκτρονίων η κατανομή Maxwell-Boltzmann αντικαθίσταται από την κατανομή Fermi-Dirac

$$N_i = \frac{g_i}{e^{(E_i - E_F)/kT} + 1},$$

όπου E_F η ενέργεια Fermi (ανεξάρτητη από το ενεργειακό επίπεδο E_i). Ποιά μορφή παίρνει η κατανομή αυτή για $T=0$ και γιατί; Για ποιές τιμές της ενέργειας E_i οι δύο κατανομές είναι κατά προσέγγιση ίδιες;

3.22. Ένα σύστημα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων μάζας m βρίσκεται μέσα σ' ένα κυβικό κουτί με πλευρά L και ακολουθεί την κατανομή Maxwell-Boltzmann.



i) Να γραφεί η έκφραση για τον αριθμό N_{n_1, n_2, n_3} των σωματιδίων, τα οποία βρίσκονται στην κατάσταση που αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3\pi z}{L}\right)$$

ii) Να γραφεί η πιθανότητα, που έχει ένα σωματίδιο να βρεθεί στην παραπάνω κατάσταση.

iii) Ναδειχθεί ότι για $L \rightarrow \infty$ η σταθερά C δίνεται από τη σχέση

$$C \approx N \left[\left(\frac{mL}{\hbar\pi} \right)^3 \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{3/2} \right]^{-1}$$

όπου N ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων.

iv) Ναδειχθεί ότι για $L \rightarrow \infty$ η πιθανότητα που έχει η x -συνιστώσα v_x της ταχύτητας ενός σωματιδίου να βρεθεί μεταξύ v_x και $v_x + dv_x$ είναι

$$P = dv_x \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp\{-mv_x^2/2kT\}$$

3.23. i) Να συζητηθεί η φυσική σημασία του τελεστή $\hat{T}_{p_0} = \exp\{ip_0\hat{x}/\hbar\}$, όπου p_0 σταθερά (με διαστάσεις ορμής).

ii) Να υπολογιστούν οι μεταθέτες $[\hat{x}, \exp\{i\hat{p}_0/\hbar\}]$, $[\hat{p}, \exp\{ip_0\hat{x}/\hbar\}]$ και να δειχθεί ότι οι καταστάσεις $\exp\{i\hat{p}_0/\hbar\}|x\rangle$, $\exp\{ip_0\hat{x}/\hbar\}|p\rangle$ αποτελούν ιδιοκαταστάσεις των τελεστών \hat{x} και \hat{p} αντίστοιχα.

Να βρεθούν οι αντίστοιχες ιδιοτιμές και να ερμηνευτούν τ' αποτελέσματα.

3.24. i) Να δειχθεί ότι η περιοδική συνάρτηση $\phi_K(x)$ ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger

$$H(K) \phi_K(x) = E(K) \phi_K(x)$$

όπου

$$H(K) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} + \hbar K \right)^2 + V(x)$$

ii) Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Feynman - Hellman από το πρόβλημα 2.15 να δειχθεί ότι

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(K)}{dK}$$

3.25. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο περιοδικό δυναμικό

$$V(x) = \lambda \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x+n\lambda), \quad \lambda < 0$$



Να γραφεί η λύση $\psi(x)$ της εξίσωσης Schrödinger, πρώτα στην περιοχή $0 < x < x_0$, και έπειτα στην περιοχή $x_0 < x < 2x_0$ χρησιμοποιώντας τη συνθήκη Bloch $\psi(x) = e^{iKx_0} \psi(x-x_0)$. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας τις σωστές συνθήκες ένωσης των δύο λύσεων στο $x=x_0$ από το πρόβλημα 3.18, να δειχθεί ότι η συνθήκη για τον υπολογισμό των ενεργειακών επιπέδων είναι

$$\cos Kx_0 = \cos kx_0 + \frac{x_0 m \lambda}{\hbar^2} \frac{\sin kx_0}{kx_0},$$

όπου $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Να δειχθεί ότι υπάρχουν ορισμένες μόνο περιοχές επιτρεπόμενων ενεργειακών ζωνών που διαχωρίζονται από απαγορευμένες περιοχές.

3.26. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μέσα στο γραμμικό δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ f x & x > 0 \end{cases}$$

α) Να λυθεί η εξίσωση Schrödinger στο χώρο των ορμών.

β) Με βάση τη λύση από το μέρος α) στο χώρο των ορμών, να εκφραστούν οι ιδιοσυναρτήσεις στο χώρο των θέσεων, καθώς και οι ιδιοτιμές της ενέργειας.

Να βρεθεί η μέση τιμή της θέσης ενός σωματιδίου στη βασική κατάσταση αν είναι $m=1.8 \text{ GeV}/c^2$ και $f=1 \text{ GeV}/\text{fm}$.



[The main body of the page contains several paragraphs of text that are extremely faint and illegible due to heavy noise and low contrast. The text appears to be organized into multiple lines and possibly paragraphs, but no specific words or phrases can be discerned.]

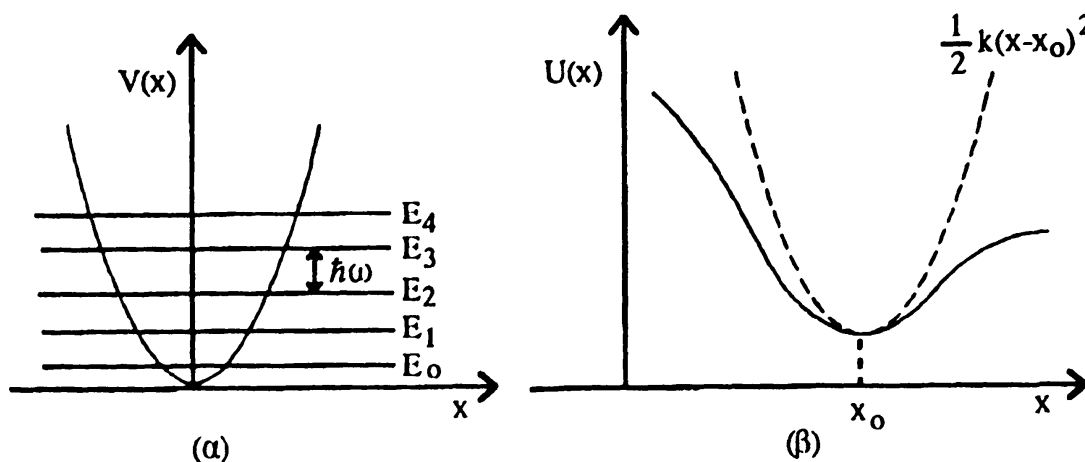


ΚΕΦΑΛΑΙΟ IV

ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

Λόγω της μεγάλης σπουδαιότητας, που παρουσιάζει ο αρμονικός ταλαντωτής, ο οποίος αποτελεί πρότυπο σύστημα τόσο για την κλασική, όσο και για την κβαντική φυσική, θα αφιερώσουμε ολόκληρο αυτό το κεφάλαιο στην αναλυτική μελέτη του.

Η κίνηση του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή είναι αυτή ενός σωματιδίου μάζας m , που έλκεται από ένα σταθερό κέντρο με μια δύναμη ανάλογη με την απόσταση από αυτό. Έτσι, διαλέγουμε να γράψουμε για τη δύναμη $F = -k \cdot x$ (νόμος του Hooke), όπου k σταθερά, οπότε το δυναμικό θα είναι (σχ. 4.1(α))



Σχ. 4.1 (α) Το δυναμικό του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή. (β) Ένα συνεχές φρέαο δυναμικού μπορεί να προσεγγιστεί από ένα δυναμικό γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή γύρω από ένα σημείο ευσταθούς ισορροπίας x_0 .



$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad (4.1)$$

Το παραβολικό δυναμικό (4.1) είναι το δυναμικό του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή. Η μεγάλη σημασία του έγκειται στο γεγονός ότι το δυναμικό αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν προσέγγιση ενός αυθαίρετου συνεχούς δυναμικού $U(x)$ στην περιοχή ενός σημείου x_0 ευσταθούς ισορροπίας (σχ. 4.1 (β)).

Πράγματι, αναπτύσσοντας κατά Taylor το $U(x)$ γύρω από το $x = x_0$ έχουμε

$$U(x) = U(x_0) + (x-x_0) U'(x_0) + \frac{1}{2} (x-x_0)^2 U''(x_0) + \dots \quad (4.2)$$

Επειδή στο $x=x_0$ η $U(x)$ παρουσιάζει ελάχιστο, έχουμε $U'(x_0)=0$ και $U''(x_0)>0$. Βλέπουμε, έτσι, ότι το δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή (4.1) (με $k = U''(x_0)$) αποτελεί την πρώτη προσέγγιση για το $U(x)$. Ο γραμμικός αρμονικός ταλαντωτής είναι, συνεπώς, το πρότυπο για συστήματα με μικρές ταλαντώσεις γύρω από ένα σημείο ευσταθούς ισορροπίας.

Η μελέτη του αρμονικού ταλαντωτή συνίσταται στην λύση του προβλήματος ιδιοτιμών της ενέργειας

$$\hat{H} | E \rangle = E | E \rangle \quad (4.3)$$

με χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2, \quad (4.4)$$

όπου $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ η κυκλική συχνότητα του αντίστοιχου κλασικού ταλαντωτή. Στα παραδείγματα μέχρι τώρα περιοριστήκαμε στη λύση της εξίσωσης (4.3) στην αναπαράστασή θέσης

$$\langle x | \hat{H} | E \rangle = E \langle x | E \rangle \quad (4.5)$$

που δεν είναι άλλη από την κυματική εξίσωση Schrödinger (3.33), απ' όπου προσδιορίζουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας $\langle x | E \rangle = \psi_E(x)$. Όμως ο αρμονικός ταλαντωτής, λόγω της σπουδαιότητάς του, προσφέρεται για τη μελέτη του προβλήματος ιδιοτιμών της ενέργειας σε διαφορετικές αναπαραστάσεις. Αυτό θα κάνουμε στη συνέχεια, σχολιάζοντας τη σημασία των αποτελεσμάτων κάθε φορά.

4.1. Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση θέσης.

Η εξίσωση (4.5), αν αντικαταστήσουμε τον τελεστή \hat{H} στην αναπαράσταση θέσης $\langle x |$:



$$\langle x | \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \langle x | , \quad (4.6)$$

γίνεται η εξίσωση Schrödinger για την ιδιοσυνάρτηση $\langle x | E \rangle = \psi_E(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_E(x) = E \psi_E(x) \quad (4.7)$$

Προφανώς, όλες οι ιδιοσυναρτήσεις αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις με $E > 0$. Είναι πρόσφορο να χρησιμοποιήσουμε αδιάστατες παραμέτρους για την μελέτη της (4.7). Ορίζουμε, πράγματι, την αδιάστατη ιδιοτιμή

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.8)$$

και την αδιάστατη μεταβλητή

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (4.9)$$

Η εξίσωση Schrödinger (4.7) παίρνει τότε τη μορφή

$$\frac{d^2 \psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad (4.10)$$

Ας εξετάσουμε, πρώτα, την ασυμπτωτική συμπεριφορά της λύσης $\psi(\xi)$ της (4.10) για μεγάλα ξ . Για κάθε πεπερασμένη τιμή της E η ποσότητα λ είναι πολύ μικρότερη από την ξ^2 στο όριο $|\xi| \rightarrow \infty$, έτσι σ' αυτό το όριο η (4.10) ανάγεται στην

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) = 0 \quad (4.11)$$

Για αρκετά μεγάλα $|\xi|$, επαληθεύουμε εύκολα ότι οι συναρτήσεις

$$\psi(\xi) = \xi^p e^{\pm \xi^2/2} , \quad (4.12)$$

με p πεπερασμένο, επαληθεύουν την (4.11). Διαλέγουμε για φυσικά αποδεκτή λύση της (4.11) την

$$\psi(\xi)_{|\xi| \gg 1} = e^{-\xi^2/2} \quad (4.13)$$

Τότε, οι λύσεις της εξίσωσης (4.10), που θα ισχύουν για όλα τα ξ , θα έχουν τη μορφή

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi), \quad (4.14)$$

όπου $H(\xi)$ είναι συναρτήσεις, που δεν πρέπει να επηρεάζουν την ασυμπτωτική συμπεριφορά της $\psi(\xi)$. Αντικαθιστώντας την (4.14) στην (4.10), παίρνουμε τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{d^2}{d\xi^2} H(\xi) - 2\xi \frac{d}{d\xi} H(\xi) + (\lambda - 1) H(\xi) = 0 \quad (4.15)$$



Η διαφορική εξίσωση (4.15) είναι γνωστή στη μαθηματική βιβλιογραφία σαν εξίσωση Hermite. Είναι γνωστό από εκεί ότι η (4.15) επιδέχεται πολυωνυμικές λύσεις (πολυώνυμα Hermite) $H_n(\xi)$ βαθμού n , αν το λ παίρνει τις διάκριτες τιμές

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.16)$$

πράγμα που σημαίνει (σχέση (4.8)) ότι η ενέργεια του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή δίνεται από τη σχέση

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.17)$$

Το ενεργειακό φάσμα (4.17) είναι ένα διάκριτο φάσμα δέσμιων καταστάσεων, που επί πλέον είναι μη εκφυλισμένο, όπως αναμένεται για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα. Τα ενεργειακά επίπεδα (4.17) ισαπέχουν μεταξύ τους κατά απόσταση $\hbar \omega$ (βλ. σχήμα 4.1) και είναι όμοια με αυτά που ανακάλυψε ο Planck το 1900 κατά τη μελέτη της ακτινοβολίας του μελανού σώματος. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η ανάλυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου σε μερικούς τρόπους ταλάντωσης (αρμονικές) είναι ουσιαστικά ανάλυση σε ασύζευκτους αρμονικούς ταλαντωτές.

Η ελάχιστη ενέργεια $\frac{1}{2} \hbar \omega$ του αρμονικού ταλαντωτή αντιστοιχεί στο κατώτερο επίπεδο $n = 0$ και είναι γνωστή σαν ενέργεια μηδενικού σημείου (ή βασικής κατάστασης) E_0 . Αυτό είναι, βέβαια, ένα ακόμη καθαρά κβαντικό φαινόμενο και σύμφωνο με την αρχή της αβεβαιότητας. Πράγματι, αν $\Delta x = d$ είναι η αβεβαιότητα στη θέση γύρω από το σημείο $x = 0$, τότε η αβεβαιότητα στην ορμή θα είναι $\Delta p \approx \frac{\hbar}{d}$ και η ενέργεια θα είναι

$$E(d) = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\frac{d}{2}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2md^2} + \frac{1}{8} m \omega^2 d^2 \quad (4.18)$$

Ελαχιστοποιώντας την έκφραση (4.18) βρίσκουμε ότι αυτό συμβαίνει για $d_0 = \sqrt{\frac{2 \hbar}{m \omega}}$ και, συνεπώς, η ελάχιστη ενέργεια είναι

$$E(d_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0 \quad (4.19)$$

Ας επανέλθουμε στις λύσεις της (4.10), που γράφονται

$$\psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (4.20)$$

όπου $H_n(\xi)$ τα πολυώνυμα Hermite βαθμού n , που ικανοποιούν την εξίσωση

$$\frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} + 2n H_n(\xi) = 0 \quad (4.21)$$



Τα πολυώνυμα Hermite $H_n(\xi)$ υπακούουν στις αναδρομικές σχέσεις

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) &= 2n H_{n-1}(\xi) \\ (2\xi - \frac{d}{d\xi}) H_n(\xi) &= H_{n+1}(\xi) \end{aligned} \quad (4.22)$$

οι οποίες φαίνεται εύκολα ότι είναι ισοδύναμες με την (4.21). Τα $H_n(\xi)$ προσδιορίζονται από τις παραπάνω εξισώσεις, εκτός από μια αυθαίρετη πολλαπλασιαστική σταθερά. Συνήθως διαλέγουμε τον συντελεστή της υψηλότερης δύναμης του ξ να είναι 2^n . Αυτό είναι σύμφωνο με τον ακόλουθο ορισμό των πολυωνύμων Hermite (τύπος Rodrigues)

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (4.23)$$

Μερικά από τα πρώτα πολυώνυμα Hermite είναι

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \quad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \\ H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \end{aligned} \quad (4.24)$$

Είναι χρήσιμος, πολλές φορές, ένας ισοδύναμος με τον (4.23) ορισμός για τα πολυώνυμα Hermite. Ορίζοντας τη γεννήτρια συνάρτηση $G(s, \xi)$ από την ανάπτυξη σε δυναμοσειρά

$$G(s, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n, \quad (4.25)$$

προκύπτει από τις αναδρομικές σχέσεις (4.22) ότι

$$G(s, \xi) = e^{-s^2 + 2s\xi} = e^{-(s-\xi)^2 + \xi^2} \quad (4.26)$$

Η ισοδυναμία με την (4.23) έπεται τώρα αν διαφορίσουμε την $G(s, \xi)$ n φορές και

αφήσουμε το s να τείνει στο μηδέν: $H_n(\xi) = \frac{\partial^n G(s, \xi)}{\partial s^n} \Big|_{s=0}$

Ας επανέλθουμε τώρα στις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_E(x)$ του αρμονικού ταλαντωτή που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές (4.17) της ενέργειας:

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \\ \psi_n(x) &= N_n e^{-(m\omega/\hbar)(x^2/2)} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \end{aligned} \quad (4.27)$$

Κατ' αρχήν, επειδή το δυναμικό είναι συμμετρικό: $V(x) = V(-x)$, οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ θα έχουν καθορισμένη ομοτιμία. Από την (4.27) βλέπουμε ότι η ομοτιμία της ψ_n καθορίζεται ουσιαστικά από την ομοτιμία της H_n και αυτή



είναι $(-1)^n$. Έτσι, οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας $\psi_n(x)$ είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές συναρτήσεις, με την ιδιοσυνάρτηση βασικής κατάστασης $\psi_0(x)$ να είναι άρτια. Η σταθερά N_n , εκτός από έναν αυθαίρετο παράγοντα φάσης, μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} |N_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1 \quad (4.28)$$

Χρησιμοποιώντας το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4.29)$$

μπορούμε να υπολογίσουμε ότι

$$N_0 = \left(\frac{\sqrt{m\omega/\hbar}}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2}, \quad N_1 = \left(\frac{\sqrt{m\omega/\hbar}}{\sqrt{\pi} 2} \right)^{1/2}, \dots \quad (4.30)$$

και, γενικά,

$$N_n = \left(\frac{\sqrt{m\omega/\hbar}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} \quad (4.31)$$

Η σχέση (4.31) προκύπτει, επίσης, αν χρησιμοποιήσουμε την γεννήτρια συνάρτηση (4.26). Η έκφραση (4.31) αντιστοιχεί στο να πάρουμε τον παράγοντα φάσης να είναι 1 και τη σταθερά N_n καθαρά πραγματική. Γράφουμε λοιπόν

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\sqrt{m\omega/\hbar}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} e^{-(m\omega/\hbar)(x^2/2)} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (4.32)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ και $\psi_m(x)$ είναι ορθογώνιες για $n \neq m$, όπως αναμένεται για ένα μη εκφυλισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας, σαν αυτό του αρμονικού ταλαντωτή και όπως επαληθεύεται χρησιμοποιώντας τις σχέσεις που παραθέσαμε προηγούμενα. Συνολικά, μπορούμε να γράψουμε τις σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (4.33)$$

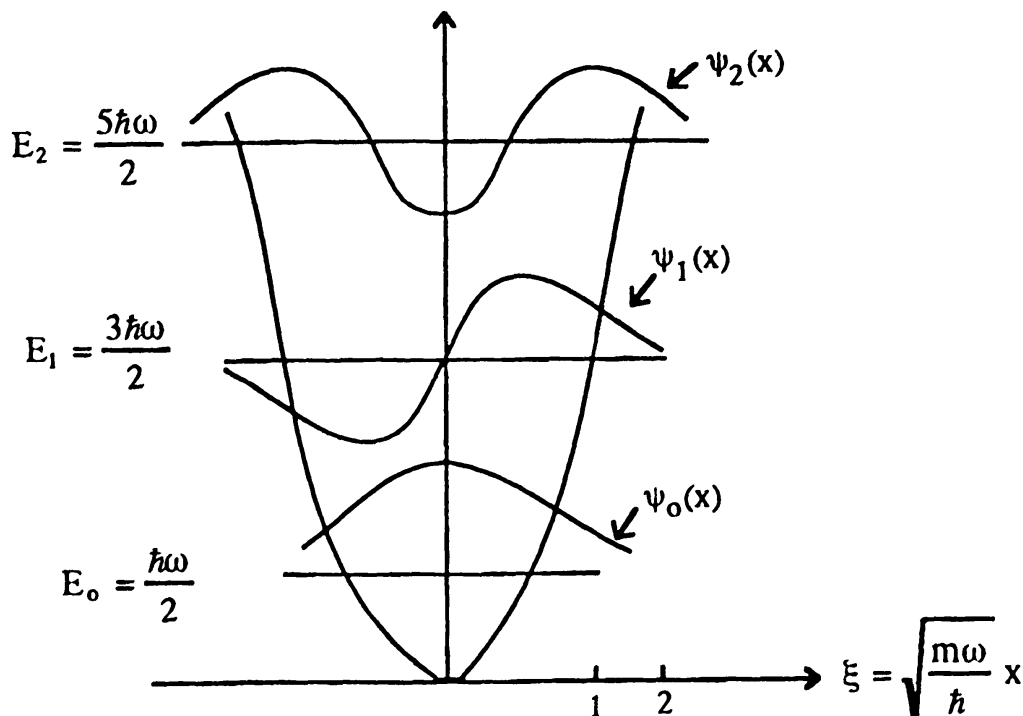
Είναι διαφωτιστικό να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της κβαντικής με εκείνα της κλασικής θεωρίας. Οι πρώτες τρεις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ εικονίζονται στο σχ. 4.2 και στο σχ. 4.3 εικονίζονται οι αντίστοιχες πυκνότητες πιθανότητας $|\psi_n(x)|^2$, μαζί με την κλασική πυκνότητα πιθανότητας $P_{\text{κλασ.}}$ για τον



κλασικό αρμονικό ταλαντωτή. Σύμφωνα με την κλασική μηχανική, η λύση της εξίσωσης του Νεύτωνα $m\ddot{x} = -m\omega^2 x$ δίνει τη θέση $x(t) = x_0 \sin \omega t$ (x_0 το πλάτος της ταλάντωσης, αρχική συνθήκη $x(0)=0$), την ταχύτητα $v(t) = \omega x_0 \cos \omega t$ και την ενέργεια $E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2$. Η κλασική κίνηση γίνεται ανάμεσα στα σημεία $\pm x_0 = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$. Η πιθανότητα $P_{\text{κλασ.}}(x)dx$ να βρεθεί το κλασικό σωματίο σε μια τυχαία παρατήρηση στο διάστημα dx είναι ίση με το κλάσμα του συνολικού χρόνου, που το σωματίο δαπανά για να μείνει εκεί. Έτσι, έχουμε

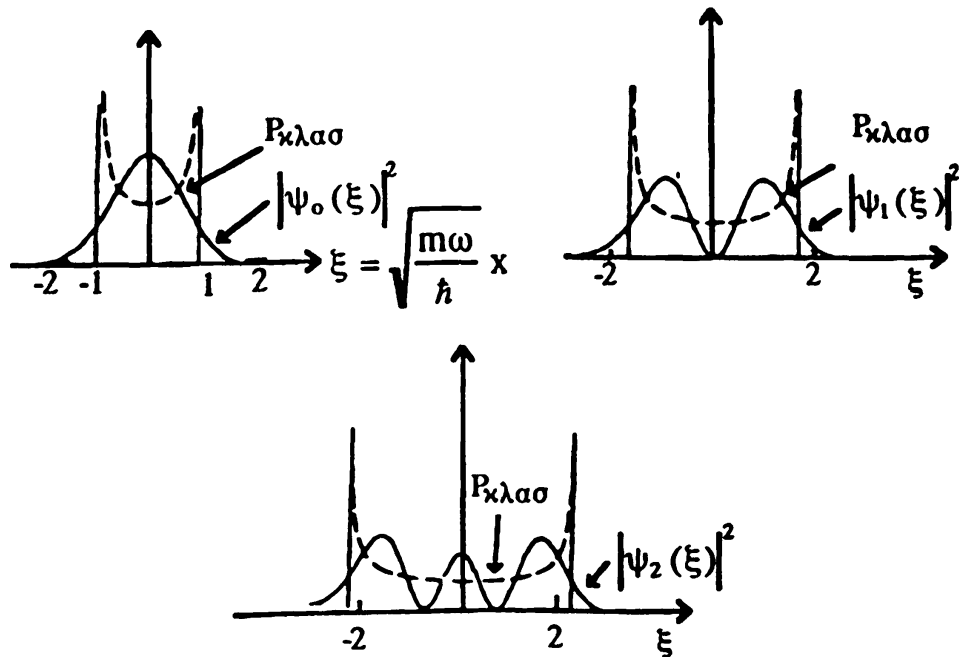
$$P_{\text{κλασ.}}(x)dx = \frac{1}{T} \frac{2dx}{v} = \frac{dx}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}} \quad (4.34)$$

Όπως αναμένεται, η κλασική πυκνότητα πιθανότητας $P_{\text{κλασ.}}(x)$ είναι μέγιστη στην περιοχή των σημείων $\pm x_0$, όπου η ταχύτητα μηδενίζεται, και ελάχιστη γύρω από το σημείο $x=0$, απ' όπου το σωματίο περνά με τη μεγαλύτερη ταχύτητα.



Σχ. 4.2. Η δυναμική ενέργεια, τα ενεργειακά επίπεδα και οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή για $n=0,1,2$.





Σχ. 4.3. Η κλασική και η κβαντική πυκνότητα πιθανότητας στην αναπαράσταση θέσης για $n=0,1,2$.

Είναι φανερό από τη σύγκριση των πυκνοτήτων πιθανότητας $P_{\kappa\lambda\sigma}(x)$ και $|\psi_n(x)|^2$ ότι, όσο μεγαλύτερος γίνεται ο κβαντικός αριθμός n , τόσο η συμφωνία ανάμεσα στην κλασική και την κβαντική πυκνότητα πιθανότητας βελτιώνεται. Αυτό είναι σε συμφωνία με την αρχή της αντιστοιχίας του Bohr, κατά την οποία για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς τα αποτελέσματα της κβαντικής θεωρίας τείνουν προς τα αντίστοιχα αποτελέσματα της κλασικής θεωρίας. Επίσης, για μια ακόμα φορά βλέπουμε να εκδηλώνεται το κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγας, μια και η κβαντομηχανική πυκνότητα πιθανότητας $|\psi_n(x)|^2$ είναι μη μηδενική ακόμα και έξω από την κλασικά επιτρεπόμενη περιοχή $-x_0 < x < x_0$.

4.2 Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση ορμής.

Στην αναπαράσταση $\langle p|$ στο χώρο των ορμών, το πρόβλημα ιδιοτιμών (4.3) με τη χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή (4.4) γίνεται μια διαφορική εξίσωση ως προς p . Το πρόβλημα ιδιοτιμών γράφεται τώρα

$$\begin{aligned} \langle p| \hat{H} |E\rangle &= E \langle p| E\rangle \\ \langle p| H &= \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2} \right) \langle p| \end{aligned} \quad (4.35)$$

απ' όπου προκύπτει η διαφορική εξίσωση για την ιδιοσυνάρτηση $\langle p|E\rangle = \phi_E(p)$



$$\frac{1}{2m} p^2 \phi_E(p) - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2} \phi_E(p) = E \phi_E(p) \quad (4.36)$$

Βλέπουμε εδώ ένα από τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά του αρμονικού ταλαντωτή: η εξίσωση ιδιοτιμών (4.36) στην αναπαράσταση ορμής είναι ισομορφική με την εξίσωση ιδιοτιμών (4.7) στην αναπαράσταση θέσης. Πράγματι, εισάγοντας την αδιάστατη μεταβλητή

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{m \hbar \omega}} p, \quad (4.37)$$

η εξίσωση (4.36) παίρνει τη μορφή ($\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$)

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \phi_E(p) + (\lambda - \xi^2) \phi_E(p) = 0, \quad (4.38)$$

που είναι ίδια με την (4.10). Έτσι, η ενέργεια συνδέεται πάλι με τον κβαντικό αριθμό n με τη σχέση

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \quad (4.39)$$

Βέβαια, το γεγονός ότι το ενεργειακό φάσμα είναι ανεξάρτητο από την αναπαράσταση είναι αναμενόμενο: το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας (4.3) μπορεί να λυθεί σε οποιαδήποτε αναπαράσταση θέλουμε. Το αποτέλεσμα για τις ενεργειακές στάθμες θα είναι το ίδιο. Ακολουθώντας παρόμοια βήματα με εκείνα για τη λύση στην αναπαράσταση θέσης, βρίσκουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας στην αναπαράσταση ορμής είναι

$$\phi_n(p) = (-i)^n \left(\frac{1/\sqrt{m \hbar \omega}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} e^{-(1/m\hbar\omega)(p^2/2)} H_n \left(\frac{1}{\sqrt{m \hbar \omega}} p \right) \quad (4.40)$$

Σημειώνουμε την παρουσία του παράγοντα φάσης $(-i)^n$ στην έκφραση (4.40). Έχοντας διαλέξει τον παράγοντα φάσης να είναι 1 για τις ιδιοσυναρτήσεις στην αναπαράσταση θέσης $\langle x|E \rangle = \psi_E(x)$, ο παράγοντας φάσης για τις ιδιοσυναρτήσεις στην αναπαράσταση ορμής $\langle p|E \rangle = \phi_E(p)$ καθορίζεται από την προηγούμενη εκλογή, δεδομένου ότι οι δύο αναπαραστάσεις συνδέονται με τη σχέση πληρότητας

$$\langle p|E \rangle = \int \langle p|x \rangle \langle x|E \rangle dx \quad (4.41)$$

Αυτό θα το δούμε και στη συνέχεια, κατά την μελέτη της γενικότερης αλγεβρικής μέθοδου επίλυσης του προβλήματος του αρμονικού ταλαντωτή.



4.3 Αλγεβρική μέθοδος επίλυσης του αρμονικού ταλαντωτή- Τελεστές καταστροφής και δημιουργίας

Στα προηγούμενα μελετήσαμε τον αρμονικό ταλαντωτή στην αναπαράσταση θέσης και στην αναπαράσταση ορμής. Θα μελετήσουμε τώρα το πρόβλημα ιδιοτιμών του αρμονικού ταλαντωτή, χρησιμοποιώντας μια γενικότερη μέθοδο (που οφείλεται στον Dirac) και η οποία δεν κάνει αναφορά σε κάποια από τις παραπάνω δύο συγκεκριμένες αναπαραστάσεις. Η μελέτη γίνεται σ' αυτό που ονομάζουμε χώρο των ενεργειακών καταστάσεων $|E_n\rangle \equiv |n\rangle$ (θα μπορούσαμε να την ονομάσουμε και αναπαράσταση ενέργειας).

Ας ορίσουμε τους τελεστές

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] \\ \hat{a}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] \end{aligned} \quad (4.42)$$

Οι κανονικές σχέσεις μετάθεσης $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ οδηγούν αμέσως στις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (4.43)$$

Συναρτήσει των \hat{a} και \hat{a}^+ , η χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a}) = \hbar\omega \left(\hat{a} \hat{a}^+ - \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (4.44)$$

όπου

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a} \quad (4.45)$$

Ο τελεστής \hat{N} ικανοποιεί τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \quad (4.46)$$

Επίσης, έχουμε

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^+] = +\hbar\omega \hat{a}^+ \quad (4.47)$$

Έστω $|E\rangle$ η ιδιοκατάσταση του \hat{H} , που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή της ενέργειας E

$$\hat{H} |E\rangle = E |E\rangle \quad (4.48)$$

Αν θεωρήσουμε την κατάσταση $\hat{a} |E\rangle$, τότε έχουμε

$$\hat{H} (\hat{a} |E\rangle) = (\hat{a} \hat{H} - \hbar\omega \hat{a}) |E\rangle = (E - \hbar\omega) (\hat{a} |E\rangle) \quad (4.49)$$



Όμοια, έχουμε

$$\hat{H}(\hat{a}^+ |E\rangle) = (\hat{a}^+ \hat{H} + \hbar \omega \hat{a}^+) |E\rangle = (E + \hbar \omega) (\hat{a}^+ |E\rangle) \quad (4.50)$$

Συνεπώς, οι καταστάσεις $\hat{a} |E\rangle$ και $\hat{a}^+ |E\rangle$ είναι επίσης ιδιοκαταστάσεις του \hat{H} με ιδιοτιμές $E - \hbar \omega$ και $E + \hbar \omega$, αντίστοιχα. Επειδή ο \hat{H} περιέχει τα τετράγωνα των τελεστών $\hat{\beta}$ και $\hat{\lambda}$, η αναμενόμενη (ή μέση) τιμή του ως προς οποιαδήποτε κατάσταση δεν μπορεί να είναι αρνητική και, συνεπώς οι ιδιοτιμές του \hat{H} πρέπει να είναι μη αρνητικές. Έστω E_0 η ελάχιστη ιδιοτιμή και $|E_0\rangle$ η αντίστοιχη ιδιοκατάσταση. Τότε θα πρέπει να ισχύει

$$\hat{a} |E_0\rangle = 0, \quad (4.51)$$

μια και διαφορετικά η $\hat{a} |E_0\rangle$ θα αντιστοιχούσε σε ιδιοτιμή $E_0 - \hbar \omega$, αντίθετα με την υπόθεση ότι E_0 είναι η κατώτερη ιδιοτιμή. Από την (4.51) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} \hbar \omega \hat{a}^+ \hat{a} |E_0\rangle &= \hbar \omega \hat{N} |E_0\rangle = (H - \frac{1}{2} \hbar \omega) |E_0\rangle \\ &= (E_0 - \frac{1}{2} \hbar \omega) |E_0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

Συνάγουμε, λοιπόν, ότι η ελάχιστη ιδιοτιμή E_0 είναι

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (4.53)$$

Δρώντας τώρα με τον τελεστή \hat{a}^+ πάνω στην ιδιοκατάσταση $|E_0\rangle$ παίρνουμε τις ιδιοκαταστάσεις

$$|E_0\rangle, |E_1\rangle = \hat{a}^+ |E_0\rangle, |E_2\rangle = (\hat{a}^+)^2 |E_0\rangle, \dots, |E_n\rangle = (\hat{a}^+)^n |E_0\rangle, \dots \quad (4.54)$$

με αντίστοιχες ιδιοτιμές

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega, E_1 = (1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega, E_2 = (2 + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \dots, \\ E_n &= (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \dots \end{aligned} \quad (4.55)$$

Βρίσκουμε, λοιπόν, μ' αυτό τον τρόπο ολόκληρο το διάκριτο ενεργειακό φάσμα του αρμονικού ταλαντωτή.

Οι ιδιοκαταστάσεις (4.54) μπορούν να συμβολιστούν απλούστερα $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$. Ο τελεστής \hat{a}^+ , λόγω της σχέσης (4.50), θεωρείται ότι δημιουργεί κβάντα ενέργειας $\hbar \omega$ (π.χ. στην §4.6 θα τα συνδέσουμε με τα λεγόμενα φωνόνια) και γι' αυτό ονομάζεται τελεστής δημιουργίας. Αντίστοιχα, ο τελεστής \hat{a} , λόγω της σχέσης (4.49), θεωρείται ότι καταστρέφει κβάντα ενέργειας $\hbar \omega$ και γι' αυτό ονομάζεται τελεστής καταστροφής:



Οι ιδιοκαταστάσεις $|0\rangle, |1\rangle, \dots |n\rangle, \dots$ αποτελούν βέβαια ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν βάση στον αντιστοιχο χώρο Hilbert. Ας δούμε μερικές βασικές σχέσεις για τις ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$. Μπορούμε να γράψουμε γενικά

$$\hat{a}^+ |n\rangle = C_{n+1} |n+1\rangle \quad (4.56)$$

όπου C_{n+1} είναι ένας συντελεστής κανονικοποίησης. Από τη συνθήκη κανονικοποίησης $\langle n+1 | n+1 \rangle = 1$ προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} 1 = \langle n+1 | n+1 \rangle &= \frac{1}{|C_{n+1}|^2} \langle n | \hat{a}^+ |n\rangle \\ &= \frac{1}{|C_{n+1}|^2} \langle n | \left(\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \frac{1}{|C_{n+1}|^2} (n+1) \end{aligned} \quad (4.57)$$

απ' όπου έχουμε (εκλέγουμε το C_{n+1} καθαρά πραγματικό)

$$C_{n+1} = \sqrt{n+1} \quad (4.58)$$

Συνεπώς, παίρνουμε τη βασική σχέση

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (4.59)$$

και από αυτή συνάγουμε επαγωγικά ότι

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (4.60)$$

Ανάλογα, συμπεραίνουμε και την άλλη βασική σχέση

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (4.61)$$

Τέλος, από τις σχέσεις (4.59) και (4.61) βλέπουμε ότι οι ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ του \hat{H} είναι και ιδιοκαταστάσεις του \hat{N} με ιδιοτιμή n :

$$\begin{aligned} \hat{N}|n\rangle &= \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = \hat{a}^+ \sqrt{n} |n-1\rangle \\ &= \sqrt{n} \sqrt{n} |n\rangle = n|n\rangle \end{aligned} \quad (4.62)$$

Έτσι, οι ιδιοτιμές του τελεστή \hat{N} είναι οι κβαντικοί αριθμοί n , γι' αυτό ο τελεστής \hat{N} είναι γνωστός σαν αριθμητικός τελεστής.

Ας θεωρήσουμε τώρα τις ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ σε μια συγκεκριμένη αναπαράσταση. Ξεκινώντας από τη σχέση

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \quad (4.63)$$

βρίσκουμε ότι στην αναπαράσταση θέσης $\langle x |$ η παραπάνω σχέση γίνεται



$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(-i \hbar \frac{d}{dx} \right) \right] \langle x|0\rangle = 0 \quad (4.64)$$

ή

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0, \quad (4.65)$$

όπου $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ είναι η ιδιοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης. Η εξίσωση (4.65) λύνεται αμέσως

$$\psi_0(x) = N_0 e^{-(m\omega/\hbar)(x^2/2)} \quad (4.66)$$

όπου N_0 είναι σταθερά κανονικοποίησης, που βρίσκουμε ότι είναι ίση με $N_0 =$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \right)^{1/2}.$$

Οι διεγερμένες καταστάσεις προκύπτουν από τη βασική μέσω της σχέσης (4.60)

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (4.67)$$

Στην αναπαράσταση θέσης $\langle x|$, από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι η ιδιοσυνάρτηση $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ της διεγερμένης κατάστασης $|n\rangle$ είναι

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{n!}}} \left[x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \psi_0(x) \quad (4.68)$$

Η σχέση αυτή αναπαράγει τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$, που βρήκαμε ήδη κατά τη μελέτη του αρμονικού ταλαντωτή στην αναπαράσταση θέσης (βλ. σχέση (4.32)). Με εντελώς ανάλογο τρόπο, ξεκινώντας από την (4.63) στην αναπαράσταση ορμής, βρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $\phi_n(p)$, που βρήκαμε ήδη στην σχέση (4.40), συμπεριλαμβανομένου και του παράγοντα φάσης:

$$\phi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n \sqrt{n!}}} \left[\frac{p}{\sqrt{m\omega \hbar}} - \sqrt{m\hbar\omega} \frac{d}{dp} \right]^n \phi_0(p) \quad (4.69)$$

όπου

$$\phi_0(p) = \left(\frac{1}{\sqrt{m\omega \hbar \pi}} \right)^{1/2} e^{-(1/m\hbar\omega)(p^2/2)} \quad (4.70)$$

Είναι χρήσιμο εδώ να μελετήσουμε την χρονική εξέλιξη του αρμονικού ταλαντωτή, βρίσκοντας τις εκφράσεις των τελεστών καταστροφής $\hat{a}(t)$, δημιουργίας $\hat{a}^+(t)$, θέσης $\hat{X}(t)$ και ορμής $\hat{p}(t)$ στην εικόνα Heisenberg (παίρνοντας για απλότητα $t_0=0$). Χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις Heisenberg (2.250), βρίσκουμε



$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}, \hat{H}] = -i\omega\hat{a}, \quad (4.71)$$

απ' όπου προκύπτει ότι

$$\hat{a}(t) = \hat{a} e^{-i\omega t} \quad (4.72)$$

Όμοια,

$$\hat{a}^+(t) = \hat{a}^+ e^{+i\omega t} \quad (4.73)$$

Για τους τελεστές θέσης $\hat{x}(t)$ και ορμής $\hat{p}(t)$ έχουμε λοιπόν

$$\hat{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t)] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^+ e^{+i\omega t}) \quad (4.74)$$

$$\hat{p}(t) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t)] = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} e^{-i\omega t} - \hat{a}^+ e^{+i\omega t}) \quad (4.75)$$

Ο λόγος, που εισάγουμε τους τελεστές \hat{a} και \hat{a}^+ , είναι ακριβώς για να διαχωρίσουμε τις εκφράσεις για τους τελεστές $\hat{x}(t)$ και $\hat{p}(t)$ σε δύο όρους, που έχουν τις ξεχωριστές μεταβολές με το χρόνο $e^{-i\omega t}$ και $e^{+i\omega t}$. Έτσι, οι εκφράσεις (4.74)-(4.75) αντιστοιχούν στις λύσεις του κλασικού αρμονικού ταλαντωτή

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) \cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin\omega t \\ p(t) &= p(0) \cos\omega t - m\omega x(0) \sin\omega t, \end{aligned} \quad (4.76)$$

όπου $\sqrt{x(0)^2 + (p(0)/m\omega)^2}$ το πλάτος της ταλάντωσης. Από την άλλη μεριά, η έκφραση (4.74) αποτελεί τη βάση για τον τρόπο με τον οποίο γράφουμε στην κβαντική θεωρία πεδίου τις εκφράσεις των κβαντικών πεδίων, συναρτήσει των τελεστών καταστροφής και δημιουργίας. Το ανάλογο της έκφρασης (4.75) θα είναι τότε η έκφραση για την παράγωγο ως προς το χρόνο των κβαντικών πεδίων.

Η εξαιρετικά κομψή αλγεβρική μέθοδος, βασισμένη στους τελεστές καταστροφής \hat{a} και δημιουργίας \hat{a}^+ , που μόλις αναπτύξαμε, βρίσκεται στα θεμέλια βασικών κλάδων της φυσικής (κβαντική θεωρία πεδίων, κβαντική στατιστική φυσική κ.λ.π.).

4.4. Ο αρμονικός ταλαντωτής στην αναπαράσταση με πίνακες

Ας θεωρήσουμε τώρα το πλήρες ορθοκανονικό σύνολο των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας $|n\rangle$. Ως προς αυτό, τα στοιχεία πίνακα για τον τελεστή \hat{H} είναι $\langle m|\hat{H}|n\rangle$ και αμέσως βλέπουμε ότι ο πίνακας που παριστάνει τη χαμιλτονιανή είναι διαγώνιος



$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 1/2 & & 0 \\ & 3/2 & \\ & & 5/2 \\ 0 & & & \ddots \\ & & & & \ddots \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \hbar\omega \quad (4.77)$$

Όμοια, για τον αριθμητικό τελεστή $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ βρίσκουμε

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & 1 & \\ & & 2 \\ 0 & & & \ddots \\ & & & & \ddots \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.78)$$

Για τους τελεστές καταστροφής \hat{a} και δημιουργίας \hat{a}^+ έχουμε

$$\langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \langle m | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (4.79)$$

$$\langle m | \hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle m | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (4.80)$$

απ' όπου προκύπτει ότι

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & 0 \\ & 0 & \sqrt{2} & \\ & & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & & & \dots \end{pmatrix}, \hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \\ & \sqrt{2} & 0 \\ & & \sqrt{3} \\ 0 & & & \dots \end{pmatrix} \quad (4.81)$$

Τέλος, για τους τελεστές θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} βρίσκουμε ότι

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & & \sqrt{3} & \\ & & & \dots \end{pmatrix} \quad (4.82)$$



$$\hat{p} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a - a^\dagger) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & 0 \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & & -\sqrt{3} & \\ & & & \dots \end{pmatrix} \quad (4.83)$$

Εύκολα επαληθεύεται από τις εκφράσεις (4.82) και (4.83) ότι ισχύουν οι κανονικές σχέσεις μετάθεσης υπό μορφή πινάκων

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar I \quad (4.84)$$

4.5. Ο διπλός αρμονικός ταλαντωτής

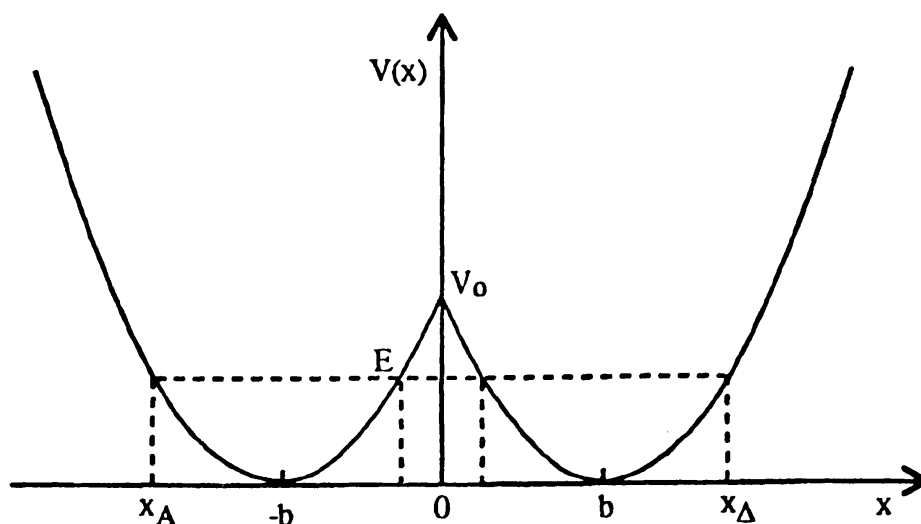
Όπως αναφέραμε ήδη στην § 3.9, το δυναμικό του διπλού αρμονικού ταλαντωτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν μοντέλο για μια προσεγγιστική μελέτη του δυναμικού του μορίου της αμμωνίας NH_3 .

Το δυναμικό του διπλού αρμονικού ταλαντωτή γράφεται

$$V(x) = \frac{1}{2} k(|x| - b)^2 \quad (4.85)$$

Για $b = 0$ το δυναμικό (4.85) ανάγεται στο παραβολικό δυναμικό (4.1) του απλού αρμονικού ταλαντωτή. Στο σχήμα 4.4 φαίνονται τα δύο παραβολικά δυναμικά που αντιστοιχούν στο (4.85). Ένα σωματίδιο μπορεί να βρίσκεται είτε στο αριστερό ($x < 0$) είτε στο δεξιό ($x > 0$) παραβολικό φρέαρ. Οι δύο παραβολές ενώνονται στο σημείο $x=0$ με κοινή τιμή του δυναμικού $V(0) = V_0 = \frac{1}{2} kb^2$. Κλασικά, ένα σωματίδιο με ενέργεια $E < V_0$ θα βρίσκεται είτε στο ένα είτε στο άλλο από τα παραβολικά φρεάτα. Αντίθετα, κβαντομηχανικά ξέρουμε ότι, έστω και αν είναι $E < V_0$, μπορεί το σωματίδιο να διεισδύσει λόγω φαινομένου σήραγγας μέσα στο φράγμα δυναμικού και να περάσει από το ένα στο άλλο φρέαρ. Την ιδιότητα αυτή και τη φυσική που συνεπάγεται την είχαμε συζητήσει στο μοντέλο της §3.9. Ας δούμε και εδώ τις γενικές γραμμές της πολύ ενδιαφέρουσας αυτής εφαρμογής με βάση το μοντέλο του διπλού αρμονικού ταλαντωτή.





Σχ. 4.4. Το δυναμικό του διπλού αρμονικού ταλαντωτή.

Η εξίσωση Schrödinger για το δυναμικό (4.85) είναι

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k(|x| - b)^2 \right] \psi(x) = E_v \psi(x) \quad (4.86)$$

Καθώς η παράμετρος b μεταβάλλεται από 0 έως ∞ , η φυσική του προβλήματός μας αλλάζει από εκείνη του απλού αρμονικού ταλαντωτή μέχρι εκείνη δύο ξεχωριστών φρεάτων απλού ταλαντωτή που τα χωρίζει ένα άπειρα υψηλό και πλατύ φράγμα δυναμικού. Όπως θ' αναφέρουμε παρακάτω, το ενεργειακό φάσμα γράφεται ($\omega = \sqrt{k/m}$)

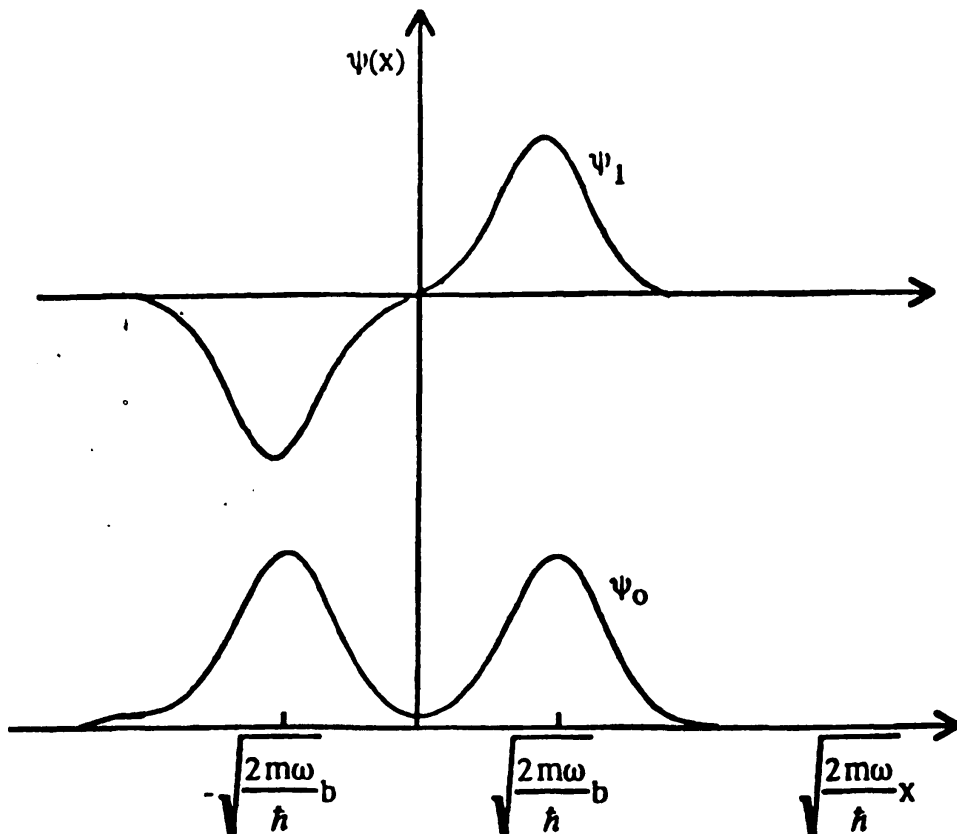
$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (4.87)$$

Στην πρώτη περίπτωση ($b = 0$) η παράμετρος v παίρνει τις ακέραιες τιμές $v = 0, 1, 2, \dots$ και έχουμε το μη εκφυλισμένο ενεργειακό φάσμα (4.17) του απλού ταλαντωτή. Στην δεύτερη περίπτωση ($b = \infty$) το ενεργειακό φάσμα είναι πάλι αυτό του απλού ταλαντωτή (4.17), μόνο που τώρα είναι διπλά εκφυλισμένο, μια και το σωματίδιο μπορεί να βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση είτε του αριστερού είτε του δεξιού φρεάτος αρμονικού ταλαντωτή. Καθώς η παράμετρος b μεταβάλλεται μεταξύ 0 και ∞ , οι ιδιοτιμές της ενέργειας και οι ιδιοσυναρτήσεις θα μεταβάλλονται κατά συνεχή τρόπο από την μια στην άλλη οριακή περίπτωση. Μια τέτοια συνεχής αργή μεταβολή, που συμβαίνει λόγω εξάρτησης από μια εξωτερική παράμετρο (όπως εδώ η b), ονομάζεται αδιαβατική μεταβολή του συστήματος και θα την συναντήσουμε και αργότερα σε άλλες περιπτώσεις (βλ. π.χ. §9.6, §10.7 και §12.3). Είναι χρήσιμο να σημειώσουμε εδώ ότι σε τέτοιου είδους μεταβολές ορισμένα γνωρίσματα που χαρακτηρίζουν το σύστημα παραμένουν αναλλοίωτα. Έτσι, δεν είναι δύσκολο να πειστούμε εδώ ότι ο αριθμός των σημείων στα οποία οι ιδιοσυναρτήσεις μηδενίζονται δεν μεταβάλλεται καθώς το b αλλάζει. Πράγματι,



δύο γειτονικά τέτοια σημεία δεν μπορούν να συμπέσουν σ' ένα, διότι αυτό θα σήμαινε ότι το ακρότατο της $\psi(x)$ που υπάρχει ανάμεσά τους θα συνέπιπτε με το σημείο μηδενισμού. Έτσι, σ' αυτό το σημείο και η $\psi(x)$ και η $\psi'(x)$ θα μηδενίζονταν. Όμως αυτό με τη σειρά του θα σήμαινε, με βάση την εξίσωση (4.86), ότι και οι $\psi''(x), \psi'''(x)$ και όλες οι ανώτερες παράγωγοι θα μηδενίζονταν επίσης εκεί. Αλλά τότε η συνάρτηση $\psi(x)$, της οποίας μηδενίζονται όλες οι παράγωγοι, θα έπρεπε να είναι η τετριμμένη λύση $\psi = 0$.

Τα παραπάνω σημαίνουν ότι ο αριθμός των σημείων, στα οποία οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi(x)$ μηδενίζονται, χαρακτηρίζεται για οποιαδήποτε τιμή του b από τον ακέραιο αριθμό n του απλού αρμονικού ταλαντωτή (μηδέν για τη βασική κατάσταση, ένα για την πρώτη διεγερμένη κ.ο.κ.). Έτσι, για μια πεπερασμένη τιμή του b οι δύο κατώτερες ενεργειακά ιδιοσυναρτήσεις ψ_0 και ψ_1 για τις οποίες θα ενδιαφερθούμε στη συνέχεια μοιάζουν όπως αυτές του σχήματος 4.5. Είναι χαρακτηριστικό ότι θα έχουν την ίδια ομοτιμία όπως και οι αντίστοιχες του απλού ταλαντωτή (άρτια και περιττή). Άλλωστε, το δυναμικό (4.85) του διπλού ταλαντωτή είναι και αυτό συμμετρικό ως προς την αρχή $x = 0$ και, συνεπώς, οι ιδιοσυναρτήσεις πρέπει να έχουν συγκεκριμένη ομοτιμία.



Σχ. 4.5. Οι δύο πρώτες ιδιοσυναρτήσεις του διπλού αρμονικού ταλαντωτή.



Όπως και στην περίπτωση του απλού αρμονικού ταλαντωτή, για την λύση της (4.86) μπορούμε να εισάγουμε την αδιάστατη μεταβλητή

$$z = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (x - b) & x > 0 \\ \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (x + b) & x < 0 \end{cases} \quad (4.88)$$

παράλληλα με την (4.87). Τότε, η εξίσωση Schrödinger παίρνει τη μορφή

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right) \psi = 0 \quad (4.89)$$

Για την οριακή περίπτωση $b = 0$ η (4.89) ταυτίζεται με την εξίσωση (4.10) του απλού ταλαντωτή. Τότε οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_0 και ψ_1 αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές

$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ και $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$. Για $b = \infty$ οι ψ_0, ψ_1 είναι εκφυλισμένες με κοινή ιδιοτιμή $\frac{1}{2} \hbar \omega$. Για μια πεπερασμένη τιμή του b η διαφορική εξίσωση (4.89) έχει

μελετηθεί στην μαθηματική βιβλιογραφία. Οι λύσεις που μηδενίζονται για μεγάλα (θετικά ή αρνητικά) z , και που μπορούν επομένως ν' αποτελέσουν φυσικά αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις, είναι

$$\psi(x) = \begin{cases} D_\nu \left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (x - b) \right) & x \geq 0 \\ \pm D_\nu \left(- \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (x + b) \right) & x \leq 0 \end{cases} \quad (4.90)$$

όπου $D_\nu(z)$ οι λεγόμενες παραβολικές κυλινδρικές συναρτήσεις οι οποίες εκφράζονται συναρτήσει των συρροουσών υπεργεωμετρικών συναρτήσεων ${}_1F_1$ που θα συναντήσουμε και στην §6.6 στη μελέτη του τριδιάστατου ιστροπικού αρμονικού ταλαντωτή. Το πρόσημο \pm στην (4.90) αντιστοιχεί σε άρτιες ή περιττές ιδιοσυναρτήσεις. Η συνθήκη για την ένωση των λύσεων στο σημείο $x = 0$, από την οποία θα προκύψουν οι τιμές του ν και, συνεπώς, οι ιδιοτιμές της ενέργειας E_ν από την (4.87), θα είναι

$$D'_\nu \left(- \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b \right) = 0 \quad (4.91)$$

για τις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις (η συνέχεια της ψ' για μια άρτια συνάρτηση απαιτεί να είναι $\psi' = 0$ στη σημείο ένωσης $x = 0$) και

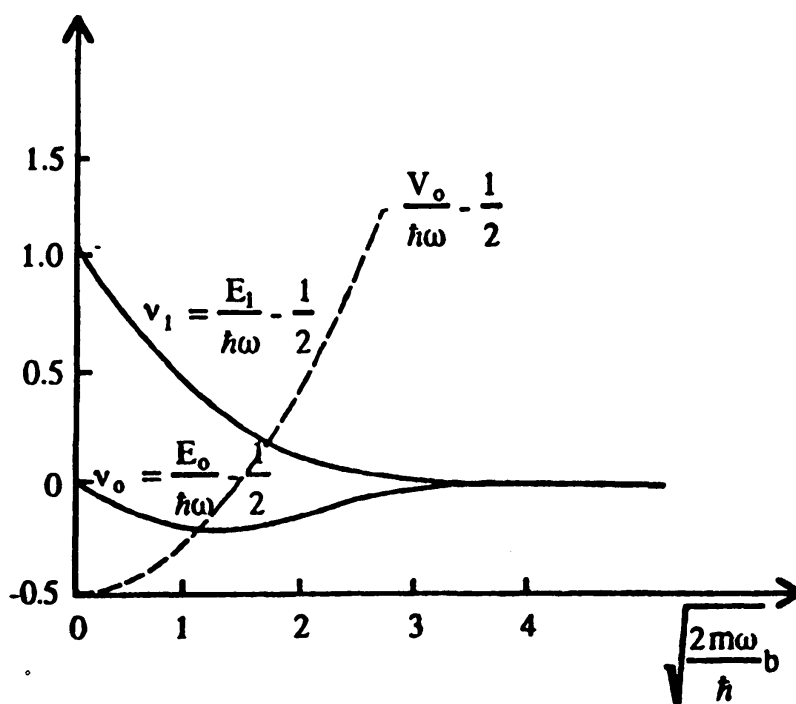
$$D_\nu \left(- \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b \right) = 0 \quad (4.92)$$



για τις περιττές ιδιοσυναρτήσεις (η συνέχεια της ψ για μια περιττή συνάρτηση απαιτεί να είναι $\psi = 0$ εκεί). Οι ιδιοτιμές του ν είναι οι ρίζες των υπερβατικών εξισώσεων (4.91) και (4.92). Το σχήμα 4.6 δείχνει τις πρώτες δύο ιδιοτιμές ν_0

και ν_1 συναρτήσει του $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b$. Στο ίδιο σχήμα δείχνεται και η καμπύλη

$(V_0/\hbar\omega) - \frac{1}{2}$ συναρτήσει πάλι του $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b$ για να συγκρίνει κανείς τα ενεργειακά επίπεδα E_ν με το ύψος V_0 του φράγματος ανάμεσα στα δύο φρέατα απλού ταλαντωτή. Καθώς το b μεταβάλλεται από 0 μέχρι ∞ φαίνονται οι αντίστοιχες οριακές τιμές για τα ενεργειακά επίπεδα που συζητήσαμε ήδη παραπάνω.



Σχ. 4.6. Οι δύο πρώτες ιδιοτιμές του $\nu = (E_\nu/\hbar\omega) - \frac{1}{2}$ συναρτήσει του $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b$. Για σύγκριση δείχνεται και η καμπύλη $(V_0/\hbar\omega) - \frac{1}{2}$ συναρτήσει του $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b$.

Μπορούμε ιδιαίτερα να συζητήσουμε τι συμβαίνει για μεγάλα b , όπου υπάρχουν προσεγγιστικές εκφράσεις για τις ιδιοτιμές της ενέργειας. Ας υποθέσουμε ότι

$$\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b \gg 1 \Rightarrow V_0 = \frac{1}{2} m\omega^2 b^2 \gg \frac{1}{4} \hbar\omega \Rightarrow V_0 \gg E$$



Στο όριο αυτό συζητήσαμε και την περίπτωση του διπλού φρέατος δυναμικού της §3.9. Στο παράδειγμά μας το όριο αυτό αντιστοιχεί σε δύο σχεδόν ξεχωριστά φρέατα ταλαντωτή. Τότε, στις δύο ιδιοσυναρτήσεις ψ_0 και ψ_1 αντιστοιχεί μια μικρή διαφορά ενέργειας $\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar \omega (v_1 - v_0)$, που από την ασυμπτωτική συμπεριφορά των συναρτήσεων D_v προκύπτει ότι είναι

$$\Delta E = \hbar \omega (v_1 - v_0) = 2 \hbar \omega \sqrt{\frac{2V_0}{\pi \hbar \omega}} \exp \left\{ -\frac{2V_0}{\hbar \omega} \right\} \quad (4.94)$$

με αντίστοιχη συχνότητα

$$\omega_0 = \frac{\Delta E}{\hbar} = 2\omega \sqrt{\frac{2V_0}{\pi \hbar \omega}} \exp \left\{ -\frac{2V_0}{\hbar \omega} \right\} \quad (4.95)$$

Η αναλογία με το σύστημα του διπλού φρέατος δυναμικού της §3.9 γίνεται πλέον προφανής. Οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_0, ψ_1 αντιστοιχούν στις ιδιοσυναρτήσεις ψ_+, ψ_-

εκεί και οι γραμμικοί συνδυασμοί $\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 - \psi_1)$ και $\psi_\Delta = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 + \psi_1)$

παριστάνουν προσεγγιστικές ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε κυματοσυναρτήσεις με το σωματίδιο να έχει μέγιστη πιθανότητα να βρεθεί στο αριστερό ($x < 0$) ή στο δεξιό ($x > 0$), αντίστοιχα, φρέαρ αρμονικού ταλαντωτή. Αξίζει να συγκρίνουμε τις ιδιοσυναρτήσεις του σχήματος 3.22 μ' εκείνες του σχήματος 4.5, οπότε οι ψ_A, ψ_Δ εδώ θα μοιάζουν όπως αυτές του σχήματος 3.24 εκεί. Επίσης, αξίζει να συγκρίνουμε την έκφραση (4.94) για την διαφορά ενέργειας ΔE με την αντίστοιχη έκφραση (3.162) εκεί. Η φυσική σημασία είναι η ίδια και στις δύο περιπτώσεις: αν το σωματίδιο τη χρονική στιγμή $t = 0$ βρεθεί στη μία από τις δύο περιοχές (αριστερά ή δεξιά), μετά από χρόνο $\tau = \frac{\pi}{\omega_0}$ θα βρεθεί στην άλλη

έχοντας διαπεράσει το φράγμα δυναμικού. Ουσιαστικά, το σωματίδιο εκτελεί ταλάντωση ανάμεσα στα δύο φρέατα με περίοδο $T=2\tau$. Αν χρησιμοποιήσουμε είτε το ένα είτε το άλλο μοντέλο για να περιγράψουμε την αναστροφή του μορίου της αμμωνίας, οι τιμές των παραμέτρων είναι τέτοιες που θ' αντιστοιχούν στα μεγέθη της περιοχής των μικροκυμάτων, που αναφέραμε ήδη στην §3.9.

Εκτός από την παραπάνω εφαρμογή, ο διπλός αρμονικός ταλαντωτής μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στην μελέτη διατομικών μορίων, όπως του υδρογόνου, στην προσέγγιση Born-Oppenheimer που θα δούμε στην §12.3 (αν και εκεί υπάρχουν άλλες προσφορότερες τεχνικές).



4.6 Φωνόνια

Ας εξετάσουμε τώρα πως μπορεί κανείς να περιγράψει τις ταλαντώσεις χαμηλής ενέργειας στο κρυσταλλικό πλέγμα ενός στερεού. Υπάρχει μια δυναμική ενέργεια για την μετατόπιση των ατόμων (ιόντων) του κρυσταλλικού πλέγματος από τις θέσεις ισορροπίας τους (βλ. και §3.12) και θα δούμε ότι μπορεί να την προσεγγίσουμε με το δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή. Η κίνηση των ατόμων (ιόντων) μπορεί τότε ν' αναλυθεί στους λεγόμενους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης, καθένας από τους οποίους αντιπροσωπεύει αρμονική κίνηση με καθορισμένη συχνότητα.

Θεωρώντας ότι τα N άτομα (ιόντα) έχουν κοινή μάζα, η χαμιλτονιανή του συστήματός μας είναι (αγνοούμε τα ηλεκτρόνια)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4.96)$$

Οι μεταβλητές θέσης λαμβάνονται $\mathbf{r}_i = 0$ για τις θέσεις ισορροπίας, όπου οι πρώτες παράγωγοι του δυναμικού μηδενίζονται. Ενδιαφερόμαστε για διεγέρσεις χαμηλής ενέργειας, για τις οποίες οι μετατοπίσεις από τη θέση ισορροπίας είναι μικρές. Έτσι, μπορούμε ν' αναπτύξουμε τη δυναμική ενέργεια V σε σειρά Taylor ως προς τις μετατοπίσεις από τη θέση ισορροπίας και να κρατήσουμε τους όρους χαμηλότερης τάξης που είναι τετραγωνικοί ως προς τις μετατοπίσεις αυτές (βλ. εισαγωγή στο παρόν κεφάλαιο). Τότε, η χαμιλτονιανή (4.96) παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} V_{ij} w_i w_j \\ &\equiv \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \hat{\mathcal{V}} \mathbf{w} \end{aligned} \quad (4.97)$$

όπου $\mathbf{w}^T = \{w_i\} = (x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N, z_1, \dots, z_N)$ το άνωσμα θέσης για τις μετατοπίσεις από τη θέση ισορροπίας και $\hat{\mathcal{V}} = \{V_{ij}\} = \{V_{ji}\} = \{(\partial^2 V / \partial w_i \partial w_j) |_{w_{i,j}=0}\}$ συμμετρικός πίνακας των παραγώγων δεύτερης τάξης της δυναμικής ενέργειας. Σε αναλογία με την κλασική μηχανική, μπορούμε να εισάγουμε τις λεγόμενες κανονικές συντεταγμένες q_i , $i = 1, \dots, 3N$, που συνδέονται με τις καρτεσιανές συντεταγμένες μ' έναν ορθογώνιο μετασχηματισμό:

$$q_i = \sum_{j=1}^{3N} R_{ij} w_j \quad \text{ή} \quad \mathbf{q} = \mathbf{R} \mathbf{w} \quad (4.98)$$

όπου ισχύουν οι σχέσεις ορθογωνιότητας



$$\sum_k R_{ik} R_{kj} = \sum_k R_{ki} R_{kj} = \delta_{ij} \quad (4.99)$$

για τα στοιχεία του ορθογώνιου πίνακα $R = \{R_{ij}\}$. Για τον ορθογώνιο πίνακα R έχουμε $R^T = R^{-1}$ και, συνεπώς, ισχύει ακόμη ότι

$$(R^{-1} R)_{ij} = \sum_k R^{-1}_{ik} R_{kj} = \sum_k R_{ki} R_{kj} = \delta_{ij} \quad (4.100)$$

Έτσι, μπορεί κανείς ν' αντιστρέψει την (4.98) και να πάρει

$$w_i = \sum_k R_{ki} q_k \quad \text{ή} \quad w = R^T q \quad (4.101)$$

Με βάση τις παραπάνω σχέσεις η δυναμική ενέργεια συναρτήσει των κανονικών συντεταγμένων q_i , $i = 1, \dots, 3N$ παίρνει τη μορφή

$$V(q_1, \dots, q_{3N}) = \frac{1}{2} q^T R \hat{V} R^T q \quad (4.102)$$

Επειδή ο \hat{V} είναι ένας συμμετρικός πίνακας, μπορεί πάντα να διαγωνιοποιηθεί μ' έναν ορθογώνιο πίνακα R (να συγκριθεί αυτό με την συζήτηση στο τέλος της §2.7 και δεδομένου ότι ένας πραγματικός συμμετρικός πίνακας είναι και ερμιτιανός, ενώ ένας ορθογώνιος πίνακας μπορεί να χαρακτηριστεί και σαν πραγματικός μοναδιακός) και έστω ότι είναι k_i , $i = 1, \dots, 3N$ τα διαγώνια στοιχεία

$$(R \hat{V} R^T)_{ij} = k_i \delta_{ij} \quad (4.103)$$

Τότε

$$V(q_1, \dots, q_{3N}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} k_i q_i^2 \quad (4.104)$$

Τέλος, σε ότι αφορά την κινητική ενέργεια από τη σχέση

$$\frac{\partial}{\partial q_i} = \sum_j \frac{\partial w_j}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial w_j} = \sum_j R_{ij} \frac{\partial}{\partial w_j} \quad (4.105)$$

προκύπτει ότι

$$\sum_{i=1}^{3N} \hat{p}_i^2 = \sum_{i,k,l=1}^{3N} R_{ik} R_{il} \hat{p}_k \hat{p}_l = \sum_{l=1}^{3N} \hat{p}_l^2 \quad (4.106)$$



όπου $\hat{p}_i = -i \hbar \partial/\partial q_i$ ο τελεστής της ορμής ως προς τις κανονικές συντεταγμένες q_i και $\hat{p}_i = -i \hbar \partial/\partial w_i$ ο τελεστής της ορμής ως προς τις καρτεσιανές συντεταγμένες w_i . Από τις εξισώσεις (4.104) και (4.106) η χαμιλτονιανή (4.97) εκφρασμένη στις κανονικές συντεταγμένες q_i είναι

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} k_i q_i^2 \right) \\ &= \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_i^2 q_i^2 \right) \end{aligned} \quad (4.107)$$

όπου $\omega_i = \sqrt{k_i/m}$ οι αντίστοιχες κυκλικές συχνότητες.

Το τελικό αποτέλεσμα (που είναι όμοιο με αυτό της κλασικής φυσικής) συνίσταται στο γεγονός ότι η χαμιλτονιανή \hat{H} μπορεί να γραφεί σαν ένα άθροισμα πάνω σε χαμιλτονιανές ανεξάρτητων μονοδιάστατων απλών αρμονικών ταλαντωτών, όπου καθένας όρος περιλαμβάνει διαφορετική συντεταγμένη $q_i(t)$ που ταλαντώνεται με συχνότητα ω_i . Οι ιδιοσυναρτήσεις της \hat{H} θα είναι τότε γινόμενα της μορφής

$$\psi = \phi_1(q_1) \phi_2(q_2) \dots \phi_{3N}(q_{3N}) \quad (4.108)$$

όπου οι επιμέρους ιδιοσυναρτήσεις $\phi_i(q_i)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις απλού αρμονικού ταλαντωτή

$$\hat{H}_i \phi_i = E_i \phi_i \quad (4.109)$$

με $\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i$. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας θα είναι

$$E = \sum_i E_i = \sum_i \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \quad (4.110)$$

με $n_i = 0, 1, 2, \dots$. Τα n_i κβάντα $\hbar \omega_i$ των διεγέρσεων του κρυσταλλικού πλέγματος του στερεού σε κανονικούς τρόπους ταλάντωσης είναι γνωστά σαν φωνόνια, σε αναλογία με τα φωτόνια που είναι τα κβάντα που περιγράφουν τους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης ενός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου σε μια κοιλότητα. Μπορούμε να πούμε ότι η κυματοσυνάρτηση ψ περιγράφει μια γενική κατάσταση που αποτελείται από n_1 φωνόνια συχνότητας ω_1 , n_2 φωνόνια συχνότητας ω_2 κ.ο.κ. Έτσι, ένα τρέχον ελαστικό κύμα στο κρυσταλλικό πλέγμα μπορεί να περιγραφεί συναρτήσει των φωνονίων που διαδίδονται μέσα στο στερεό, όπως ένα τρέχον ηλεκτρομαγνητικό κύμα συνίσταται από φωτόνια. Βέβαια, θα πρέπει να πούμε ότι



τα φωνόνια από μια άποψη αλληλεπιδρούν με άλλα σωματίδια όπως π.χ. με ηλεκτρόνια ή με νετρόνια (τα τελευταία χρησιμοποιούνται συχνά για τη μελέτη της κρυσταλλικής δομής). Όμως, σε αντίθεση με τα φωτόνια, τα φωνόνια μπορούν να υπάρξουν μόνο μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα και δεν μπορούν να μεταφέρουν έξω από τον κρύσταλλο οποιαδήποτε ορμή απορροφούν (π.χ. κατά τη διάρκεια μιας κρούσης) (ας θυμηθούμε εδώ την έκφραση $\hbar K$ της §3.12 για τις ιδιοκαταστάσεις στο περιοδικό δυναμικό ενός κρυσταλλικού πλέγματος, που δεν μπορεί να είναι μια πραγματική ορμή). Όταν ένας κρύσταλλος απορροφά π.χ. ένα φωτόνιο, η πραγματική ορμή απορροφάται σε τελευταία ανάλυση από ολόκληρο τον κρύσταλλο. Θα πρέπει, επίσης, να σημειώσουμε ότι η έκφραση (4.110) βρέθηκε υπό την προϋπόθεση διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας (μικρές ταλαντώσεις) και έτσι αυτό το ενεργειακό φάσμα ισχύει για μικρούς κβαντικούς αριθμούς n_i .

Η θεωρία που περιγράψαμε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εξηγήσει πολλές ιδιότητες των στερεών (όπως π.χ. την θερμοχωρητικότητα στη θεωρία Debye, βλ. και §8.2).

Προβλήματα

- 4.1. i) Ναδειχτεί ότι η μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας ως προς την ιδιοσυνάρτηση $\psi_n(x)$ είναι:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{1}{2} E_n \end{aligned}$$

Συνεπώς, θα είναι

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{1}{2} E_n$$

Έτσι, για κάθε ιδιοσυνάρτηση του αρμονικού ταλαντωτή, η μέση τιμή τόσο της δυναμικής, όσο και της κινητικής ενέργειας είναι ίση με το μισό της ολικής ενέργειας, όπως και στον κλασικό αρμονικό ταλαντωτή.

- ii) Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, ως προς μια οποιαδήποτε ιδιοσυνάρτηση $\psi_n(x)$. Να βρεθούν, συνεπώς, οι αβεβαιότητες Δx^2 και Δp^2 και ναδειχθεί η σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής $\Delta x \cdot \Delta p = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar$. Ναδειχθεί, συνεπώς, ότι η σχέση ελάχιστης αβεβαιότητας ισχύει για τη βασική κατάσταση $n = 0$. Να εξηγηθεί γιατί.



- 4.2. Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές για τον τριδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2} k_1 x^2 + \frac{1}{2} k_2 y^2 + \frac{1}{2} k_3 z^2$$

Να μελετηθεί ο εκφυλισμός των ενεργειακών επιπέδων για την περίπτωση του ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή $k_1 = k_2 = k_3$.

- 4.3. Να δειχθούν οι σχέσεις

$$\hat{x} |n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle]$$

$$\hat{p} |n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1} |n+1\rangle - \sqrt{n} |n-1\rangle]$$

Από αυτές, να συναχθούν οι κανόνες επιλογής

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1})$$

$$\langle n' | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1})$$

- 4.4. Να βρεθούν στην εικόνα Heisenberg τα στοιχεία πίνακα για τους τελεστές καταστροφής \hat{a} , δημιουργίας \hat{a}^+ , θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} ως προς τις ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ του αρμονικού ταλαντωτή. Να επαληθευτούν οι εξισώσεις κίνησης (2.257)-(2.258)

- 4.5. i) Να υπολογιστεί η έκφραση $\langle x^4 \rangle - \langle x^2 \rangle^2$ για τις τρεις πρώτες ($n=0,1,2$) ιδιοκαταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή. Να χρησιμοποιηθεί το παραπάνω αποτέλεσμα για να υπολογιστεί επίσης η έκφραση $\langle p^4 \rangle - \langle p^2 \rangle^2$.

Χρήσιμα ολοκληρώματα: $\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} = \sqrt{\pi}$, $\int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-y^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy y^4 e^{-y^2} = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dy y^6 e^{-y^2} = \frac{15}{8} \sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy y^8 e^{-y^2} = \frac{105}{16} \sqrt{\pi}$$



ii) Να λυθεί το ίδιο πρόβλημα χρησιμοποιώντας τους τελεστές καταστροφής \hat{a} και δημιουργίας \hat{a}^\dagger .

4.6. Θεωρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ των δύο πρώτων ενεργειακών επιπέδων ενός αρμονικού ταλαντωτή. Για $t=0$, ένα σύστημα περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x,t=0) = \cos\theta \psi_0(x) + \sin\theta \psi_1(x)$$

i) Ποιά είναι η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ τη χρονική στιγμή t .

ii) Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$ και η αβεβαιότητα $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ για το σύστημα.

iii) Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ και η αβεβαιότητα $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ τη χρονική στιγμή t .

4.7. Ένα σωματίδιο μάζας m κινείται μέσα στο δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$. Αρχικά το σωματίδιο βρίσκεται στη βασική κατάσταση $\psi_0(x)$. Σαν αποτέλεσμα μιας εξωτερικής επίδρασης το δυναμικό αλλάζει απότομα σε $\frac{1}{2} m\omega'^2 x^2$. Να βρεθούν:

i) Η πιθανότητα που υπάρχει μετά την αλλαγή το σωματίδιο να βρεθεί στη βασική κατάσταση του νέου δυναμικού.

ii) Η πιθανότητα που υπάρχει μετά την αλλαγή το σωματίδιο να βρεθεί στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του νέου δυναμικού.

iii) Η έκφραση για τη μέση τιμή της ενέργειας μετά την αλλαγή.

Σε κάθε περίπτωση να γίνει εφαρμογή για $\omega'^2 = \frac{1}{2} \omega^2$.

4.8. Ένα σωματίδιο μέσα σ' ένα δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή περιορίζεται με αδιαπέραστο διάφραγμα να κινείται μόνο στο θετικό άξονα των θέσεων $x > 0$.

α) Να γραφούν οι ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές της ενέργειας.

β) Υποθέτουμε ότι το σωματίδιο βρίσκεται στη βασική κατάσταση για το παραπάνω δυναμικό. Ξαφνικά αποσύρεται το διάφραγμα και το σωματίδιο κινείται σε ολόκληρη την περιοχή $-\infty < x < +\infty$. Ποιά είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στις δύο χαμηλότερες ενεργειακά καταστάσεις του νέου πλήρους δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή; Ποιά είναι η μέση τιμή της ενέργειας τότε;



γ) Να επαναληφθεί το μέρος β) αν συγχρόνως γίνεται η αλλαγή $\omega \rightarrow \omega'$.

4.9. Για ένα μιγαδικό αριθμό z , μια κατάσταση $|z\rangle$ ενός αρμονικού ταλαντωτή ορίζεται από τη σχέση

$$|z\rangle = e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle$$

i) Ναδειχθεί ότι : $\langle z_1 | z_2 \rangle = e^{z_1^* z_2}$

ii) Ναδειχθεί, επίσης, ότι : $\langle z_1 | \hat{H} | z_2 \rangle = (|z_1|^2 + \frac{1}{2}) \hbar \omega \cdot e^{|z_1|^2}$

4.10. i) Υποθέτουμε ότι για $t=0$ η κυματοσυνάρτηση ενός συστήματος αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$\psi(x,t=0) = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}} e^{-\beta^2(x-x(0))^2/2}, \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Εάν μετρήσουμε την ενέργεια, ποιά είναι η πιθανότητα να βρούμε την τιμή $\frac{\hbar\omega}{2}$, την $\frac{3\hbar\omega}{2}$, μια τιμή μεγαλύτερη από $\frac{3\hbar\omega}{2}$.

ii) Να γραφεί η $\psi(x,t)$ και ναδειχθεί ότι ο γενικός συντελεστής C_n του αναπτύγματος της $\psi(x,t)$ συναρτήσει των ιδιοσυναρτήσεων του αρμονικού ταλαντωτή είναι

$$C_n = \frac{\beta^n x(0)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\beta^2 x(0)^2/4}$$

4.11. Θεωρούμε τις ιδιοτιμές a και τις ιδιοκαταστάσεις $|a\rangle$ του τελεστή καταστροφής \hat{a} ενός αρμονικού ταλαντωτή: $\hat{a} |a\rangle = a |a\rangle$

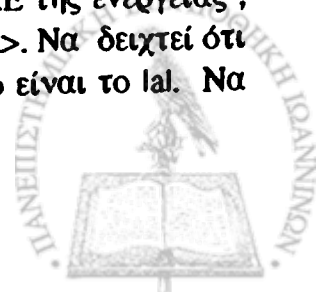
i) Αναπτύσσοντας την κατάσταση $|a\rangle$ συναρτήσει των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας $|n\rangle$: $|a\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$, ναδειχθεί ότι

$$|a\rangle = C_0 \sum_n \frac{a^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Όταν ισχύει η συνθήκη κανονικοποίησης $\langle a | a \rangle = 1$, ναδειχθεί ότι $C_0 = e^{-|a|^2/2}$

Ποιά είναι η πιθανότητα να βρεθεί η ιδιοτιμή $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ σε μια μέτρηση της ενέργειας, όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|a\rangle$.

ii) Να υπολογιστούν η μέση τιμή $\langle E \rangle$ και η αβεβαιότητα ΔE της ενέργειας, όταν ο αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται στην κατάσταση $|a\rangle$. Ναδειχθεί ότι η ενέργεια είναι τόσο καλύτερα ορισμένη, όσο μεγαλύτερο είναι το $|a|$. Να



υπολογιστούν ακόμη οι ποσότητες $\langle x \rangle$, Δx , $\langle p \rangle$, Δp για την κατάσταση $|a\rangle$ και να βρεθεί το $\Delta x \cdot \Delta p$. Να σχολιαστεί το αποτέλεσμα.

4.12. Ναδειχθεί ότι η συνάρτηση

$$\langle x|a \rangle \equiv a(x) = A \exp \left[-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{(x-x(0))^2}{2} + i \frac{p(0)x}{\hbar} \right],$$

όπου $x(0)$ και $p(0)$ σταθερές, είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή καταστροφής \hat{a} του αρμονικού ταλαντωτή και να βρεθεί η αντίστοιχη ιδιοτιμή a . Ναδειχθεί ότι η $a(x)$ μπορεί να γραφεί

$$a(x) = \sum_n C_n \psi_n(x) = C_0 \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} a^n \psi_n(x) = C_0 e^{aa^\dagger} \psi_0(x)$$

Αν για $t = 0$ ο αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται στην κατάσταση $a(x)$, να γραφεί η χρονική εξέλιξη της $a(x)$ και ναδειχθεί ότι τη χρονική στιγμή t ο αρμονικός ταλαντωτής θα βρίσκεται στην κατάσταση

$$a(x,t) = A \exp \left[-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{(x-x(t))^2}{2} + i \frac{p(t)x}{\hbar} \right]$$

όπου

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t$$

$$p(t) = p(0) \cos \omega t - m\omega x(0) \sin \omega t$$

Ναδειχθεί ότι σε κάθε χρονική στιγμή είναι $(\Delta x \cdot \Delta p)_t = \frac{\hbar}{2}$.

Όπως φαίνεται από τα προβλήματα 4.11 και 4.12, μια ιδιοκατάσταση $|a\rangle$ του τελεστή καταστροφής \hat{a} καθορίζεται πλήρως (εκτός από μια σταθερά C_0) από την ιδιοτιμή της a . Μια τέτοια κατάσταση ονομάζεται σύμφωνη (από το ρόλο που παίζουν τέτοιες καταστάσεις στην κβαντική οπτική) και, όπως φαίνεται από το πρόβλημα 4.12, παραμένει σύμφωνη σε κάθε χρονική στιγμή.



THE [illegible] OF [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

THE UNIVERSITY OF CHICAGO
LIBRARY

ΚΕΦΑΛΑΙΟ V

ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

Σ' αυτό το κεφάλαιο θ' ασχοληθούμε με τον απαραίτητο φορμαλισμό για την περιγραφή της στροφορμής στην κβαντική θεωρία. Ήδη από την κλασική μηχανική, η έννοια της στροφορμής είναι από τις σπουδαιότερες στη μελέτη μεγάλου αριθμού προβλημάτων. Μαζί με την ολική ενέργεια και την ολική ορμή αποτελούν τις τρεις βασικές διατηρούμενες ποσότητες για απομονωμένα συστήματα. Θα δούμε πρώτα με συγκεκριμένα παραδείγματα τη σχέση που υπάρχει ανάμεσα σε συμμετρίες και διατηρούμενες ποσότητες από τη μια, καθώς επίσης σε συμμετρίες και ύπαρξη εκφυλισμού από την άλλη. Στη συνέχεια, ξεκινώντας από τον ορισμό της κλασικής τροχιακής στροφορμής, θα γράψουμε τις σχέσεις μετάθεσης, τις οποίες ικανοποιεί το παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος της τροχιακής στροφορμής L . Αυτές θα μας επιτρέψουν να δώσουμε το γενικό ορισμό κάθε παρατηρήσιμου μεγέθους J , που μπορεί να ερμηνευτεί σαν στροφορμή, συμπεριλαμβανομένης και της περίπτωσης, όπου δεν υπάρχει κλασικό ανάλογο. Αυτή είναι η περίπτωση της ιδιοστροφορμής (σπιν) ενός σωματιδίου. Θα μελετήσουμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις - ιδιοσυναρτήσεις τέτοιων παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών, καθώς επίσης και το πρόβλημα της πρόσθεσης στροφορμών.

5.1. Περί συμμετριών στην κβαντική μηχανική

Ας θυμηθούμε αρχικά την έκφραση του τελεστή $\hat{T}_{\mathbf{r}_0}$, που δημιουργεί μετατόπιση στο χώρο των θέσεων κατά \mathbf{r}_0



$$\langle r | \hat{T}_{r_0} | \psi \rangle = \hat{T}_{r_0} \psi(r) = \psi(r+r_0) = \langle r+r_0 | \psi \rangle \quad (5.1)$$

Όπως έχουμε δει στην §3.12, είναι

$$\langle r | \hat{T}_{r_0} | \psi \rangle = \langle r | e^{i\hat{p}r_0/\hbar} | \psi \rangle \quad (5.2)$$

Συνεπώς, ο τελεστής μετατόπισης \hat{T}_{r_0} παίρνει τη μορφή

$$\hat{T}_{r_0} = e^{i\hat{p}r_0/\hbar} \quad (5.3)$$

Έτσι λέμε ότι ο τελεστής \hat{p} είναι ο γεννήτορας για τις μετατοπίσεις στο χώρο των θέσεων. Όπως και στην κλασική μηχανική, συμμετρία κάτω από μετατοπίσεις στο χώρο των θέσεων συνεπάγεται διατήρηση της ορμής p . Πράγματι, από τη σχέση

$$[\hat{T}_{r_0}, \hat{H}] = 0, \quad (5.4)$$

παίρνουμε

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0, \quad (5.5)$$

που σημαίνει ότι η ορμή p είναι σταθερά της κίνησης (βλ. §2.8-2.9).

Ακόμη, είναι γνωστή από την κλασική μηχανική η σχέση στροφορμής και στροφών στο χώρο των θέσεων. Έτσι, ας θεωρήσουμε τον τελεστή $\hat{R}_{\delta\varphi, \eta}$, που δημιουργεί στροφή στο χώρο των θέσεων κατά απειροστή γωνία $\delta\varphi$, κατά τη θετική φορά, γύρω από έναν άξονα προσανατολισμένο κατά την κατεύθυνση του μοναδιαίου ανύσματος η :

$$\begin{aligned} \langle r | \hat{R}_{\delta\varphi, \eta} | \psi \rangle &= \hat{R}_{\delta\varphi, \eta} \psi(r) = \psi(r - \delta\varphi \eta \times r) \\ &= \langle r - \delta\varphi \eta \times r | \psi \rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

Αναπτύσσοντας κατά Taylor παίρνουμε

$$\begin{aligned} \psi(r - \delta\varphi \eta \times r) &= \psi(r) - (\delta\varphi \eta \times r) \cdot \nabla \psi(r) \\ &= \psi(r) - \frac{i}{\hbar} (\delta\varphi \eta \times r) \cdot \hat{p} \psi(r) \\ &= \psi(r) - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \eta \cdot (\hat{r} \times p) \psi(r) \\ &= [1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \eta \cdot \hat{L}] \psi(r) \end{aligned} \quad (5.7)$$

όπου

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \quad (5.8)$$

ο τελεστής της τροχιακής στροφορμής. Συνεπώς, έχουμε

$$\langle r | \hat{R}_{\delta\varphi, \eta} | \psi \rangle = \langle r | [1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \eta \cdot \hat{L}] | \psi \rangle \quad (5.9)$$



και ο τελεστής $\hat{R}_{\delta\varphi,\eta}$ παίρνει τη μορφή

$$\hat{R}_{\delta\varphi,\eta} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi\eta \cdot \hat{L} \quad (5.10)$$

Ας θεωρήσουμε τώρα μια στροφή κατά πεπερασμένη γωνία φ . Επειδή μια τέτοια στροφή μπορεί να κατασκευαστεί από διαδοχικές απειροστές στροφές, μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\varphi+\delta\varphi,\eta} &= \hat{R}_{\delta\varphi,\eta} \hat{R}_{\varphi,\eta} \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi\eta \cdot \hat{L}\right) \hat{R}_{\varphi,\eta} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Από τη σχέση αυτή παίρνουμε αμέσως για τον τελεστή των στροφών στο χώρο των θέσεων κατά γωνία φ γύρω από τον άξονα κατά μήκος του ανύσματος η την έκφραση

$$\hat{R}_{\varphi,\eta} = e^{-i\varphi\eta\hat{L}/\hbar} \quad (5.12)$$

Έτσι λέμε ότι ο τελεστής της στροφορμής \hat{L} είναι ο γεννήτορας για τις στροφές στο χώρο των θέσεων. Πάλι, όπως και στην κλασική μηχανική, συμμετρία κάτω από στροφές στο χώρο των θέσεων συνεπάγεται διατήρηση της στροφορμής L . Πράγματι, από τη σχέση

$$[\hat{R}_{\varphi,\eta}, \hat{H}] = 0 \quad (5.13)$$

προκύπτει ότι

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0 \quad (5.14)$$

που σημαίνει ότι η στροφορμή L είναι σταθερά της κίνησης.

Ανάλογη σχέση ισχύει ανάμεσα στη συμμετρία κάτω από μετατόπιση στο χρόνο και τη διατήρηση της ενέργειας. Αυτό προκύπτει αμέσως από τη μορφή (2.218) του τελεστή της χρονικής εξέλιξης, που έχει τη χαμιλτονιανή \hat{H} σαν γεννήτορα.

Τα παραπάνω αποτελούν τα τρία πιο χαρακτηριστικά παραδείγματα πάνω στη βαθιά σχέση συμμετριών και διατηρούμενων ποσοτήτων στην οποία δεν θα επεκταθούμε περισσότερο εδώ. Συνοψίζουμε, απλά, το θέμα που αξίζει να θυμόμαστε: *Η ύπαρξη μιας συμμετρίας σ' ένα φυσικό σύστημα συνεπάγεται την ύπαρξη ενός μετασχηματισμού που αφήνει αναλλοίωτη τη χαμιλτονιανή. Αυτό με τη σειρά του συνεπάγεται την ύπαρξη ενός φυσικού μεγέθους που ο τελεστής του μετατίθεται με τη χαμιλτονιανή, κάτι που σημαίνει ότι η αντίστοιχη φυσική ποσότητα (ισοδύναμα, ο αντίστοιχος κβαντικός αριθμός) διατηρείται.*



Στο σημείο αυτό αξίζει ν' αναφερθούμε σε μια άλλη συμμετρία, εκείνη της αναστροφής χρόνου : $t \rightarrow -t$. Η συμμετρία αυτή, όπως και η συμμετρία αναστροφής χώρου $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ (βλ. §3.6), είναι μια διάκριτη συμμετρία, σε αντίθεση με τις προαναφερθείσες συμμετρίες που είναι συνεχείς συμμετρίες και μπορούν να γραφούν με τη μορφή $e^{i\theta\hat{F}}$, όπου \hat{F} ερμιτιανός τελεστής. Ο τελεστής \hat{P} της αναστροφής χώρου είναι βέβαια ένας μοναδιακός τελεστής και, αν $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$, ο κβαντικός αριθμός της ομοτιμίας διατηρείται (βλ. και πρόβλημα 3.8). Αντίθετα, ο τελεστής $\hat{\Theta}$ αναστροφής χρόνου είναι ο μόνος τελεστής στην κβαντική θεωρία που έχει μια ιδιομορφία. Αρχικά, είναι φανερό ότι κάτω από την δράση του $\hat{\Theta}$ θα έχουμε $\hat{\Theta}^{-1} \hat{r} \hat{\Theta} = \hat{r}$, $\hat{\Theta}^{-1} \hat{p} \hat{\Theta} = -\hat{p}$, $\hat{\Theta}^{-1} \hat{L} \hat{\Theta} = -\hat{L}$. Όμως, αν θέλουμε να είναι η εξίσωση Schrödinger αναλλοίωτη κάτω από αναστροφή στο χρόνο, βλέπουμε εύκολα ότι, λόγω της παρουσίας του μιγαδικού αριθμού i , θα πρέπει, αν $[\hat{\Theta}, \hat{H}] = 0$, να κάνουμε παράλληλα τον μετασχηματισμό $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{\Theta}^{-1} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, -t)$. Έτσι, ο τελεστής $\hat{\Theta}$ πρέπει να περιλαμβάνει και την πράξη της μιγαδικής συζυγίας. Να σημειωθεί ότι, επειδή οι διάφορες κβαντικές ποσότητες περιλαμβάνουν το $\Psi^* \Psi$, έπεται ότι οι δύο εξισώσεις Schrödinger για την $\Psi(\mathbf{r}, t)$ και $\Psi^*(\mathbf{r}, -t)$ θα περιγράφουν την ίδια φυσική, εφ' όσον το δυναμικό V είναι πραγματικό ($V^* = V$). Με άλλα λόγια, συμμετρία κάτω από αναστροφή στο χρόνο στην κβαντική μηχανική επιβάλλει συνθήκες πραγματικότητας στις αλληλεπιδράσεις. Για να παραβιαστεί η συμμετρία αναστροφής χρόνου σ' ένα κβαντικό σύστημα, χρειάζεται να εισάγουμε κατά κάποιο τρόπο αλληλεπιδράσεις μιγαδικής μορφής. Επανερχόμενοι στον τελεστή $\hat{\Theta}$, τον γράφουμε με τη μορφή $\hat{\Theta} = \hat{U} \hat{K}$, όπου \hat{U} μοναδιακός τελεστής και \hat{K} ο τελεστής της μιγαδικής συζυγίας. Ο τελεστής $\hat{\Theta}$ είναι, έτσι, ένας αντιγραμμικός τελεστής : $\hat{\Theta} (c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) = c_1^* \hat{\Theta} |\psi_1\rangle + c_2^* \hat{\Theta} |\psi_2\rangle$ και, συνεπώς, λέμε ότι δεν είναι μοναδιακός, αλλά αντιμοναδιακός (ο Wigner ήταν ο πρώτος που απέδειξε ότι μετασχηματισμοί συμμετρίας που διατηρούν το μέτρο των εσωτερικών γινομένων περιγράφονται από τελεστές που είναι είτε γραμμικοί μοναδιακοί είτε αντιγραμμικοί αντιμοναδιακοί και η δεύτερη αυτή περίπτωση είναι που χρειάζεται για την περιγραφή της αναστροφής χρόνου). Λόγω αυτής της ιδιότητας δεν υπάρχει κβαντικός αριθμός που να συνδέεται με την συμμετρία αναστροφής χρόνου. Σημειωτέον ότι η αναστροφή χρόνου εναλλάσσει αρχικές και τελικές καταστάσεις. Τόσο η αναστροφή χώρου, όσο και η αναστροφή χρόνου, έχουν βρεθεί να παραβιάζονται μόνο στις ασθενείς πυρηνικές αλληλεπιδράσεις, αλλά τα σχετικά φαινόμενα παίζουν αμελητέο ρόλο στα φυσικά συστήματα που εξετάζουμε εδώ στην κβαντομηχανική και γι' αυτό τ' αγνοούμε.

Για τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας θα έχουμε στην περίπτωση ύπαρξης μιας συμμετρίας $\hat{\Sigma}$ ότι



$$\hat{H} (\hat{\Sigma} |n\rangle) = \hat{\Sigma} (\hat{H} |n\rangle) = E_n (\hat{\Sigma} |n\rangle) \quad (5.15)$$

Αυτό σημαίνει ότι οι καταστάσεις $|n\rangle$ και $\hat{\Sigma} |n\rangle$ (υποθέτουμε ότι είναι διαφορετικές) έχουν την ίδια ιδιοτιμή E_n και άρα είναι εκφυλισμένες. Άλλωστε, δύο φυσικά μεγέθη που μετατίθενται μεταξύ τους έχουν κοινές ιδιοκαταστάσεις και, συνεπώς, υπάρχει εκφυλισμός. Αντίστροφα, εάν υπάρχει εκφυλισμός στο ενεργειακό φάσμα, αυτό θα οφείλεται στην ύπαρξη κάποιας συμμετρίας. Κατά συνέπεια, σε περίπτωση εκφυλισμού αναζητούμε κάποια συμμετρία που πρέπει να υπάρχει στο σύστημα. Ο εκφυλισμός αίρεται τελείως, όταν ανακαλύψουμε όλες τις συμμετρίες που ενυπάρχουν σ' αυτό, δηλαδή όταν βρούμε το αντίστοιχο πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών (βλ. §2.6).

5.2. Τροχιακή στροφορμή και γενικευμένη στροφορμή: ιδιοτιμές

Όπως έχουμε ήδη σημειώσει (βλ. σχέσεις (2.159)-(2.164)), οι συνιστώσες του τελεστή της τροχιακής στροφορμής

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \quad (5.16)$$

ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (5.17\alpha)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad (5.17\beta)$$

Οι παραπάνω σχέσεις γράφονται ισοδύναμα

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L} \quad (5.18\alpha)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}] = 0 \quad (5.18\beta)$$

Ακριβώς οι σχέσεις μετάθεσης (5.17)-(5.18) ορίζουν ένα παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος σαν γενικευμένη στροφορμή. Έτσι, μια γενικευμένη στροφορμή \hat{J} ορίζεται από τις σχέσεις μετάθεσης

$$\hat{J} \times \hat{J} = i \hbar \hat{J} \quad (5.19)$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}] = 0 \quad (5.20)$$

Οι σχέσεις (5.19)-(5.20) σημαίνουν ότι μπορούμε να εκλέξουμε το \hat{J}^2 και μια από τις συνιστώσες \hat{J}_i σαν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών. Κατά σύμβαση, σαν τέτοιο πλήρες σύνολο παίρνουμε το σύνολο $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$.



Έχοντας διαλέξει σαν πλήρες σύνολο συμβιβαστών παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών τα \hat{J}^2, \hat{J}_z , το πρόβλημά μας είναι ο προσδιορισμός των κοινών ιδιοκαταστάσεων (ιδιοσυναρτήσεων) των \hat{J}^2, \hat{J}_z , καθώς και των αντίστοιχων ιδιοτιμών τους. Έτσι, αν συμβολίσουμε προς το παρόν σαν $|\lambda m\rangle$ τις κοινές ιδιοκαταστάσεις, το πρόβλημα ιδιοτιμών των \hat{J}^2, \hat{J}_z γράφεται

$$\hat{J}^2 |\lambda m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda m\rangle \quad (5.21)$$

$$\hat{J}_z |\lambda m\rangle = m \hbar |\lambda m\rangle \quad (5.22)$$

και το αντικείμενό μας είναι να βρούμε αρχικά της ιδιοτιμές λ και m .

Δύο πολύ σημαντικοί τελεστές, χρήσιμοι στην εύρεση των λ και m , είναι οι τελεστές \hat{J}_+ και \hat{J}_- , ανάλογοι των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής του αρμονικού ταλαντωτή. Ορίζονται συναρτήσεις των \hat{J}_x και \hat{J}_y από τις σχέσεις

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y \quad (5.23)$$

Από τις σχέσεις μετάθεσης (5.19)-(5.20), ελέγχουμε εύκολα ότι ισχύουν και οι σχέσεις

$$[\hat{J}_-, \hat{J}_z] = \hbar \hat{J}_- \quad (5.24)$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_z] = -\hbar \hat{J}_+ \quad (5.25)$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z \quad (5.26)$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{J}^2] = 0 \quad (5.27)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψη τη σχέση (5.24), βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{J}_z (\hat{J}_- |\lambda m\rangle) &= \hat{J}_- \hat{J}_z |\lambda m\rangle - \hbar \hat{J}_- |\lambda m\rangle \\ &= (m-1) \hbar (\hat{J}_- |\lambda m\rangle) \end{aligned} \quad (5.28)$$

Η σχέση αυτή μας λέει ότι η κατάσταση $\hat{J}_- |\lambda m\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση του \hat{J}_z με ιδιοτιμή $(m-1)\hbar$, ενώ προφανώς δεν αλλάζει η τιμή του λ . Έτσι, η κατάσταση $\hat{J}_- |\lambda m\rangle$ πρέπει να χαρακτηριστεί από τις τιμές λ και $m-1$. Γράφουμε λοιπόν

$$\hat{J}_- |\lambda m\rangle = C_m \hbar |\lambda, m-1\rangle \quad (5.29)$$

όπου ο συντελεστής C_m μένει να προσδιοριστεί. Η (5.29) καθορίζει και το χαρακτήρα του τελεστή \hat{J}_- σαν τελεστή που μειώνει κατά 1 την ιδιοτιμή m , από m σε $m-1$.

Παρόμοια, ξεκινώντας από τη σχέση (5.25) και ακολουθώντας την ίδια λογική, βρίσκουμε ότι ο τελεστής \hat{J}_+ αυξάνει κατά 1 την ιδιοτιμή m , από m σε $m+1$.



Η νέα κατάσταση $\hat{J}_+ |l, m\rangle$ θα χαρακτηρίζεται από τις τιμές λ και $m+1$. Γράφουμε σ' αυτή την περίπτωση ότι

$$\hat{J}_+ |l, m\rangle = C_{m+1} \hbar |l, m+1\rangle \quad (5.30)$$

όπου ο C_{m+1} μένει επίσης να προσδιοριστεί.

Είμαστε τώρα έτοιμοι να βρούμε τις τιμές των m και λ . Παρατηρούμε πρώτα ότι πρέπει να υπάρχει μια μέγιστη και μια ελάχιστη τιμή για το m . Ο λόγος είναι ότι το $\lambda \hbar^2$ είναι η ιδιοτιμή του \hat{J}^2 και για σταθερό λ αυτό περιορίζει το πόσο μεγάλη μπορεί να είναι η ιδιοτιμή του J_z :

$$(m \hbar)^2 \leq \lambda \hbar^2 \quad (5.31)$$

Μπορούμε να το δούμε αυτό διαφορετικά, αν παρατηρήσουμε ότι η μέση τιμή του $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2$ δεν μπορεί να είναι αρνητική:

$$\begin{aligned} \langle \lambda m | (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2) | \lambda m \rangle &= \langle \lambda m | (\hat{J}^2 - J_z^2) | \lambda m \rangle \\ &= \hbar^2 (\lambda - m^2) \geq 0 \end{aligned} \quad (5.32)$$

Συνεπώς, υπάρχει ένα m_{\max} και ένα m_{\min} . Ονομάζουμε το $m_{\max} = j$.

Έπειτα, παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές m αποτελούν ένα διάκριτο φάσμα. Αυτό οφείλεται προφανώς στη δράση των τελεστών \hat{J}_{\pm} , που αυξάνουν ή μειώνουν, αντίστοιχα, τις ιδιοτιμές m κατά μία μονάδα. Έτσι, μπορούμε να γράψουμε

$$m_{\max} = j = m_{\min} + N \quad (5.33)$$

όπου N ένας ακέραιος.

Τέλος, μένει να δούμε τί τιμές παίρνει το j και πως συνδέεται με το λ . Οι δύο συνθήκες, που καθορίζουν αυτές τις τιμές είναι οι προφανείς σχέσεις

$$\hat{J}_- |l, m_{\min}\rangle = 0 \quad (5.34)$$

$$\hat{J}_+ |l, m_{\max}\rangle = 0 \quad (5.35)$$

Για να εκμεταλλευτούμε αυτές τις σχέσεις, χρειαζόμαστε τις εκφράσεις που συνδέουν το \hat{J}^2 με τα \hat{J}_+ , \hat{J}_- , \hat{J}_z , (αντί των \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z). Επαληθεύουμε εύκολα ότι αυτές είναι

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 \quad (5.36)$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 \quad (5.37)$$

Χρησιμοποιώντας τις (5.33)-(5.37), βρίσκουμε

$$\hat{J}^2 |l, m_{\min}\rangle = [-(j-N) + (j-N)^2] \hbar^2 |l, m_{\min}\rangle \quad (5.38)$$



$$\hat{J}^2 |l m_{\max}\rangle = [j + j^2] \hbar^2 |l m_{\max}\rangle \quad (5.39)$$

Επειδή ισχύει επίσης ότι $\hat{J}^2 |l m\rangle = \lambda \hbar^2 |l m\rangle$, παίρνουμε τελικά τις σχέσεις

$$-(j - N) + (j - N)^2 = j + j^2 = \lambda \quad (5.40)$$

Από την (5.40) συμπεραίνουμε δύο πράγματα. Πρώτον, ότι

$$\lambda = j(j + 1) \quad (5.41)$$

Έτσι, από δω και πέρα, δεν χρειαζόμαστε το λ για να χαρακτηρίσουμε μια ιδιοκατάσταση των \hat{J}^2, \hat{J}_z . Θα χρησιμοποιούμε το $j : |l j m\rangle$. Δεύτερον, το j πρέπει να είναι ένας μη αρνητικός ακέραιος ή ημιακέραιος αριθμός:

$$j = \frac{N}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (5.42)$$

Οι τιμές (5.42) αποτελούν το φάσμα του j .

Συνοψίζοντας, έχουμε τα αποτελέσματα

$$\hat{J}^2 |l j m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |l j m\rangle \quad (5.43)$$

$$\hat{J}_z |l j m\rangle = m \hbar |l j m\rangle \quad (5.44)$$

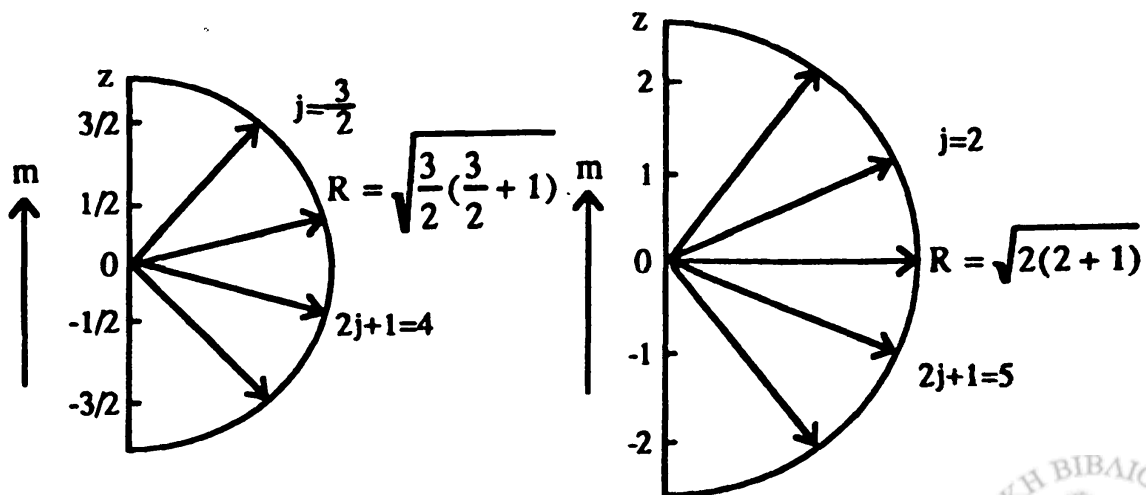
όπου

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (5.45)$$

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \quad (5.46)$$

Το m παίρνει τις $(2j+1)$ τιμές μεταξύ $-j$ και j : $-j \leq m \leq j$.

Ένας χρήσιμος μνημονικός κανόνας για τα παραπάνω αποτελέσματα είναι το λεγόμενο ανυσματικό μοντέλο της στροφορμής, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.1.



Σχ. 5.1 Ανυσματικό μοντέλο στροφορμής (για $j = \frac{3}{2}, 2$)



Η στροφορμή παριστάνεται μ' ένα άνυσμα μήκους $R = \sqrt{j(j+1)}$ (σε μονάδες \hbar), που σχηματίζει μόνο ορισμένες γωνίες με τον άξονα z , έτσι ώστε οι προβολές του πάνω σ' αυτόν ν' απέχουν κατά ένα ακέραιο αριθμό μεταξύ τους. Το άνυσμα της στροφορμής διαγράφει όλες τις δυνατές κατευθύνσεις στο επίπεδο $x-y$, ενώ διατηρεί την z προβολή του.

Μας μένει τέλος να προσδιορίσουμε τις σταθερές C_m και C_{m+1} στις σχέσεις (5.29) -(5.30), που χαρακτηρίζουν τη δράση των τελεστών \hat{J}_{\pm} . Δρώντας με το $\hat{J}^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2$ πάνω στην ιδιοκατάσταση $|jm\rangle$, παίρνουμε (διαλέγουμε το C_m να είναι πραγματικό)

$$j(j+1) = C_m^2 - m + m^2 \quad (5.47)$$

απ' όπου βρίσκουμε ότι

$$C_m = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \quad (5.48)$$

Έχουμε, επίσης, όμοια

$$C_{m+1} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \quad (5.49)$$

Συνοψίζοντας, λοιπόν, τις σχέσεις για τη δράση των τελεστών \hat{J}_{\pm} γράφουμε

$$\begin{aligned} \hat{J}_{\pm} &= \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \\ \hat{J}_{\pm} |jm\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (5.50)$$

5.3. Τροχιακή στροφορμή: ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις

Ας επανέλθουμε τώρα στην τροχιακή στροφορμή $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ ενός σωματιδίου. Σύμφωνα με τα προηγούμενα, οι ιδιοτιμές του \hat{L}^2 είναι $l(l+1)\hbar^2$ ($l \geq 0$) και οι ιδιοτιμές του \hat{L}_z είναι $m\hbar$ ($-l \leq m \leq l$). Όπως θα δούμε στη συνέχεια, για την τροχιακή στροφορμή τα l και m είναι μόνο ακέραιοι αριθμοί.

Οι ιδιοκαταστάσεις των \hat{L}^2 , \hat{L}_z είναι $|lm\rangle$. Στην περίπτωση μας το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\hat{L}^2 |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 |lm\rangle \quad (5.51)$$

$$\hat{L}_z |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle \quad (5.52)$$

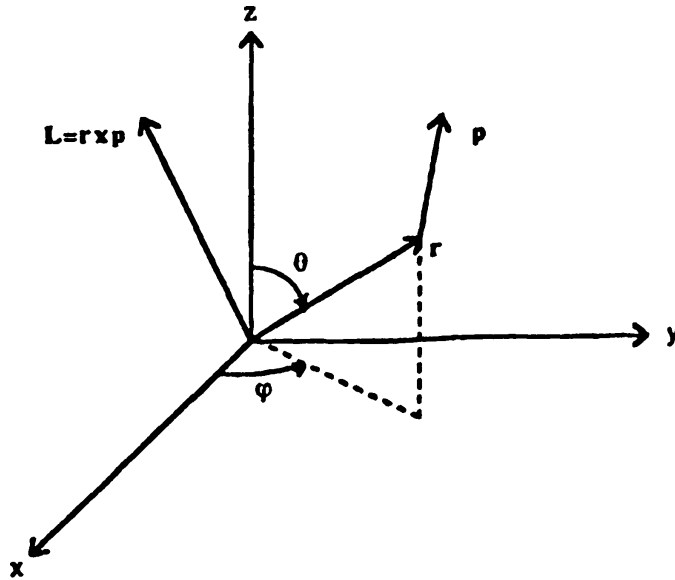
και, συνεπώς, οι ιδιοκαταστάσεις $|lm\rangle$ είναι κατάλληλο να εκφραστούν στην αναπαράσταση θέσης, χρησιμοποιώντας τις γωνιακές συντεταγμένες (θ, φ) από τις σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) για σταθερό r (σχ. 5.2). Έτσι έχουμε

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}^2 |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \theta\varphi |lm\rangle \quad (5.53)$$



$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_z | l m \rangle = m\hbar \langle \theta\varphi | l m \rangle \quad (5.54)$$

Το πρόβλημά μας είναι να βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις $\langle \theta\varphi | l m \rangle$ των \hat{L}^2 , \hat{L}_z , καθώς και το φάσμα των ιδιοτιμών l, m .



Σχ. 5.2. Τροχιακή στροφορμή $L = r \times p$ σωματιδίου με θέσεις, που αντιστοιχούν σε σταθερή απόσταση r από την αρχή. Στο χώρο (θ, φ) το στοιχείο όγκου είναι $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$.

Για να προχωρήσουμε στη λύση του προβλήματος ιδιοτιμών, χρειαζόμαστε τις εκφράσεις των τελεστών \hat{L}^2 , \hat{L}_z στην αναπαράσταση θέσης $\langle \theta\varphi |$. Οι αναγκαίες μαθηματικές εκφράσεις των τελεστών \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_+ και \hat{L}_- σε σφαιρικές συντεταγμένες βρίσκονται ότι είναι

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \langle \theta\varphi | \quad (5.55)$$

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \langle \theta\varphi | \quad (5.56)$$

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_x = -i\hbar \left[-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \langle \theta\varphi | \quad (5.57\alpha)$$

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_y = -i\hbar \left[\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \langle \theta\varphi | \quad (5.57\beta)$$

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \langle \theta\varphi | \quad (5.58\alpha)$$

$$\langle \theta\varphi | \hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \langle \theta\varphi | \quad (5.58\beta)$$

Να σημειωθεί ότι, πράγματι, στις παραπάνω σχέσεις εμφανίζονται μόνο οι γωνιακές συντεταγμένες (θ, φ) και όχι η συντεταγμένη r . Αυτό βέβαια γιατί οι τελεστές της τροχιακής στροφορμής είναι καθαρά γωνιακοί τελεστές και δεν σχετίζονται με την ακτινική συντεταγμένη r .



Ας θεωρήσουμε πρώτα την εξίσωση ιδιοτιμών (5.54) για τον \hat{L}_z , χρησιμοποιώντας την έκφραση (5.56). Έχουμε τη διαφορική εξίσωση

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \theta \varphi | l m \rangle = m \langle \theta \varphi | l m \rangle, \quad (5.59)$$

απ' όπου παίρνουμε

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = e^{im\varphi} f(\theta), \quad (5.60)$$

με $f(\theta)$ συνάρτηση μόνο του θ . Για να είναι η (5.60) μια φυσικά αποδεκτή λύση, θα πρέπει να είναι μια συνάρτηση περιοδική ως προς το φ με περίοδο 2π : $\langle \theta \varphi | l m \rangle = \langle \theta, \varphi + 2\pi | l m \rangle$. Αυτό σημαίνει ότι

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} \rightarrow e^{i2\pi m} = 1$$

και, συνεπώς, στην περίπτωση της τροχιακής στροφορμής ο κβαντικός αριθμός m πρέπει να είναι ένας αριθμός ακέραιος. Κατ' ακολουθία, πρέπει και ο κβαντικός αριθμός l να είναι ακέραιος.

Το επόμενο βήμα είναι να βρούμε την άγνωστη συνάρτηση $f(\theta)$. Χρησιμοποιώντας την ήδη γνωστή εξάρτηση από την φ , όπως αυτή συνάγεται από την (5.60), η εξίσωση ιδιοτιμών (5.53), που βάσει της (5.55) γράφεται

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \langle \theta \varphi | l m \rangle \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \langle \theta \varphi | l m \rangle = \\ = l(l+1) \langle \theta \varphi | l m \rangle, \quad (5.61)$$

παίρνει τη μορφή

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} f(\theta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} f(\theta) = \\ = l(l+1) f(\theta) \quad (5.62)$$

Η διαφορική αυτή εξίσωση και η λύση της είναι γνωστή από τα μαθηματικά: οι συναρτήσεις $f(\theta)$, που λύνουν τη (5.62), είναι τα προσαρτημένα πολυώνυμα του Legendre $P_l^m(\cos\theta)$.

Η κοινή λύση των εξισώσεων (5.59) και (5.61) είναι η κανονικοποιημένη συνάρτηση, που προκύπτει από το γινόμενο των συναρτήσεων - λύσεών τους $e^{im\varphi}$ και $P_l^m(\cos\theta)$, αντίστοιχα. Οι συναρτήσεις αυτές είναι οι γνωστές από τα μαθηματικά σφαιρικές αρμονικές $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Γράφουμε λοιπόν

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) = N e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta) \quad (5.63)$$



όπου N σταθερά κανονικοποίησης. Χρησιμοποιώντας τις σφαιρικές αρμονικές, οι εξισώσεις ιδιοτιμών (5.53) - (5.54) γράφονται απλά

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5.64)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5.65)$$

Η σταθερά κανονικοποίησης N στη σχέση (5.63) προκύπτει αν εφαρμόσουμε τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\begin{aligned} 1 = \langle l m | l m \rangle &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \langle l m | \theta \varphi \rangle \langle \theta \varphi | l m \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (5.66)$$

Η φάση για το N καθορίζεται συνήθως, κατά σύμβαση, από την απαίτηση να είναι η $Y_{l0}(\theta, \varphi)$ πραγματική και θετική.

Ένας άλλος τρόπος προσδιορισμού των κυματοσυναρτήσεων $\langle \theta \varphi | l m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ είναι μέσω της χρήσης των τελεστών \hat{L}_{\pm} , σε αναλογία με την περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή. Πράγματι, ξεκινώντας από το γεγονός ότι η κατάσταση $|l m\rangle$, επειδή αντιστοιχεί στη μέγιστη τιμή του m , έχει την ιδιότητα η δράση του \hat{L}_+ πάνω της να δίνει μηδέν, έχουμε

$$0 = \langle \theta \varphi | \hat{L}_+ | l m \rangle = \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \langle \theta \varphi | l m \rangle \quad (5.67)$$

Για τη διαφορική εξίσωση που προκύπτει από την παραπάνω σχέση, λαμβάνοντας υπ' όψη την εξάρτηση από το φ , που είναι $e^{i\varphi}$, βρίσκουμε αμέσως ότι η λύση της είναι

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) = C e^{i l \varphi} \sin^l \theta \quad (5.68)$$

Η σταθερά C προκύπτει εύκολα από τη συνθήκη κανονικοποίησης $\langle l m | l m \rangle = 1$ και είναι

$$C = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \frac{(-1)^l}{2^l l!} \quad (5.69)$$

Η φάση $(-1)^l$ είναι αυτή που αντιστοιχεί στην παραπάνω σύμβαση.

Για τις υπόλοιπες κυματοσυναρτήσεις με $m \neq l$, η διαδικασία υπολογισμού είναι εύκολη. Δρώντας με τον τελεστή \hat{L}_- πάνω στην κατάσταση $|l m\rangle$ παίρνουμε πρώτα



$$\begin{aligned} \langle \theta\varphi | \hat{L}_z | l, m \rangle &= \hbar e^{-i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \langle \theta\varphi | l, m \rangle \\ &= \hbar \sqrt{2l} \langle \theta\varphi | l, m-1 \rangle \end{aligned} \quad (5.70)$$

Από την εξίσωση αυτή προκύπτει η $\langle \theta\varphi | l, m-1 \rangle = Y_{l, m-1}(\theta, \varphi)$ από την ήδη γνωστή $\langle \theta\varphi | l, m \rangle = Y_{l, m}(\theta, \varphi)$. Περαιτέρω δράση του \hat{L}_z μας δίνει την $\langle \theta\varphi | l, m-2 \rangle = Y_{l, m-2}(\theta, \varphi)$ από την $\langle \theta\varphi | l, m-1 \rangle = Y_{l, m-1}(\theta, \varphi)$ κ.ο.κ. Ο γενικός τύπος, που δίνει τις σφαιρικές αρμονικές $\langle \theta\varphi | l, m \rangle = Y_{l, m}(\theta, \varphi)$, και μερικές χρήσιμες ιδιότητες είναι :

$$\langle \theta\varphi | l, m \rangle = Y_{l, m}(\theta, \varphi)$$

$$= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}$$

$$Y_{l, m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad \text{για } m \geq 0$$

$$Y_{l, m}(\theta, \varphi) = (-1)^{|m|} Y_{l, |m|}^*(\theta, \varphi) \quad \text{για } m < 0$$

$$P_l^{|m|}(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_l(\cos \theta), \quad \text{όπου}$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (1 - \cos^2 \theta)^l \quad \text{πολυνώνυμα Legendre}$$

$$(l+1) P_{l+1}(\cos \theta) = (2l+1) \cos \theta P_l(\cos \theta) - l P_{l-1}(\cos \theta)$$

$$(1 - \cos^2 \theta) P_l'(\cos \theta) = -l \cos \theta P_l(\cos \theta) + l P_{l-1}(\cos \theta) \quad (5.71)$$

Οι πρώτες σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις είναι:

$$\langle \theta\varphi | 00 \rangle = Y_{00}(\theta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$$

$$\langle \theta\varphi | 10 \rangle = Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$$

$$\langle \theta\varphi | 1\pm 1 \rangle = Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\langle \theta\varphi | 20 \rangle = Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$\langle \theta\varphi | 2\pm 1 \rangle = Y_{2\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\langle \theta\varphi | 2\pm 2 \rangle = Y_{2\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{15/32\pi} \sin^2 \theta e^{\pm i2\varphi} \quad (5.72)$$

Τέλος, είναι χρήσιμο να σημειώσουμε τις ακόλουθες σχέσεις ορθογωνιότητας και πληρότητας των πολωνύμων Legendre, όπως επίσης τις σχέσεις ορθοκανονικότητας και πληρότητας των σφαιρικών αρμονικών:



$$\int_{-1}^{+1} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) d(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l^{lm}(\cos\theta) P_{l'}^{l'm'}(\cos\theta) d(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \delta_{ll'}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta') P_l(\cos\theta) = \delta(\cos\theta - \cos\theta') = \frac{\delta(\theta-\theta')}{\sin\theta} \quad (5.73)$$

$$\langle l m | l' m' \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \langle l m | \theta \varphi \rangle \langle \theta \varphi | l' m' \rangle$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi)$$

$$= \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\langle \theta \varphi | \theta' \varphi' \rangle = \sum_{l,m} \langle \theta \varphi | l m \rangle \langle l m | \theta' \varphi' \rangle$$

$$= \sum_{l,m} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi')$$

$$= \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi') = \frac{\delta(\theta-\theta') \delta(\varphi-\varphi')}{\sin\theta} \equiv \delta(\Omega - \Omega') \quad (5.74)$$

5.4. Αναπαράσταση με πίνακες των τελεστών της στροφορμής

Ας θεωρήσουμε τις κοινές κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις $|j m\rangle$ των τελεστών \hat{J}^2, \hat{J}_z μιας γενικευμένης στροφορμής \hat{J} . Αυτές θα ικανοποιούν τις σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\langle j m | j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (5.75)$$

Χρησιμοποιώντας σαν βάση τις $|j m\rangle$, είναι εύκολο να βρούμε τις αναπαραστάσεις υπό μορφή πινάκων των διαφόρων τελεστών της στροφορμής. Πρώτα, τα στοιχεία των τετραγωνικών πινάκων, που παριστάνουν τους τελεστές \hat{J}^2 και \hat{J}_z , βλέπουμε αμέσως ότι είναι

$$(\hat{J}^2)_{j' m', j m} = \langle j' m' | \hat{J}^2 | j m \rangle = j(j+1) \hbar^2 \langle j' m' | j m \rangle$$

$$= j(j+1) \hbar^2 \delta_{j' j} \delta_{m' m}$$

$$(\hat{J}_z)_{j' m', j m} = \langle j' m' | \hat{J}_z | j m \rangle = m \hbar \langle j' m' | j m \rangle$$



$$= m\hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (5.77)$$

Έπειτα, για να βρούμε τα στοιχεία πίνακα για τους τελεστές \hat{J}_x και \hat{J}_y , είναι πρόσφορο να τα εκφράσουμε πρώτα μέσω εκείνων για τους τελεστές \hat{J}_{\pm} . Πράγματι, για τους τελεστές \hat{J}_{\pm} έχουμε

$$\begin{aligned} (\hat{J}_{\pm})_{j'm',jm} &= \langle j'm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle = \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)} \hbar \langle j'm' | j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m',m\pm 1} \end{aligned} \quad (5.78)$$

Τα στοιχεία πίνακα για τους τελεστές \hat{J}_x , \hat{J}_y βρίσκονται τότε μέσω εκείνων για τους \hat{J}_{\pm} χρησιμοποιώντας τις σχέσεις

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \quad (5.79)$$

Από τις παραπάνω εκφράσεις είναι φανερό ότι οι πίνακες ως προς τη βάση $|jm\rangle$ που παριστάνουν τους τελεστές της στροφορμής \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z , \hat{J}_+ , \hat{J}_- και \hat{J}^2 είναι διαγώνιοι ως προς j . Για δοσμένο j ($j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$), οι πίνακες αυτοί χαρακτηρίζονται από $(2j+1)$ στήλες και $(2j+1)$ σειρές, που χαρακτηρίζονται από τις τιμές των m και m' , αντίστοιχα:

$$m' \downarrow \left(\begin{array}{c} \xrightarrow{m} \\ (2j+1) \times (2j+1) \end{array} \right)$$

Ας θεωρήσουμε τις τρεις πρώτες αναπαράστάσεις για $j=0, \frac{1}{2}$ και 1 των τελεστών \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z , και \hat{J}^2 .

1. Για $j=0$ προφανώς έχουμε τους μηδενικούς πίνακες πρώτης τάξης:

$$\hat{J}_x = \hat{J}_y = \hat{J}_z = \hat{J}^2 = (0) \quad (5.80)$$

2. Για $j = 1/2$ επαληθεύουμε ότι οι εκφράσεις (5.76)-(5.79) μας δίνουν τους πίνακες 2×2 :

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(5.81)



$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3. Για $j=1$ βρίσκουμε όμοια τους πίνακες 3×3 :

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (5.82)$$

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Στην περίπτωση της τροχιακής στροφορμής \hat{L} , όπου ο κβαντικός αριθμός $j=1$ είναι ένας ακέραιος $(0,1,2,\dots)$, οι παραπάνω εκφράσεις μπορούν επίσης να προκύψουν χρησιμοποιώντας τις σφαιρικές αρμονικές $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, που είναι οι ιδιοκαταστάσεις $|lm\rangle$ στην αναπαράσταση θέσης $\langle\theta\varphi|$. Έτσι, παραδείγματος χάρι,

$$\begin{aligned} (\hat{L}^2)_{l'm',lm} &= \langle l'm' | \hat{L}^2 | lm \rangle = \\ &= \int d\Omega \langle l'm' | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | \hat{L}^2 | lm \rangle \\ &= \int d\Omega Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= l(l+1) \hbar^2 \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (5.83)$$

$$\begin{aligned} (\hat{L}_z)_{l'm',lm} &= \langle l'm' | \hat{L}_z | lm \rangle = \\ &= \int d\Omega \langle l'm' | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | \hat{L}_z | lm \rangle \\ &= \int d\Omega Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= m\hbar \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (5.84)$$

$$\begin{aligned} (\hat{L}_{\pm})_{l'm',lm} &= \langle l'm' | \hat{L}_{\pm} | lm \rangle = \\ &= \int d\Omega \langle l'm' | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | \hat{L}_{\pm} | lm \rangle \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \int d\Omega Y_{l'm}^*(\theta, \varphi) \hat{L}_{\pm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
&= \sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)} \hbar \delta_{l, l'} \delta_{m', m\pm 1}
\end{aligned} \tag{5.85}$$

5.5. Ιδιοστροφορμή

Εκτός από την τροχιακή στροφορμή, που αντιστοιχεί στην κλασική έκφραση $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, υπάρχει πειραματική επιβεβαίωση ότι τα διάφορα σωματίδια έχουν έναν εσωτερικό βαθμό ελευθερίας, που συμπεριφέρεται σαν στροφορμή και υπακούει, συνεπώς, στις σχέσεις μετάθεσης του κάθε ανάλογου παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους $\hat{\mathbf{J}}$. Η εσωτερική αυτή στροφορμή είναι γνωστή σαν ιδιοστροφορμή ή σπιν και συνηθίζεται να συμβολίζεται με το γράμμα $\hat{\mathbf{S}}$. Η ιδιοστροφορμή δεν έχει κλασικό ανάλογο, μια και δεν μπορεί να γραφεί σαν συνάρτηση των \mathbf{r} και \mathbf{p} .

Επειδή ο τελεστής της ιδιοστροφορμής $\hat{\mathbf{S}}$ είναι ένας τελεστής στροφορμής, οι συνιστώσες του \hat{S}_x , \hat{S}_y και \hat{S}_z είναι ερμιτιανοί τελεστές, που ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x, [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y \tag{5.86}$$

Ισοδύναμα, οι σχέσεις αυτές μπορεί να γραφούν

$$\hat{S}_x \hat{\mathbf{S}} = i\hbar \hat{\mathbf{S}} \tag{5.87}$$

Από τη γενική θεωρία της στροφορμής γνωρίζουμε ότι μπορούμε να διαλέξουμε το τετράγωνο του τελεστή της ιδιοστροφορμής

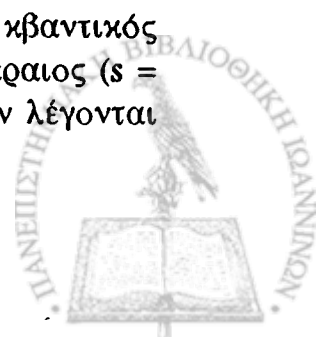
$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \tag{5.88}$$

και έναν από τους τελεστές \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z , με τους οποίους μετατίθεται, για να αποτελέσουν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών. Σαν τέτοιο παίρνουμε το σύνολο $\{\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z\}$. Συμβολίζουμε τις ιδιοτιμές των αντίστοιχων τελεστών με s , m_s και τις κοινές ιδιοκαταστάσεις με $|s, m_s\rangle$. Έχουμε τότε τις εξισώσεις του προβλήματος των ιδιοτιμών

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \tag{5.89}$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle \tag{5.90}$$

Πάλι από τη γενική θεωρία της στροφορμής, ξέρουμε ότι ο κβαντικός αριθμός s (σπιν) της ολικής ιδιοστροφορμής μπορεί να είναι είτε ακέραιος ($s = 0, 1, 2, \dots$) είτε ημιακέραιος ($s = 1/2, 3/2, \dots$). Σωματίδια με ακέραιο σπιν λέγονται



μποζόνια, ενώ εκείνα με ημισκέραιο σπιν λέγονται φερμιόνια (θα επανέλθουμε στη θεμελιώδη αυτή διάκριση στο κεφάλαιο VIII). Σε ότι αφορά τον κβαντικό αριθμό m_s , ξέρουμε ότι παίρνει τις $(2s + 1)$ τιμές από $-s$ έως $+s$: $-s \leq m_s \leq s$. Τέλος, θα ισχύουν οι σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\langle s' m_s' | s m_s \rangle = \delta_{s's} \delta_{m_s' m_s} \quad (5.91)$$

Αν χρησιμοποιήσουμε σαν βάση τις ιδιοκαταστάσεις $|s m_s\rangle$, τότε για δοσμένο s οι τελεστές της ιδιοστροφορμής \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z και \hat{S}^2 μπορούν να παρασταθούν σαν $(2s+1) \times (2s+1)$ πίνακες, όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Οι ιδιοκαταστάσεις $|s m_s\rangle$ μπορούν τότε να παρασταθούν σαν ανύσματα μιας στήλης με $(2s+1)$ συνιστώσες, από τις οποίες μία είναι ίση με τη μονάδα και οι υπόλοιπες είναι μηδέν. Έτσι, παραδείγματος χάρη, για $s=1$ έχουμε ήδη δει ότι

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \hat{S}^2 &= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.92)$$

και επαληθεύουμε εύκολα ότι οι τρεις ιδιοκαταστάσεις είναι

$$|11\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.93)$$

με αντίστοιχες ιδιοτιμές $+\hbar$, 0 , $-\hbar$ για τον \hat{S}_z και $2\hbar^2$ για τον \hat{S}^2 .

5.6. Ιδιοστροφορμή $s=1/2$

Ιδιαίτερη μνεία πρέπει να γίνει για την απλούστερη μη τετριμμένη περίπτωση ιδιοστροφορμής, αυτή που αντιστοιχεί σε σωματίδια με σπιν $s = 1/2$. Η περίπτωση αυτή είναι ιδιαίτερα σημαντική, μια και τόσο τα ηλεκτρόνια, όσο και τα νουκλεόνια (πρωτόνια και νετρόνια), που αποτελούν τα βασικά συστατικά ατόμων και πυρήνων, έχουν σπιν $1/2$. Πιστεύεται ότι όλα τα αδρόνια (σωματίδια που αλληλεπιδρούν με ισχυρές πυρηνικές δυνάμεις), συμπεριλαμβανομένων των πρωτονίων και νετρονίων, αποτελούνται από βασικότερα συστατικά, γνωστά σαν



κούαρκς, τα οποία έχουν επίσης σπιν $1/2$. Έτσι, στο βασικό επίπεδο η ύλη φαίνεται ν' απαρτίζεται από σωματίδια με σπιν $1/2$.

Για ένα σωματίδιο με σπιν $s = 1/2$ ο κβαντικός αριθμός m_s παίρνει τις δύο δυνατές τιμές $m_s = \pm 1/2$. Έτσι, έχουμε δύο ιδιοκαταστάσεις $|1/2 \ 1/2\rangle$, $|1/2 \ -1/2\rangle$, που μπορούν να συμβολιστούν ενδεικτικά και σαν $|+\rangle$, $|-\rangle$, όπου το συν ή πλην σημαίνει τη θετική ή αρνητική ιδιοτιμή m_s , αντίστοιχα:

$$|\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\rangle \equiv |+\rangle, \quad |\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}\rangle \equiv |-\rangle \quad (5.94)$$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών των \hat{S}^2 και \hat{S}_z γράφεται

$$\hat{S}^2 |+\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |+\rangle, \quad \hat{S}^2 |-\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |-\rangle \quad (5.95)$$

$$\hat{S}_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad \hat{S}_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad (5.96)$$

ενώ οι σχέσεις ορθοκανονικότητας είναι

$$\begin{aligned} \langle + | + \rangle &= \langle - | - \rangle = 1 \\ \langle + | - \rangle &= \langle - | + \rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.97)$$

Επίσης, εισάγοντας κατά τα γνωστά τους τελεστές \hat{S}_{\pm} μέσω των σχέσεων

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y, \quad (5.98)$$

επαληθεύουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |+\rangle &= 0, \quad \hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \\ \hat{S}_- |+\rangle &= \hbar |-\rangle, \quad \hat{S}_- |-\rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.99)$$

Έτσι, συνολικά, οι συνιστώσες \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z του τελεστή της ιδιοστροφορμής \hat{S} δρουν για την περίπτωση του σπιν $s=1/2$ σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \hat{S}_x |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |-\rangle, \quad \hat{S}_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ \hat{S}_y |+\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |-\rangle, \quad \hat{S}_y |-\rangle = -\frac{i\hbar}{2} |+\rangle \\ \hat{S}_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad \hat{S}_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \end{aligned} \quad (5.100)$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle$ και $|-\rangle$ σαν βάση του αντίστοιχου διδιάστατου καταστατικού χώρου, μία τυχαία κατάσταση $|\Sigma\rangle$ του σπιν γράφεται

$$|\Sigma\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$$



$$= \langle + | \Sigma | + \rangle + \langle - | \Sigma | - \rangle \quad (5.101)$$

Αν η $|\Sigma\rangle$ είναι κανονικοποιημένη $\langle \Sigma | \Sigma \rangle = 1$, θα ισχύει

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = |\langle + | \Sigma \rangle|^2 + |\langle - | \Sigma \rangle|^2 = 1 \quad (5.102)$$

Οι πιθανότητες σε μία μέτρηση του \hat{S}_z να βρούμε τις τιμές $(\pm \hbar/2)$, όταν ένα σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\Sigma\rangle$, είναι βέβαια

$$P(+\frac{\hbar}{2}) = |c_+|^2 = |\langle + | \Sigma \rangle|^2, \quad P(-\frac{\hbar}{2}) = |c_-|^2 = |\langle - | \Sigma \rangle|^2 \quad (5.103)$$

Στην αναπαράσταση με πίνακες, αν πάρουμε σαν βάση τις δύο ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle$ και $|-\rangle$, τότε οι τελεστές της ιδιοστροφορμής παριστάνονται, σύμφωνα με τις σχέσεις (5.81), με τους πίνακες

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \hat{S}^2 &= \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.104)$$

Επί πλέον, οι δύο τελεστές \hat{S}_{\pm} θα παριστάνονται από τους πίνακες

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.105)$$

Οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle$, $|-\rangle$ δίνονται από τα ανύσματα μιας στήλης

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.106)$$

ενώ μία τυχαία κατάσταση $|\Sigma\rangle$ παριστάνεται από το άνυσμα

$$|\Sigma\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (5.107)$$

Όταν δουλεύουμε με τους τελεστές της ιδιοστροφορμής για σπιν $s=1/2$, είναι κατάλληλο να εισάγουμε τους πίνακες του Pauli $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.108)$$

γράφοντας

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad (5.109)$$



Οι ιδιοτιμές των πινάκων Pauli σ είναι ± 1 και, συνεπώς, εκείνες των τελεστών \hat{S} είναι $\pm \hbar/2$. Οι ιδιοκαταστάσεις του \hat{S}_z είναι βέβαια οι (5.106), ενώ του \hat{S}_x και του \hat{S}_y είναι

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad (5.110)$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}, \quad (5.111)$$

αντίστοιχα.

Οι πίνακες του Pauli ικανοποιούν πολλές χρήσιμες σχέσεις, που μπορούν να συνοψιστούν στην εξής:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (5.112)$$

Ειδικότερα, ισχύουν οι σχέσεις μετάθεσης

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (5.113)$$

και οι σχέσεις αντιμετάθεσης

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \quad (5.114)$$

όπου έχουμε ήδη ορίσει το σύμβολο $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ σαν τον αντιμεταθέτη δύο τελεστών

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A} \quad (5.115)$$

Ακόμη, μπορούμε να γράψουμε τις σχέσεις

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (5.116)$$

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y \quad (5.117)$$

Οι ανάλογες σχέσεις, που ικανοποιούν οι τελεστές $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$, προκύπτουν αμέσως από τις παραπάνω μέσω της (5.109).

Αναφέρουμε ότι τα ίχνη των πινάκων Pauli είναι μηδέν

$$\text{Tr } \sigma_x = \text{Tr } \sigma_y = \text{Tr } \sigma_z = 0 \quad (5.118)$$

ενώ η ορίζουσά τους -1:

$$\det \sigma_x = \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1 \quad (5.119)$$

Οι πίνακες Pauli, μαζί με το μοναδιαίο 2×2 πίνακα I , είναι τέσσερις γραμμικά ανεξάρτητοι πίνακες και, συνεπώς, αποτελούν ένα πλήρες σύνολο 2×2 πινάκων. Κάθε πίνακας 2×2 μπορεί να γραφεί σαν γραμμικός συνδυασμός των $I, \sigma_x, \sigma_y,$ και σ_z , με συντελεστές, εν γένει, μιγαδικούς αριθμούς. Συνέπεια αυτού είναι το



γεγονός ότι μια τυχαία συνάρτηση των τελεστών του σπιν για $s = \frac{1}{2}$ μπορεί να γραφεί σαν γραμμικός συνδυασμός των \hat{I} , \hat{S}_x , \hat{S}_y και \hat{S}_z , (βλ. πρόβλημα 5.6).

5.7. Ολική στροφορμή -Πρόσθεση στροφορμών

Αν είναι \hat{L} ο τελεστής της τροχιακής στροφορμής ενός σωματιδίου και \hat{S} εκείνος της ιδιοστροφορμής (σπιν), τότε ο τελεστής της ολικής στροφορμής \hat{J} του σωματιδίου θα είναι

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (5.120)$$

Επειδή οι \hat{L} και \hat{S} δρουν πάνω σε διαφορετικές, ανεξάρτητες μεταβλητές (ο \hat{L} σε γωνιακές μεταβλητές και ο \hat{S} σε μεταβλητές του σπιν), οι συνιστώσες του \hat{L} μετατίθενται μ' εκείνες του \hat{S} και, συνεπώς, οι σχέσεις μετάθεσης για τις συνιστώσες της ολικής στροφορμής είναι ίδιες με αυτές για τις συνιστώσες των \hat{L} και \hat{S} .

Γενικότερα, για ένα απομονωμένο σύστημα N σωματιδίων γράφουμε

$$\hat{J} = \sum_{i=1}^N \hat{J}_i \quad (5.121)$$

όπου \hat{J}_i ο τελεστής της ολικής στροφορμής για το σωματίδιο i :

$$\hat{J}_i = \hat{L}_i + \hat{S}_i \quad (5.122)$$

Αν γράψουμε

$$\hat{L} = \sum_{i=1}^N \hat{L}_i, \quad \hat{S} = \sum_{i=1}^N \hat{S}_i, \quad (5.123)$$

τότε η ολική στροφορμή \hat{J} (5.121) μπορεί να γραφεί με τη μορφή (5.120) και οι συνιστώσες των τελεστών των διαφόρων στροφορμών υπακούουν στις ίδιες γνωστές σχέσεις μετάθεσης, μια και δρουν σε διαφορετικές, ανεξάρτητες μεταβλητές. Αναφέρουμε εδώ ότι η κατάσταση ενός συστήματος με κβαντικούς αριθμούς J , L και S για την συνολική στροφορμή, την τροχιακή στροφορμή και το σπιν συμβολίζεται, συνήθως, στη φασματοσκοπία σαν $^{2S+1}L_J$ (με τα κωδικά γράμματα S, P, D, F, \dots ν' αντιστοιχούν σε $L = 0, 1, 2, 3, \dots$, βλ. και §6.4).



Στα επόμενα θα περιοριστούμε στην απλούστερη περίπτωση πρόσθεσης, δηλαδή στην πρόσθεση δύο μετατιθέμενων στροφορμών

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 \quad (5.124)$$

όπου \hat{J}_1, \hat{J}_2 είναι οι τελεστές δύο οποιωνδήποτε στροφορμών, που αντιστοιχούν είτε σε δύο διαφορετικά, ανεξάρτητα σύνολα δυναμικών μεταβλητών ενός συστήματος (όπως η τροχιακή στροφορμή \hat{L} και η ιδιοστροφορμή \hat{S}), είτε σε δύο διαφορετικά, ανεξάρτητα υποσυστήματα (όπως δύο διαφορετικές στροφορμές \hat{J}_i στην εξίσωση (5.121)).

Ακριβέστερα, λέμε ότι οι δύο τελεστές της στροφορμής \hat{J}_1 και \hat{J}_2 δρουν σε διαφορετικούς χώρους Hilbert E_1 και E_2 , αντίστοιχα. Παραδείγματος χάρη, μπορεί και οι δύο χώροι E_1 και E_2 ν' αντιστοιχούν σε χώρους Hilbert για τις ιδιοκαταστάσεις δύο διαφορετικών, ανεξάρτητων τροχιακών στροφορμών, ή μπορεί να είναι ο E_1 χώρος Hilbert για τροχιακή στροφορμή και ο E_2 για ιδιοστροφορμή $s = \frac{1}{2}$. Ο χώρος Hilbert του ολικού συστήματος λέμε ότι είναι το τανυστικό γινόμενο

$$E = E_1 \otimes E_2 \quad (5.125)$$

των χώρων Hilbert των δύο ανεξάρτητων υποσυστημάτων. Τότε, εξ ορισμού, θα γράφαμε για την ολική στροφορμή

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 = \hat{J}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{J}_2 \quad (5.126)$$

όπου \hat{I}_1 και \hat{I}_2 είναι οι ταυτοτικοί τελεστές για τους χώρους Hilbert E_1 και E_2 , αντίστοιχα. Η ολική στροφορμή \hat{J} δρα μέσα στο χώρο Hilbert E και ικανοποιεί τις σχέσεις μετάθεσης

$$\hat{J} \times \hat{J} = i \hbar \hat{J}, \quad (5.127)$$

επειδή και οι \hat{J}_1, \hat{J}_2 ικανοποιούν τις ίδιες σχέσεις μετάθεσης και, επί πλέον, μετατίθενται μεταξύ τους.

Το πρόβλημα της πρόσθεσης των στροφορμών (5.124) συνίσταται στο να προσδιορίσουμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις για τους τελεστές \hat{J}^2 και \hat{J}_z της ολικής στροφορμής, συναρτήσει εκείνων των επί μέρους στροφορμών \hat{J}_1 και \hat{J}_2 . Έτσι, για τους τέσσερις τελεστές $\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$, που αποτελούν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών, έχουμε τις εξισώσεις του προβλήματος ιδιοτιμών

$$\hat{J}_1^2 |j_1 m_1\rangle = j_1(j_1+1) \hbar^2 |j_1 m_1\rangle$$



$$\begin{aligned}
\hat{J}_{1z} |j_1 m_1\rangle &= m_1 \hbar |j_1 m_1\rangle \\
\hat{J}_2^2 |j_2 m_2\rangle &= j_2(j_2+1) \hbar^2 |j_2 m_2\rangle \\
\hat{J}_{2z} |j_2 m_2\rangle &= m_2 \hbar |j_2 m_2\rangle
\end{aligned} \tag{5.128}$$

Μια κανονικοποιημένη κοινή ιδιοκατάσταση των μετατιθέμενων τελεστών $\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$ με ιδιοτιμές $j_1(j_1+1) \hbar^2, m_1 \hbar, j_2(j_2+1) \hbar^2$ και $m_2 \hbar$, αντίστοιχα, δίνεται από το "τανυστικό" γινόμενο

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \tag{5.129}$$

Για δοσμένες τιμές j_1 και j_2 , υπάρχουν $(2j_1+1)(2j_2+1)$ "τανυστικά" γινόμενα (5.129), που αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα, δηλαδή μια βάση στο χώρο Hilbert E του ολικού συστήματος (1+2). Έτσι, για παράδειγμα, σ' αυτή τη βάση δρώντας με τον τελεστή $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ παίρνουμε

$$\begin{aligned}
\hat{J}_z |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\
&= (\hat{J}_{1z} |j_1 m_1\rangle) \otimes |j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle \otimes (\hat{J}_{2z} |j_2 m_2\rangle) \\
&= m_1 \hbar |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle + m_2 \hbar |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \\
&= (m_1 + m_2) \hbar |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle
\end{aligned} \tag{5.130}$$

Από την άλλη μεριά, ας θεωρήσουμε τον τελεστή \hat{J}^2 :

$$\hat{J}^2 = (\hat{J}_1 + \hat{J}_2)^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \hat{J}_2 \tag{5.131}$$

Από τις σχέσεις μετάθεσης $[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = 0$, $[\hat{J}_1^2, \hat{J}_1] = 0$ και $[\hat{J}_2^2, \hat{J}_2] = 0$, συνάγουμε αμέσως ότι

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] = [\hat{J}^2, \hat{J}_2^2] = 0 \tag{5.132}$$

Εξ άλλου, επειδή $\hat{J}_1 \hat{J}_2 = \hat{J}_{1x} \hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y} \hat{J}_{2y} + \hat{J}_{1z} \hat{J}_{2z}$ και οι $\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$ δεν μετατίθενται με τους $\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1y}$ και $\hat{J}_{2x}, \hat{J}_{2y}$, αντίστοιχα, συνάγουμε επίσης ότι

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_{1z}] \neq 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_{2z}] \neq 0 \tag{5.133}$$

Συνεπώς, οι τέσσερις τελεστές $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ αποτελούν ένα δεύτερο πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών με κοινές ιδιοκαταστάσεις $|j_1 j_2 j m\rangle$, που μπορούν έτσι να αποτελέσουν μια δεύτερη βάση στο χώρο Hilbert E . Γράφουμε το αντίστοιχο πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\begin{aligned}
\hat{J}_1^2 |j_1 j_2 j m\rangle &= j_1(j_1+1) \hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle \\
\hat{J}_2^2 |j_1 j_2 j m\rangle &= j_2(j_2+1) \hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle \\
\hat{J}^2 |j_1 j_2 j m\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle \\
\hat{J}_z |j_1 j_2 j m\rangle &= m \hbar |j_1 j_2 j m\rangle
\end{aligned} \tag{5.134}$$



Όπως είναι γνωστό, μπορούμε να πάμε από τη μια βάση του χώρου E στην άλλη μ' ένα μοναδιακό μετασχηματισμό, γράφοντας

$$\begin{aligned} |j_1 j_2 j m\rangle &= \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \end{aligned} \quad (5.135)$$

όπου το άθροισμα είναι πάνω σε όλα τα m_1, m_2 , επειδή τα j_1, j_2 θεωρούνται ότι έχουν δοσμένες τιμές. Οι συντελεστές $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$ του παραπάνω μοναδιακού μετασχηματισμού είναι γνωστοί σαν συντελεστές Clebsch-Gordan. Μπορούμε απλούστερα να γράψουμε

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle \quad (5.136)$$

Οι συντελεστές Clebsch-Gordan έχουν πολλές σπουδαίες ιδιότητες. Σημειώνουμε τις εξής δύο:

i) Οι συντελεστές μηδενίζονται, εκτός αν $m = m_1 + m_2$. Μπορούμε να γράψουμε

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle = 0, \quad m \neq m_1 + m_2. \quad (5.137)$$

Η ιδιότητα αυτή είναι μάλλον προφανής. Από τη σχέση

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j_1 j_2 j m\rangle = 0, \quad (5.138)$$

πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 |$ παίρνουμε

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle = 0 \quad (5.139)$$

απ' όπου προκύπτει η ιδιότητα i).

ii) Οι συντελεστές μηδενίζονται $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle = 0$, εκτός αν

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (5.140)$$

Η ιδιότητα αυτή είναι επίσης προφανής, αν σκεφτεί κανείς το ανυσματικό μοντέλο πρόσθεσης των στροφορμών, όπου βλέπουμε το \hat{J} σαν ανυσματικό άθροισμα των \hat{J}_1 και \hat{J}_2 . Όμως, μπορούμε να τη δούμε και διαφορετικά. Η διάσταση του χώρου E πρέπει να είναι ίδια είτε την δούμε με βάση τις ιδιοκαταστάσεις $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$, είτε με βάση τις ιδιοκαταστάσεις $|j_1 j_2 j m\rangle$. Στην πρώτη περίπτωση αυτή είναι

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (5.141)$$

Στην δεύτερη περίπτωση, παίρνοντας χωρίς βλάβη της γενικότητας $j_1 \geq j_2$, βρίσκουμε σύμφωνα με την (5.140)



$$N = \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = \frac{1}{2} [(2(j_1-j_2)+1) + (2(j_1+j_2)+1)](2j_2+1) \\ = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad (5.142)$$

Επειδή και στις δύο περιπτώσεις παίρνουμε την ίδια τιμή του N , συμπεραίνουμε ότι η (5.140) είναι συνεπής.

Οι συντελεστές Clebsch-Gordan $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$ μπορούν να προσδιοριστούν με εφαρμογή της γνωστής δράσης των τελεστών $\hat{J}_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ πάνω στη σχέση (5.135), από την οποία προκύπτουν αναδρομικές (αναγωγικές) σχέσεις. Κατ' αρχήν, πρέπει να ικανοποιούν τους κανόνες επιλογής (5.137) και (5.140). Ο παραπέρα προσδιορισμός είναι μονοσήμαντος, αν καθοριστούν οι σχετικές φάσεις των ιδιοκαταστάσεων $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ και $|j_1 j_2 j m\rangle$. Η συνήθως χρησιμοποιούμενη σύμβαση είναι η λεγόμενη σύμβαση των Condon - Shortley και Wigner, δηλαδή αυτή στην οποία έχουμε

$$1. \quad \hat{J}_{\pm} |j_1 j_2 j m\rangle = \hbar [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} |j_1 j_2 j, m \pm 1\rangle, \quad (5.143)$$

με όμοιες σχέσεις για τις $|j_1 m_1\rangle$ και $|j_2 m_2\rangle$ (βλ. σχέσεις (5.50))

$$2. \quad \langle j_1 j_2 (j-j_1) | j j \rangle \text{ πραγματικό και θετικό.} \quad (5.144)$$

Με αυτή τη σύμβαση, οι συντελεστές Clebsch-Gordan είναι όλοι πραγματικοί. Οι τιμές τους, έτσι υπολογισμένες, δίνονται σε πίνακες.

Συνέπεια της πραγματικότητας των συντελεστών Clebsch-Gordan είναι ότι ο αντίστροφος συντελεστής $\langle j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle$ είναι ίδιος με τον $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$. Και επειδή ένας πραγματικός μοναδιακός πίνακας είναι και ορθογώνιος, έχουμε τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\sum_{j m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | j m \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (5.145)$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m' \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m m'} \quad (5.146)$$

Από την τελευταία, θέτοντας $j' = j$, $m' = m = m_1 + m_2$, παίρνουμε

$$\sum_{m_1 m_2} |\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle|^2 = 1, \quad (5.147)$$

που είναι η συνθήκη κανονικοποίησης για την $|j_1 j_2 j m\rangle$.



Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω σε δύο χαρακτηριστικά παραδείγματα. Σαν πρώτο παράδειγμα, ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο με σπιν s . Η ολική στροφορμή του είναι $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$. Στη βάση $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ έχουμε

$$|l m_l s m_s\rangle = |l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle \quad (5.148)$$

Στην αναπαράσταση θέσης, οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ θα είναι τότε

$$\Psi_{l m_l s m_s} = Y_{l m_l}(\theta, \varphi) \chi_{s m_s} \quad (5.149)$$

όπου $Y_{l m_l}(\theta, \varphi)$ οι σφαιρικές αρμονικές και $\chi_{s m_s}$ οι ιδιοσυναρτήσεις του σπιν, που όπως έχουμε δει (βλ. § 5.5) παριστάνονται με ανύσματα μιας στήλης με $(2s+1)$ συνιστώσες, έχοντας μηδέν σε όλες τις θέσεις εκτός από μία. Οι κοινές ιδιοκαταστάσεις των $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ θα είναι τότε

$$|s j m_j\rangle = \sum_{m_l m_s} \langle l m_l s m_s | j m_j\rangle |l m_l s m_s\rangle \quad (5.150)$$

και οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις τους θα είναι

$$\begin{aligned} \Psi_{l s}^{j m_j} &= \sum_{m_l m_s} \langle l m_l s m_s | j m_j\rangle \Psi_{l m_l s m_s} \\ &= \sum_{m_l m_s} \langle l m_l s m_s | j m_j\rangle Y_{l m_l}(\theta, \varphi) \chi_{s m_s} \end{aligned} \quad (5.151)$$

Ένα εξειδικευμένο σχετικό παράδειγμα υπολογισμού των συντελεστών Clebsch-Gordan περιγράφεται στο πρόβλημα 5.11. πρόσθεσης μιας τροχιακής στροφορμής $l=1$ και ενός σπιν $s = \frac{1}{2}$.

Σαν δεύτερο παράδειγμα, ας θεωρήσουμε δύο σωματίδια με σπιν $\frac{1}{2}$ και τελεστές του σπιν \hat{S}_1 και \hat{S}_2 , αντίστοιχα. Η ολική ιδιοστροφορμή είναι

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \quad (5.152)$$

Οι δυνατές κοινές ιδιοκαταστάσεις των $\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ είναι οι : $|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 0\rangle$, αφ' ενός, και $|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 1\rangle$, $|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 0\rangle$, $|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 -1\rangle$, αφ' ετέρου. Χρησιμοποιώντας το συμβολισμό



$$\begin{aligned}\chi_{\pm}(1) &= |s_1 \pm \frac{1}{2}\rangle \\ \chi_{\pm}(2) &= |s_2 \pm \frac{1}{2}\rangle\end{aligned}\quad (5.153)$$

για τις ιδιοκαταστάσεις των \hat{S}_1^2 , \hat{S}_{1z} και \hat{S}_2^2 , \hat{S}_{2z} , αντίστοιχα, και είτε συμβουλευόμενοι τους πίνακες με τους συντελεστές Clebsch-Gordan, είτε υπολογίζοντάς τους (βλ. σχετικά το πρόβλημα 5.11), έχουμε για την ιδιοκατάσταση με σπιν $s = s_1 - s_2 = 0$

$$|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 0\rangle \equiv \chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) - \chi_-(1) \chi_+(2)], \quad \begin{array}{c} \text{σπιν} \\ \leftrightarrow \end{array} \quad (5.154)$$

ενώ για τις τρεις ιδιοκαταστάσεις με σπιν $s = s_1 + s_2 = 1$ παίρνουμε

$$\begin{aligned}|\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 1\rangle &\equiv \chi_{1,1} = \chi_+(1) \chi_+(2) && \begin{array}{c} \text{σπιν} \\ \uparrow \uparrow \end{array} \\ |\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 0\rangle &\equiv \chi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) + \chi_-(1) \chi_+(2)] && \Rightarrow \\ |\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 -1\rangle &\equiv \chi_{1,-1} = \chi_-(1) \chi_-(2) && \downarrow \downarrow\end{aligned}\quad (5.155)$$

Οι τρεις τελευταίες καταστάσεις είναι συμμετρικές ως προς την εναλλαγή των "συντεταγμένων" του σπιν των δύο σωματιδίων, ενώ η (5.154) είναι αντισυμμετρική. Σαν εφαρμογή αναφέρουμε ότι η κατώτερη κατάσταση του ατόμου του ηλίου είναι μια κατάσταση με $s = 0$, ενώ διεγερμένες καταστάσεις μπορούν ν' αντιστοιχούν είτε σε $s = 0$ είτε σε $s = 1$ (βλ. παρακάτω §8.1 και §12.1).

Θα πρέπει εδώ τελειώνοντας να σημειώσουμε ότι, εάν σ' ένα φυσικό σύστημα οι δυνάμεις εξαρτώνται από την ιδιοστροφομή, τότε οι ιδιοσυναρτήσεις του συστήματος δεν είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις της χαμιλτονιανής \hat{H} και των \hat{S}_1^2 , \hat{S}_{1z} , \hat{S}_2^2 , \hat{S}_{2z} , μπορεί όμως να είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των \hat{H} , \hat{S}_1^2 , \hat{S}_2^2 , \hat{S}^2 , \hat{S}_z . Αυτό φαίνεται στο πολύ απλό παράδειγμα μιας χαμιλτονιανής \hat{H} που περιέχει το δυναμικό

$$V(\mathbf{r}) = V_1(\mathbf{r}) + \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 V_2(\mathbf{r}) \quad (5.156)$$

Προφανώς, οι \hat{S}_{1z} , \hat{S}_{2z} δεν μετατίθενται με τον δεύτερο όρο στην παραπάνω έκφραση και, συνεπώς, οι \hat{H} , \hat{S}_1^2 , \hat{S}_{1z} , \hat{S}_2^2 , \hat{S}_{2z} δεν έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις.

Αν όμως γράψουμε

$$\hat{S}_1 \hat{S}_2 = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) \quad (5.157)$$



βλέπουμε αμέσως ότι οι \hat{H} , \hat{S}_1^2 , \hat{S}_2^2 , \hat{S}^2 , \hat{S}_z έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις. Οι ιδιοτιμές του δυναμικού είναι τότε

$$\begin{aligned}
 V(r) &= V_1(r) + \frac{1}{2} V_2(r) [s(s+1)\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2] \\
 &= \begin{cases} V_1(r) + \frac{1}{4} V_2(r) & s=1 \\ V_1(r) - \frac{3}{4} V_2(r) & s=0 \end{cases} \quad (5.158)
 \end{aligned}$$

Το δευτέριο είναι πράγματι μια δέσμια κατάσταση από ένα πρωτόνιο και ένα νετρόνιο, που αντιστοιχεί σ' ένα δυναμικό του τύπου (5.156) και έχει $s=1$ (βλ. παρακάτω §6.3 και §11.7).

Προβλήματα

5.1. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m σε κυκλική τροχιά ακτίνας r . Ναδειχθεί ότι η αρχή της αβεβαιότητας σ' ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να εκφραστεί με τη μορφή $\Delta L \cdot \Delta \phi \geq \frac{1}{2} \hbar$, όπου L η στροφορμή του σωματιδίου και ϕ η γωνία που δηλώνει τη θέση του σωματιδίου πάνω στην τροχιά. Αν το σωματίδιο είναι ένα ηλεκτρόνιο σε μια από τις τροχιές Bohr ενός ατόμου υδρογόνου και δεχθούμε ότι μπορεί να εντοπιστεί μέσα σε γωνία $\Delta \phi \sim 10^{-1}$ rad, να βρεθεί η αβεβαιότητα Δn στον κβαντικό αριθμό του ατόμου.

5.2. Ναδειχθεί ότι

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{J}_x \rangle &= \langle \hat{J}_y \rangle = 0 \\
 \langle \hat{J}_x^2 \rangle &= \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - m^2] \hbar^2
 \end{aligned}$$

όπου οι μέσες τιμές λαμβάνονται ως προς μια ιδιοκατάσταση $|jm\rangle$.

Να γραφούν, επίσης, οι σχέσεις αβεβαιότητας ανά ζεύγη για τις ΔJ_x , $\Delta J_y, \Delta J_z$ και να συζητηθούν σε σχέση με τα παραπάνω αποτελέσματα.



5.3. i) Ένα σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|lm\rangle = |1,-1\rangle$. Ποιά είναι η πιθανότητα να το βρούμε γύρω από τη θέση $\theta = \frac{\pi}{6}$, $\varphi = \frac{\pi}{2}$ μέσα στο διάστημα $d\theta = 0.01 \text{ rad}$, $d\varphi = 0.02 \text{ rad}$.

ii) Ένα σύστημα βρίσκεται σε μια χρονική στιγμή γύρω από τη θέση $\theta = \frac{\pi}{6}$, $\varphi = \frac{\pi}{2}$ μέσα στο διάστημα $d\theta = 0.01 \text{ rad}$, $d\varphi = 0.02 \text{ rad}$. Ποιά είναι η πιθανότητα, κάνοντας μια μέτρηση της ολικής στροφορμής \hat{L}^2 αμέσως μετά, να βρούμε την τιμή $l=1$.

5.4. Να βρεθούν τα ενεργειακά επίπεδα και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi = c_1 Y_{11} + c_2 Y_{10} + c_3 Y_{1-1}$$

για ένα σωματίδιο με στροφορμή $l=1$, αν η χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \alpha \hat{L}_x^2 + \beta \hat{L}_y^2 + \gamma \hat{L}_z^2$$

όταν α, β, γ , σταθερές.

5.5. Να υπολογιστούν οι πίνακες, που παριστάνουν τους τελεστές της στροφορμής \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z και \hat{J}^2 για $j = \frac{3}{2}$.

5.6. Ξεκινώντας από τις σχέσεις μετάθεσης και αντιμετάθεσης για τους τελεστές \hat{S}_i του σπιν $s = 1/2$, ναδειχθεί ότι

$$\hat{S}_i \hat{S}_j = \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} \hat{S}_k \quad (i \neq j)$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση αυτή, καθώς και τις $\hat{S}_i^2 = \frac{\hbar^2}{4} \hat{1}$, ναδειχθεί ότι ο

πιο γενικός τελεστής \hat{A} για σπιν $s=1/2$ μπορεί να γραφεί

$$\hat{A} = \hat{A}_0 + \hat{A}_x \hat{S}_x + \hat{A}_y \hat{S}_y + \hat{A}_z \hat{S}_z = \hat{A}_0 \hat{1} + \hat{A} \cdot \hat{S}$$

όπου οι τελεστές \hat{A}_0, \hat{A} είναι ανεξάρτητοι από το σπιν.

5.7. Ναδειχθεί ότι

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}),$$

όπου \mathbf{A}, \mathbf{B} δύο ανύσματα ή δύο ανυσματικοί τελεστές, που μετατίθενται με το $\boldsymbol{\sigma}$. Στη δεύτερη περίπτωση, η σειρά των \mathbf{A} και \mathbf{B} στα δύο μέλη της παραπάνω σχέσης πρέπει να τηρηθεί.



- 5.8. i) Αν η πιθανότητα να βρούμε την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ σε μια μέτρηση της συνιστώσας \hat{S}_z του σπιν του ηλεκτρονίου είναι 0.30, να βρεθούν η μέση τιμή $\langle \hat{S}_z \rangle$ και η αβεβαιότητα ΔS_z
- ii) Να βρεθεί η ιδιοκατάσταση $|\Sigma\rangle$, που δίνει ιδιοτιμή $-\frac{\hbar}{2}$ για τη συνιστώσα \hat{S}_x του σπιν του ηλεκτρονίου.
- iii) Αν το σύστημά μας βρίσκεται στην κατάσταση $|\Sigma\rangle$ της προηγούμενης περίπτωσης ii) και κάνουμε μια μέτρηση της \hat{S}_z , ποιο θα είναι το αποτέλεσμα και με ποιά πιθανότητα.

- 5.9. i) Να δειχτεί ότι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοκαταστάσεις για την προβολή

$$\begin{aligned}\hat{S}_\eta &= \eta \cdot \hat{\mathbf{S}} = \hat{S}_x \sin\theta \cos\varphi + \hat{S}_y \sin\theta \sin\varphi + \hat{S}_z \cos\theta \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

του τελεστή \hat{S} του σπιν $s = 1/2$ πάνω στην τυχούσα κατεύθυνση με μοναδιαίο διάνυσμα $\eta = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$, είναι

$$\hat{S}_\eta |v\rangle = v\hbar |v\rangle$$

όπου :

$$\text{Ιδιοτιμή } v = +\frac{1}{2}, \text{ ιδιοκατάσταση } |+\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

$$\text{Ιδιοτιμή } v = -\frac{1}{2}, \text{ ιδιοκατάσταση } |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

Να δειχθεί ότι οι ιδιοκαταστάσεις $|+\frac{1}{2}\rangle$, $|-\frac{1}{2}\rangle$ ικανοποιούν τις σχέσεις ορθοκανονικότητας.

- ii) Να δειχθεί ότι οι μέσες τιμές των τελεστών \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z ως προς τις ιδιοκαταστάσεις $|+\frac{1}{2}\rangle$ του προηγούμενου ερωτήματος, είναι

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \sin\theta \cos\varphi$$



$$\langle \hat{S}_y \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \sin \theta \sin \varphi$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \cos \theta$$

Να βρεθούν επίσης οι μέσες τιμές των \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z ως προς τις ιδιοκαταστάσεις $|-\frac{1}{2}\rangle$.

iii) Να δειχτεί ότι οι ιδιοκαταστάσεις $|+\frac{1}{2}\rangle$, $|-\frac{1}{2}\rangle$ ικανοποιούν τη σχέση πληρότητας

$$\sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu| = |+\frac{1}{2}\rangle \langle +\frac{1}{2}| + |-\frac{1}{2}\rangle \langle -\frac{1}{2}| = I, \text{ όπου } I \text{ ο μοναδιαίος πίνακας.}$$

5.10. Θεωρούμε ένα σωματίδιο με σπιν $\frac{1}{2}$, που περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Υποθέτουμε ότι

$$\psi_+(\mathbf{r}) = R(r) [Y_{00}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10}(\theta, \varphi)]$$

$$\psi_-(\mathbf{r}) = R(r) \frac{1}{\sqrt{3}} [Y_{11}(\theta, \varphi) - Y_{10}(\theta, \varphi)]$$

i) Ποιά είναι η συνθήκη κανονικοποίησης για το $R(r)$.

ii) Ποιές είναι οι πιθανότητες να βρούμε τις τιμές $\pm \frac{\hbar}{2}$ κατά τη μέτρηση του S_z .

iii) Ποιές είναι οι τιμές που παίρνει το L_z και με ποιές πιθανότητες.

5.11. Ας θεωρήσουμε την πρόσθεση μιας τροχιακής στροφορμής $l = 1$ και ενός σπιν $s = \frac{1}{2}$. Στη βάση $|1m \frac{1}{2} m_s\rangle$ γράφουμε συμβολικά

$$\Psi_{1,0,\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} \equiv \Psi_{1,0,(+)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$\Psi_{1,\pm 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \equiv \Psi_{1,\pm 1, (+)} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{1,0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \equiv \Psi_{1,0, (-)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{1,\pm 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \equiv \Psi_{1,\pm 1, (-)} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ξεκινώντας από την προφανή σχέση

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} = \Psi_{1, -1, (-)} \quad (a)$$

και δρώντας με τον τελεστή $\hat{J}_+ = \hat{L}_+ + \hat{S}_+$ να δειχθεί ότι

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \Psi_{1,0, (-)} + \sqrt{\frac{1}{3}} \Psi_{1, -1, (+)} \quad (b)$$

Η ορθογώνια σ' αυτή κατάσταση είναι

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}} \Psi_{1,0, (-)} - \sqrt{\frac{2}{3}} \Psi_{1, -1, (+)} \quad (c)$$

Δρώντας πάλι με τον τελεστή \hat{J}_+ να δειχθεί ότι

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \Psi_{1, +1, (-)} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Psi_{1,0, (+)} \quad (d)$$

Η ορθογώνια σ' αυτή κατάσταση είναι

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}} \Psi_{1, +1, (-)} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Psi_{1,0, (+)} \quad (e)$$

Τέλος, έχουμε

$$\Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \Psi_{1, 1, (+)} \quad (f)$$

Έτσι, από τις σχέσεις (a) - (f) μπορούμε να διαβάσουμε τους αντίστοιχους συντελεστές Clebsch-Gordan.

5.12. Ξεκινώντας από την κατάσταση

$$\chi_{1, -1} = \chi_{-}(1) \chi_{-}(2) \quad (a)$$

και δρώντας με τον τελεστή $\hat{S}_+ = \hat{S}_{1+} + \hat{S}_{2+}$, να δειχθεί ότι

$$\chi_{1,0} = \sqrt{\frac{1}{2}} [\chi_{+}(1) \chi_{-}(2) + \chi_{-}(1) \chi_{+}(2)] \quad (b)$$



Η ορθογώνια σ' αυτή κατάσταση είναι

$$\chi_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] \quad (c)$$

Τέλος, έχουμε

$$\chi_{1,1} = \chi_+(1)\chi_+(2) \quad (d)$$

Έτσι, από τις σχέσεις (a)-(d) μπορούμε να διαβάσουμε τους αντίστοιχους συντελεστές Clebsch - Gordan στην περίπτωση αυτή.

5.13. Να επαληθευτεί ότι οι ιδιοκαταστάσεις (5.154) και (5.155) είναι πράγματι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή της ολικής ιδιοστροφορμής $\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2$ με ιδιοτιμές 0 και $2\hbar^2$, αντίστοιχα.

5.14. Να κατασκευαστεί η κατάσταση $|jm\rangle = |1+1\rangle$ από την πρόσθεση δύο στροφορμών με $j_1 = 1$ και $j_2 = 2$.



ΚΕΦΑΛΑΙΟ VI

ΚΕΝΤΡΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ - ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ

6.1. Κεντρικά δυναμικά: το γενικό πρόβλημα

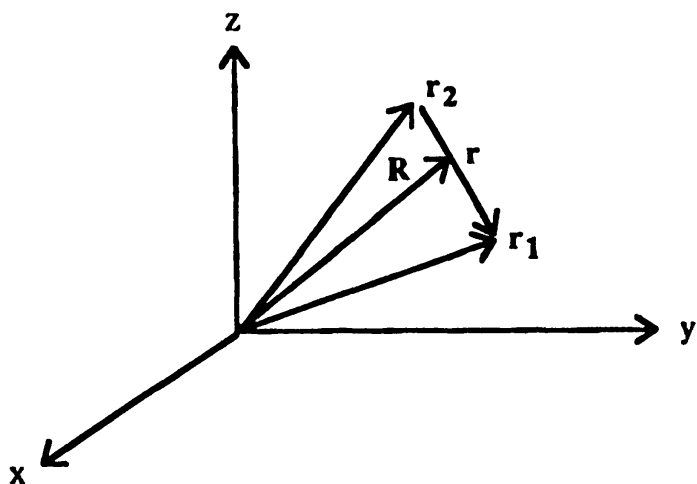
Θα μελετήσουμε σ' αυτό το κεφάλαιο τη μη σχετικιστική κίνηση ενός σωματιδίου (αγνοώντας το σπιν του) μέσα σ' ένα κεντρικό δυναμικό, δηλαδή ένα δυναμικό $V(r)$ που εξαρτάται μόνο από το μέτρο r του ανύσματος θέσης \mathbf{r} . Όπως θα δούμε, οι ιδιότητες της τροχιακής στροφορμής $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, είναι ιδιαίτερης σημασίας σ' αυτή την ανάλυση.

Ας εξετάσουμε, όμως, πρώτα την κίνηση ενός συστήματος δύο σωματιδίων με συντεταγμένες \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 (σχ. 6.1) και μάζες m_1 και m_2 , αντίστοιχα, για το οποίο η δυναμική ενέργεια της αλληλεπίδρασης εξαρτάται από την απόσταση $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ των δύο σωματιδίων. Έχουμε

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

$$\hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \quad (6.1)$$





Σχήμα 6.1 Σχετική κίνηση συστήματος δύο σωματιδίων

Όπως και στην κλασική μηχανική, το πρόβλημα μπορεί ν' αναχθεί στη μελέτη της σχετικής κίνησης των δύο σωματιδίων, εισάγοντας αντί των $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ τις συντεταγμένες (\mathbf{r}, \mathbf{R})

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 && \text{(σχετική απόσταση)} \\ \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} && \text{(θέση κέντρου μάζας),} \end{aligned} \quad (6.2)$$

όπου $M = m_1 + m_2$ η ολική μάζα του συστήματος. Τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε, αντί για την (6.1), την χαμιλτονιακή

$$\hat{H} = \left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \right] + \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right] \equiv \hat{H}_{\text{KM}} + \hat{H}_{\text{ΣΧ}} \quad (6.3)$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 && \text{(ολική ορμή)} \\ \mathbf{p} &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{M} && \text{(σχετική ορμή)} \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{M} && \text{(ανηγμένη μάζα)} \end{aligned} \quad (6.4)$$

Αν συμβολίσουμε τις επί μέρους συντεταγμένες με $\hat{\mathbf{R}} = \{\hat{X}_i\}$, $\hat{\mathbf{P}} = \{\hat{P}_i\}$, $\hat{\mathbf{r}} = \{\hat{r}_i\}$, $\hat{\mathbf{p}} = \{\hat{p}_i\}$, είναι εύκολο να δειχτεί ότι ισχύουν οι σχέσεις μετάθεσης

$$\begin{aligned} [\hat{X}_i, P_j] &= i\hbar \delta_{ij}, & [\hat{X}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \delta_{ij} \\ [\hat{X}_i, \hat{p}_j] &= 0, & [\hat{X}_i, \hat{P}_j] &= 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

Συνεπώς, έχουμε

$$[\hat{H}_{\text{KM}}, \hat{H}_{\text{ΣΧ}}] = 0 \quad (6.6)$$

Αυτό σημαίνει ότι η εξίσωση Schrödinger με την χαμιλτονιακή (6.3)



$$(\hat{H}_{KM} + \hat{H}_{SX}) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \quad (6.7)$$

επιδέχεται λύσεις της μορφής (διαχωρισμός των μεταβλητών)

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{r}) e^{-i(E_{KM} + E)t/\hbar} \quad (6.8)$$

όπου

$$\hat{H}_{KM} \Phi(\mathbf{R}) = E_{KM} \Phi(\mathbf{R}) \quad (6.9)$$

και

$$\hat{H}_{SX} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (6.10)$$

Η (6.9) περιγράφει την κίνηση του κέντρου μάζας θεωρούμενου σαν ελεύθερου σωματιδίου μάζας M και ενέργειας E_{KM} . Εμείς βέβαια, στη συνέχεια, θα ενδιαφερθούμε για τη λύση της (6.10), που περιγράφει τη σχετική κίνηση των δύο σωματιδίων. Η ολική ενέργεια του συστήματος είναι

$$\begin{aligned} E_{ολ} &= E_{KM} + E \\ E_{KM} &: \text{Κινητική ενέργεια κέντρου μάζας} \\ E &: \text{Ενέργεια σχετικής κίνησης} \end{aligned} \quad (6.11)$$

Επανερχόμαστε τώρα στην περίπτωση του κεντρικού δυναμικού $V(\mathbf{r})=V(r)$:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SX} &= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}(r) \\ \hat{H}_{SX} \Psi(\mathbf{r}) &= E \Psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Επειδή το $V(r)$ παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία, είναι πρόσφορο να χρησιμοποιήσουμε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) . Στην αναπαράσταση θέσης $\langle r\theta\varphi|$ είναι:

$$\begin{aligned} \langle r\theta\varphi| V(\mathbf{r}) &= V(r) \langle r\theta\varphi| \\ \langle r\theta\varphi| \hat{p} &= (-i\hbar) \left(\frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} \right) \langle r\theta\varphi| \\ \langle r\theta\varphi| \hat{p}^2 &= -\hbar^2 \nabla^2 \langle r\theta\varphi| \\ &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle r\theta\varphi| \\ &\quad + \left[-\frac{\hbar^2}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar^2}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \langle r\theta\varphi| \\ &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle r\theta\varphi| + \frac{1}{r^2} \langle r\theta\varphi| \hat{L}^2 \end{aligned} \quad (6.13)$$

Συνεπώς, η εξίσωση του Schrödinger (6.12) γράφεται

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \Psi_{E(r)} = E \Psi_{E(r)} \quad (6.14)$$

Εύκολα βλέπουμε ότι είναι



$$[\hat{H}_{\Sigma X}, \hat{L}^2] = [\hat{H}_{\Sigma X}, \hat{L}_z] = 0 \quad (6.15)$$

Άρα, οι τελεστές $\hat{H}_{\Sigma X}$, \hat{L}^2, \hat{L}_z παριστάνουν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών και έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις. Οδηγούμαστε, λοιπόν, στο να ψάξουμε κοινές λύσεις που να έχουν τη μορφή (διαχωρισμός των μεταβλητών)

$$\Psi_{Elm}(r) = R_{Elm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.16)$$

Είναι

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Sigma X} \Psi_{Elm}(r) &= E \Psi_{Elm}(r) \\ \hat{L}^2 \Psi_{Elm}(r) &= l(l+1)\hbar^2 \Psi_{Elm}(r) \\ \hat{L}_z \Psi_{Elm}(r) &= m\hbar \Psi_{Elm}(r) \end{aligned} \quad (6.17)$$

Συνεπώς, η εξίσωση (6.14) δίνει για την άγνωστη ακτινική συνάρτηση $R_{Elm}(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r) \quad (6.18)$$

Επειδή δεν υπάρχει εξάρτηση από το m , έχουμε γράψει απλά $R_{El}(r) \equiv R_{Elm}(r)$ και, επομένως,

$$\Psi_{Elm}(r) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.19)$$

Για τον ίδιο λόγο, η E είναι ανεξάρτητη από το m και, άρα, υπάρχει εκφυλισμός τάξης $(2l+1)$ για δοσμένο l .

Η συνθήκη κανονικοποίησης είναι

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi)|^2 = 1 \quad (6.20)$$

Επειδή οι σφαιρικές αρμονικές είναι κανονικοποιημένες πάνω στη μοναδιαία σφαίρα (βλ. (5.74)), προκύπτει τελικά η συνθήκη κανονικοποίησης για την ακτινική συνάρτηση

$$\int_0^\infty |R_{El}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (6.21)$$

Είναι χρήσιμο πολλές φορές να εισάγουμε τη νέα ακτινική συνάρτηση

$$u_{El}(r) = r R_{El}(r) \quad (6.22)$$

οπότε η συνθήκη κανονικοποίησης (6.21) γράφεται

$$\int_0^\infty |u_{El}(r)|^2 dr = 1 \quad (6.23)$$

Η εξίσωση (6.18) δίνει τότε



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r) \quad (6.24)$$

Η εξίσωση αυτή είναι μια μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger με δυναμικό το διορθωμένο ή ενεργό, όπως συνήθως λέγεται, δυναμικό

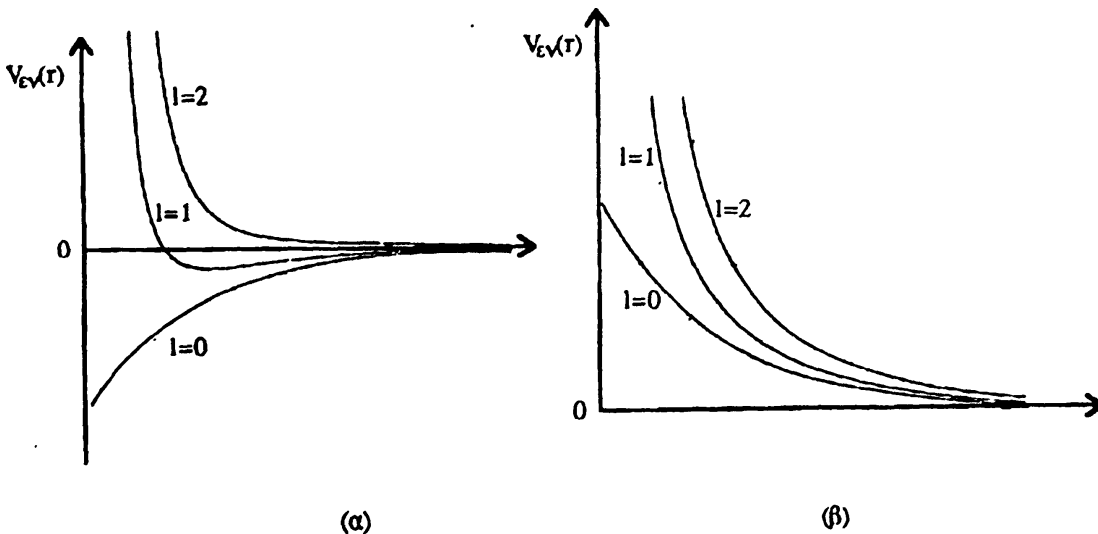
$$V_{ev}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}, \quad (6.25)$$

η οποία έχει νόημα μόνο για $r > 0$ και πρέπει να συνοδεύεται από μια οριακή συνθήκη για $r = 0$. Απαιτώντας η $R_{El}(r)$ να είναι πεπερασμένη στην αρχή, προκύπτει η οριακή συνθήκη

$$u_{El}(0) = 0 \quad (6.26)$$

Στη συνέχεια θα λύσουμε ή την ακτινική εξίσωση (6.18) ή, ισοδύναμα, την (6.24) με τη συνθήκη (6.26) για διάφορα κεντρικά δυναμικά. Είναι, όμως, πριν διδακτικό να δούμε τη μορφή που έχει το ενεργό δυναμικό $V_{ev}(r)$. Ο όρος $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ παριστάνει ένα απωστικό φυγόκεντρο φράγμα. Η μορφή του $V_{ev}(r)$ για ελκτικό ή απωστικό δυναμικό $V(r)$ φαίνεται στα σχήματα (6.2α) και (6.2β), αντίστοιχα.

Αξίζει να σημειώσουμε εδώ ότι η χαμιλτονιανή για ένα κεντρικό δυναμικό είναι συμμετρική κάτω από αναστροφή στο χώρο, δηλαδή ισχύει $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$. Η συμμετρία αναστροφής στο χώρο έχει βρεθεί ότι παραβιάζεται μόνο στις ασθενείς αλληλεπιδράσεις (π.χ. στη β ακτινοβολία). Αλλά αυτή η παραβίαση έχει ένα πολύ μικρό αντίκτυπο στ' ατομικά συστήματα. Έτσι, η εξίσωση $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ αποτελεί μια εξαιρετικά καλή προσέγγιση στις περιπτώσεις που συζητάμε.



Σχ. 6.2 Το ενεργό δυναμικό $V_{ev}(r)$ για (α) ελκτικό, (β) απωστικό κεντρικό δυναμικό $V(r)$.



6.2. Το ελεύθερο σωματίδιο

Σαν πρώτο παράδειγμα, ας θεωρήσουμε την πολύ απλή περίπτωση ενός ελεύθερου σωματίδιου, για το οποίο είναι $V(r)=0$.

Στις καρτεσιανές συντεταγμένες έχουμε ήδη δει (βλ. § 3.1) τις λύσεις του επίπεδου κύματος $\Psi_p(r) = N e^{ipr/\hbar}$, που είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των \hat{H} και \hat{p} . Στις σφαιρικές συντεταγμένες, που θεωρούμε εδώ, οι λύσεις $\Psi_{Elm}(r)$ είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των \hat{H} , \hat{L}^2 και \hat{L}_z . Η ακτινική συνάρτηση $R_{El}(r)$ είναι λύση της εξίσωσης

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \right] R_{El}(r) = 0 \quad (6.27)$$

όπου $p^2 = 2\mu E$. Χρησιμοποιώντας την $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$, έχουμε

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \right] u_{El}(r) = 0 \quad (6.28)$$

με την οριακή συνθήκη $u_{El}(0) = 0$.

i) Για $l = 0$, η λύση της (6.28) είναι $u_{El}(r) = c \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)$ και, συνεπώς,

$$R_{El}(r) = c \frac{\sin(pr/\hbar)}{r} \quad (6.29)$$

ii) Για $l \neq 0$ είναι ευκολότερο να λυθεί η (6.27). Με την αλλαγή της μεταβλητής $\rho = \frac{pr}{\hbar}$, και γράφοντας απλούστερα $R_{El}(\rho) \equiv R_l(\rho)$, έχουμε

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) \right] R_l(\rho) = 0 \quad (6.30)$$

Η εξίσωση (6.30) είναι γνωστή σαν σφαιρική εξίσωση Bessel. Οι δύο μερικές λύσεις της (6.30) είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho) \quad (6.31)$$

και οι σφαιρικές συναρτήσεις Neumann

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho) \quad (6.32)$$

όπου $J_\nu(\rho)$ είναι οι λεγόμενες συνήθεις συναρτήσεις Bessel τάξης ν .

Για κάθε l οι δύο συναρτήσεις $\{j_l(\rho), n_l(\rho)\}$ αποτελούν ένα ζευγάρι γραμμικά ανεξάρτητων λύσεων της (6.30), έτσι ώστε η γενική λύση αυτής της



εξίσωσης να είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των δύο αυτών συναρτήσεων. Ένα άλλο ζευγάρι γραμμικά ανεξάρτητων λύσεων της (6.30) είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Hankel πρώτου και δεύτερου είδους, που ορίζονται, αντίστοιχα, από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} h_1^{(1)}(\varrho) &= j_1(\varrho) + i n_1(\varrho) \\ h_1^{(2)}(\varrho) &= j_1(\varrho) - i n_1(\varrho) = [h_1^{(1)}(\varrho)]^* \end{aligned} \quad (6.33)$$

Οι $j_1(\varrho)$ και $n_1(\varrho)$ δίνονται και από τις εκφράσεις:

$$j_1(\varrho) = (-\varrho)^l \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin \varrho}{\varrho} \quad (6.34)$$

$$n_1(\varrho) = -(-\varrho)^l \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\cos \varrho}{\varrho} \quad (6.35)$$

Από αυτές μπορούμε να βρούμε μερικές από τις πρώτες συναρτήσεις $j_l(\varrho)$ και $n_l(\varrho)$:

$$j_0(\varrho) = \frac{\sin \varrho}{\varrho}, \quad n_0(\varrho) = -\frac{\cos \varrho}{\varrho} \quad (6.36)$$

$$j_1(\varrho) = \frac{\sin \varrho}{\varrho^2} - \frac{\cos \varrho}{\varrho}, \quad n_1(\varrho) = -\frac{\cos \varrho}{\varrho^2} - \frac{\sin \varrho}{\varrho} \quad (6.37)$$

$$\begin{aligned} j_2(\varrho) &= \left(\frac{3}{\varrho^3} - \frac{1}{\varrho} \right) \sin \varrho - \frac{3}{\varrho^2} \cos \varrho \\ n_2(\varrho) &= - \left(\frac{3}{\varrho^3} - \frac{1}{\varrho} \right) \cos \varrho - \frac{3}{\varrho^2} \sin \varrho \end{aligned} \quad (6.38)$$

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η συμπεριφορά των $j_l(\varrho)$ και $n_l(\varrho)$ για μικρά ϱ ($\varrho \rightarrow 0$), καθώς και η ασυμπτωτική συμπεριφορά τους για μεγάλα ϱ ($\varrho \rightarrow \infty$):

$$j_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow 0} \frac{\varrho^l}{1.3.5 \dots (2l+1)}, \quad j_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} \frac{1}{\varrho} \sin \left(\varrho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (6.39)$$

$$n_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow 0} \frac{1.3.5 \dots (2l-1)}{\varrho^{l+1}}, \quad n_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} -\frac{1}{\varrho} \cos \left(\varrho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (6.40)$$

Το σχ. 6.3 δείχνει τις τρεις πρώτες συναρτήσεις $j_l(\varrho)$ και $n_l(\varrho)$

Από φυσική άποψη τώρα, επειδή οι $n_l(\varrho)$ παρουσιάζουν ανωμαλία στην αρχή (το $\varrho = 0$ είναι πόλος τάξης $(l+1)$), πρέπει να διαλέξουμε σαν φυσικά αποδεκτές λύσεις τις $j_l(\varrho)$, που είναι πεπερασμένες στην αρχή. Έτσι, η φυσικά αποδεκτή λύση της (6.30) είναι

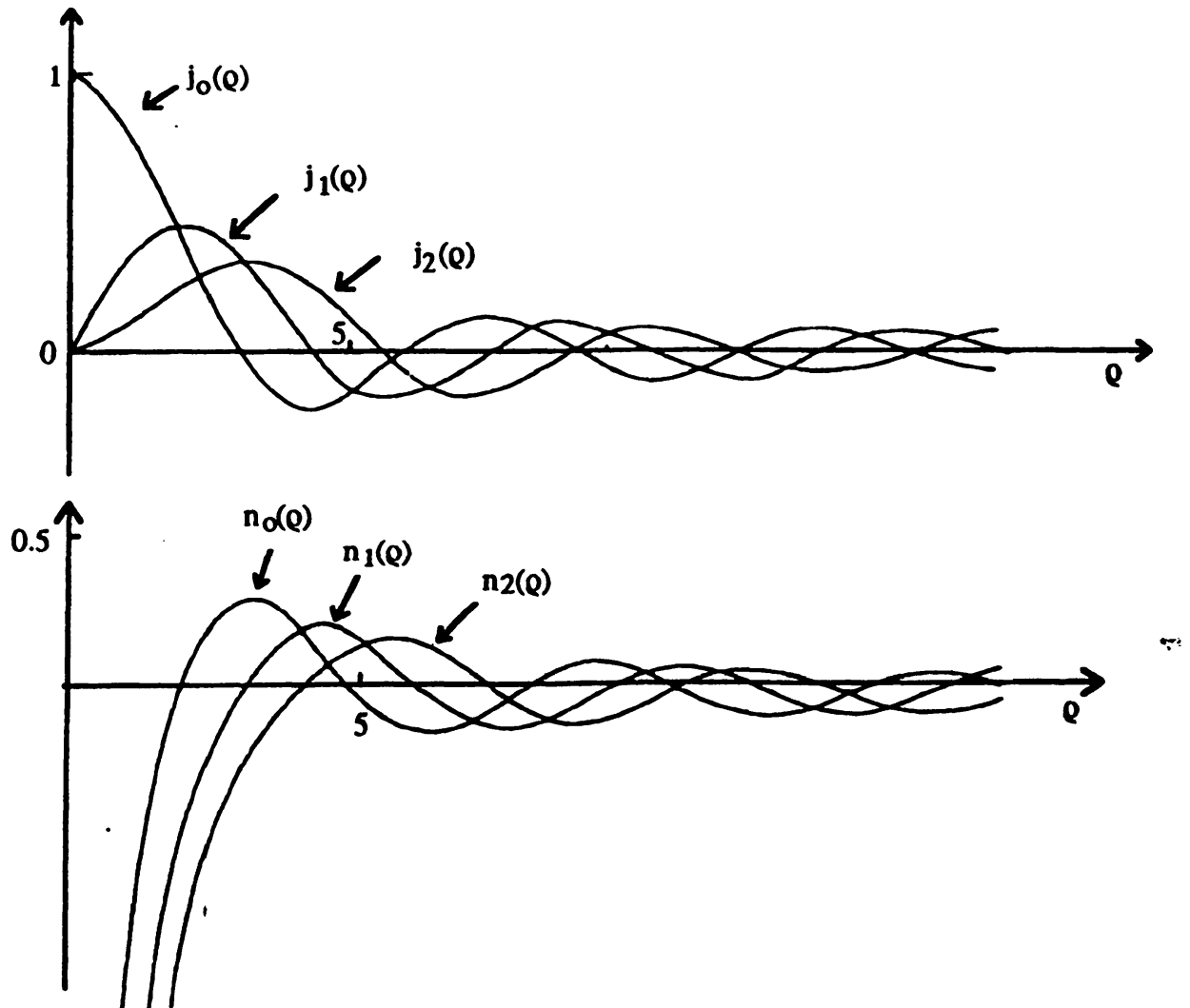
$$R_l(r) = c j_l \left(\frac{p}{\hbar} r \right) \equiv c j_l(kr) \quad (6.41)$$

όπου $k = \frac{p}{\hbar}$ ο αντίστοιχος κυματαριθμός. Σημειωτέον ότι κοντά στην αρχή έχουμε

$j_l(kr) \propto r^l$ (βλ. (6.39)). Αυτό είναι σύμφωνο με τη γενική συμπεριφορά της $R_{El}(r)$



κοντά στην αρχή (βλ. πρόβλημα 6.2). Συνεπώς, οι πλήρεις ιδιοσυναρτήσεις του ελεύθερου σωματιδίου στις σφαιρικές συντεταγμένες είναι



Σχ. 6.3 Οι τρεις πρώτες συναρτήσεις $j_l(\rho)$, $n_l(\rho)$.

$$\begin{aligned} \Psi_{Elm}(\mathbf{r}) &\equiv \langle \mathbf{r} | Elm \rangle = \langle \mathbf{r} | klm \rangle \\ &= c j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (6.42)$$

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές ονομάζονται σφαιρικά κύματα.

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε τιμή στο διάστημα $(0, +\infty)$, και, έτσι, το αντίστοιχο φάσμα είναι συνεχές. Κάθε ιδιοτιμή είναι άπειρα εκφυλισμένη, γιατί για δοσμένο k υπάρχουν δύο κβαντικοί αριθμοί $l = 0, 1, 2, \dots$ και $m = -l, \dots, +l$. Μπορεί ναδειχτεί ότι το σύνολο των σφαιρικών



κυμάτων αποτελεί ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο. Οι σχέσεις ορθοκανονικότητας γράφονται

$$\langle klm | k' l' m' \rangle = \delta(k-k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (6.43)$$

ενώ οι σχέσεις πληρότητας είναι

$$\int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l |klm\rangle \langle klm| = 1 \quad (6.44)$$

Πριν τελειώσουμε αυτή την παράγραφο, θα ήταν χρήσιμο (βλ. π.χ. κεφάλαιο XI) να σημειώσουμε το ανάπτυγμα ενός επίπεδου κύματος σε σφαιρικά κύματα, πράγμα που υπογραμμίζει τη σχέση των λύσεων της κυματικής εξίσωσης Schrödinger για το ελεύθερο σωματίδιο σε καρτεσιανές και σφαιρικές συντεταγμένες, αντίστοιχα. Πράγματι, τόσο ένα επίπεδο κύμα $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = N e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$, που χαρακτηρίζεται από καθορισμένη ενέργεια και ορμή, όσο και ένα σφαιρικό κύμα $\psi_{Elm}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | Elm \rangle = c_{lm}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, που χαρακτηρίζεται από καθορισμένη ενέργεια και στροφορμή, αποτελούν ξεχωριστά ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Συνεπώς, οποιαδήποτε συνάρτηση μπορεί ν' αναπτυχθεί συναρτήσει είτε του ενός, είτε του άλλου συνόλου.

Ειδικά, μπορούμε ν' αναπτύξουμε ένα επίπεδο κύμα συναρτήσει σφαιρικών κυμάτων

$$e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} = \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l c_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.45)$$

όπου οι συντελεστές c_{lm} (που είναι ανεξάρτητοι από το r) μπορεί ν' αποδειχτεί ότι προσδιορίζονται από τη σχέση

$$c_{lm} = 4\pi i^l Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k), \quad (6.46)$$

όπου (θ_k, φ_k) είναι οι πολικές γωνίες της διεύθυνσης του $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$. Έτσι, γράφουμε

$$e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} = 4\pi \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) \quad (6.47)$$

Χρησιμοποιώντας το λεγόμενο θεώρημα πρόσθεσης των σφαιρικών αρμονικών

$$P_l(\cos \alpha) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.48)$$

όπου α είναι η γωνία μεταξύ των \mathbf{p} και \mathbf{r} με

$$\cos \alpha = \cos \theta_k \cos \theta + \sin \theta_k \sin \theta \cos(\varphi_k - \varphi),$$



το ανάπτυγμα (6.47) γράφεται

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \alpha) \quad (6.49)$$

Ειδικά, αν $\mathbf{p} \parallel \mathbf{z}$, είναι

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\cos\theta/\hbar} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (6.50)$$

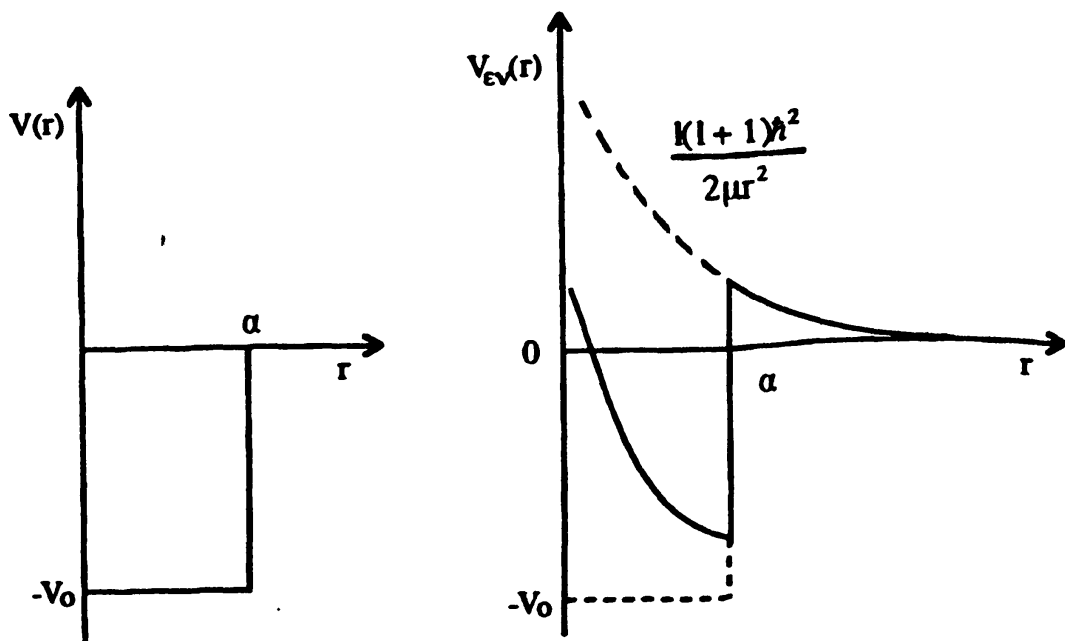
Το γεγονός ότι οι ιδιοσυναρτήσεις της στροφορμής στην έκφραση (6.50) έχουν $m=0$ οφείλεται στο ότι το επίπεδο κύμα είναι ιδιοσυνάρτηση του \hat{L}_z με ιδιοτιμή μηδέν:

$$\hat{L}_z e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\cos\theta/\hbar} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\cos\theta/\hbar} = 0$$

6.3. Σφαιρικό φρέαρ δυναμικού - Το σύστημα του δευτερίου

Ένα πολύ σπουδαίο πρόβλημα - ιδιαίτερα στην πυρηνική φυσική - είναι αυτό του σφαιρικού φρέατος δυναμικού (σχ. 6.4)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 < r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (6.51)$$



Σχ. 6.4. Το σφαιρικό φρέαρ δυναμικού. $V_{\text{eff}}(r)$ είναι το ενεργό δυναμικό $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$.

Παραδείγματος χάρι, το δυναμικό αυτό αποτελεί μια αποτελεσματική προσέγγιση για τη δυναμική ενέργεια ενός νετρονίου μέσα στον πυρήνα

i) Για $E \geq 0$ η $u_{E1}(r) = rR_{E1}(r)$ θα συμπεριφέρεται ταλαντωτικά για μεγάλα r ($V_{ev}(r) \rightarrow 0$ για $r \rightarrow \infty$). Το φάσμα θα είναι συνεχές και οι προκύπτουσες μη δέσμιες καταστάσεις μελετώνται σε φαινόμενα σκέδασης (βλ. κεφάλαιο XI, §11.7).

ii) Εμείς εδώ θα ενδιαφερθούμε για δέσμιες καταστάσεις: $-V_0 \leq E < 0$. Οι εξισώσεις για την $R_{E1}(r)$ είναι

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{E1}(r) = (E+V_0) R_{E1}(r), \quad 0 < r < \alpha \quad (6.52)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{E1}(r) = E R_{E1}(r), \quad r > \alpha \quad (6.53)$$

α) Λύσεις για $0 < r < \alpha$ (εσωτερική περιοχή).

Ορίζοντας τις παραμέτρους $K^2 = 2\mu(E+V_0)/\hbar^2$ και $\rho = Kr$, έχουμε την εξίσωση

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] R_{E1}(r) = 0 \quad (6.54)$$

Η φυσικά αποδεκτή λύση είναι

$$R_{E1}(r) = A j_l(Kr), \quad 0 < r < \alpha \quad (6.55)$$

β) Λύσεις για $r > \alpha$ (εξωτερική περιοχή).

Η εξίσωση (6.53) είναι όμοια με την εξίσωση του ελεύθερου σωματιδίου, αλλά τώρα $E < 0$. Θέτοντας $E = -\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\lambda^2$, δηλαδή

$$\lambda = \left(-\frac{2\mu E}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (6.56)$$

και

$$\rho = i\lambda r, \quad (6.57)$$

βλέπουμε ότι οι λύσεις είναι όμοιες μ' εκείνες του ελεύθερου σωματιδίου με την αντικατάσταση $k \rightarrow i\lambda$. Επειδή $r > \alpha$, δεν χρειάζεται να περιοριστούμε στη λύση j_ρ , που είναι ομαλή στην αρχή. Αποδεκτός είναι οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των $\{j_l, n_l\}$ ή των $\{h_l^{(1)}, h_l^{(2)}\}$. Ο κατάλληλος συνδυασμός θα βρεθεί κοιτάζοντας την

ασυμπτωτική συμπεριφορά των λύσεων:



$$j_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} \frac{1}{\varrho} \sin \left(\varrho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad h_l^{(1)}(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} -i \frac{e^{i(\varrho - l\pi/2)}}{\varrho} \quad (6.58)$$

$$n_l(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} -\frac{1}{\varrho} \cos \left(\varrho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad h_l^{(2)}(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} i \frac{e^{-i(\varrho - l\pi/2)}}{\varrho}$$

με $\varrho = i\lambda r$. Βλέπουμε ότι οι $j_l(i\lambda r)$, $n_l(i\lambda r)$, $h_l^{(2)}(i\lambda r)$ αυξάνουν εκθετικά σαν $\frac{e^{\lambda r}}{r}$ και, συνεπώς, αποκλείονται. Η μόνη φυσικά αποδεκτή λύση είναι η $h_l^{(1)}(i\lambda r)$, που είναι ανάλογη του $\frac{e^{-\lambda r}}{r}$ για μεγάλα r . Η φυσικά αποδεκτή λύση της (6.53) γράφεται λοιπόν

$$R_{E1}(r) = B h_l^{(1)}(i\lambda r) = B [j_l(i\lambda r) + i n_l(i\lambda r)], \quad r > a \quad (6.59)$$

Μερικές πρώτες συναρτήσεις $h_l^{(1)}(i\lambda r)$ είναι

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\lambda r) &= -i \frac{e^{i(i\lambda r)}}{(i\lambda r)} = -\frac{1}{\lambda r} e^{-\lambda r} \\ h_1^{(1)}(i\lambda r) &= - \left[\frac{1}{(i\lambda r)} + \frac{i}{(i\lambda r)^2} \right] e^{i(i\lambda r)} = i \left(\frac{1}{\lambda r} + \frac{1}{\lambda^2 r^2} \right) e^{-\lambda r} \\ h_2^{(1)}(i\lambda r) &= - \left[\frac{i}{(i\lambda r)} - \frac{3}{(i\lambda r)^2} - \frac{3i}{(i\lambda r)^3} \right] e^{i(i\lambda r)} = \\ &= \left(\frac{1}{\lambda r} + \frac{3}{\lambda^2 r^2} + \frac{3}{\lambda^3 r^3} \right) e^{-\lambda r} \end{aligned} \quad (6.60)$$

Όπως είναι γνωστό, τα ενεργειακά επίπεδα θα προσδιορίζονται από τη συνθήκη που προκύπτει απαιτώντας τη συνέχεια των ιδιοσυναρτήσεων (6.55) και (6.59) και των παραγώγων τους στο σημείο $r = a$ Ισοδύναμα, απαιτούμε τη συνέχεια της λογαριθμικής παραγώγου $\frac{1}{R_{E1}} \left(\frac{dR_{E1}}{dr} \right)$ στο $r=a$. Από τις (6.55) και (6.59) βρίσκουμε τη συνθήκη

$$\left[\frac{1}{j_l(Kr)} \frac{dj_l(Kr)}{dr} \right]_{r=a} = \left[\frac{1}{h_l^{(1)}(i\lambda r)} \frac{dh_l^{(1)}(i\lambda r)}{dr} \right]_{r=a} \quad (6.61)$$

Η λύση της υπερβατικής αυτής εξίσωσης είναι πολύπλοκη και μπορεί να γίνει αριθμητικά. Αλλά σε πολύ απλές περιπτώσεις μπορεί να γίνει γραφικά, ακολουθώντας το παράδειγμα του μονοδιάστατου φρέατος δυναμικού (§ 3.8).

Ας δούμε τώρα μια χαρακτηριστική εφαρμογή των παραπάνω στο σύστημα του δευτερίου. Το δευτέριο d αποτελεί μια δέσμη κατάσταση ενός πρωτονίου και



ενός νετρονίου και βρίσκεται ότι η συνολική στροφορμή του αντιστοιχεί σε κβαντικό αριθμό $j = 1$. Όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο κατά τη συζήτηση της μαγνητικής ροπής (§7.1), η κυρίαρχη κατάσταση για το δευτέριο είναι αυτή που αντιστοιχεί σε $l = 0$ και, συνεπώς, $s = s_1 + s_2 = 1$ (κατάσταση 3S_1). Πάντως, από μετρήσεις της ηλεκτρικής διπολικής ροπής συνάγεται ότι υπάρχει μια μικρή πρόσμειξη της κατάστασης με $l = 2$ (3D_1) στη συνολική κυματοσυνάρτηση του δευτερίου, που όμως θα δούμε στην § 7.1 ότι είναι περίπου 5%. Επειδή το φαινόμενο αυτό είναι πολύ μικρό, σε πρώτη προσέγγιση θα το αγνοήσουμε εδώ κατά τη συζήτηση της ενέργειας σύνδεσης του δευτερίου.

Για το δυναμικό της δέσμιας κατάστασης ανάμεσα στο πρωτόνιο και το νετρόνιο ενός δευτερίου μπορεί να υιοθετήσει κανείς διάφορες μορφές. Η απλούστερη είναι το συναμικό (6.51) του σφαιρικού φρέατος. Η ανηγμένη μάζα του συστήματος είναι $\mu = m_p m_n / (m_p + m_n) \approx \frac{1}{2} m_p$, περίπου η μισή μάζα του πρωτονίου. Η συνθήκη (6.61) για την ένωση των λύσεων (6.55) και (6.59) βρίσκουμε εύκολα ότι δίνει για $l = 0$ που μας ενδιαφέρει εδώ (βλ. και πρόβλημα 6.4)

$$K \cot K a = -\lambda \quad (6.62)$$

Πειραματικά, η ενέργεια σύνδεσης του δευτερίου είναι $E_{\text{συνδ}} (= -E) = 2.22 \text{ MeV}$ (ίση με την ενέργεια ενός φωτονίου κατά την αντίδραση $n+p \rightarrow d+\gamma$, όταν τα προσπίπτοντα σωματίδια έχουν μηδενική κινητική ενέργεια). Έτσι, για ένα εύρος $a \sim 2 \times 10^{-13} \text{ cm}$, χρειαζόμαστε ένα φρέαρ με βάθος $V_0 \sim 30-40 \text{ MeV}$, αρκετά μεγαλύτερο από την ενέργεια σύνδεσης $E_{\text{συνδ}}$. Επειδή αυτό συνεπάγεται ότι η $\cot K a = -\frac{\lambda}{K}$ είναι πολύ μικρή και αρνητική, συμπεραίνουμε ότι το $K a$ είναι μόλις ελαφρά μεγαλύτερο από το $\frac{\pi}{2}$ για την λύση της δέσμιας κατάστασης του δευτερίου. Λόγω λοιπόν της μικρής ενέργειας σύνδεσης $E_{\text{συνδ}}$, η συνθήκη για τη δέσμια κατάσταση είναι $K^2 a^2 \geq \frac{\pi^2}{4}$, δηλαδή $\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} a^2 \geq \frac{\pi^2}{4}$. Να σημειωθεί ότι η κυματοσυνάρτηση εκτείνεται σε απόσταση περίπου $\lambda^{-1} = 4.3 \times 10^{-13} \text{ cm}$ (από την (6.56) με $E_{\text{συνδ}} = 2.22 \text{ MeV}$ και την (6.60) για $l = 0$). Επειδή $\lambda^{-1} > a$, το μεγαλύτερο μέρος της κυματοσυνάρτησης του δευτερίου βρίσκεται στην εξωτερική περιοχή (όπου $R(r) \propto e^{-\lambda r/r}$).

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι η συνθήκη (6.62) είναι όμοια με την συνθήκη (3.150β), που ισχύει για τις περιττές ιδιοσυναρτήσεις στο μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού. Συνθήκη όπως η (3.150α), που ισχύει για τις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις στη μονοδιάστατη περίπτωση, δεν υπάρχει εδώ λόγω της απαίτησης $u(0) = 0$.

Θα πρέπει, τέλος, ν' αναφέρουμε ότι ένα δυναμικό, που αποτελεί πολύ καλύτερη προσέγγιση από το απλό δυναμικό (6.51), είναι ένα δυναμικό της μορφής



(5.156)-(5.158) το οποίο εξαρτάται από το σπιν των δύο σωματιδίων. Η έλξη για την περίπτωση με $s = 0$ είναι πολύ ασθενής για να δημιουργήσει δέσμη κατάσταση (βλ. και § 11.7). Η επικρατούσα κατάσταση είναι, όπως είπαμε, η 3S_1 με $s=1, l=0$ και $j=1$ (βλ. και §7.1).

6.4. Το άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή άτομα

Ας θεωρήσουμε τώρα την περίπτωση ενός ατόμου - υδρογονοειδές άτομο - μ' ένα πυρήνα φορτίου Ze και ένα ηλεκτρόνιο φορτίου $-e$, που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέσω του δυναμικού Coulomb

$$V(r) = - \frac{Ze^2}{r} \quad (6.63)$$

Σ' αυτή την εξίσωση το φορτίο e μετριέται σε ηλεκτροστατικές μονάδες φορτίου και σε σχέση με τις μονάδες MKSA(Cb) είναι

$$e^2 \text{ (esu)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \text{ (Cb)} = 13.6 \text{ eV}\cdot\text{\AA} \quad (5.64)$$

Για το άτομο του υδρογόνου έχουμε βέβαια $Z=1$. Έχουμε, επίσης, τα υδρογονοειδή ιόντα $\text{He}^+(Z=2)$, $\text{Li}^{++}(Z=3)$, $\text{Be}^{+++}(Z=4)$ κλπ. Για τη χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad (6.65)$$

με

$$\mu = \frac{m_e M_{\text{πυρ}}}{m_e + M_{\text{πυρ}}} \approx m_e,$$

όπου $M_{\text{πυρ}}$ η μάζα του πυρήνα, παίρνουμε την εξίσωση για την ακτινική κυματοσυνάρτηση $R_{El}(r)$:

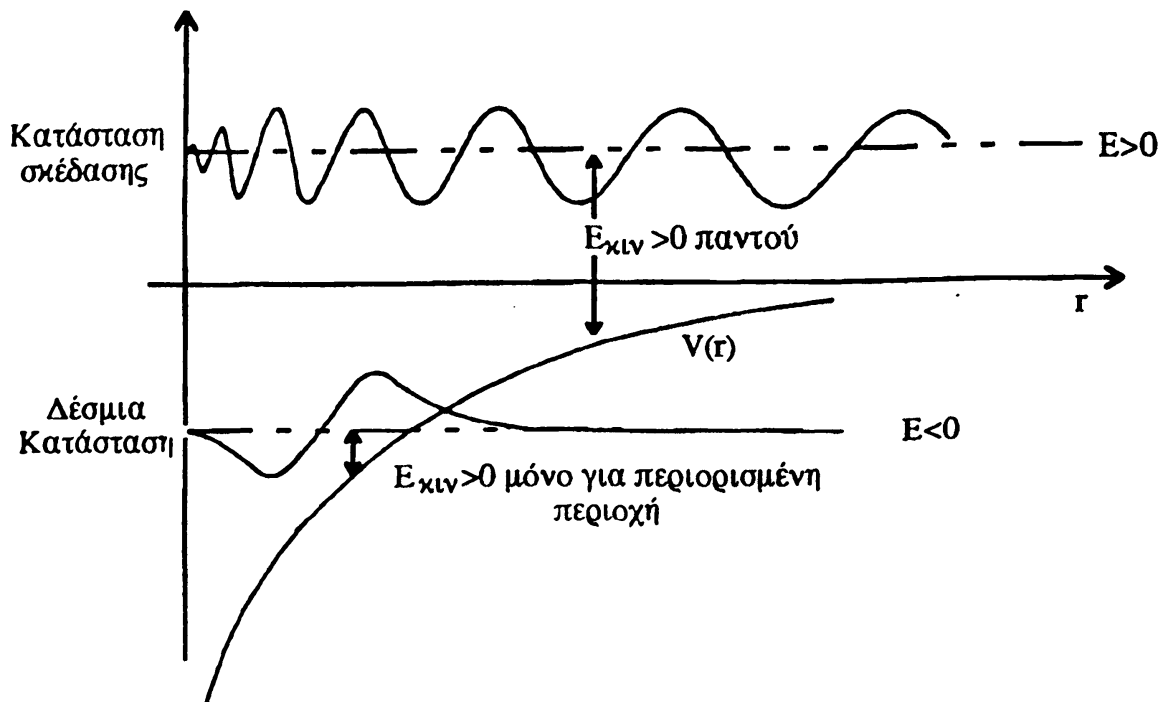
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] R_{El}(r) = E R_{El}(r) \quad (6.66)$$

Η αντίστοιχη εξίσωση για την συνάρτηση $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$ είναι

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right] u_{El}(r) = 0 \quad (6.67)$$

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, για $E > 0$ η λύση $u_{El}(r)$ παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά για μεγάλα r και θα είναι μια αποδεκτή ιδιοσυνάρτηση για κάθε θετική τιμή του E (φάσμα συνεχές). Τέτοιες καταστάσεις σκέδασης παίζουν σημαντικό ρόλο σε φαινόμενα κρούσεων μεταξύ ηλεκτρονίων και ιόντων (βλ. κεφάλαιο XI). Στη συνέχεια εμείς θα ενδιαφερόμαστε για δέσμιες καταστάσεις, για τις οποίες $E < 0$ (σχ. 6.5)





Σχ. 6.5. Καταστάσεις σκέδασης και δέσμιες καταστάσεις σ' ένα υδρογονοειδές άτομο.

Εισάγοντας τις μεταβλητές

$$\rho = \left(-\frac{8\mu E}{\hbar^2} \right)^{1/2} r$$

και

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar} \left(-\frac{\mu}{2E} \right)^{1/2} = Z\alpha \left(-\frac{\mu c^2}{2E} \right)^{1/2}, \quad (6.68)$$

όπου

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (6.69)$$

είναι η λεγόμενη σταθερά λεπτής υφής που εκφράζει την ένταση των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων, βρίσκουμε την εξίσωση

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] u_{El}(\rho) = 0 \quad (6.70)$$

Για τη λύση της θεωρούμε πρώτα για την ασυμπτωτική συμπεριφορά ($\rho \rightarrow \infty$)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right] u_{El}(\rho) = 0 \quad (6.71)$$



και, συνεπώς,

$$u_{El}(Q) \approx e^{-Q/2} \quad (6.72)$$

Έτσι, γράφοντας (βλ. πρόβλημα 6.2)

$$u_{El}(Q) = e^{-Q/2} Q^{l+1} f(Q) \quad (6.73)$$

βρίσκουμε από την (6.70) την εξίσωση

$$\left[Q \frac{d^2}{dQ^2} + (2l + 2 - Q) \frac{d}{dQ} + (\lambda - l - 1) \right] f(Q) = 0 \quad (6.74)$$

Όπως προκύπτει από τη μαθηματική θεωρία επίλυσης διαφορικών εξισώσεων, η (6.74) έχει πολυωνυμικές λύσεις μόνο για

$$\lambda - l - 1 = n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (6.75)$$

όπου ο n_r είναι γνωστός στη φυσική σαν ακτινικός κβαντικός αριθμός. Εισάγοντας τον κύριο κβαντικό αριθμό

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, \dots, \quad (6.76)$$

βλέπουμε ότι οι ιδιοτιμές της (6.70), που αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις ($E < 0$), δίνονται από την τιμή

$$\lambda = n \quad (6.77)$$

Έτσι, από την (6.68) βρίσκουμε ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας για δέσμιες καταστάσεις δίνονται από τις εκφράσεις

$$\begin{aligned} E_n &= - \frac{\mu(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{2} \mu c^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} = - \frac{Z^2 e^2}{2\alpha_\mu} \frac{1}{n^2} \\ &= - \frac{m_e(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{2} m_e c^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} = - \frac{Z^2 e^2}{2\alpha_0} \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (6.78)$$

όπου α η σταθερά λεπτής υφής και

$$\alpha_\mu = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{m_e}{\mu} \alpha_0 \approx \alpha_0 \quad (6.79)$$

με $\alpha_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 5.3 \times 10^{-9} \text{cm} = 0.53 \text{ \AA}$ την πρώτη ακτίνα του Bohr.

Για το άτομο του υδρογόνου, το Z είναι 1 και οι αριθμοί δίνουν $E_{n=1} = - \frac{e^2}{2\alpha_0} = -13.6 \text{ eV}$. Αυτή είναι η ιδιοτιμή της ενέργειας για τη βασική (θεμελιώδη)

κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου, που είναι μη εκφυλισμένη. Η ενέργεια ιονισμού για το άτομο του υδρογόνου είναι $I = |E_{n=1}|$. Για την αμέσως επόμενη, πρώτη διεγερμένη, κατάσταση έχουμε $E_{n=2} = -3.4 \text{ eV}$. Αυτή η στάθμη είναι εκφυλισμένη, με βαθμό εκφυλισμού 4. Οι αντίστοιχες τέσσερις ιδιοκαταστάσεις είναι οι $|nlm\rangle = |200\rangle, |2,1,+1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,-1\rangle$ Εύκολα βλέπουμε ότι, γενικά, ο



εκφυλισμός της ιδιοτιμής E_n είναι τάξης $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$. Βέβαια αν

λάβουμε υπόψη μας ότι το ηλεκτρόνιο και το πρωτόνιο έχουν το καθένα σπιν $\frac{1}{2}$, τότε ο βαθμός εκφυλισμού πολλαπλασιάζεται επί τέσσερα και γίνεται $4n^2$.

Ας σημειώσουμε ότι ορίζουμε, συχνά, τη μονάδα ενέργειας Rydberg σαν $1Ry = |E_{n=1}| = 13.6 \text{ eV}$. Επίσης, η σταθερά Rydberg (τύπος (E.6)) προκύπτει εδώ να είναι

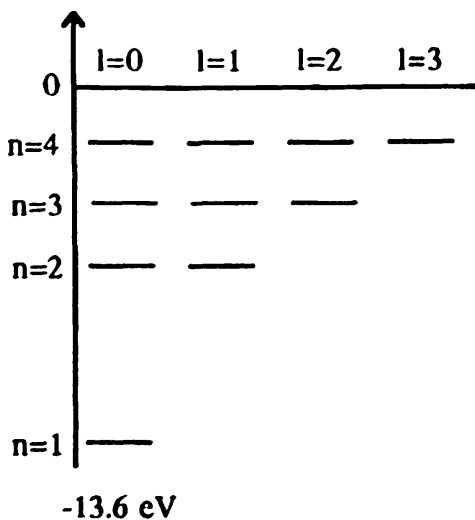
$$R_H \approx \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3} = \frac{e^2}{4\pi\alpha_0 \hbar c}$$

και, συνεπώς, παίρνουμε $R_H = 109737 \text{ cm}^{-1}$ σε καλή συμφωνία με την πειραματική τιμή $R_H^{\text{πειρ}} = 109677.58 \text{ cm}^{-1}$.

Στη φασματοσκοπία, τα ενεργειακά επίπεδα συμβολίζονται με δύο δείκτες. Ο πρώτος δείχνει την τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού n . Ο δεύτερος δείχνει την τιμή του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής l , σύμφωνα με τον κώδικα

Τιμή του l :	0	1	2	3	4	5
Κωδικό γράμμα:	s	p	d	f	g	h	...

Έτσι, $1s$ είναι η βασική κατάσταση ($n=1, l=0$), $2s$ ($n=2, l=0$) και $2p$ ($n=2, l=1$) οι τέσσερις ιδιοκαταστάσεις της πρώτης διεγερμένης στάθμης του ατόμου του υδρογόνου κ.ο.κ. Αν λάβουμε υπόψη μας και το σπιν, ένας πληρέστερος συμβολισμός είναι, όπως ήδη αναφέραμε και στην §5.7, $n^{2s+1}l_j$.



Οι συχνότητες που αντιστοιχούν στις μεταβάσεις από μια ενέργεια E_m σε μια άλλη E_n ($m > n$) συνιστούν το χαρακτηριστικό φάσμα του ατόμου του υδρογόνου. Έτσι, έχουμε:

Σειρά Lyman: $m \rightarrow n = 1$ (υπεριώδες)
(Ly- α : $2 \rightarrow 1$, Ly- β : $3 \rightarrow 1$ κλπ.)

Σειρά Balmer: $m \rightarrow n = 2$ (ερυθρό)
(B α : $3 \rightarrow 2$, B β : $4 \rightarrow 2$ κλπ.)

Σειρά Paschen: $m \rightarrow n = 3$ (υπέρυθρο)
(P α : $4 \rightarrow 3$, P β : $5 \rightarrow 3$ κλπ.)

κ.ο.κ.



Για τις κυματοσυναρτήσεις τώρα, παρατηρούμε ότι εξίσωση (6.74) έχει τη μορφή

$$\left[e \frac{d^2}{dQ^2} + (p+1-Q) \frac{d}{dQ} + (q-p) \right] L_q^p(Q) = 0 \quad (6.80)$$

με $p = 2l+1$, $q = n+1$. Η διαφορική εξίσωση (6.80) είναι γνωστή στη μαθηματική βιβλιογραφία και οι λύσεις της είναι τα λεγόμενα προσαρτημένα πολυώνυμα Laguerre $L_q^p(Q)$. Συνεπώς, οι λύσεις $f(Q)$ είναι τα προσαρτημένα πολυώνυμα Laguerre $L_{n+1}^{2l+1}(Q)$ βαθμού $(n+1) - (2l+1) = n - l - 1 = n_r$. Είναι χρήσιμο ν' αναφέρουμε τη γεννήτρια συνάρτηση για τα προσαρτημένα πολυώνυμα Laguerre:

$$G_p(Q,s) = \frac{(-s)^p \exp[-qs/(1-s)]}{(1-s)^{p+1}} = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{L_q^p(Q)}{q!} s^q, |s| < 1 \quad (6.81)$$

Ακόμη, ισχύει ο ορισμός

$$L_q^p(Q) = \frac{d^p}{dQ^p} L_p(Q), \quad L_p(Q) = e^Q \frac{d^p}{dQ^p} (Q^p e^{-Q}) \quad (6.81\alpha)$$

Η αναλυτική έκφραση των πολυωνύμων Laguerre $L_{n+1}^{2l+1}(Q)$ είναι

$$L_{n+1}^{2l+1}(Q) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{[(n+1)!]^2}{(n-l-1-k)! (2l+1+k)! k!} Q^k \quad (6.82)$$

Έτσι, η ακτινική κυματοσυνάρτηση $R_{El}(r) \equiv R_{nl}(r)$ είναι

$$R_{nl}(r) = N e^{-Q/2} Q^l L_{n+1}^{2l+1}(Q) \quad (6.83)$$

Επειδή ισχύει

$$Q = \frac{2Z}{n\alpha_\mu} r, \quad (6.84)$$

γράφουμε τελικά

$$R_{nl}(r) = N \left(\frac{2Zr}{n\alpha_\mu} \right)^l e^{-Zr/n\alpha_\mu} L_{n+1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{n\alpha_\mu} \right) \quad (6.85)$$

Οι πλήρεις ιδιοσυναρτήσεις του διάκριτου φάσματος ιδιοτιμών της ενέργειας E_n είναι τότε

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \langle r\theta\varphi | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (6.86)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις (6.86) κανονικοποιούνται από τη σχέση



$$\int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 = 1 \quad (6.87)$$

Επειδή οι σφαιρικές αρμονικές είναι κανονικοποιημένες πάνω στη μοναδιαία σφαίρα, η (6.87) συνεπάγεται

$$\int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (6.88)$$

από την οποία υπολογίζεται η σταθερά N . Είναι $N = - \left\{ \left(\frac{2Z}{n\alpha_{\mu}} \right)^3 \frac{(n-1)!}{2n[(n+1)!]^3} \right\}^{1/2}$. Οι

πρώτες σχετικές ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\begin{aligned} 1s: \quad \psi_{100}(r,\theta,\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{\alpha_{\mu}} \right)^{3/2} e^{-Zr/\alpha_{\mu}} \\ 2s: \quad \psi_{200}(r,\theta,\varphi) &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{\alpha_{\mu}} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2\alpha_{\mu}} \right) e^{-Zr/2\alpha_{\mu}} \\ 2p: \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_{210}(r,\theta,\varphi) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{\alpha_{\mu}} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{\alpha_{\mu}} \right) e^{-Zr/2\alpha_{\mu}} \cos\theta \\ \psi_{21\pm 1}(r,\theta,\varphi) &= \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{\alpha_{\mu}} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{\alpha_{\mu}} \right) e^{-Zr/2\alpha_{\mu}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Θα άξιζε ν' αναφέρουμε, τελειώνοντας, τα ουδέτερα ισότοπα του ατόμου του υδρογόνου, που είναι τα άτομα δευτερίου και τριτίου. Σ' αυτά το ρόλο του πρωτονίου, που είχαμε στα υδρογονοειδή άτομα, τον παίζει ένας πυρήνας φορτίου $+e$, που στην πρώτη περίπτωση είναι ένα δευτέριο (δέσμια κατάσταση ενός πρωτονίου και ενός νετρονίου, βλ. §6.3) και στη δεύτερη περίπτωση ένα τρίτιο (δέσμια κατάσταση ενός πρωτονίου και δύο νετρονίων). Επειδή $M_{\text{πυρ}} = m_p + m_n \approx 2m_p$, $M_{\text{πυρ}} = m_p + 2m_n \approx 3m_p$, αντίστοιχα, η ανηγμένη μάζα μ και η ποσότητα α_{μ} , η οποία είναι μέτρο της απόστασης στην οποία εκτείνεται η κυματοσυνάρτηση (βλ. προηγούμενες εκφράσεις), δεν διαφέρουν παρά ελάχιστα από τις αντίστοιχες ποσότητες στο άτομο του υδρογόνου. Το ίδιο ισχύει και για την ενέργεια ιονισμού. Οι πολύ μικρές αυτές διαφορές, πάντως, απεικονίζονται στα φάσματα των αντίστοιχων ατόμων.

6.5. Τα συστήματα ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου, κουάρκ-αντικουάρκ

Σ' αυτή την παράγραφο θα μελετήσουμε το ενεργειακό φάσμα δύο απλών συστημάτων δέσμιων καταστάσεων, που αποτελούνται από δύο σωματίδια. Το



πρώτο είναι ένα σύστημα δέσμιας κατάστασης ενός ηλεκτρονίου και ενός ποζιτρονίου (του αντισωματιδίου του ηλεκτρονίου), σύστημα που είναι γνωστό σαν ποζιτρονίουμ (positronium), και το δεύτερο είναι ένα σύστημα δέσμιας κατάστασης ενός βαριού κουάρκ και ενός αντικουάρκ, που είναι γνωστό σαν κουαρκόνιουμ (quarkonium).

Ας θεωρήσουμε, πρώτα, το σύστημα ηλεκτρονίου - ποζιτρονίου. Στη μη σχετικιστική προσέγγιση που μελετάμε, η χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}, \quad (6.90)$$

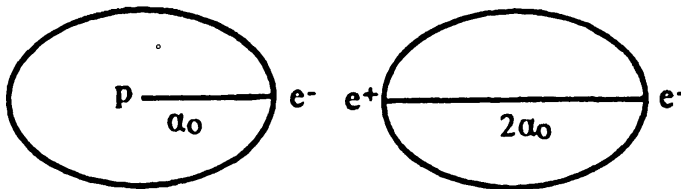
όπου η ανηγμένη μάζα είναι εδώ $\mu = m_e/2$. Συνεπώς, με βάση όσα αναπτύξαμε στην § 6.4, τα ενεργειακά επίπεδα θα είναι τώρα

$$E_n = - \frac{e^2}{4\alpha_0} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{4} m_e c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.91)$$

Έτσι, η ενέργεια της βασικής κατάστασης είναι

$$E_1 = - \frac{e^2}{4\alpha_0} \approx - 6.8 \text{ eV} \quad (6.92)$$

και η ενέργεια ιονισμού είναι, βέβαια, $I = |E_1| \approx 6.8 \text{ eV}$. Τα ενεργειακά επίπεδα (6.91) παρουσιάζουν εκφυλισμό τάξης n^2 . Δεδομένου ότι τόσο το ηλεκτρόνιο, όσο και το ποζιτρόνιο, έχουν σπιν $\frac{1}{2}$, αν λάβουμε υπόψη μας και το σπιν, ο βαθμός εκφυλισμού πολλαπλασιάζεται επί τέσσερα και γίνεται $4n^2$. Το σχήμα 6.6 παριστάνει σχηματικά το άτομο του υδρογόνου και το σύστημα ηλεκτρονίου - ποζιτρονίου στην πρώτη τροχιά Bohr.



Σχ. 6.6. Το άτομο του υδρογόνου και το σύστημα ηλεκτρονίου ποζιτρονίου στην πρώτη τροχιά Bohr.

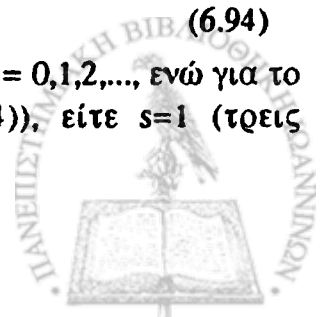
Η ολική στροφορμή του συστήματος ηλεκτρονίου - ποζιτρονίου είναι

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (6.93)$$

όπου \mathbf{L} η τροχιακή στροφορμή του συστήματος και

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (6.94)$$

το ολικό σπιν. Για την τροχιακή στροφορμή έχουμε τις τιμές $l = 0, 1, 2, \dots$, ενώ για το ολικό σπιν έχουμε είτε $s = 0$ (ιδιοκατάσταση η (5.154)), είτε $s=1$ (τρεις



ιδιοκαταστάσεις (5.155)). Οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος συμβολίζονται συνήθως, όπως αναφέραμε, σαν

$$n^{2s+1}l_j$$

Η βασική κατάσταση με $n=1, l=0$, περιλαμβάνει την κατάσταση 1^1S_0 (είναι γνωστή σαν παραποζιτρόνιουμ) και τις τρεις καταστάσεις 1^3S_1 (γνωστές σαν ορθοποζιτρόνιουμ). Τα ενεργειακά επίπεδα του συστήματος ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου χαρακτηρίζονται, επί πλέον, από δύο άλλους κβαντικούς αριθμούς, την ομοτιμία και τη συζυγία φορτίου, που όμως δεν θα μας απασχολήσουν εδώ.

Θα άξιζε ν' αναφέρουμε εδώ ότι το σύστημα ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου, που είδαμε, θα μπορούσε να χαρακτηριστεί σαν ένα "ισότοπο" του υδρογόνου στο οποίο το ρόλο του πυρήνα παίζει το ποζιτρόνιο. Υπάρχει, επίσης, ένα παρόμοιο "ισότοπο", στο οποίο το ρόλο του πυρήνα παίζει ένα άλλο στοιχειώδες σωματίδιο, όμοιο καθόλα με το ηλεκτρόνιο, αλλά βαρύτερο, το μόνιο μ^+ ($m_\mu \approx 207m_e$) (το σύστημα είναι γνωστό σαν μόνιουμ). Και τα δύο έχουν παρατηρηθεί, αλλά θα πρέπει να τονίσουμε ότι είναι ασταθή. Ο χρόνος ζωής για το σύστημα (μ^+e^-) είναι 2.2×10^{-6} s (όσος και ο χρόνος ζωής για του ίδιου του μ^+). Στο σύστημα (e^+e^-) το ηλεκτρόνιο και το ποζιτρόνιο μπορούν να εξαϋλωθούν παράγοντας ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (φωτόνια). Και τα δύο αυτά συστήματα (ποζιτρόνιουμ - μόνιουμ) περιέχουν μόνο λεπτόνια (σωματίδια με ηλεκτρομαγνητικές, αλλά όχι ισχυρές αλληλεπιδράσεις) και γι' αυτό είναι ιδιαίτερα κατάλληλα για να ελεγχθούν οι προβλέψεις της κβαντικής θεωρίας των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων, δηλαδή της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής (QED).

Ας έλθουμε, τώρα, στο σύστημα κουάρκ-αντικουάρκ ($q\bar{q}$). Όπως είναι γνωστό, η μεγάλη ποικιλία των αδρονίων μπορεί να εξηγηθεί με το πρότυπο των κουάρκ. Σύμφωνα με αυτό, τα κουάρκ μπορούν να συνδυαστούν είτε σε δέσμιες καταστάσεις τριών κουάρκ (qqq) σχηματίζοντας τα βαρυόνια, είτε σε δέσμιες καταστάσεις κουάρκ-αντικουάρκ ($q\bar{q}$) σχηματίζοντας τα μεσόνια. Για τα τρία πρώτα ελαφριά είδη κουάρκ u, d, s , ο υπολογισμός δείχνει ότι η ενέργεια ηρεμίας τους είναι συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης για το σχηματισμό αδρονίων. Αυτό σημαίνει ότι οι υπολογισμοί θα πρέπει να γίνουν πλήρως σχετικιστικά, κάτι αρκετά περίπλοκο. Όμως, για τα βαρύτερα κουάρκ c, b, t ο μη σχετικιστικός υπολογισμός αρχίζει να γίνεται όλο και πιο ακριβής. Επειδή οι ιδιότητες συμμετρίας ενός συστήματος $q\bar{q}$ ($c\bar{c}$, $b\bar{b}$, $t\bar{t}$) είναι όμοιες μ' εκείνες του συστήματος (e^+e^-), περιμένουμε ότι τα ενεργειακά επίπεδα του συστήματος $q\bar{q}$ θα παρουσιάζουν παρόμοια μορφή μ' εκείνα του (e^+e^-), με τη διαφορά ότι τώρα θα έχουμε διαφορετική κλίμακα ενεργειών. Ο λόγος είναι ότι στην περίπτωση του συστήματος

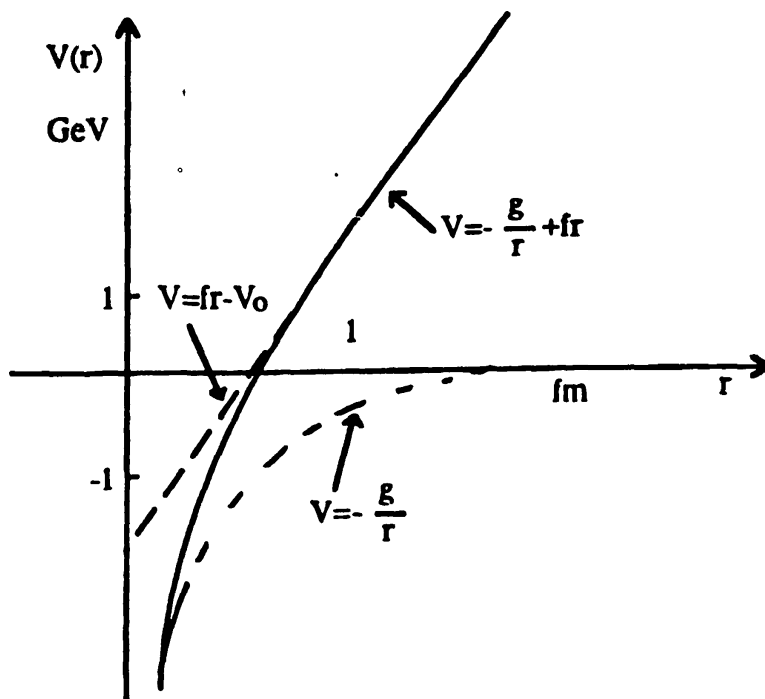


$q\bar{q}$ οι αλληλεπιδράσεις είναι ισχυρές σε σύγκριση με τις ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις του συστήματος (e^+e^-) και οι μάζες των σωματιδίων αρκετά μεγαλύτερες.

Η ακριβής μορφή του δυναμικού στα βαριά συστήματα $q\bar{q}$ δεν είναι γνωστή. Όμως, μέσα στο καθιερωμένο πρότυπο για τις θεωρίες που περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις των στοιχειωδών σωματιδίων, η θεωρία που ισχύει για τις ισχυρές αλληλεπιδράσεις, η κβαντική χρωμοδυναμική (QCD), είναι ανάλογη με τη θεωρία των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων, την κβαντική ηλεκτροδυναμική (QED), αν και με αρκετά πιο πολύπλοκη δομή. Έτσι, μέσα στο πλαίσιο αυτών των θεωριών, για μικρές αποστάσεις r περιμένουμε ένα δυναμικό τύπου Coulomb. Από την άλλη μεριά, επειδή ελεύθερα κουάρκ δεν παρατηρούνται, περιμένουμε για μεγάλα r ένα γραμμικό δυναμικό, πράγμα που οδηγεί σε "εγκλεισμό" των κουάρκ, τα οποία έτσι δεν μπορούν ν' αποδεσμευτούν. Έτσι, ένα φαινομενολογικό δυναμικό (υπαγορευόμενο από την κβαντική χρωμοδυναμική), κατάλληλο να περιγράψει ένα τέτοιο σύστημα $q\bar{q}$, είναι το

$$V(r) = -\frac{g}{r} + fr \quad (6.95)$$

Στην εξίσωση αυτή η σταθερά g εξαρτάται από την σταθερά ζεύξης α_s των ισχυρών αλληλεπιδράσεων (ανάλογη της σταθεράς $\alpha = e^2/\hbar c$ των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων) και αριθμητικά είναι $g = \frac{4}{3} \alpha_s \hbar c = 0.19 \times \hbar c \approx 0.04 \text{ GeV} \cdot \text{fm}$. Η σταθερά f είναι $f \approx 1 \text{ GeV}/\text{fm}$. Ένα τέτοιο δυναμικό φαίνεται στο σχήμα 6.7.



Σχ. 6.7. Φαινομενολογικό δυναμικό για ένα σύστημα $q\bar{q}$



Η λύση της εξίσωσης Schrödinger με το πλήρες δυναμικό (6.95) γίνεται αριθμητικά. Τα ενεργειακά επίπεδα που προκύπτουν από τον όρο Coulomb είναι, όπως ξέρουμε, ανάλογα της μάζας m των σωματιδίων και του τετραγώνου της σταθεράς ζεύξης α^2 . Περιμένουμε, έτσι, η κλίμακα των ενεργειών (6.91) να είναι εδώ περίπου 10^8 φορές μεγαλύτερη από εκείνη του συστήματος (e^+e^-), δηλαδή της τάξης του 600 MeV, πράγμα που επιβεβαιώνεται πειραματικά. Από την άλλη μεριά, για μεγάλα γ μπορούμε να έχουμε μια αίσθηση για τα ενεργειακά επίπεδα ενός συστήματος $q\bar{q}$ χρησιμοποιώντας ένα φαινομενολογικό γραμμικό δυναμικό της μορφής $V(r) = fr - V_0$, όπως φαίνεται στο σχήμα 6.7. Πράγματι, ας θεωρήσουμε το δυναμικό

$$V(r) = fr - V_0 \quad (6.96)$$

που μεταβάλλεται γραμμικά με την ακτίνα r . Η εξίσωση για την ακτινική συνάρτηση $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$ είναι

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + V_0 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - fr \right] u_{El}(r) = 0 \quad (6.97)$$

Για $l > 0$ η εξίσωση αυτή δεν μπορεί να λυθεί συναρτήσει γνωστών συναρτήσεων και πρέπει να χρησιμοποιηθούν προσεγγιστικές μέθοδοι. Όμως, για $l=0$ η εξίσωση ανάγεται στην εξίσωση (3.91), που μελετήσαμε στην § 3.5. Πράγματι, χρησιμοποιώντας τη μεταβλητή

$$\xi = \left(r - \frac{E + V_0}{f} \right) \left(\frac{2\mu f}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad (6.98)$$

η (6.97) για $l=0$ δίνει

$$\frac{d^2 \eta}{d\xi^2} - \xi \eta = 0, \quad \eta(\xi) = u(r) \quad (6.99)$$

Στην § 3.5 εξετάσαμε το δυναμικό (3.95), στο οποίο η κυματοσυνάρτηση είναι μηδέν για $x = 0$, επειδή το V είναι άπειρο για $x < 0$. Εδώ έχουμε μια μαθηματικά όμοια συμπεριφορά, που προκύπτει από τη συνοριακή συνθήκη $u(0) = 0$. Η λύση της (6.99) είναι η συνάρτηση Airy (3.92)-(3.93). Επειδή $u(0) = 0$, το $\xi(r=0)$ πρέπει να είναι μια από τις ρίζες ξ_n της συνάρτησης Airy. Έτσι τα ενεργειακά επίπεδα προκύπτουν από τη συνθήκη

$$\xi_n = \left(0 - \frac{E_n + V_0}{f} \right) \left(\frac{2\mu f}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad (6.100)$$

απ' όπου παίρνουμε

$$E_n = |\xi_n| \left(\frac{f^2 \hbar^2}{2\mu} \right)^{1/3} - V_0$$



$$= |\xi_n| \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{1/3} - V_0, \quad (6.101)$$

όπου λάβαμε υπ' όψη ότι η ανηγμένη μάζα είναι $\mu = \frac{m}{2}$ (m η μάζα του κουάρκ).

Βλέπουμε, εδώ, ότι για ένα γραμμικό δυναμικό τα ενεργειακά επίπεδα είναι ανάλογα του $m^{-1/3}$. Οι φυσικά μετρούμενες ποσότητες είναι οι μάζες M_n ή, ισοδύναμα, οι ενέργειες ηρεμίας $M_n c^2$ των μεσονίων, που δίνονται από το άθροισμα των ενεργειών ηρεμίας του κουάρκ και του αντικουάρκ συν την ενέργεια (6.101):

$$M_n c^2 = 2mc^2 + |\xi_n| \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{1/3} - V_0 \quad (6.102)$$

Βέβαια, όπως ήδη αναφέραμε, μια ολοκληρωμένη ανάλυση περιλαμβάνει αριθμητική λύση με το πλήρες δυναμικό (6.95), καθώς επίσης σχετικιστικές διορθώσεις, κάτι που όμως ξεφεύγει από τα πλαίσια της συζήτησής μας.

6.6. Ο τριδιάστατος ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής

Ας θεωρήσουμε την κίνηση ενός σωματιδίου μάζας μ μέσα σ' ένα δυναμικό

$$V(r) = \frac{1}{2} kr^2 = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2, \quad (6.103)$$

που αντιστοιχεί σ' ένα τριδιάστατο ισοτροπικό ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας $\omega =$

$$\sqrt{\frac{k}{\mu}}.$$

Για την ακτινική συνάρτηση $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$ έχουμε την εξίσωση

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\mu^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} \right] u_{El}(r) = 0 \quad (6.104)$$

Ορίζοντας τις παραμέτρους

$$\rho = \beta r, \quad \beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad (6.105)$$

και

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad (6.106)$$

η (6.104) γίνεται



$$\left[\frac{d^2}{dQ^2} - \frac{l(l+1)}{Q^2} + \lambda - Q^2 \right] u_{EI}(Q) = 0 \quad (6.107)$$

Ασυμπτωτικά ($Q \rightarrow \infty$) η (6.107) ανάγεται στην εξίσωση

$$\left[\frac{d^2}{dQ^2} - Q^2 \right] u_{EI}(Q) = 0 \quad (6.108)$$

με φυσικά αποδεκτή λύση $u_{EI}(Q) \sim e^{-Q^2/2}$. Γράφοντας, λοιπόν,
 $Q \rightarrow \infty$

$u_{EI}(Q) = e^{-Q^2/2} v(Q)$, η (6.107) γίνεται

$$\left[\frac{d^2}{dQ^2} - 2Q \frac{d}{dQ} - \frac{l(l+1)}{Q^2} + \lambda - 1 \right] v(Q) = 0 \quad (6.109)$$

Παραπέρα, θέτοντας (βλ. και πρόβλημα 6.2) $v(Q) = Q^{l+1} f(Q)$, η (6.109) δίνει

$$\left[\frac{d^2}{dQ^2} + 2 \left(\frac{l+1}{Q} - Q \right) \frac{d}{dQ} + \left(\lambda - 2 \left(l + \frac{3}{2} \right) \right) \right] f(Q) = 0 \quad (6.110)$$

Χρησιμοποιώντας τη μεταβλητή

$$\zeta = Q^2 = \beta^2 r^2, \quad (6.111)$$

η παραπάνω εξίσωση ανάγεται στην

$$\zeta \frac{d^2 f(\zeta)}{d\zeta^2} + \left[\left(l + \frac{3}{2} \right) - \zeta \right] \frac{df(\zeta)}{d\zeta} - \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{\lambda}{4} \right] f(\zeta) = 0 \quad (6.112)$$

Η (6.112) είναι της μορφής

$$\zeta \frac{d^2 f(\zeta)}{d\zeta^2} + (c - \zeta) \frac{df(\zeta)}{d\zeta} - \alpha f(\zeta) = 0 \quad (6.113)$$

που είναι γνωστή στη μαθηματική βιβλιογραφία σαν διαφορική εξίσωση Kummer-Laplace και οι λύσεις της είναι οι λεγόμενες συρρέουσες υπεργεωμετρικές συναρτήσεις ${}_1F_1(\alpha, c, \zeta)$. Για τις ${}_1F_1(\alpha, c, \zeta)$ έχουμε την δυναμοσειρά

$${}_1F_1(\alpha, c, \zeta) = 1 + \frac{\alpha}{c} \frac{\zeta}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{c(c+1)} \frac{\zeta^2}{2!} + \dots \quad (6.114)$$

Για $\alpha = -n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) οι λύσεις είναι πολυώνυμα και, όπως βλέπει κανείς από τη μορφή των παραπάνω διαφορικών εισώσεων, ειδικές περιπτώσεις αποτελούν τα πολυώνυμα Hermite και Laguerre. Έτσι, η (6.112) έχει πολυωνυμικές λύσεις για

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{\lambda}{4} = -n_r \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots) \quad (6.115)$$

όπου n_r ο ακτινικός κβαντικός αριθμός, οπότε



$$\begin{aligned}\lambda &= 2(2n_r + 1 + \frac{3}{2}) \\ &= 2(n + \frac{3}{2}),\end{aligned}\tag{6.116}$$

όπου

$$n = 2n_r + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)\tag{6.117}$$

ο κύριος κβαντικός αριθμός. Από τη (6.106) βρίσκουμε τότε τα ενεργειακά επίπεδα του τριδιάστατου ισοτροπικού ταλαντωτή

$$E_n = (n + \frac{3}{2}) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots\tag{6.118}$$

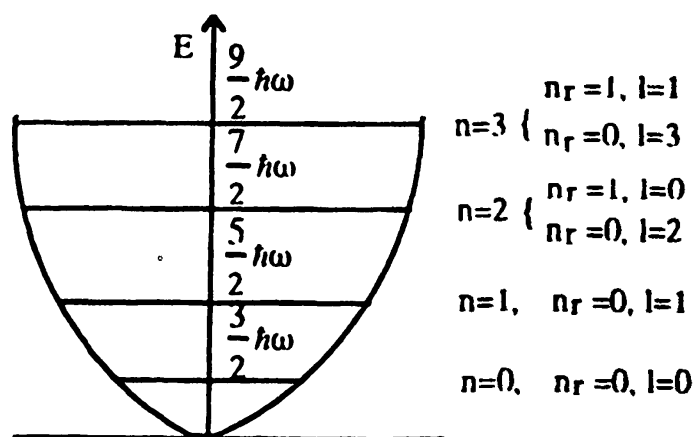
ένα αποτέλεσμα αναμενόμενο, μα και έχουμε συνεισφορά $\frac{1}{2} \hbar\omega$ για καθ' ένα από τους τρεις βαθμούς ελευθερίας στην ενέργεια μηδενικού σημείου.

Οι αντίστοιχες ακτινικές ιδιοσυναρτήσεις $R_{El}(r) = \frac{1}{r} u_{El}(r)$ γράφονται

$$R_{El}(r) = N e^{-\beta^2 r^2/2} r^l {}_1F_1(-n_r, l + \frac{3}{2}, \beta^2 r^2)\tag{6.119}$$

και οι πλήρεις ιδιοσυναρτήσεις θα είναι τότε

$$\Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) = N e^{-\beta^2 r^2/2} r^l {}_1F_1(-n_r, l + \frac{3}{2}, \beta^2 r^2) Y_{lm}(\theta, \varphi)\tag{6.120}$$



Σχ. 6.8. Η δομή του ενεργειακού φάσματος του τριδιάστατου ισοτροπικού ταλαντωτή.

Το σχ. 6.8 δείχνει το ενεργειακό φάσμα του τριδιάστατου ισοτροπικού ταλαντωτή. Η βασική στάθμη είναι μη εκφυλισμένη, η πρώτη διεγερμένη κατάσταση παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης 3, η δεύτερη διεγερμένη κατάσταση



εκφυλισμό τάξης 6 κλπ. Γενικά, ο βαθμός εκφυλισμού της ενεργειακής στάθμης E_n είναι $(n+1)(n+2)/2$.

Η μελέτη του ιστροπικού αρμονικού ταλαντωτή μπορεί, ασφαλώς, να γίνει και στις καρτεσιανές συντεταγμένες (βλ. και πρόβλημα 4.2). Έχουμε, άλλωστε, ήδη σημειώσει ότι τα πολυώνυμα Hermite αποτελούν ειδικές περιπτώσεις των συναρτήσεων ${}_1F_1$. Θα βρούμε, βέβαια, τότε το ίδιο ενεργειακό φάσμα. Τα προβλήματα 6.16 και 6.17 δίνουν την ευκαιρία στον αναγνώστη για μια τέτοια συγκριτική μελέτη για τις απλές περιπτώσεις της βασικής και της πρώτης διεγερμένης στάθμης.

Ο τριδιάστατος αρμονικός ταλαντωτής είναι ιδιαίτερης σπουδαιότητας στην πυρηνική φυσική (στο μοντέλο των φλοιών για τους πυρήνες).

Προβλήματα

6.1. Ναδειχτεί ότι η ομοτιμία των ιδιοσυναρτήσεων $\Psi_{Elm}(r) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ είναι $(-1)^l$.

Υπενθυμίζεται ότι κάτω από τη δράση του τελεστή \hat{P} της ομοτιμίας, ισχύει $\hat{P} f(r, \theta, \varphi) = f(r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$.

6.2. Ναδειχτεί ότι για ένα κεντρικό δυναμικό $V(r)$, που κοντά στην αρχή έχει τη μορφή

$$V(r) = \frac{b_0}{r} + b_1 + O(r),$$

(αυτό συμβαίνει σε όλες σχεδόν τις περιπτώσεις φυσικού ενδιαφέροντος), η ακτινική συνάρτηση $R_{El}(r)$ συμπεριφέρεται στην αρχή σαν $R_{El}(r) \approx r^l$.

Που οφείλεται το γεγονός ότι, καθώς το l αυξάνει, η $R_{El}(r)$ γίνεται όλο και μικρότερη στην περιοχή της αρχής;

Υπόδειξη: Να χρησιμοποιηθεί η εξίσωση για την $u_{El}(r) = rR_{El}(r)$, μαζί

με την οριακή συνθήκη $u_{El}(0) = 0$. Γράφοντας $u_{El}(r) = r^s \sum_{k=0}^{\infty} C_k r^k$ (το $r=0$ είναι

κανονικό ανώμαλο σημείο για την αντίστοιχη διαφορική εξίσωση), ναδειχθεί ότι η προκύπτουσα εξίσωση δεικτών συνεπάγεται τη συμπεριφορά



$$u_{E_l}(r) \approx r^{l+1} \quad r \rightarrow 0$$

6.3. Σ' ένα κεντρικό δυναμικό με διάκριτο φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας, συμβολίζουμε με E_l την ιδιοτιμή, που για δοσμένο l είναι μικρότερη από κάθε άλλη που αντιστοιχεί σε καταστάσεις με ίδιο l . Να δειχτεί ότι η E_l αυξάνει με το l .

6.4. i) Να δειχτεί ότι για $l=0$ η συνθήκη (6.61) ανάγεται στην εξίσωση

$$\xi \cot \xi = -\eta,$$

$$\text{όπου } \xi = Ka, \eta = \lambda a \text{ με } \xi^2 + \eta^2 = \frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2} \equiv \gamma^2$$

Από την εξίσωση αυτή να συναχθεί γραφικά ότι για $\gamma \leq \pi/2$ δεν υπάρχει λύση δέσμιας κατάστασης, για $\pi/2 < \gamma \leq 3\pi/2$ υπάρχει μια λύση δέσμιας κατάστασης κ.λ.π. Να σχεδιαστεί πως μοιάζουν οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις.

ii) Να δειχτεί επίσης ότι για $l=1$ η συνθήκη (6.61) ανάγεται στην εξίσωση

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2}$$

Να δειχτεί ότι τώρα για $\gamma \leq \pi$ δεν υπάρχει λύση δέσμιας κατάστασης, για $\pi < \gamma \leq 2\pi$ υπάρχει μία λύση δέσμιας κατάστασης κ.λ.π.

6.5. Να υπολογιστεί η ιδιοτιμή της ενέργειας E_n και ο βαθμός εκφυλισμού για τη δεύτερη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου $|n=3, l=m\rangle$.

6.6. Έστω ότι το άτομο του υδρογόνου βρίσκεται στην κατάσταση $|nlm\rangle = |210\rangle$. Επί πλέον, έστω ότι για την ορμή του κέντρου μάζας $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{K}$, έχουμε $K_x = 5 \text{ \AA}^{-1}$, $K_y = 6 \text{ \AA}^{-1}$, $K_z = 0$. Να βρεθεί η ιδιοτιμή της ολικής ενέργειας $E = E_K + E_n$ σε eV.

6.7. Να υπολογιστούν: i) η πιο πιθανή τιμή και ii) η μέση τιμή της απόστασης ανάμεσα στο ηλεκτρόνιο και το πρωτόνιο ενός ατόμου υδρογόνου για την κατάσταση $1s$.

Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle r \rangle_{100}$ και $\langle 1/r \rangle_{100}$ για τη βασική κατάσταση $|100\rangle$ του ατόμου του υδρογόνου. Από αυτές, να υπολογιστεί η $\langle T \rangle_{100}$, όπου T η κινητική ενέργεια $\frac{p^2}{2\mu}$, και η μέση ταχύτητα $\langle v \rangle_{100}$ του



ηλεκτρονίου. Να επαληθευτεί επίσης η σχέση $\langle T \rangle_{100} = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{100}$ (θεώρημα virial), όπου V η δυναμική ενέργεια.

Να επαναληφθούν τα παραπάνω για την κατάσταση $|200\rangle$ του ατόμου του υδρογόνου.

Να δικαιολογηθεί από τα αποτελέσματα αυτά η μη σχετικιστική προσέγγιση της κβαντικής μηχανικής.

6.8. Για ένα υδρογονοειδές άτομο με πυρηνικό φορτίο Ze , που βρίσκεται στην βασική κατάσταση, να υπολογιστούν:

i) η μέση τιμή της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας

ii) η μέση απόσταση μεταξύ ηλεκτρονίου και πυρήνα

iii) η πιο πιθανή τιμή της απόστασης ηλεκτρονίου - πυρήνα

iv) η πιθανότητα που υπάρχει να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο διάστημα $0.9a_0 < r < 1.1a_0$

v) η πιθανότητα που υπάρχει να βρεθεί το ηλεκτρόνιο μέσα στον πυρήνα ($r \leq 1$ fm).

6.9. Χρησιμοποιώντας τη γεννήτρια συνάρτηση (6.81), είναι δυνατόν να υπολογισθούν οι μέσες τιμές

$$\begin{aligned} \langle r^k \rangle_{nlm} &= \int \psi_{nlm}^* (r, \theta, \varphi) r^k \psi_{nlm} (r, \theta, \varphi) r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^{k+2} dr \end{aligned}$$

Να δειχθούν οι παρακάτω χρήσιμες εκφράσεις

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{nlm} &= \frac{a_\mu}{2Z} [3n^2 - l(l+1)] \\ \langle r^2 \rangle_{nlm} &= \frac{a_\mu n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} &= \frac{Z}{a_\mu n^2} \\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} &= \frac{Z^2}{a_\mu^2 n^3 (1 + \frac{1}{2})} \end{aligned}$$



$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z^3}{a_\mu^2 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

6.10. Ξεκινώντας από τη σχέση $\langle 1/r \rangle_{nlm} = Z/n^2 a_\mu$, να δειχτεί το θεώρημα virial $\langle T \rangle_{nlm} = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm}$ για μια οποιαδήποτε κατάσταση $|nlm\rangle$ ενός υδρογονοειδούς ατόμου.

6.11. Ένα άτομο υδρογόνου περιγράφεται σε μια δεδομένη στιγμή από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{30}} [2\psi_{100}(\mathbf{r}) - 3\psi_{211}(\mathbf{r}) + 4\psi_{200}(\mathbf{r}) - \psi_{320}(\mathbf{r})],$$

Είναι αυτή ιδιοσυνάρτηση του τελεστή της ομοτιμίας; Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle E \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ και $\langle L_z \rangle$

6.12. Για τις ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

του ατόμου του υδρογόνου, να υπολογιστούν οι συνιστώσες $J_r^{(nlm)}$, $J_\theta^{(nlm)}$,

$J_\varphi^{(nlm)}$ της πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_{nlm} \nabla \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \nabla \psi_{nlm} \right) = \left\{ J_r^{(nlm)}, J_\theta^{(nlm)}, J_\varphi^{(nlm)} \right\},$$

$$\text{όπου } \nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}.$$

Να δοθεί φυσική ερμηνεία στ' αποτελέσματα.

6.13. Το άτομο του μιονίου είναι μια δέσμη κατάσταση ενός μιονίου μ^- και ενός πρωτονίου p (σε αναλογία με το άτομο του υδρογόνου). Να υπολογιστούν η ανηγμένη μάζα μ , η "ακτίνα" a_μ και η ενέργεια ιονισμού I για ένα τέτοιο σύστημα και να συγκριθούν με τις αντίστοιχες ποσότητες για το άτομο του υδρογόνου και τα συστήματα $(e^+ e^-)$, $(\mu^+ e^-)$.

Να υπολογιστούν, επίσης, οι ίδιες ποσότητες για το άτομο του π-μεσονίου, το οποίο συνίσταται από μια δέσμη κατάσταση ενός μεσονίου π^- ($m_\pi \approx 273 m_e$) και ενός πρωτονίου p .



Τόσο το άτομο του μιονίου, όσο και το άτομο του π-μεσονίου, είναι βέβαια ασταθή με πολύ μικρό χρόνο ζωής.

6.14. Να γραφεί η ακτινική εξίσωση για το κεντρικό δυναμικό

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2, \quad A \geq 0, \quad B > 0$$

Στη συνέχεια, να βρεθούν τα ενεργειακά επίπεδα και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις για ένα σωματίδιο μάζας μ μέσα στο παραπάνω δυναμικό, φέρνοντας την ακτινική εξίσωση σε μορφή όμοια με εκείνη του τριδιάστατου ισοτροπικού ταλαντωτή με την αντικατάσταση $l'(l'+1) = l(l+1) + \frac{2\mu A}{\hbar^2}$.

6.15. Να χρησιμοποιηθούν οι τεχνικές της θεωρίας τριδιάστατου ισοτροπικού ταλαντωτή για να μελετηθεί ο διδιάστατος ισοτροπικός ταλαντωτής. Να δειχτεί ότι ενεργειακά επίπεδα είναι

$$E_n = (n+1) \hbar \omega, \quad n = 2n_r + |m| = 0, 1, 2, \dots$$

$$n_r = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις

$$\Psi_{E_m}(r, \varphi) = N e^{-\beta^2 r^2 / 2} r^{|m|} {}_1F_1(-n_r, |m| + 1, \beta^2 r^2) e^{im\varphi}$$

6.16. Να μελετηθεί η βασική κατάσταση του ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή

i) σε καρτεσιανές συντεταγμένες και

ii) σε σφαιρικές συντεταγμένες, εξετάζοντας την εξίσωση για την ακτινική συνάρτηση $u_{E_l}(r) = rR_{E_l}(r)$ με $l=0$. Ιδιαίτερα, να εξηγηθεί με απλό τρόπο πώς παίρνουμε την ίδια ιδιοσυνάρτηση και την ίδια μη εκφυλισμένη ιδιοτιμή.

Να δειχθεί στη συνέχεια ότι η μέση τιμή $\langle r \rangle_0$ για τη βασική κατάσταση είναι

$$\langle r \rangle_0 = \frac{2}{\beta \sqrt{\pi}}.$$

Να βρεθεί η μέση τιμή $\langle r \rangle_0$ για το άτομο ενός μορίου, όταν η μάζα του είναι $\mu = 10 m_p \approx 10 \text{ GeV}/c^2$ και χρειάζεται ενέργεια 1 eV για την απομάκρυνσή του κατά 1 \AA από τη θέση ισορροπίας.

6.17. Να γίνει η παραπάνω μελέτη για την πρώτη τριπλά εκφυλισμένη διεγερμένη κατάσταση.



[The text in this section is extremely faint and illegible due to heavy noise and low contrast. It appears to be several paragraphs of a document.]

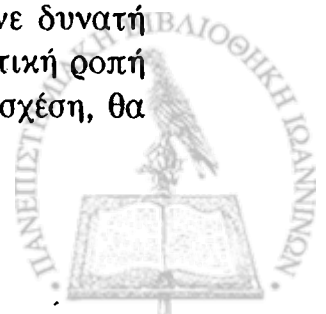
ΚΕΦΑΛΑΙΟ VII

ΚΒΑΝΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕΣΑ ΣΕ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟ
ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ - ΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

Στο κεφάλαιο αυτό θα εξετάσουμε ορισμένα προβλήματα αλληλεπίδρασης κβαντικών συστημάτων με εξωτερικό μαγνητικό ή ηλεκτρικό πεδίο. Θεμελιώδης εδώ είναι η σχέση στροφορμής και μαγνητικής ροπής ενός συστήματος. Χαρακτηριστικό είναι το φαινόμενο του μαγνητικού συντονισμού. Φορτισμένα σωματίδια μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο υφίστανται την επίδραση της δύναμης Lorentz. Θα δούμε τη μορφή που παίρνει η αντίστοιχη κβαντομηχανική χαμιλτονιανή, καθώς και τους μετασχηματισμούς βαθμίδας για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και την κυματοσυνάρτηση, που αφήνουν αναλλοίωτη την κβαντική θεωρία. Το φαινόμενο Aharanov-Bohm υπογραμμίζει τη σημασία των (ηλεκτρομαγνητικών) δυναμικών αυτών καθεαυτών. Η παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου εκδηλώνεται τόσο στο φαινόμενο Zeeman, όσο και στις στάθμες Landau. Οι τελευταίες παίζουν σημαντικό ρόλο στην κατανόηση του κβαντικού φαινομένου Hall. Εξ άλλου, στο συμβολόμετρο νετρονίων βλέπουμε μερικά αξιοσημείωτα φαινόμενα, όπως την κβαντική συμβολή που επάγει η βαρύτητα και το ρόλο των περιστροφών πάνω σε καταστάσεις ιδιοστροφορμής $\frac{1}{2}$.

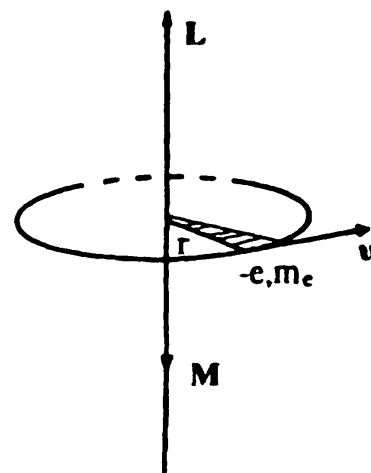
7.1. Στροφορμή και μαγνητική ροπή

Η πειραματική απόδειξη της κβάντωσης της στροφορμής έγινε δυνατή χάρη στη θεμελιώδη σχέση, που υπάρχει ανάμεσα σ' αυτή και τη μαγνητική ροπή ενός συστήματος. Ξεκινώντας από ένα κλασικό μοντέλο γι' αυτή τη σχέση, θα



μεταφέρουμε τα αντίστοιχα αποτελέσματα στην κβαντική μηχανική και θα εξετάσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά των πειραματικών δεδομένων, που οδήγησαν στην ανακάλυψη των κβαντικών αριθμών της στροφορμής, τόσο των ακέραιων, όπως π.χ. η τροχιακή στροφορμή, όσο και των ημιακέραιων, όπως π.χ. το σπιν των ηλεκτρονίων.

Κλασικά, ο μαγνητισμός προέρχεται από την κίνηση φορτίων. Ας θεωρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο φορτίου $-e$ και μάζας m_e μέσα σ' ένα πεδίο Coulomb. Η τροχιακή στροφορμή L του ηλεκτρονίου είναι τότε μια σταθερά της κίνησης. Η παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου B διαταράσσει αυτή την κίνηση, αλλά όπως θα δούμε και στη συνέχεια, στις περισσότερες περιπτώσεις φυσικού ενδιαφέροντος αυτή η διαταραχή είναι πολύ ασθενής και έτσι μπορεί κανείς να ορίσει μια μαγνητική ροπή M , που σχετίζεται με τη στροφορμή L σε απουσία μαγνητικού πεδίου. Ας πάρουμε μια κυκλική τροχιά για το ηλεκτρόνιο (σχ. 7.1).



Σχ. 7.1. Σχέση στροφορμής και μαγνητικής ροπής.

Ισχύουν οι σχέσεις

$$L = r \times p = m_e r \times v$$

$$dS(\text{στοιχείο επιφάνειας}) = \frac{1}{2} r \times v dt$$

$$M = \frac{1}{c} I dS = \frac{-e}{2c} r \times v \quad (7.1)$$

και, συνεπώς, η μαγνητική ροπή είναι

$$M = -\frac{e}{2m_e c} L \quad (7.2)$$

Η σταθερά $\gamma_0 = -\frac{e}{2m_e c}$ είναι γνωστή σαν γυρομαγνητικός λόγος του ηλεκτρονίου σε τροχιά και έτσι μπορούμε να γράψουμε τη σχέση μαγνητικής ροπής και τροχιακής στροφορμής για το ηλεκτρόνιο σαν

$$M = \gamma_0 L \quad (7.3)$$

Μέσα σ' ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο B η ύπαρξη της μαγνητικής ροπής M συνεπάγεται ότι το σύστημά μας έχει μια ενέργεια W και υφίσταται την επίδραση μιας ροπής Γ και μιας δύναμης F , που δίνονται από τις σχέσεις:

$$W = -M \cdot B \quad (7.4)$$

$$\Gamma = M \times B \quad (7.5)$$

$$F = -\nabla W = \nabla (M \cdot B) \quad (7.6)$$



Το αποτέλεσμα της ροπής Γ είναι να δημιουργήσει μια μεταπτωτική κίνηση γύρω από το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} (σχ. 7.2), που είναι γνωστή σαν μετάπτωση Larmor.

Πράγματι, ο νόμος κίνησης $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \Gamma$ μας δίνει

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \mathbf{M} \times \gamma_0 \mathbf{B} \quad (7.7)$$

Έτσι, μέσα σ' ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο (όπου δεν υπάρχει δύναμη, αλλά μόνο ροπή), η μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου \mathbf{M} περιστρέφεται γύρω από το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} με γωνιακή ταχύτητα ω_L ίση με

$$\omega_L = -\gamma_0 B = \frac{e B}{2m_e c} \quad (7.8)$$

Η κυκλική συχνότητα ω_L είναι γνωστή σαν συχνότητα Larmor.

Η μετάβαση από την κλασική στην κβαντική φυσική γίνεται αντικαθιστώντας την τροχιακή στροφορμή \mathbf{L} με τον τελεστή της $\hat{\mathbf{L}}$. Έτσι, στην μαγνητική ροπή \mathbf{M} αντιστοιχεί ο τελεστής $\hat{\mathbf{M}}$, που ο ορισμός και οι ιδιότητές του περιγράφονται από τις βασικές σχέσεις

$$\hat{\mathbf{M}} = \gamma_0 \hat{\mathbf{L}}, \quad \hat{H}_M = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{B}} \quad (7.9)$$

\hat{H}_M είναι το τμήμα της χαμιλτονιανής, που συνδέεται με τη μαγνητική ενέργεια W . Η στροφορμή $\hat{\mathbf{L}}$ μετρείται σε μονάδες \hbar και γι' αυτό, συνήθως, γράφουμε

$$\hat{\mathbf{M}} = \gamma_0 \hbar \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} = -\mu_B \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} \quad (7.10)$$

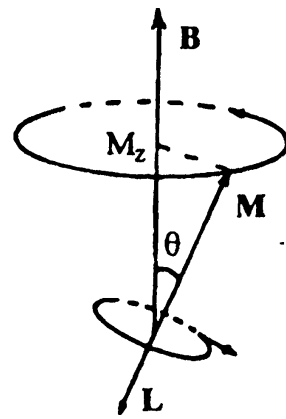
όπου η ποσότητα

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e c} \quad (7.11)$$

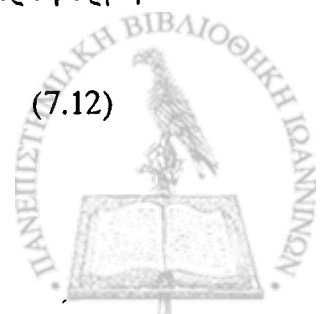
είναι γνωστή σαν μαγνητόνη του Bohr. Η αριθμητική της τιμή είναι $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$.

Ό,τι ειπώθηκε μέχρι τώρα για τη σχέση τροχιακής στροφορμής και μαγνητικής ροπής επεκτείνεται, κατά τρόπο πολύ γενικό, σε κάθε μικροσκοπικό σύστημα. Έτσι, για κάθε κβαντικό μικροσκοπικό σύστημα, που βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση $|jm\rangle$ των $\hat{\mathbf{J}}^2$ και \hat{J}_z με ιδιοτιμές $j(j+1)\hbar^2$ και $m\hbar$, αντίστοιχα, υπάρχει μια σχέση αναλογίας ανάμεσα στη μαγνητική ροπή $\hat{\mathbf{M}}$ και τη στροφορμή $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\hat{\mathbf{M}} = \gamma \cdot \hat{\mathbf{J}}, \quad (7.12)$$



Σχ. 7.2. Μετάπτωση Larmor

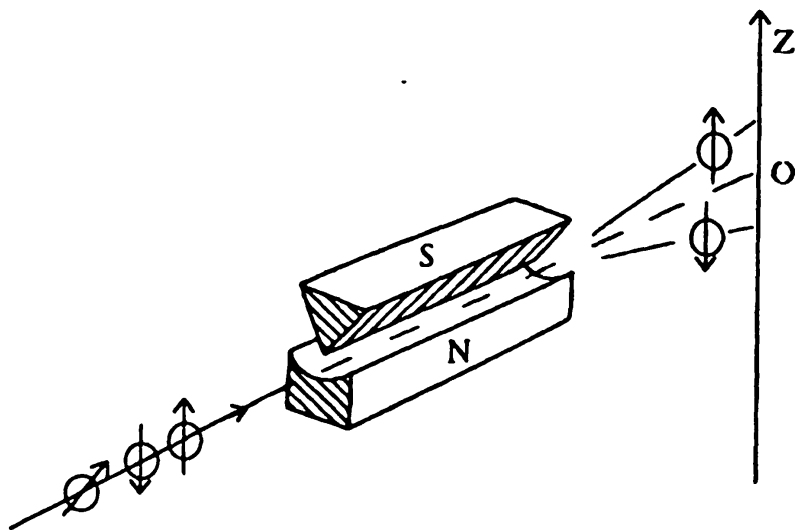


όπου γ ο γυρομαγνητικός λόγος του συστήματος γι' αυτή την κατάσταση. Επί πλέον, μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} το σύστημα έχει μια μαγνητική ενέργεια, στην οποία αντιστοιχεί η χαμιλτονιανή

$$\hat{H}_M = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{B}} \quad (7.13)$$

Οι σχέσεις (7.12) και (7.13) συνιστούν τη γενική θεωρία για τη σχέση στροφορμής και μαγνητικής ροπής, της οποίας η επαλήθευση εναπόκειται στο πείραμα.

Η πειραματική επαλήθευση της σχέσης (7.12) συνίσταται στην ξεχωριστή μέτρηση των \mathbf{M} και $\hat{\mathbf{J}}$ και στην διαπίστωση της μεταξύ τους αναλογίας. Η πιο εύκολη πειραματικά μέτρηση είναι αυτή της μαγνητικής ροπής, η μέτρηση της οποίας δίνει πράγματι κβαντισμένες τιμές. Η αποκάλυψη αυτή βέβαια οφείλεται στο κβαντισμένο φάσμα ιδιοτιμών της στροφορμής, όπως εκθέσαμε μέχρι τώρα, και είναι σύμφωνη με τη σχέση (7.12). Το σχετικό πείραμα είναι το περίφημο πείραμα Stern-Gerlach, του οποίου η διάταξη φαίνεται στο σχ. 7.3. Η συσκευή αυτή οδηγεί σωματίδια με τη z συνιστώσα της μαγνητικής ροπής M_z σε ορισμένες θέσεις



Σχ. 7.3. Συσκευή Stern-Gerlach για τη μέτρηση της μαγνητικής ροπής.

πάνω στο επίπεδο ανίχνευσης Oz . Αυτό είναι συνέπεια της δύναμης $F_z = M_z \frac{\partial B}{\partial z}$ που ασκείται πάνω στα έχοντα μαγνητική ροπή σωματίδια μιας δέσμης, που περνά μέσα από ένα μη ομογενές μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} . Η συσκευή αυτή δρα όπως ένα πρίσμα, αποτυπώνοντας το διάκριτο φάσμα των τιμών της μαγνητικής ροπής σε διάκριτες θέσεις πάνω στο επίπεδο Oz .

Ας συνοψίζουμε τώρα τις συνέπειες των παραπάνω θεμελιωδών σχέσεων (7.12) και (7.13) για τη μαγνητική ροπή και τη στροφορμή.



i) Η συνιστώσα J_z παίρνει τις $(2j+1)$ τιμές $m\hbar$. Συνεπώς, η συνιστώσα M_z της μαγνητικής ροπής παίρνει τις τιμές

$$M_z = m \gamma \hbar, \quad -j \leq m \leq j \quad (7.14)$$

Στο πείραμα Stern-Gerlach, ο αριθμός $(2j+1)$ των σημείων ανίχνευσης μπορεί να είναι όχι μόνο περιττός, αλλά και άρτιος, πράγμα που σημαίνει την ύπαρξη τόσο ακέραιων ($j = 0, 1, 2, \dots$), όσο και ημιακέραιων ($j = \frac{1}{2}, \dots$) κβαντικών αριθμών στροφορμής. Η απόσταση των θέσεων ανίχνευσης επιτρέπει να προσδιορίσουμε το γυρομαγνητικό λόγο γ .

ii) Για τη μετάπτωση Larmor θα έχουμε την κβαντομηχανική εξίσωση για τη μέση τιμή της μαγνητικής ροπής

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{M} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{M}, H_M] \rangle \quad (7.15)$$

Αλλά οι σχέσεις μετάθεσης $\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar\mathbf{J}$ για τη στροφορμή συνεπάγονται τις σχέσεις μετάθεσης

$$\mathbf{M} \times \mathbf{M} = i\hbar\gamma \mathbf{M} \quad (7.16)$$

για την μαγνητική ροπή. Συνεπώς, παίρνουμε τελικά ότι

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{M} \rangle = \gamma \langle \mathbf{M} \rangle \times \mathbf{B} \quad (7.17)$$

Η κβαντική έκφραση (7.17) είναι το ανάλογο της κλασικής έκφρασης (7.7) για τη μετάπτωση Larmor. Όπως θα δούμε στην επόμενη παράγραφο, τα πειράματα του μαγνητικού συντονισμού επιτρέπουν να μετρήσουμε τη συχνότητα Larmor $|\omega_L| = \gamma B$. Κατά συνέπεια, μπορεί κανείς εύκολα να μετρήσει απ' ευθείας το γυρομαγνητικό λόγο γ ενός κβαντικού συστήματος. Παραδείγματος χάρη, το πείραμα δείχνει ότι για το ηλεκτρόνιο, το πρωτόνιο και το νετρόνιο ο γυρομαγνητικός λόγος γ για το σπιν είναι

$$\gamma_s^e = 2\gamma_0 = -\frac{e}{m_e c}, \quad \gamma_s^p = +2.79 \frac{e}{m_p c}, \quad \gamma_s^n = -1.91 \frac{e}{m_p c} \quad (7.18)$$

πράγμα που σημαίνει ότι οι μαγνητικές ροπές για το σπιν είναι

$$M_{sz}^e = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c} = \pm \mu_B \quad (7.19)$$

$$M_{sz}^p = \pm 2.79 \frac{e\hbar}{2m_p c} = \pm 2.79 \mu_N, \quad M_{sz}^n = \pm 1.91 \frac{e\hbar}{2m_p c} = \pm 1.91 \mu_N \quad (7.20)$$



όπου $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 5 \cdot 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$ η λεγόμενη πυρηνική μαγνητόνη

iii) Το τρίτο σημείο, που πρέπει ν' αναφέρουμε εδώ, είναι το λεγόμενο φαινόμενο Zeeman. Μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο $B \parallel Oz$ η σχέση (7.13) συνεπάγεται τις $(2j+1)$ τιμές της ενέργειας

$$|W| = m\hbar \gamma B. \quad (7.21)$$

Ο αριθμός των ενεργειακών αυτών επιπέδων, ανάλογα με το κβαντικό σύστημα, μπορεί να είναι είτε περιττός είτε άρτιος, κάτι που σημαίνει ότι η στροφορμή μπορεί να αντιστοιχεί είτε σε ακέραιο (τροχιακή στροφορμή) είτε σε ημιακέραιο (σπιν) κβαντικό αριθμό.

Έτσι, για το ηλεκτρόνιο, παραδείγματος χάρη, έχουμε δει ότι η μαγνητική ροπή για την τροχιακή στροφορμή του είναι

$$\mathbf{M}_L = \gamma_0 \mathbf{L} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} \quad (7.22)$$

Η μαγνητική ροπή για το σπιν γράφεται συνήθως

$$\mathbf{M}_S = g_s \gamma_0 \mathbf{S} = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar}, \quad (7.23)$$

όπου ο παράγων g_s είναι γνωστός σαν παράγων Landé και για το ηλεκτρόνιο είναι $g_s^e = 2$. Έτσι, για την ολική μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου έχουμε

$$\mathbf{M} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (7.24)$$

Η σχέση αυτή συνεπάγεται την ύπαρξη επί πλέον ενεργειακών επιπέδων μέσα σε μαγνητικό πεδίο:

$$\Delta W = \mu_B B(m_l + 2m_s) = \hbar\omega_L (m_l + 2m_s) \quad (7.25)$$

όπου οι κβαντικοί αριθμοί m_l και m_s παίρνουν τις τιμές: $-l \leq m_l \leq l$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Στο φαινόμενο Zeeman θα επανέλθουμε στη συνέχεια.

Θα πρέπει ν' αναφέρουμε ότι η σχετικιστική κβαντική θεωρία του Dirac πράγματι εξηγεί την αριθμητική τιμή $g_s^e = 2$ για το ηλεκτρόνιο. Επί πλέον οι διορθώσεις στη τιμή αυτή, που υπολογίζονται στην κβαντική θεωρία πεδίου (κβαντική ηλεκτροδυναμική), συμφωνούν σ' εκπληκτικό βαθμό με την πειραματικά μετρούμενη τιμή. Γράφοντας $g_s^e = 2(1+\alpha)$, έχουμε

$$\alpha_{\text{θεωρητική}} = 0.001159652200(40)$$



$$\alpha_{\text{πειραματικη}} = 0.001159652460(127)$$

όπου τα σφάλματα μέσα στις παρενθέσεις αφορούν στα τελευταία δεκαδικά ψηφία. Η παραπάνω συμφωνία θεωρίας και πειράματος είναι μια από τις πιο θεαματικές επιτυχίες της κβαντικής φυσικής στο θεμελιώδες επίπεδο.

Θα πρέπει, επίσης να πούμε ότι οι συντελεστές +2.79 και -1.91 στους γυρομαγνητικούς λόγους γ_s^p και γ_s^n για το πρωτόνιο και το νετρόνιο (αντίστοιχοι παράγοντες Lande $g_s^p = 5.58$ και $g_s^n = -3.82$ με μαγνητική ροπή για το σπιν $\mathbf{M}_s^{p,n} = g_s^{p,n} \mu_N \frac{\mathbf{S}}{\hbar}$) οφείλονται στην εσωτερική δομή αυτών των σωματιδίων. Από την άλλη μεριά, για συνθετότερα συστήματα ο συντελεστής γ της σχέσης (7.12) έχει, εν γένει, μια τιμή, που περιλαμβάνεται μεταξύ του γ_0 και του $2\gamma_0$ για ατομικά συστήματα, ενώ η τιμή αυτή είναι περίπου 2.000 φορές μικρότερη (όσο και ο λόγος m_e/m_p) για πυρηνικά συστήματα.

Θα τελειώσουμε αυτή την παράγραφο συζητώντας τη μαγνητική ροπή του δευτερίου (βλ. §6.3). Έχουμε ήδη αναφέρει ότι η επικρατούσα κατάσταση στο σύστημα του δευτερίου είναι η ${}^3S_1(l=0)$, ενώ υπάρχει μια μικρή πρόσμειξη της ${}^3D_1(l=2)$. Ας δούμε πως προκύπτει αυτό από τη γνώση που έχουμε για τη μαγνητική ροπή του δευτερίου.

Ακολουθώντας τον συμβολισμό (5.149)-(5.151) των ιδιοσυναρτήσεων της ολικής στροφορμής γράφουμε για τις επιμέρους ιδιοκαταστάσεις με την εκλογή $m_j=1$:

$$\psi_{ls}^{jm_j} = \begin{cases} \psi_{01}^{11} = |l=0, s=1, j=1, m_j=1\rangle \\ \psi_{21}^{11} = |l=2, s=1, j=1, m_j=1\rangle \end{cases} \quad (7.26\alpha)$$

Προφανώς έχουμε (βλ. και σχέση (5.155)).

$$\psi_{01}^{11} = Y_{00}(\theta, \phi) \chi_+(p) \chi_+(n) \quad (7.26\beta)$$

Από πίνακες με τους συντελεστές Clebsch-Gordan (ή δουλεύοντας όπως στο πρόβλημα 5.11) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \psi_{21}^{11} = & \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{22}(\theta, \phi) \chi_{1,-1} - \sqrt{\frac{3}{10}} Y_{21}(\theta, \phi) \chi_{1,0} + \\ & + \sqrt{\frac{1}{10}} Y_{20}(\theta, \phi) \chi_{1,1} \end{aligned} \quad (7.26\gamma)$$

Για την κυματοσυνάρτηση του δευτερίου γράφουμε τώρα την επαλληλία



$$\psi = C_S R_0(r) \psi_{01}^{11} + C_D R_2(r) \psi_{21}^{11} \quad (7.26\delta)$$

όπου $R_{0,2}(r)$ οι κανονικοποιημένες αντίστοιχες ακτινικές κυματοσυναρτήσεις. Η πιθανότητα εύρεσης της τιμής $l=2$ είναι $|C_D|^2$, ενώ $|C_S|^2 = 1 - |C_D|^2$ είναι η πιθανότητα εύρεσης της τιμής $l=0$.

Για τον τελεστή της z συντεταγμένης της ολικής μαγνητικής ροπής του συστήματος του δευτερίου γράφουμε

$$\begin{aligned} \hat{M}_z &= \gamma_1 \hat{L}_z + \gamma_s^p \hat{S}_z^p + \gamma_s^n \hat{S}_z^n \\ &= \gamma_1 \hat{L}_z + \frac{\gamma_s^p + \gamma_s^n}{2} (\hat{S}_z^p + \hat{S}_z^n) + \frac{\gamma_s^p - \gamma_s^n}{2} (\hat{S}_z^p - \hat{S}_z^n) \end{aligned} \quad (7.26\epsilon)$$

Στη σχέση αυτή είναι $\gamma_1 = \frac{1}{2} \frac{e}{2m_p c}$ (επειδή η τροχιακή στροφορμή του δευτερίου προέρχεται εξ ημισείας από το πρωτόνιο και το νετρόνιο καθώς κινούνται περί το κέντρο μάζας τους, αλλά μόνο το πρωτόνιο παράγει μαγνητική ροπή, ενώ το νετρόνιο είναι αφόρτιστο και δεν δημιουργεί ρεύμα, βλ. σχήμα 7.1) και $\gamma_s^p = 2.79 \frac{e}{m_p c}$, $\gamma_s^n \approx -1.91 \frac{e}{m_p c}$ οι γυρομαγνητικοί λόγοι λόγω σπιν πρωτονίου και νετρονίου, αντίστοιχα. Ο λόγος για το δεύτερο τρόπο γραφής της εξίσωσης (7.26ε) είναι προφανής, μα και ο τελεστής $\hat{S}_z^p + \hat{S}_z^n$ έχει ιδιοκαταστάσεις τις $\chi_{1,1}$, $\chi_{1,0}$, $\chi_{1,-1}$ με ιδιοτιμές $+\hbar$, 0 , $-\hbar$, ενώ ο τελεστής $\hat{S}_z^p - \hat{S}_z^n$ έχει μηδενική αναμενόμενη τιμή για τις ίδιες ιδιοκαταστάσεις. Έτσι, βρίσκουμε αμέσως ότι η αναμενόμενη τιμή του \hat{M}_z ως προς την κατάσταση ψ είναι

$$\begin{aligned} \langle \hat{M}_z \rangle &= |C_S|^2 \langle \hat{M}_z \rangle |R_0(r) \psi_{01}^{11} + |C_D|^2 \langle \hat{M}_z \rangle |R_2(r) \psi_{21}^{11} \\ &= (1 - |C_D|^2) \left(\frac{\gamma_s^p + \gamma_s^n}{2} \right) \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2} \right) + \\ &\quad + |C_D|^2 \left\{ \frac{3}{5} [\gamma_1 (2\hbar) - \left(\frac{\gamma_s^p + \gamma_s^n}{2} \right) \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2} \right)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{10} [\gamma_1 (1\hbar)] + \frac{1}{10} \left[\left(\frac{\gamma_s^p + \gamma_s^n}{2} \right) \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2} \right) \right] \right\} \\ &= (0.88 - 0.57 |C_D|^2) \frac{e\hbar}{2m_p c} \\ &= (0.88 - 0.57 |C_D|^2) \mu_N \end{aligned} \quad (7.26\sigma\tau)$$



όπου μ_N η πυρηνική μαγνητόνη. Από πειράματα πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (βλ. επόμενη παράγραφο) με δείγματα που περιέχουν δευτέριο βρίσκεται ότι η μαγνητική ροπή του δευτερίου είναι

$$\mathbf{M}_{\text{πειρ}}^d = 0.86 \frac{e}{2m_p c} s^d \quad (s^d = 1) \quad (7.26\zeta)$$

Έτσι, η (7.26στ) δίνει ότι θα πρέπει να είναι

$$|C_D|^2 = 0.04$$

Ο παρών, λοιπόν, υπολογισμός δείχνει ότι το δευτέριο συνίσταται κατά 96% από την κατάσταση 3S_1 και μόνο κατά 4% από την κατάσταση 3D_1 . Αν λάβει κανείς υπόψη του και άλλες διορθώσεις, μια τελικά αποδεκτή εκτίμηση είναι $|C_D|^2 \approx 0.05$.

7.2. Μαγνητικός συντονισμός

Θα μελετήσουμε τώρα τη συμπεριφορά της μαγνητικής ροπής του σπιν μέσα σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο και θα δούμε το φαινόμενο του μαγνητικού συντονισμού.

Η μαγνητική ροπή για το σπιν ενός ατομικού συστήματος γράφεται

$$\mathbf{M}_s = \gamma \mathbf{S} = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (7.27)$$

Μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο \mathbf{B}_0 παράλληλο με τον άξονα z ($\mathbf{B}_0 \parallel Oz$) η χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = -\hat{\mathbf{M}}_s \cdot \mathbf{B}_0 = g_s \mu_B B_0 \frac{S_z}{\hbar} \quad (7.28)$$

και τα πρόσθετα ενεργειακά επίπεδα, εξ αιτίας αυτής της αλληλεπίδρασης, είναι

$$E = g_s \mu_B B_0 m \quad (7.29)$$

Για να απλοποιήσουμε τη συζήτηση θα θεωρήσουμε στη συνέχεια την ειδική περίπτωση ενός σπιν $\frac{1}{2}$. Τότε, οι αντίστοιχες εκφράσεις για τη χαμιλτονιανή και τα ενεργειακά επίπεδα παίρνουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\omega_0 \hbar}{2} \hat{\sigma}_z \\ E_{\pm} &= \pm \frac{\omega_0 \hbar}{2} \end{aligned} \quad (7.30)$$

όπου



$$\omega_0 = \frac{g_s \mu_B B_0}{\hbar} = g_s \omega_L \quad (7.31)$$

με ω_L τη συχνότητα Larmor. Οι ιδιοκαταστάσεις της \hat{H} είναι προφανώς οι ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ και $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ του $\hat{\theta}_z$.

Έτσι, αν για $t=0$ η κατάσταση του συστήματός μας είναι η

$$|\psi(0)\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (7.32)$$

μετά από χρόνο t θα έχουμε

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega_0 t/2} |+\rangle + \beta e^{+i\omega_0 t/2} |-\rangle \quad (7.33)$$

Κλασικά, έχουμε ήδη δει ότι ένα μαγνητικό δίπολο μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο θα εκτελέσει μετάπτωση γύρω από τη διεύθυνση του πεδίου με γωνιακή συχνότητα ω_0 . Μια τεχνική, που επινοήθηκε από τον Rabi τη δεκαετία του 1930, επιτρέπει την ακριβή μέτρηση της συχνότητας ω_0 χάρη στο φαινόμενο του μαγνητικού συντονισμού. Τοποθετούμε το σύστημά μας μέσα σ' ένα πεδίο, που αποτελεί επαλληλία ενός ισχυρού πεδίου \mathbf{B}_0 κατά μήκος του άξονα Oz και ενός ασθενούς πεδίου \mathbf{B}_1 , που περιστρέφεται με (μεταβλητή) γωνιακή ταχύτητα ω πάνω στο επίπεδο xOy . Θα δούμε ότι, όταν η γωνιακή συχνότητα ω είναι κοντά στη γωνιακή συχνότητα ω_0 , το σύστημα διαταράσσεται σημαντικά και υπάρχει μεγάλη πιθανότητα μετάβασης από μια αρχική κατάσταση σε μια άλλη. Μέτρηση της συχνότητας συντονισμού επιτρέπει ακριβή μέτρηση των γυρομαγνητικών λόγων.

Η ολική χαμιλτονιανή είναι σ' αυτή την περίπτωση

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\hat{\mathbf{M}}_s \cdot \mathbf{B} = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} (B_0 \hat{S}_z + B_1 \hat{S}_x \cos \omega t + B_1 \hat{S}_y \sin \omega t) = \\ &= \frac{\omega_0 \hbar}{2} \hat{\theta}_z + \frac{\omega_1 \hbar}{2} (\hat{\theta}_x \cos \omega t + \hat{\theta}_y \sin \omega t) \end{aligned} \quad (7.34)$$

όπου έχουμε θέσει

$$\omega_0 = \frac{g_s \mu_B B_0}{\hbar} = g_s \omega_L, \quad \omega_1 = \frac{g_s \mu_B B_1}{\hbar} \quad (7.35)$$

Για την κατάσταση του συστήματός μας γράφουμε

$$|\psi(t)\rangle = \alpha_+(t) |+\rangle + \alpha_-(t) |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{pmatrix} \quad (7.36)$$

με

$$|\alpha_+(t)|^2 + |\alpha_-(t)|^2 = 1 \quad (7.37)$$



Η εξίσωση Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$ δίνει για τους συντελεστές $\alpha_{\pm}(t)$ το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (συμβολίζουμε $\dot{\alpha} \equiv \frac{d\alpha}{dt}$)

$$\begin{aligned} i \dot{\alpha}_+ &= \frac{\omega_0}{2} \alpha_0 + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} \alpha_- \\ i \dot{\alpha}_- &= -\frac{\omega_0}{2} \alpha_- + \frac{\omega_1}{2} e^{+i\omega t} \alpha_+ \end{aligned} \quad (7.38)$$

Με τους μετασχηματισμούς φάσης

$$b_+ = \alpha_+ e^{+i\omega t/2}, \quad b_- = \alpha_- e^{-i\omega t/2}, \quad (7.39)$$

το σύστημα γίνεται

$$\begin{aligned} i \dot{b}_+ &= -\frac{\omega - \omega_0}{2} b_+ + \frac{\omega_1}{2} b_- \\ i \dot{b}_- &= \frac{\omega - \omega_0}{2} b_- + \frac{\omega_1}{2} b_+ \end{aligned} \quad (7.40)$$

Από αυτό εύκολα προκύπτει ότι

$$\ddot{b}_{\pm} + \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 b_{\pm} = 0 \quad (7.41)$$

με

$$\Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2 \quad (7.42)$$

Με τις αρχικές συνθήκες $b_+(0) = 1$, $b_-(0) = 0$ (δηλαδή το σπιν για $t=0$ να είναι προσανατολισμένο κατά μήκος του θετικού άξονα $+Oz$), η λύση των εξισώσεων (7.41) είναι

$$\begin{aligned} b_+(t) &= \frac{\omega_1}{\Omega} \left[i \frac{\omega - \omega_0}{\omega_1} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \frac{\Omega}{\omega_1} \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] \\ b_-(t) &= -i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{aligned} \quad (7.43)$$

Η πιθανότητα, που έχει το σύστημά μας να βρεθεί τη χρονική στιγμή t στην κατάσταση $|-\rangle$ (δηλαδή το σπιν να προσανατολιστεί κατά μήκος του αρνητικού άξονα $-Oz$), είναι

$$\begin{aligned} P(|+\rangle \rightarrow |-\rangle) &= |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |\alpha_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{aligned} \quad (7.44)$$



Ο τύπος αυτός είναι ο γνωστός μας τύπος του Rabi, που έχουμε ήδη δει στο μείζερ αμμωνίας (βλ. σχέση (3.201)). Άλλωστε, ο αναγνώστης θα έχει προσέξει την ομοιότητα των παραπάνω υπολογισμών με εκείνους του μείζερ αμμωνίας (έχουμε και στις δύο περιπτώσεις ένα σύστημα δύο καταστάσεων). Η φυσική βέβαια των δύο περιπτώσεων είναι διαφορετική.

Από τις εκφράσεις (7.44) και (7.42) προκύπτει ότι υπάρχει συντονισμός για $\omega = \omega_0$, ενώ κοντά σ' αυτήν τη συχνότητα η μαγνητική ροπή ταλαντώνεται μεταξύ $+Oz$ και $-Oz$ με συχνότητα Ω . Οι γραφικές παραστάσεις των σχημάτων (3.26-3.27) αποδίδουν και εδώ το φαινόμενο του μαγνητικού συντονισμού, ο οποίος μας επιτρέπει μια πολύ ακριβή μέτρηση της συχνότητας συντονισμού ω_0 , που αντιστοιχεί στη διαφορά ενέργειας ανάμεσα στα δύο ενεργειακά επίπεδα Zeeman (7.30) του συστήματός μας :

$$\Delta E = E_+ - E_- = \hbar \omega_0 = g_s \mu_B B_0$$

Γενικότερα, για ατομικά συστήματα μη μηδενικής στροφορμής, μαγνητικός συντονισμός συμβαίνει όταν η συχνότητα του εφαρμοζόμενου εξωτερικού μαγνητικού πεδίου γίνεται ίση με τη συχνότητα, που αντιστοιχεί σε μια μετάβαση μεταξύ συγκεκριμένων ενεργειακών επιπέδων Zeeman. Η θεωρία τότε αντιστοιχεί στη διαπραγματεύση ενός συστήματος $(2j+1)$ εξισώσεων (και όχι δύο, όπως είχαμε εδώ για $j = \frac{1}{2}$).

Το φυσικό φαινόμενο, που μόλις περιγράψαμε, μας παρέχει μια μέθοδο για μια αρκετά ακριβή μέτρηση της μαγνητικής ροπής, μέσω μιας συσκευής που επινοήθηκε από τον Rabi. Η συσκευή του Rabi είναι ένας συνδυασμός δύο συσκευών τύπου Stern- Gerlach, μεταξύ των οποίων τοποθετείται ένας μαγνήτης με περιστρεφόμενο μαγνητικό πεδίο.

Αν και οι μαγνητικές ροπές των πυρήνων είναι μικρότερες από αυτές των ατόμων κατά m_e/m_p , πειράματα πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR = Nuclear Magnetic Resonance) είναι απόλυτα δυνατά και, μάλιστα, μεγάλης σπουδαιότητας. Η αρχή έγινε από τους Bloch και Purcell το 1945. Η συχνότητα συντονισμού καθορίζεται σ' αυτή την περίπτωση από την ένταση του στατικού μαγνητικού πεδίου B_0 μέσω της σχέσης $\omega_0 = g_s^N \mu_N B_0 / \hbar$, όπου μ_N η πυρηνική μαγνητόνη.

Οι εφαρμογές του μαγνητικού συντονισμού είναι αναρίθμητες σε πάμπολλες περιοχές της φυσικής (φυσική στερεάς κατάστασης, φυσική χαμηλών θερμοκρασιών), της χημείας και της βιοχημείας. Ιδιαίτερα, ο πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός έχει δημιουργήσει επανάσταση στη χημική ανάλυση και τον



προσδιορισμό της δομής των μορίων. Παράλληλα, έχει γίνει ένα χρησιμότερο εργαλείο στη μοριακή βιολογία βοηθώντας σημαντικά στην γνώση των μακρομορίων, ενώ αυξάνεται συνεχώς η χρήση του στην ιατρική και τη φυσιολογία για διαγνωστικούς σκοπούς.

7.3. Φορτισμένα σωματίδια μέσα σ' ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο-Μετασχηματισμοί βαθμίδας

Αν ένα φορτισμένο σωματίδιο φορτίου q κινείται μέσα σ' ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, εξασκείται πάνω του η δύναμη Lorentz

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \quad (7.45)$$

Οι εξισώσεις του ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E} και του μαγνητικού πεδίου \mathbf{B} εκφράζονται συναρτήσει των δυναμικών $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ και $\Phi(\mathbf{r},t)$ μέσω των σχέσεων

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned} \quad (7.46)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ είναι το ανυσματικό δυναμικό και $\Phi(\mathbf{r},t)$ το δυναμικό Coulomb. Θυμίζουμε ότι οι εξισώσεις Maxwell είναι (σύστημα Gauss-CGS)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho & \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \times \mathbf{B} &= +\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \end{aligned} \quad (7.47)$$

και ότι συνεπάγονται την εξίσωση συνέχειας (διατήρηση φορτίου)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (7.48)$$

όπου $\rho(\mathbf{r},t)$ και $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ είναι οι πυκνότητες φορτίου και ρεύματος, αντίστοιχα, από τις οποίες πηγάζουν το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο.

Στην κλασική φυσική, η κίνηση του φορτισμένου σωματιδίου περιγράφεται από τη χαμιλτονιανή

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\Phi \quad (7.49)$$

Η αντικατάσταση $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}$ είναι γνωστή σαν ελάχιστη ζεύξη. Η κανονική ορμή, που προκύπτει από την (7.49), είναι

$$\mathbf{p} = m \mathbf{v} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \quad (7.50)$$



Η μετάβαση στην κβαντική φυσική γίνεται αντικαθιστώντας τα φυσικά μεγέθη με τους τελεστές τους. Έτσι, η κβαντομηχανική χαμιλτονιανή είναι

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + q \hat{\Phi} \\ &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q \Phi\end{aligned}\quad (7.51)$$

Βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + q \Phi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{iq\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + q\Phi\end{aligned}\quad (7.52)$$

Είναι γνωστό ότι τα δυναμικά \mathbf{A} και Φ δεν είναι μοναδικά, αλλά εξαρτώνται από τη βαθμίδα (βλ. και παρακάτω). Είναι βολικό να θεωρήσουμε εδώ τη βαθμίδα Coulomb: $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Τότε έχουμε

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + q\Phi \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{q}{mc} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{p} + \frac{q^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2 + q\hat{\Phi}\end{aligned}\quad (7.53)$$

Οι μετασχηματισμοί βαθμίδας για τα \mathbf{A} και Φ , που αφήνουν αναλλοίωτη την ηλεκτροδυναμική, είναι ως γνωστόν

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \\ \Phi &\rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}\end{aligned}\quad (7.54)$$

όπου $\chi(\mathbf{r}, t)$ μια συνάρτηση των \mathbf{r}, t . Είναι φανερό τώρα ότι για να είναι η εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t)\quad (7.55)$$

αναλλοίωτη κάτω από τους μετασχηματισμούς βαθμίδας (7.54), πρέπει και η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ να μετασχηματίζεται ανάλογα. Ο μετασχηματισμός βαθμίδας για την $\Psi(\mathbf{r}, t)$, που αφήνει μαζί με τους (7.54) αναλλοίωτη την εξίσωση Schrödinger, είναι

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i q \chi(\mathbf{r}, t) / \hbar c} \Psi(\mathbf{r}, t)\quad (7.56)$$

Πράγματι, μπορούμε να δείξουμε ότι η εξίσωση

$$\hat{H}' \Psi'(\mathbf{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\mathbf{r}, t),\quad (7.57)$$

όπου η \hat{H}' εξαρτάται από τα \mathbf{A}', Φ' , συνεπάγεται την (7.55). Έτσι η (7.57) γράφεται



$$\left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right)^2 + q \left(\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \right] e^{iq\chi/\hbar c} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{iq\chi/\hbar c} \Psi) \quad (7.58)$$

ή ακόμη

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right)^2 e^{iq\chi/\hbar c} \Psi + \left(q\Phi - \frac{q}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) e^{iq\chi/\hbar c} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} e^{iq\chi/\hbar c} - \frac{q}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} e^{iq\chi/\hbar c} \Psi \quad (7.59)$$

$$\begin{aligned} \text{Ισχύει: } & \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right) e^{iq\chi/\hbar c} \Psi = \\ & = \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right) e^{iq\chi/\hbar c} \Psi = \\ & = e^{iq\chi/\hbar c} \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \end{aligned}$$

Δρώντας άλλη μια φορά με τον $\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right)$ έχουμε:

$$\begin{aligned} & \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right) e^{iq\chi/\hbar c} \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \\ & = e^{iq\chi/\hbar c} \left[-\hbar^2 \nabla^2 + \frac{2iq\hbar}{c} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{iq\hbar}{c} (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right] \Psi \end{aligned} \quad (7.60)$$

Συνεπώς, προκύπτει η εξίσωση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{iq\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + q\Phi \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (7.61)$$

που είναι ισοδύναμη με την εξίσωση (7.55)

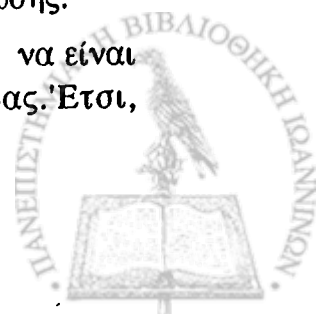
$$\hat{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi,$$

Βρήκαμε, λοιπόν, ότι κάτω από τους (τοπικούς) μετασχηματισμούς βαθμίδας

$$\begin{aligned} \mathbf{A} & \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \\ \Phi & \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \psi & \rightarrow \psi' = e^{iq\chi/\hbar c} \psi \end{aligned} \quad (7.62)$$

η εξίσωση Schrödinger (7.55) παραμένει αναλλοίωτη. Η λέξη "τοπικοί" σημαίνει απλά ότι η ποσότητα χ στο μετασχηματισμό φάσης (7.62) για την $\Psi(\mathbf{r}, t)$ είναι συνάρτηση της θέσης \mathbf{r} (και του χρόνου t). Τα παραπάνω αποτελούν ένα εξαιρετικά σημαντικό αποτέλεσμα, που αποδείχτηκε μια σπουδαία οδηγός αρχή στις σύγχρονες θεωρίες της σωματιδιακής φυσικής για τις βασικές αλληλεπιδράσεις της φύσης.

Θα πρέπει, βέβαια, η μέση τιμή κάθε μετρήσιμου φυσικού μεγέθους να είναι αναλλοίωτη κάτω από τους παραπάνω μετασχηματισμούς βαθμίδας. Έτσι,



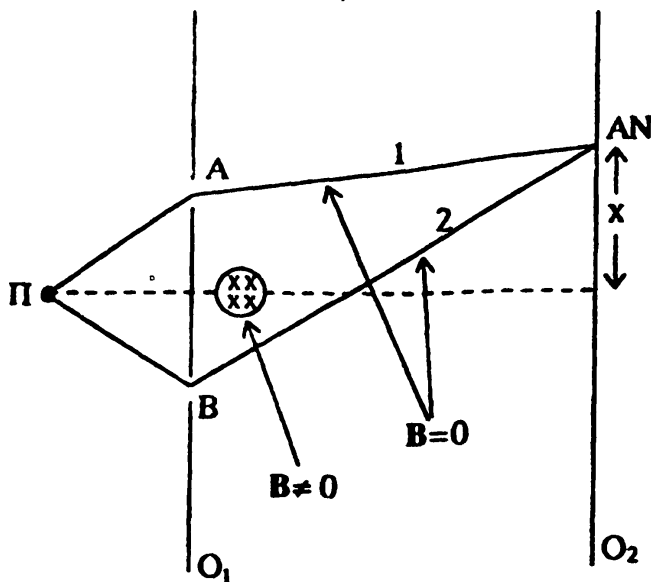
παραδείγματος χάρι, για τη μέση τιμή της μηχανικής ορμής $\pi = m v = (\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A})$ έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \pi \rangle_{\Psi'} &= \langle \Psi' | \hat{\pi} | \Psi' \rangle = \int \Psi'^* \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right) \Psi' d\tau \\ &= \int e^{-iq\chi/\hbar c} \Psi'^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \nabla \chi \right) e^{iq\chi/\hbar c} \Psi' d\tau \\ &= \int \Psi'^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \Psi' d\tau \\ &= \langle \Psi' | \hat{\pi} | \Psi' \rangle = \langle \pi \rangle_{\Psi'}, \end{aligned} \quad (7.63)$$

πράγμα που δεν ισχύει για τη μέση τιμή της κανονική ορμής \mathbf{p} . Αυτό σημαίνει ότι η μηχανική ορμή π μπορεί να χαρακτηριστεί σαν ένα "αληθινό" μετρήσιμο φυσικό μέγεθος, αντίθετα με την κανονική ορμή \mathbf{p} .

7.4. Φαινόμενο Aharonov-Bohm

Η κλασική φυσική μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει του ηλεκτρικού \mathbf{E} και του μαγνητικού \mathbf{B} πεδίου, απομακρύνοντας τελείως τα δυναμικά \mathbf{A} και Φ . Αυτό δεν μπορεί να συμβεί στην κβαντική φυσική, όπως καταδεικνύεται από το γεγονός ότι η χαμιλτονιανή \hat{H} εξαρτάται εκπεφρασμένα από τα δυναμικά. Το καθαρά κβαντομηχανικό φαινόμενο Aharonov-Bohm υπογραμμίζει



Σχ. 7.4. Διάταξη φαινομένου Aharonov-Bohm.

ακριβώς αυτήν την εξάρτηση της φυσικής από τα δυναμικά και είναι αυτό που θα περιγράψουμε στη συνέχεια.



Ας πάρουμε μια διάταξη όμοια μ' εκείνη του πειράματος των δύο οπών, στην οποία έχει προστεθεί ένα κυλινδρικό σωληνοειδές αμέσως πίσω από τις δύο οπές (σχήμα 7.4). Μέσα στο σωληνοειδές υπάρχει μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} \neq 0$ (κάθετο στο επίπεδο του σχήματος), έξω όμως από αυτό είναι $\mathbf{B}=0$, αλλά $\mathbf{A} \neq 0$. Πράγματι, το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα του ανυσματικού δυναμικού \mathbf{A} γύρω από ένα κλειστό δρόμο, που περιβάλλει το σωληνοειδές, είναι

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \int_S \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \quad (7.64)$$

όπου το επιφανειακό ολοκλήρωμα με βάση το θεώρημα Stokes είναι πάνω σε μια επιφάνεια που περιορίζεται από το δρόμο. Εάν ο δρόμος ολοκλήρωσης βρίσκεται έξω ολοκλήρου έξω από το σωληνοειδές, το ολοκλήρωμα (7.64) παριστάνει την ολική μαγνητική ροή Φ_B μέσα στον κύλινδρο, ανεξάρτητα από το δρόμο ολοκλήρωσης.

Ας θεωρήσουμε τώρα την κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου με φορτίο q , που κινείται από την πηγή Π μέσω μιας των δύο οπών μέχρι το σημείο ανίχνευσής του $\Lambda\mathbf{N}$. Θέλουμε να συγκρίνουμε τις φάσεις που προσλαμβάνει η κυματοσυνάρτηση λόγω της ύπαρξης μη μηδενικού \mathbf{A} και που υπολογίζονται κατά μήκος των δρόμων 1 και 2, οι οποίοι περνούν ορθογώνια προς το σωληνοειδές από αντίθετες πλευρές. Επειδή από τις περιοχές που διέρχεται το σωματίδιο είναι $\mathbf{B} = 0$, έπεται ότι σ' αυτές μπορούμε να γράψουμε $\mathbf{A} = \nabla\chi$ (οπότε $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$). Από τους μετασχηματισμούς βαθμίδας (7.62) συνάγεται τότε ότι η μεταβολή στη φάση της κυματοσυνάρτησης ανάμεσα στην αρχική (α) και την τελική (τ) θέση κατά μήκος ενός από τους δύο δρόμους είναι

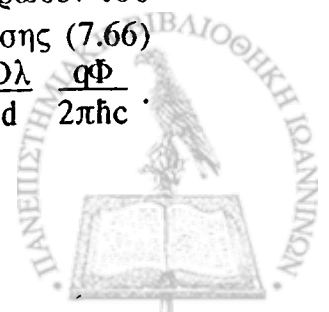
$$\frac{q}{\hbar c} \chi = \frac{q}{\hbar c} \int_{\alpha}^{\tau} \nabla \chi \cdot d\mathbf{r} = \frac{q}{\hbar c} \int_{\alpha}^{\tau} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (7.65)$$

Η διαφορά στις φάσεις για τους δρόμους 1 και 2 είναι, τότε,

$$\frac{q}{\hbar c} (\chi_1 - \chi_2) = \frac{q}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q}{\hbar c} \Phi_B \quad (7.66)$$

Έτσι, έχουμε το χαρακτηριστικό φαινόμενο ότι, αν και το σωματίδιο κινείται σε περιοχές όπου το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} είναι μηδενικό, υπάρχει ένα μη μηδενικό αποτέλεσμα του μαγνητικού πεδίου στην κυματοσυνάρτηση μέσω του ανυσματικού δυναμικού \mathbf{A} (και, κατ' επέκταση, της μαγνητικής ροής Φ_B , που εφράζεται βέβαια συναρτήσει του \mathbf{B}). Η διαφορά φάσης (7.66) μπορεί να μετρηθεί παρατηρώντας τη συμβολή των κυματοσυναρτήσεων για τους δύο δρόμους 1 και 2 εκατέρωθεν του σωληνοειδούς. Πράγματι, στο πείραμα των δύο οπών η διαφορά φάσης (7.66)

δημιουργεί μετατόπιση στο διάγραμμα συμβολής (βλ. §1.2) κατά $\delta s \approx \frac{D\lambda}{d} \frac{q\Phi}{2\pi\hbar c}$.



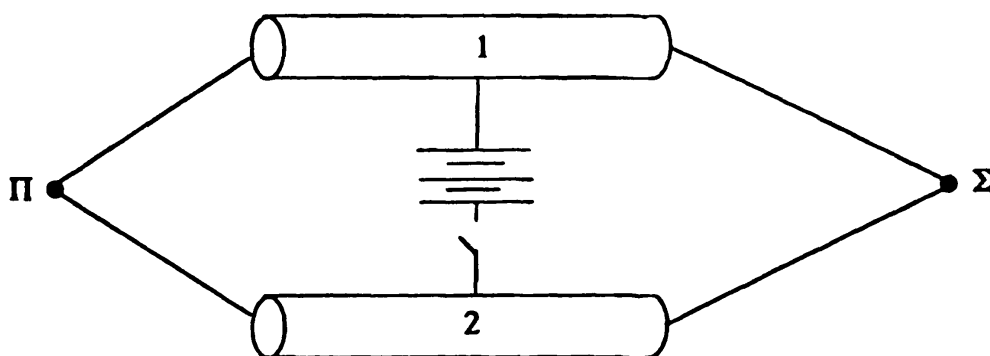
Το φαινόμενο αυτό επαληθεύτηκε πειραματικά από τον Chambers το 1960, αμέσως μετά την πρόβλεψή του από τον Aharonov και Bohm το 1959. Από τότε επαληθεύτηκε σε μια σειρά άλλων πειραμάτων.

Μια εξαιρετικά ενδιαφέρουσα συνέπεια της σχέσης (7.66) έγκειται στο γεγονός ότι, για ένα σωματίδιο που κινείται σε μια περιοχή με μηδενικά πεδία που όμως περικλείει μη μηδενική μαγνητική ροή, μόλις το σωματίδιο συμπληρώσει ένα κύκλο, η κυματοσυνάρτησή του αποκτά μια φάση που δίνεται από την (7.66). Απαιτώντας η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου να είναι μια μονότιμη συνάρτηση συνεπάγεται ότι η φάση αυτή πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του 2π , πράγμα που οδηγεί στην κβάντωση της μαγνητικής ροπής :

$$\Phi_B = \frac{2\pi\hbar c}{q} n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.67)$$

Το φαινόμενο αυτό έχει παρατηρηθεί κατά την κίνηση ηλεκτρονίων μέσα σ' ένα υπεραγώγιμο δακτύλιο, που περιβάλλει μια περιοχή μη μηδενικής μαγνητικής ροής (βλ. και §8.4).

Παρουσιάζει ενδιαφέρον να επεξεργαστεί κανείς το ανάλογο φαινόμενο για το βαθμωτό δυναμικό Φ . Μπορούμε να φανταστούμε δύο μακρείς παράλληλους μεταλλικούς κυλίνδρους (σχήμα 7.5), που διατηρούνται σε μια πεπερασμένη διαφορά δυναμικού, η οποία είναι συνάρτηση του χρόνου. Μια



Σχ. 7.5. Διάταξη για την ανίχνευση κβαντομηχανικής συμβολής λόγω διαφοράς δυναμικού.

δέσμη σωματιδίων Π , που μπορεί να παρασταθεί από ένα κυματοπακέτο με διαστάσεις πολύ μικρότερες από τις διαστάσεις των κυλίνδρων, πλησιάζει τους δύο κυλίνδρους, διαμοιράζεται σ' αυτούς, οπότε και δημιουργούμε τη διαφορά δυναμικού μεταξύ τους, και επανενώνεται στην περιοχή συμβολής Σ μετά που βγαίνει από αυτούς, οπότε και φανταζόμαστε ότι σβύνουμε τη διαφορά δυναμικού.



Για ένα δυναμικό $\Phi(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$, που είναι συνάρτηση του χρόνου, οι μετασχηματισμοί βαθμίδας (7.62) συνεπάγονται μια αλλαγή φάσης στην κυματοσυνάρτηση

$$\phi = -\frac{q}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\tau} \Phi(t) dt \quad (7.68\alpha)$$

Έτσι, στην περιοχή Σ θα δημιουργηθεί ένα κατ' αρχήν παρατηρήσιμο φαινόμενο συμβολής, που εξαρτάται από τη διαφορά στις φάσεις των κυματοσυναρτήσεων, η οποία είναι

$$\phi_1 - \phi_2 = -\frac{q}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\tau} [\Phi_2(t) - \Phi_1(t)] dt \quad (7.68\beta)$$

Να σημειωθεί ότι αυτή η διαφορά στις φάσεις προέκυψε παρά το γεγονός ότι πάνω στα σωματίδια κατά τη διαδρομή τους μέσα στους κυλίνδρους δεν εξασκείται δύναμη, γιατί εκεί το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} είναι μηδέν (δυναμικό χωρικά ομογενές εκεί). Έτσι, παρά το γεγονός ότι τα σωματίδια δεν υφίστανται την επίδραση κάποιας δύναμης, υπάρχει ένα κατ' αρχήν παρατηρήσιμο φαινόμενο που εξαρτάται από την εφαρμογή της διαφοράς δυναμικού $\Phi_2(t) - \Phi_1(t)$.

Πρέπει να τονίσουμε ότι τα παραπάνω φαινόμενα είναι καθαρά κβαντομηχανικά: στο όριο $\hbar \rightarrow 0$ τα σχετικά φαινόμενα συμβολής μηδενίζονται λόγω άπειρα γρήγορης ταλάντωσης των αντίστοιχων όρων συμβολής.

7.5. Φαινόμενο Zeeman

Η χαμιλτονιανή για το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου (φορτίο ηλεκτρονίου $q = -e$ και δυναμικό $\Phi = \frac{e}{r}$) γράφεται (βαθμίδα Coulomb)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \quad (7.69)$$

Για ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο μπορούμε να διαλέξουμε (πρόβλημα 7.4)

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (\nabla \cdot \mathbf{A} = 0) \quad (7.70)$$

Τότε, ο γραμμικός όρος (ονομάζεται παρομαγνητικός) δίνει

$$-\frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla = \frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} \cdot \mathbf{B}, \quad (7.71)$$



δηλαδή παριστάνει την αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου λόγω τροχιακής στροφορμής με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B}

$$H_L = -\mathbf{M}_L \cdot \mathbf{B} = \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} \cdot \mathbf{B} \quad (7.72)$$

Διαλέγοντας να είναι $\mathbf{B} \parallel \mathbf{Oz}$ ο όρος αυτός τροποποιεί τις ιδιοτιμές της ενέργειας του ατόμου του υδρογόνου σύμφωνα με τη σχέση

$$E = E_n + \mu_B B m_l \quad (7.73)$$

Ο τετραγωνικός όρος (ονομάζεται διαμαγνητικός) $\frac{e^2}{2mc^2} A^2$, για τις κατώτερες στάθμες του ατόμου του υδρογόνου και για ασθενή μαγνητικά πεδία \mathbf{B} το πολύ μέχρι μερικές δεκάδες Tesla, όπως συμβαίνει σε συνθήκες εργαστηρίου, είναι πολύ μικρότερος του γραμμικού όρου, που και αυτός με τη σειρά του είναι πολύ μικρότερος του $|E_n|$ (τυπικές τάξεις μεγέθους $10^{-8} : 10^{-4} : 1$). Γι' αυτό συνήθως τον αγνοούμε κάτω από τέτοιες συνθήκες. Όμως, υπάρχουν και φυσικά ενδιαφέρουσες περιπτώσεις που ο τετραγωνικός όρος είναι σημαντικός. Για παράδειγμα, στην αστροφυσική στην επιφάνεια των αστέρων νετρονίων είναι $B \approx 10^8 \text{ T}$ και τότε ο τετραγωνικός όρος δεν μπορεί να αγνοηθεί.

Αν συμπεριλάβουμε, τέλος, το σπιν του ηλεκτρονίου, τότε προστίθεται στη χαμιλτονιανή ο όρος

$$H_s = -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B} = 2\mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \cdot \mathbf{B} \quad (7.74)$$

και η αντίστοιχη πλήρης χαμιλτονιανή, γνωστή σαν χαμιλτονιανή Pauli, γίνεται

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \quad (7.75)$$

Για $\mathbf{B} \parallel \mathbf{Oz}$, η συνολική τροποποίηση των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι κατά συνέπεια

$$E = E_n + \mu_B (m_l + 2m_s) B = E_n + \hbar \omega_L (m_l + 2m_s) \quad (7.76)$$

Η (7.76) συνιστά το φαινόμενο Zeeman για το άτομο του υδρογόνου: μέσα σε μαγνητικό πεδίο για δοσμένο l κάθε στάθμη E_n διαχωρίζεται σε $(2l+1)$ στάθμες, λόγω του κβαντικού αριθμού m_l , και κάθε τέτοια νέα στάθμη σε άλλες δύο, λόγω του κβαντικού αριθμού $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Ανάλογο είναι το φαινόμενο Zeeman, που παρατηρείται στα φάσματα συνθετότερων ατόμων. Θα επανέλθουμε στο φαινόμενο Zeeman, όταν θα συζητήσουμε το ρεαλιστικό άτομο του υδρογόνου (βλ. § 9.4).



7.6. Κίνηση μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό και ηλεκτρικό πεδίο-Στάθμες Landau-Κβαντικό φαινόμενο Hall

Το πρόβλημα της κίνησης ενός ηλεκτρονίου μέσα σ' ένα σταθερό και ομογενές μαγνητικό πεδίο είναι ένα εξαιρετικά ενδιαφέρον θέμα. Στο πρόβλημα αυτό το φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας αποτελείται από ισάπεχουσες ενεργειακές στάθμες, που είναι άπειρα εκφυλισμένες. Αυτές είναι γνωστές σαν στάθμες Landau και βρίσκονται στη βάση του κβαντικού φαινομένου Hall.

Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι ($q=-e$ για το ηλεκτρόνιο)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 \quad (7.77)$$

Για το σταθερό μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = (0,0,B)$ εκλέγουμε τη βαθμίδα Landau (βλ. πρόβλημα 7.5), για την οποία είναι

$$\mathbf{A} = -B(y,0,0) \quad (7.78)$$

Τότε η χαμιλτονιανή (7.77) γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{p}_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_y^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_z^2 \quad (7.79)$$

Βλέπουμε, αμέσως, ότι έχουμε τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = 0 \quad (7.80)$$

και, συνεπώς, οι \hat{p}_x , \hat{p}_z και \hat{H} αποτελούν ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών. Ψάχνουμε λοιπόν, τότε, για λύσεις της εξίσωσης Schrödinger

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}), \quad (7.81)$$

που να έχουν τη μορφή (διαχωρισμός των μεταβλητών)

$$\psi_E(\mathbf{r}) = e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y) \quad (7.82)$$

Χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους

$$\omega = \frac{eB}{m_e c} = 2\omega_L, \quad y_0 = \frac{\hbar c k_x}{eB} = \frac{\hbar k_x}{m_e \omega}, \quad (7.83)$$

η εξίσωση Schrödinger (7.81) οδηγεί στην εξίσωση αρμονικού ταλαντωτή

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 (y-y_0)^2 \right] \phi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \right) \phi \quad (7.84)$$

- Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι, λοιπόν,



$$E_{n,kz} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} = \hbar \omega_L (2n+1) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \quad (7.85)$$

Αν λάβουμε υπ' όψη μας και το σπιν του ηλεκτρονίου, έχουμε

$$E_{n,kz} = \hbar \omega_L (2n + 2m_s + 1) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \quad (7.85\alpha)$$

Οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\Psi_{n,k_x, k_z} = N_n e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-(y-y_0)^2/2\lambda^2} H_n \left(\frac{y-y_0}{\lambda} \right), \quad (7.86)$$

όπου η παράμετρος

$$\lambda = \left(\frac{\hbar}{m_e \omega} \right)^{1/2} = \left(\frac{\hbar c}{eB} \right)^{1/2} \quad (7.87)$$

είναι γνωστή σαν μαγνητικό μήκος.

Για δοσμένη τιμή του k_x , η κυματοσυνάρτηση (7.82) είναι εντοπισμένη πάνω στον άξονα y , αλλά όχι πάνω στον άξονα x , παρά το γεγονός ότι οι δύο διευθύνσεις θα έπρεπε να είναι ισοδύναμες. Όμως, όπως έχουμε δει, τα ενεργειακά επίπεδα δεν εξαρτώνται από το k_x και, συνεπώς, είναι άπειρα εκφυλισμένα. Θα μπορούσε, βέβαια, κανείς να θεωρήσει κυματοπακέτα της μορφής

$$\Psi_{n,k_z} = \int_{-\infty}^{\infty} N_n e^{i(k_x x + k_z z)} \phi_{k_x}(y) c(k_x) dk_x \quad (7.88)$$

και να διαλέξει τη συνάρτηση $c(k_x)$, έτσι ώστε η λύση (7.88) για την εξίσωση Schrödinger (7.81) να είναι εντοπισμένη και πάνω στον άξονα x . Αυτές οι δέσιμες καταστάσεις στο επίπεδο $x-y$ δεν περιορίζονται στην κατεύθυνση z του μαγνητικού πεδίου B . Η φυσική εικόνα γίνεται τότε καθαρή. Η κίνηση του ηλεκτρονίου είναι όπως στην κλασική περίπτωση: κινείται με σταθερή ταχύτητα παράλληλα στο μαγνητικό πεδίο, ενώ συγχρόνως περιστρέφεται κάθετα σ' αυτό (ελικοειδής κίνηση). Μόνο η θέση του κέντρου της τροχιάς παραμένει απροσδιόριστη.

Όπως σημειώσαμε ήδη, το παραπάνω πρόβλημα παίζει σημαντικό ρόλο στην κατανόηση του κβαντικού φαινομένου Hall (βλ. παρακάτω), καθώς επίσης και στα ενεργειακά επίπεδα ατόμων μέσα σε υπερισχυρά μαγνητικά πεδία. Ο όρος υπερισχυρά μαγνητικά πεδία σημαίνει τόσο ισχυρά, έτσι ώστε οι τροχιές να συρρικνώνονται στην τάξη μεγέθους των ακτίνων Bohr, δηλαδή θα πρέπει

$$R_0 = \left(\frac{\hbar \omega}{m_e \omega^2} \right)^{1/2} \leq \alpha_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad (7.89)$$



απ' όπου προκύπτει

$$B \geq \frac{m_e^2 e^3 c}{\hbar^3} \approx 10^6 \text{ T} \quad (7.90)$$

Μέσα σε τόσο ισχυρά μαγνητικά πεδία όλοι οι όροι της αντίστοιχης χαμιλτονιανής, συμπεριλαμβανομένου του τετραγωνικού, είναι σημαντικοί, ενώ τα άτομα γίνονται περισσότερο "κυλινδρικά" παρά "σφαιρικά" σε σχήμα.

Το φαινόμενο Hall (που παρατηρήθηκε για πρώτη φορά το 1879) συμβαίνει όταν σ' ένα αγωγό ή ημιαγωγό μέσο, στο οποίο υπάρχει ρεύμα λόγω ενός εφαρμοζόμενου ηλεκτρικού πεδίου, εφαρμόζεται ένα εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο.

Τότε προκύπτει ένα ρεύμα Hall κάθετο τόσο στο ηλεκτρικό, όσο και στο μαγνητικό πεδίο. Θα μελετήσουμε, εδώ, ένα μοντέλο γι αυτό το φαινόμενο, θεωρώντας την απλουστευμένη περίπτωση ενός ηλεκτρονίου στο κενό.

Η χαμιλτονιανή είναι εδώ

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 - e\Phi \quad (7.91)$$

Για το σταθερό και ομογενές μαγνητικό $\mathbf{B} = (0,0,B)$ και ηλεκτρικό $\mathbf{E} = (0,\mathcal{E},0)$ πεδίο εκλέγουμε πάλι τη βαθμίδα Landau, οπότε είναι

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= -B(y,0,0) \\ \Phi &= -\mathcal{E}y \end{aligned} \quad (7.92)$$

Τότε η χαμιλτονιανή γίνεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{p}_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_y^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_z^2 + e\mathcal{E}y \quad (7.93)$$

Έχουμε ξανά εδώ

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = 0 \quad (7.94)$$

και, συνεπώς, γράφουμε πάλι

$$\psi_{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y) \quad (7.95)$$

Η εξίσωση Schrödinger οδηγεί στην εξίσωση αρμονικού ταλαντωτή

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 (y - y_0 + y_1)^2 \right] \phi &= \\ = \left[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 (y_1^2 - 2y_1 y_0) \right] \phi & \end{aligned} \quad (7.96)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την επί πλέον παράμετρο



$$y_1 = \frac{e\mathcal{E}}{m_e \omega^2} \quad (7.97)$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$E_{n,k_x, k_z} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} - \frac{1}{2} m_e \omega^2 (y_1^2 - 2y_1 y_0) \quad (7.98)$$

και οι ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{n,k_x, k_z} = N_n e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-(y-y_0+y_1)^2/2\lambda^2} H_n \left(\frac{y-y_0+y_1}{\lambda} \right) \quad (7.99)$$

Η ποσότητα, που έχει ενδιαφέρον, είναι η πυκνότητα (ηλεκτρικού) ρεύματος

$$J_{n,k_x, k_z} = (-e) \frac{i\hbar}{2m_e} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (7.100)$$

Η y -συνιστώσα J_y είναι προφανώς μηδέν και για τις άλλες δύο συνιστώσες βρίσκουμε

$$\begin{aligned} J_x(y) &= -\frac{e\hbar k_x}{m_e} |\phi_n(y)|^2 \\ J_z(y) &= -\frac{e\hbar k_z}{m_e} |\phi_n(y)|^2 \end{aligned} \quad (7.101) \leftrightarrow$$

Ολοκληρώνοντας πάνω στην y -συντεταγμένη και χρησιμοποιώντας τη σχέση

κανονικοποίησης $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(y)|^2 dy = 1$, παίρνουμε για το ολικό ρεύμα

$$\begin{aligned} J_x &= \int_{-\infty}^{\infty} J_x(y) dy = -\frac{e\hbar k_x}{m_e} \\ J_z &= \int_{-\infty}^{\infty} J_z(y) dy = -\frac{e\hbar k_z}{m_e} \end{aligned} \quad (7.102)$$

Οι $\hbar k_x$ και $\hbar k_z$ είναι οι x - και z - συνιστώσες της ορμής, αντίστοιχα. Συνεπώς, τα παραπάνω αποτελέσματα συμπίπτουν και εδώ με τ' αντίστοιχα κλασικά.

Ως γνωστόν, η τάση που αναπτύσσεται στο φαινόμενο Hall - τάση Hall V_H - είναι

$$V_H = \frac{I B}{nedc} \quad (7.103)$$



όπου I το ρεύμα Hall, d το πάχος του κρυστάλλου που χρησιμοποιείται και n η πυκνότητα των ηλεκτρικών φορέων. Η αντίσταση Hall R_H είναι τότε

$$R_H = \frac{B}{nedc} \quad (7.104)$$

Το 1980 οι von Klitzing, Dorda και Pepper κάνοντας μετρήσεις σε ορισμένο ημιαγωγό μέσο σε χαμηλή θερμοκρασία (περίπου $2 \text{ }^\circ\text{K}$) και με ισχυρό μαγνητικό πεδίο (περίπου 15T) παρατήρησαν ορισμένα επίπεδα τμήματα - "πλατώ" στην τάση Hall, με αντίστοιχες τιμές της αντίστασης Hall

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2} \quad (7.105)$$

όπου $\nu = 1, 2, 3, \dots$. Αυτό το αποτέλεσμα είναι γνωστό σαν (ακέραιο) κβαντικό φαινόμενο Hall. Είναι αξιοσημείωτο ότι η αντίσταση Hall (7.105) δεν εξαρτάται από τις ιδιότητες του υλικού. Για $\nu = 1$ η λεγόμενη αντίσταση von Klitzing R_K είναι

$$R_K = \frac{h}{e^2} = 25\,813 \text{ } \Omega \quad (7.106)$$

Η πειραματική τεχνική του προσδιορισμού της αντίστασης Hall είναι τόσο ακριβής ώστε το 1990 ένας νέος ορισμός του Ohm υιοθετήθηκε:

$$R_K = 25\,812.807 \text{ } \Omega \quad (7.107)$$

Το κβαντικό φαινόμενο Hall μπορεί να εξηγηθεί με βάση το γεγονός ότι το ρεύμα περιορίζεται σ' ένα λεπτό στρώμα πυριτίου, συστατικού του ημιαγωγού μέσου. Τα ηλεκτρόνια κινούνται τότε ουσιαστικά σε δύο διαστάσεις (βλ. σχέση (7.88)) και τα ενεργειακά τους επίπεδα είναι οι στάθμες Landau (βλ. σχέση (7.85)). Από τη σχέση (7.101), αν λάβουμε υπ' όψη ότι η ταχύτητα τριβής $\frac{\hbar k_x}{m_e}$ στο φαινόμενο

Hall είναι $-\frac{c\mathcal{E}}{B}$ και ότι κάθε στάθμη Landau καταλαμβάνεται από $\frac{eB}{ch}$ ηλεκτρόνια ανά μονάδα επιφάνειας (βλ. σχέση (7.87)), προκύπτει ότι κάθε μια πλήρης στάθμη Landau συνεισφέρει μια πυκνότητα ρεύματος ίση με

$$J_x = e \frac{c\mathcal{E}}{B} \frac{eB}{ch} = \frac{e^2}{h} \mathcal{E} \quad (7.108)$$

σε μια διεύθυνση κάθετη στο ηλεκτρικό πεδίο. Αυτό σημαίνει ότι η αγωγιμότητα Hall θα είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $\frac{e^2}{h}$, αν όλες οι στάθμες Landau είναι είτε πλήρως κατειλημμένες είτε εντελώς άδειες, όπως μπορεί να συμβαίνει σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. Αντιστρέφοντας, προκύπτει η αντίσταση Hall (7.105).



Μπορούμε, πάντως, να χρησιμοποιήσουμε ένα απλούστερο μοντέλο για να καταλάβουμε τη σχέση (7.105). Η συνθήκη κβάντωσης Bohr - Sommerfeld (βλ. (E.9) και (9.111) αργότερα) για ένα ηλεκτρόνιο που περιορίζεται να κινείται σε μια κυκλική τροχιά μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο γράφεται με βάση και τη σχέση (7.67) για την κβάντωση της μαγνητικής ροής

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \nu h = \frac{e \Phi_B}{c} \quad (7.109)$$

όπου ν θετικός ακέραιος και Φ_B η μαγνητική ροή δια μέσου του κύκλου ακτίνας r . Είναι

$$\Phi_B = \pi r^2 B = \pi \left(\frac{pc}{eB} \right)^2 B = \pi r^2 \frac{c}{e^2 B} \quad (7.110)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση $p = e\hbar k$. Ο αριθμός των καταστάσεων ανά μονάδα επιφάνειας n_2 (το διδιάστατο ανάλογο του n) είναι (βλ. §3.7)

$$n_2 = \frac{\pi p^2}{h^2} \quad (7.111)$$

και, συνεπώς,

$$n_2 = \frac{veB}{c h} \quad (7.112)$$

Όμοια, το διδιάστατο ανάλογο της (7.104) για την αντίσταση Hall θα είναι

$$R_H = \frac{B}{n_2 e c} \quad (7.113)$$

Από τις (7.112) και (7.113) προκύπτει η αντίσταση Hall (7.105) του κβαντικού φαινομένου Hall.

Όπως έγινε αμέσως αντιληπτό, μέτρηση της αντίστασης Hall στο κβαντικό φαινόμενο Hall επιτρέπει ένα πολύ ακριβή προσδιορισμό της σταθεράς λεπτής υφής των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{2\pi}{\nu c R_H} \quad (7.114)$$

Τέλος, το 1982 οι Tsui, Störmer και Gossard ανακάλυψαν ένα νέο απροσδόκητο φαινόμενο. Μελετώντας το κβαντικό φαινόμενο Hall στην διεπιφάνεια δύο ορισμένων ημιαγωγών κρυστάλλων παρατήρησαν ένα πρόσθετο "πλατώ" στην αντίσταση Hall (7.105), που αντιστοιχεί σε τιμή $\nu = \frac{1}{3}$. Το αναπάντεχο αυτό αποτέλεσμα ονομάζεται κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall και παρατηρήθηκε και για άλλες τιμές του ν (π.χ. $\nu = \frac{2}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{4}{5}, \frac{2}{7}$). Η εξήγηση του κλασματικού

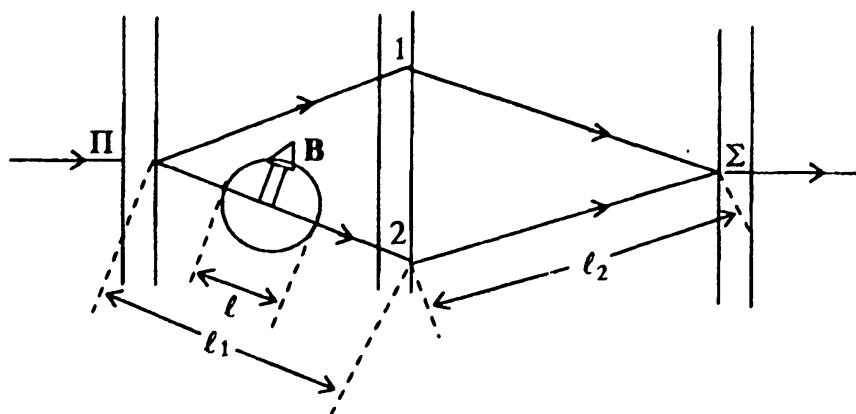


κβαντικού φαινομένου Hall αποτελεί πεδίο συνεχιζόμενης, πολύ ενδιαφέρουσας, έρευνας.

7.7. Συμβολόμετρο νετρονίων

Το συμβολόμετρο νετρονίων αποτελεί μια συσκευή με την οποία διαμοιράζεται μια μονοενεργητική δέσμη θερμικών νετρονίων σε δύο διάκριτες δέσμες, οι οποίες στη συνέχεια επανενώνονται σε μια περιοχή συμβολής (σχήμα 7.6). Ο διαμοιρασμός και η επανένωση της δέσμης των νετρονίων γίνεται με κρυστάλλους πυριτίου σύμφωνα με το γνωστό νόμο Bragg $2d \sin \theta = m\lambda$. Στη σχέση αυτή d είναι η απόσταση των ατομικών επιπέδων, θ η γωνία πρόσπτωσης της δέσμης νετρονίων, λ το μήκος κύματος de Broglie των νετρονίων και m (μικρός) ακέραιος αριθμός. Θέτοντας μια τυπική τιμή $\lambda \approx d \approx 15 \text{ \AA}$, βρίσκουμε ότι τα νετρόνια που θα χρησιμοποιηθούν έχουν τυπική ταχύτητα $v = \frac{2\pi\hbar}{m_n\lambda} \approx 2.3 \text{ km sec}^{-1}$

και κινητική ενέργεια $E = \frac{1}{2} m_n v^2 \approx 24 \text{ meV}$. Η τιμή αυτή από τη σχέση $E = kT$ (k σταθερά Boltzmann) αντιστοιχεί σε θερμοκρασία $T = 288 \text{ }^\circ\text{K}$, η οποία είναι της τάξης της θερμοκρασίας δωματίου, απ' όπου και η ονομασία θερμικά νετρόνια. Στη μια από τις δύο δέσμες, στις οποίες διαχωρίζεται η αρχική δέσμη νετρονίων, υπάρχει η δυνατότητα εφαρμογής ενός μαγνητικού πεδίου **B**.



Σχ. 7.6. Συμβολόμετρο νετρονίων

Το συμβολόμετρο νετρονίων έχει χρησιμοποιηθεί από τα μέσα της δεκαετίας του 1970 για να δείξει δύο χαρακτηριστικά φαινόμενα κβαντικής συμβολής: κβαντική συμβολή που επάγεται από το πεδίο βαρύτητας και κβαντική συμβολή λόγω περιστροφής ενός σπιν $\frac{1}{2}$ (όταν εφαρμοστεί μαγνητικό πεδίο).



Ας περιγράψουμε πρώτα πως μπορεί κανείς να δει τον τρόπο με τον οποίο εμφανίζεται κατά ένα μετρήσιμο ποσό η βαρύτητα στην κβαντική μηχανική (βλ. και πρόβλημα 3.6 και 9.6). Κατ' αρχήν, η εξίσωση Schrödinger για ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο πεδίο βαρύτητας θα είναι

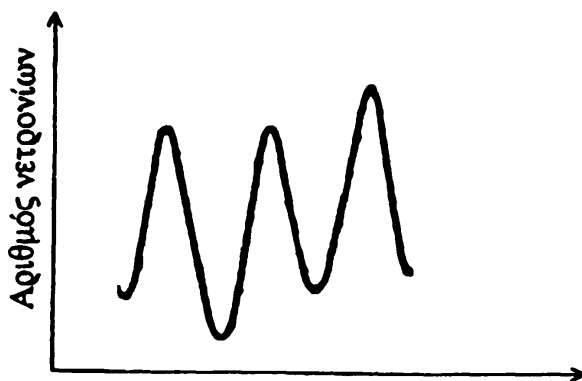
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + m\Phi_{\text{βαρ}} \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (7.115)$$

Γίνεται αμέσως φανερό ότι σε αντίθεση με την εξίσωση Newton $m\ddot{\mathbf{r}} = -m\nabla\Phi_{\text{βαρ}} = -mg\hat{z}$ όπου η μάζα απαλείφεται, στην κβαντική μηχανική κάτι τέτοιο δεν συμβαίνει. Μάλιστα εδώ η μάζα εμφανίζεται με το συνδυασμό \hbar/m , κάτι που σημαίνει ότι κάθε φορά που εμφανίζεται το \hbar περιμένουμε να εμφανιστεί και το m . Εκεί που συμβαίνει να έχουμε ένα μη τετριμένο υπολογίσιμο φαινόμενο είναι στο συμβολόμετρο νετρονίων. Ας υποθέσουμε ότι το επίπεδο (Π1Σ2) αρχικά είναι οριζόντιο και αντιστοιχεί σε δυναμικό $V_{\text{βαρ}} = 0$. Ας κάνουμε τώρα μια στροφή του επιπέδου (Π1Σ2) κατά γωνία α γύρω από τον άξονα (Π2), έτσι ώστε το δυναμικό για ένα νετρόνιο στο επίπεδο (1Σ) να είναι κατά $m_n g l_2 \sin\alpha$ μεγαλύτερο από εκείνο του επιπέδου (Π2). Επειδή ο τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, καταλαβαίνουμε αμέσως ότι θα υπάρχει μια διαφορά φάσης στις κυματοσυναρτήσεις ψ_1, ψ_2 του κυματοπακέτου για τις δύο δέσμες, που ξεκινώντας από το Π ακολουθούν τους δρόμους 1 και 2 και φθάνουν στην περιοχή συμβολής Σ:

$$\psi_1 = \exp \left\{ -\frac{i m_n g l_2 \sin\alpha \Delta t}{\hbar} \right\} \psi_2 \quad (7.116)$$

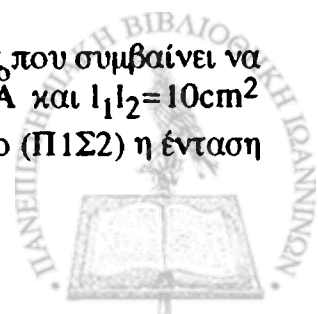
όπου $\Delta t = \frac{l_1}{v_{\text{αμ}}} = \frac{m_n \lambda l_1}{2\pi\hbar}$ ο χρόνος που χρειάζεται το κυματοπακέτο να διανύσει την απόσταση (1Σ). Συνεπώς, έχουμε διαφορά φάσης στην περιοχή συμβολής

$$\Delta\phi = -\frac{m_n^2 g l_1 l_2 \lambda \sin\alpha}{2\pi\hbar^2} \quad (7.117)$$



Σχ. 7.7. Φαινόμενα κβαντικής συμβολής στο συμβολόμετρο νετρονίων

Το ενδιαφέρον με τον τύπο (7.117) είναι ότι τα μεγέθη είναι τέτοια που συμβαίνει να δίνουν ένα παρατηρήσιμο φαινόμενο στη συμβολή: για $\lambda = 1.42 \text{ \AA}$ και $l_1 l_2 = 10 \text{ cm}^2$ είναι $m_n g l_1 l_2 \lambda / 2\pi\hbar^2 = 55.6$, οπότε καθώς περιστρέφεται το επίπεδο (Π1Σ2) η ένταση



της δέσμης στη περιοχή συμβολής παρουσιάζει χαρακτηριστικά μέγιστα και ελάχιστα (σχήμα 7.7). Τα πειράματα επαληθεύουν την πρόβλεψη σε ποσοστό 1%.

Ας έρθουμε τώρα να δούμε το πειράματα που χρησιμοποιούν το συμβολόμετρο νετρονίων για να μελετήσουν την περιστροφή ενός σπιν $\frac{1}{2}$. Ο προσανατολισμός του σπιν δεν μεταβάλλεται με την αλλαγή της κατεύθυνσης διάδοσης των νετρονίων στο συμβολόμετρο. Για να πετύχουμε περιστροφή του σπιν, τοποθετούμε τμήμα της μιας από τις δύο δέσμες μέσα σε στατικό μαγνητικό πεδίο (σχήμα 7.6). Σαν αποτέλεσμα, το καταστατικό διάνυσμα ενός νετρονίου, που διέρχεται από την περιοχή με $\mathbf{B} \neq 0$, υφίσταται μια μεταβολή φάσης που είναι (σε αναλογία με την σχέση (7.33)).

$$|\psi(\mathbf{B} \neq 0)\rangle = e^{\mp i \omega T/2} |\psi(\mathbf{B} = 0)\rangle \quad (7.118)$$

όπου $T = \frac{m_n l \lambda}{2\pi \hbar}$ ο χρόνος που χρειάζεται το νετρόνιο να διανύσει την απόσταση l όπου $\mathbf{B} \neq 0$ και

$$\omega = \frac{g_s^n e B}{2m_p c}, \quad (g_s^n = -3.92) \quad (7.119)$$

η συχνότητα της μεταπτωτικής κίνησης του σπιν μέσα στο μαγνητικό πεδίο. Έτσι, η διαφορά φάσης για τις δύο δέσμες που συμβάλλουν στο σημείο Σ είναι

$$\Delta\phi = \mp \frac{\omega T}{2} = \mp \frac{g_s^n e B l \lambda}{2\pi \hbar c} \quad (7.120)$$

Μεταβάλλοντας την ένταση του μαγνητικού πεδίου B , μεταβάλλουμε τη διαφορά φάσης $\Delta\phi$ και, συνεπώς, την ένταση της δέσμης στην περιοχή συμβολής Σ . Αν είναι ΔB η μεταβολή στο B που χρειάζεται για να παραχθούν δύο διαδοχικά μέγιστα (ή ελάχιστα), το πείραμα δείχνει (βλ. πάλι σχήμα 7.7) ότι με ακρίβεια κλάσματος του 1% αυτό αντιστοιχεί σε διαφορά φάσης $\Delta\phi = 4\pi$:

$$\Delta B = 4\pi \frac{2\pi \hbar c}{g_s^n e B l \lambda} \quad (7.121)$$

Το γεγονός αυτό αποτελεί ένα εξαιρετικά μη τετριμένο αποτέλεσμα: συνεπάγεται ότι το καταστατικό διάνυσμα ket για ένα σύστημα με σπιν $\frac{1}{2}$ χρειάζεται μια περιστροφή κατά 4π (και όχι 2π !) για να επανέλθει στην αρχική του τιμή με το ίδιο πρόσημο (εξ ίσου καθαρά φαίνεται η γνήσια κβαντική αυτή ιδιότητα του σπιν $\frac{1}{2}$ στο πρόβλημα 7.3).



Προβλήματα

7.1. Θεωρούμε ένα άτομο υδρογόνου στην κατάσταση $2p$ (χωρίς να λάβουμε υπ όψη το σπιν του ηλεκτρονίου). Τοποθετούμε το άτομο μέσα σε μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} \parallel \mathbf{Oz}$, οπότε η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι $W = -\mathbf{M}_L \cdot \mathbf{B} = \omega_L m \hbar$. Ας συμβολίσουμε με $|\psi_+\rangle$, $|\psi_0\rangle$, $|\psi_-\rangle$ τις ιδιοκαταστάσεις με $m = +1, 0, -1$, αντίστοιχα.

i) Να υπολογιστούν τα ενεργειακά επίπεδα του συστήματος.

ii) Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle E \rangle$ και $\langle E^2 \rangle$ και η αβεβαιότητα $(\Delta E)^2$ ως προς την κατάσταση

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|\psi_+\rangle + \sqrt{2} |\psi_0\rangle + |\psi_-\rangle)$$

iii) Να βρεθεί η $|\psi(t)\rangle$ τη χρονική στιγμή t , αν $|\psi(0)\rangle = |\psi_1\rangle$

iv) Χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση με πίνακες στη βάση $|\psi_+\rangle$, $|\psi_0\rangle$, $|\psi_-\rangle$, όπου ο \hat{L}_z είναι διαγώνιος, ναδειχθεί ότι

$$\langle \psi(t) | \hat{L}_z | \psi(t) \rangle = 0$$

$$\langle \psi(t) | \hat{L}_x | \psi(t) \rangle = \hbar \cos \omega_L t$$

$$\langle \psi(t) | \hat{L}_y | \psi(t) \rangle = \hbar \sin \omega_L t$$

Να ερμηνευτεί το αποτέλεσμα.

7.2. Να υπολογιστούν οι μεσές τιμές $\langle \hat{M}_{sx} \rangle$, $\langle \hat{M}_{sy} \rangle$, $\langle \hat{M}_{sz} \rangle$ της μαγνητικής ροπής \mathbf{M}_s ως προς την κατάσταση $|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega_0 t/2} |+\rangle + \beta e^{+i\omega_0 t/2} |-\rangle$. Να συζητηθεί η εξάρτησή τους από το χρόνο.

7.3. Αν για $t=0$ η κατάσταση ενός συστήματος είναι η ιδιοκατάσταση $|+\rangle_x$ του \hat{S}_x , ναδειχθεί ότι μετά από χρόνο $t = 2\pi/\omega_0$ η $|\psi(t)\rangle$ παραμένει μεν ιδιοκατάσταση του \hat{S}_x με την ίδια ιδιοτιμή $+\frac{\hbar}{2}$, έχει όμως αλλάξει πρόσημο: $|\psi(t)\rangle = -|\psi(0)\rangle$. Ναδειχθεί, συνεπώς, ότι μόνο περιστροφές κατά $4n\pi$ (n =ακέραιος) αφήνουν αναλλοίωτη την αρχική κατάσταση του συστήματός μας. Ναδειχθεί, επίσης, ότι σε μια οποιαδήποτε χρονική στιγμή t η $|\psi(t)\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του τελεστή $\hat{S}_\phi = \hat{S}_x \cos \phi + \hat{S}_y \sin \phi$ (βλ. πρόβλημα 5.9) με $\phi = \omega_0 t$.



Ας σημειωθεί ότι μπορούμε να καταλήξουμε στο ίδιο συμπέρασμα θεωρώντας την εξάρτηση $e^{im\phi}$ των ιδιοσυναρτήσεων της στροφορμής με $m=1/2$. Το γεγονός ότι, αντίθετα με την κοινή αίσθηση, μια περιστροφή κατά 2π ενός συστήματος σπιν $\frac{1}{2}$ δεν επαναφέρει το σύστημά μας στην αρχική κατάσταση (πράγμα που όπως είδαμε στην §7.7 έχει αποδειχθεί πειραματικά), δείχνει ακριβώς ότι η ιδιοστροφορμή είναι μια καθαρά κβαντική ποσότητα.

7.4. Θεωρούμε ένα φορτισμένο σωματίδιο μάζας m και φορτίου q μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο.

i) Ναδειχθεί ότι η εξίσωση συνέχειας είναι

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

$$\text{όπου } P = \hbar\psi^2, \quad \mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - \frac{q}{mc} \mathbf{A} \hbar\psi^2$$

Είναι τα P, J αναλλοίωτα κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας;

ii) Ναδειχθούν οι σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = \frac{i\hbar q}{c} \epsilon_{ijk} \hat{B}_k$$

και οι εξισώσεις κίνησης

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i \right)$$

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{d\pi_i}{dt} = q \left\{ E_i + \frac{1}{2c} \left[\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \right)_i - \left(\mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right)_i \right] \right\}$$

Χρήσιμη σχέση: $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$

7.5. Θεωρούμε ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} .

i) Ναδειχθεί ότι μπορούμε να διαλέξουμε το ανυσματικό δυναμικό σαν

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

και ότι αυτό αντιστοιχεί στη βαθμίδα Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

Χρήσιμες ανυσματικές ταυτότητες:

$$\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\nabla \times \mathbf{a}) - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$$



$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{a}(\nabla \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{a}) + (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b}$$

ii) Αν είναι $\mathbf{B} \parallel Oz$ και γράψουμε

$$\mathbf{B} = (0, 0, B),$$

οπότε έχουμε

$$\mathbf{A} = -\frac{B}{2}(y, -x, 0) \quad (\text{βαθμίδα Coulomb}),$$

να δειχθεί χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση βαθμίδας $\chi = -\frac{B}{2}xy$ ότι μια εξίσου καλή εκλογή δυναμικού είναι η λεγόμενη βαθμίδα Landau

$$\mathbf{A}' = -B(y, 0, 0) \quad (\text{βαθμίδα Landau}).$$

Οποιαδήποτε μορφή δυναμικού χρησιμοποιήσουμε στους υπολογισμούς ενός προβλήματος, τα φυσικά αποτελέσματα θα πρέπει βέβαια να είναι τα ίδια.

7.6. i) Να υπολογιστούν οι μέσες τιμές $\langle \frac{p^2}{2m} \rangle$ και $\langle \frac{e^2 A^2}{2mc^2} \rangle$ ως προς την κατάσταση $|1s\rangle$ του ατόμου του υδρογόνου.

ii) Να υπολογιστεί προσεγγιστικά το σχετικό μέγεθος των όρων $|E_n|$, παραμαγνητικού και διαμαγνητικού για μαγνητικά πεδία

$$B \approx 1 \text{ T} = \frac{c}{e} \times 1 \text{ eV m}^{-2} \text{ sec}$$

και διαστάσεις $r \approx a_0$.

7.7. Να μελετηθεί το πρόβλημα των σταθμών Landau στη βαθμίδα Coulomb $\mathbf{A} = -\frac{B}{2}(y, -x, 0)$ (βλ. πρόβλημα 7.5). Συγκεκριμένα,

i) Να δειχθεί ότι η χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + \frac{qB}{c} (yp_x - xp_y) + \frac{q^2 B^2}{4c^2} (x^2 + y^2)]$$

ii) Ορίζοντας τους τελεστές b και b^\dagger , όπου

$$b = \frac{1}{\sqrt{2qB\hbar/c}} \left(\frac{1}{2c} qB x + ip_x + \frac{1}{2c} iqBy - p_y \right).$$

να δειχθεί ότι

$$\hat{H} = \hbar \omega \left(b b^\dagger - \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(b b^\dagger + \frac{1}{2} \right), \quad \text{όπου } \omega = qB/mc$$

iii) Από αυτό να συναχθεί ότι η ενέργεια του σωματιδίου είναι

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



- 7.8. Θεωρούμε ένα φορτισμένο σωματίδιο μάζας m και φορτίου q μέσα σε σταθερό, ομογενές μαγνητικό $\mathbf{B} = (0, B, 0)$ και ηλεκτρικό $\mathbf{E} = (0, 0, \varepsilon)$ πεδίο. Να εξηγηθεί γιατί η βαθμίδα Landau $\mathbf{A} = (Bz, 0, 0)$ και $\Phi = -\varepsilon z$ είναι κατάλληλη εκλογή και να δειχθεί ότι η εξίσωση Schrödinger ανάγεται στη μορφή

$$\left[\hat{p}_z^2 + \left(\frac{qB}{c} z - \hbar k_x - \frac{m\varepsilon c}{B} \right)^2 \right] \phi(z) = E' \phi(z)$$

όπου E' σταθερά. Να δειχθεί ότι σ' αυτή την περίπτωση είναι

$$\langle z \rangle = \frac{c}{qB} \left(\hbar k_x + \frac{m\varepsilon c}{B} \right)$$

$$\langle v_x \rangle = - \frac{\varepsilon c}{B}$$

Γιατί το παραπάνω αποτέλεσμα για τη μέση τιμή της ταχύτητας $\langle v_x \rangle$ είναι το αναμενόμενο κλασικά;



THE UNIVERSITY OF CHICAGO
DEPARTMENT OF CHEMISTRY
5408 SOUTH DICKENS STREET
CHICAGO, ILLINOIS 60637

RECEIVED
JAN 15 1964

FROM
DR. J. H. GOLDSTEIN

TO
DR. R. M. MAYER

RE
POLYMERIZATION OF VINYL
ACRYLATE

BY
DR. J. H. GOLDSTEIN

AND
DR. R. M. MAYER

CHICAGO, ILLINOIS

UNIVERSITY OF CHICAGO

ΚΕΦΑΛΑΙΟ VIII

ΟΜΟΙΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

Σαν όμοια σωματίδια εννοούμε εκείνα που έχουν ίδια μάζα, φορτίο, σπιν κλπ. και συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο κάτω από ίδιες φυσικές συνθήκες. Για να δούμε την ασάφεια, που κατ' αρχήν ενυπάρχει σ' ένα σύστημα όμοιων σωματιδίων, ας θεωρήσουμε δύο όμοια σωματίδια μέσα σ' ένα δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_2^2$$

Η βασική κατάσταση του συστήματος έχει προφανώς ενέργεια $E_0 = \hbar\omega$ και ιδιοσυνάρτηση $\psi_0(x_1, x_2) = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)$. Η πρώτη διεγερμένη κατάσταση έχει ενέργεια $E_1 = 2\hbar\omega$ και φαίνεται εκφυλισμένη με δύο προφανείς ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{12} = \psi_1(x_1)\psi_0(x_2)$, $\psi_{21} = \psi_0(x_1)\psi_1(x_2)$. Όμως και κάθε γραμμικός συνδυασμός

$$\psi(x_1, x_2) = C_1 \psi_1(x_1)\psi_0(x_2) + C_2 \psi_0(x_1)\psi_1(x_2)$$

είναι ιδιοσυνάρτηση της H . Επί πλέον, η μέση τιμή του γινόμενου των θέσεων $x_1 x_2$, που είναι ανεξάρτητο από την αρίθμηση των σωματιδίων, παίρνει τη μορφή

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} 2\text{Re}(C_1^* C_2)$$

και εξαρτάται από τα C_1, C_2 . Επειδή τίποτα δεν μας επιτρέπει να διακρίνουμε ποιο από τα δύο σωματίδια βρίσκεται στη διεγερμένη κατάσταση, δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε τα C_1 και C_2 . Θα πρέπει να βρούμε μια άλλη διαδικασία για ένα τέτοιο προσδιορισμό. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, μόνο οι τιμές $C_1 = \pm C_2 = 1/\sqrt{2}$ επιτρέπονται, με το πρόσημο να εξαρτάται από τη φύση των σωματιδίων.



[The page contains approximately 20 lines of text that is extremely faint and illegible due to heavy noise and low contrast. The text appears to be organized into several paragraphs.]

ΚΕΦΑΛΑΙΟ VIII

ΟΜΟΙΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

Σαν όμοια σωματίδια εννοούμε εκείνα που έχουν ίδια μάζα, φορτίο, σπιν κλπ. και συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο κάτω από ίδιες φυσικές συνθήκες. Για να δούμε την ασάφεια, που κατ' αρχήν ενυπάρχει σ' ένα σύστημα όμοιων σωματιδίων, ας θεωρήσουμε δύο όμοια σωματίδια μέσα σ' ένα δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_2^2$$

Η βασική κατάσταση του συστήματος έχει προφανώς ενέργεια $E_0 = \hbar\omega$ και ιδιοσυνάρτηση $\psi_0(x_1, x_2) = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)$. Η πρώτη διεγερμένη κατάσταση έχει ενέργεια $E_1 = 2\hbar\omega$ και φαίνεται εκφυλισμένη με δύο προφανείς ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{12} = \psi_1(x_1)\psi_0(x_2)$, $\psi_{21} = \psi_0(x_1)\psi_1(x_2)$. Όμως και κάθε γραμμικός συνδυασμός

$$\psi(x_1, x_2) = C_1 \psi_1(x_1)\psi_0(x_2) + C_2 \psi_0(x_1)\psi_1(x_2)$$

είναι ιδιοσυνάρτηση της H . Επί πλέον, η μέση τιμή του γινόμενου των θέσεων $x_1 x_2$, που είναι ανεξάρτητο από την αρίθμηση των σωματιδίων, παίρνει τη μορφή

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} 2\text{Re}(C_1^* C_2)$$

και εξαρτάται από τα C_1, C_2 . Επειδή τίποτα δεν μας επιτρέπει να διακρίνουμε ποιό από τα δύο σωματίδια βρίσκεται στη διεγερμένη κατάσταση, δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε τα C_1 και C_2 . Θα πρέπει να βρούμε μια άλλη διαδικασία για ένα τέτοιο προσδιορισμό. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, μόνο οι τιμές $C_1 = \pm C_2 = 1/\sqrt{2}$ επιτρέπονται, με το πρόσημο να εξαρτάται από τη φύση των σωματιδίων.



8.1. Σύστημα όμοιων σωματιδίων-Κατασκευή ολικά συμμετρικών και αντισυμμετρικών κυματοσυναρτήσεων

Ας πάρουμε ένα σύνολο N όμοιων σωματιδίων και ας συμβολίσουμε με q_i ένα πλήρες σύνολο συμβιβαστών μεγεθών για το σωματίδιο i (π.χ. τη θέση r_i και την τρίτη συνιστώσα του σπιν S_{iz}). Τότε, η κυματοσυνάρτηση του συστήματος γράφεται $\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$. Αν \hat{P}_{ij} είναι τώρα ο τελεστής εναλλαγής των q_i, q_j , θα έχουμε την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\hat{P}_{ij} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N, t) = P_{ij} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t) \quad (8.1)$$

Επειδή προφανώς $\hat{P}_{ij}^2 = I$, οι ιδιοτιμές είναι $P_{ij} = \pm 1$. Επομένως, θα είναι είτε

$$\hat{P}_{ij} \psi_S = \psi_S \quad (8.2\alpha)$$

είτε

$$\hat{P}_{ij} \psi_A = -\psi_A \quad (8.2\beta)$$

όπου η ψ_S είναι μια συμμετρική και η ψ_A μια αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση.

Γενικότερα, αν \hat{P} είναι ο τελεστής μιας τυχαίας μετάθεσης των q_i , θα έχουμε είτε

$$\hat{P} \psi_S = \psi_S \quad (8.3\alpha)$$

είτε

$$\hat{P} \psi_A = \begin{cases} \psi_A & \text{για μια άρτια μετάθεση} \\ -\psi_A & \text{για μια περιττή μετάθεση} \end{cases} \quad (8.3\beta)$$

Τονίζουμε ότι ο \hat{P} εναλλάσσει όλες τις μεταβλητές (χώρου και σπιν).

Όλα τα σωματίδια που υπάρχουν στη φύση ανήκουν σε μια από τις δύο κατηγορίες: είτε είναι σωματίδια που περιγράφονται από μια συμμετρική κυματοσυνάρτηση, είτε είναι σωματίδια που περιγράφονται από μια αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση. Τα πρώτα λέγονται μποζόνια και έχουν σπιν ακέραιο (π.χ. φωτόνιο με σπιν 1, π μεσόνιο με σπιν 0 κλπ). Τα δεύτερα λέγονται φερμιόνια και έχουν σπιν ημιακέραιο (π.χ. ηλεκτρόνιο, νετρίνο, πρωτόνιο, νετρόνιο, κουάρκ, όλα με σπιν $\frac{1}{2}$ κ.λπ.). Η βαθιά σχέση μεταξύ σπιν και ιδιοτήτων συμμετρίας της κυματοσυνάρτησης (γνωστή σαν σχέση σπιν - στατιστικής από τη διαφορετική στατιστική που ακολουθούν) βρέθηκε πρώτα εμπειρικά και μπορεί να κατανοηθεί στο πλαίσιο της κβαντικής θεωρίας πεδίου.



Η αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης των φερμιονίων είναι ισοδύναμη με την απαγορευτική αρχή του Pauli: μπορεί να υπάρξει μόνο ένα φερμιόνιο (π.χ. ηλεκτρόνιο) σε μια συγκεκριμένη κβαντομηχανική κατάσταση (π.χ. μια κατάσταση με καθορισμένες τιμές των κβαντικών αριθμών n, l, m_l, m_s). Η αρχή αυτή διατυπώθηκε πρώτα εμπειρικά από τον Pauli το 1925 για να εξηγήσει τη δομή των ατόμων.

Οι ιδιότητες συμμετρίας συστημάτων με όμοια σωματίδια παίζουν θεμελιακό ρόλο σε αναρίθμητες περιοχές της φυσικής. Στην κβαντική στατιστική, όπως είπαμε παραπάνω, η συμπεριφορά συστημάτων μποζονίων διαφέρει ριζικά από εκείνη συστημάτων φερμιονίων (βλ. παράρτημα II, §Π-II.6). Έτσι, παραδείγματος χάρη, σε χαμηλές θερμοκρασίες τα μποζόνια μπορούν να συγκεντρώνονται στη χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη, πράγμα που απαγορεύεται στα φερμιόνια. Αυτό (βλ. §Π-II.7) οδηγεί κατ' αρχήν στην υπερρευστότητα του ^4He που είναι μποζόνιο, αλλά όχι του ^3He , που είναι φερμιόνιο (όμως θα πρέπει να πούμε ότι και το ^3He εμφανίζει φαινόμενα υπερρευστότητας μέσω συνδυασμού δύο ατόμων σε ζεύγη με ακέραιο spin, σε αναλογία με ό,τι συμβαίνει στην υπεραγωγιμότητα, βλ. §8.4). Επίσης, ο μποζονικός χαρακτήρας των φωτονίων επιτρέπει να καταλάβουμε τη εξαναγκασμένη εκπομπή και, συνεπώς, τη λειτουργία του λέιζερ.

Ας δούμε, τώρα, το πρόβλημα της κατασκευής ολικά συμμετρικών και ολικά αντισυμμετρικών κυματοσυναρτήσεων, ξεκινώντας από κυματοσυναρτήσεις που δεν έχουν συγκεκριμένες ιδιότητες συμμετρίας κάτω από εναλλαγή των μεταβλητών q_i .

Εύκολα βλέπουμε ότι για $N=2$ όμοια σωματίδια είναι

$$\psi_{\Sigma}^A(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(q_1, q_2) \pm \psi(q_2, q_1)], \quad (8.4)$$

ενώ για $N=3$ έχουμε

$$\begin{aligned} \psi_{\Sigma}^A(q_1, q_2, q_3) = & \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi(q_1, q_2, q_3) \pm \psi(q_2, q_1, q_3) \\ & + \psi(q_2, q_3, q_1) \pm \psi(q_3, q_2, q_1) \\ & + \psi(q_3, q_1, q_2) \pm \psi(q_1, q_3, q_2)] \end{aligned} \quad (8.5)$$

Η γενίκευση σε συστήματα N όμοιων σωματιδίων γίνεται με τον ίδιο τρόπο.



Ιδιαίτερη περίπτωση είναι αυτή, όπου η ολική χαμιλτονιανή \hat{H} ενός συστήματος N όμοιων σωματιδίων είναι άθροισμα N όμοιων χαμιλτονιανών καθενός σωματιδίου

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad (8.6)$$

με επιμέρους εξισώσεις ιδιοτιμών

$$\hat{H}_i \phi_k(q_i) = E_k \phi_k(q_i) \quad (8.7)$$

Τότε, η λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών για το σύστημα

$$\hat{H} \psi(q_1, \dots, q_N) = E \psi(q_1, \dots, q_N) \quad (8.8)$$

είναι

$$\psi(q_1, \dots, q_N) = \phi_a(q_1) \phi_b(q_2) \dots \phi_k(q_i) \dots \phi_n(q_N) \quad (8.9)$$

$$E = E_a + E_b + \dots + E_k + \dots + E_n \quad (8.10)$$

όπου τα a, b, \dots, k, \dots, n συμβολίζουν ένα σύνολο κατάλληλων κβαντικών αριθμών. Η κυματοσυνάρτηση (8.9) δεν έχει, εν γένει, κάποια ιδιαίτερη συμμετρία. Όμως, ξεκινώντας από τις επιμέρους κυματοσυναρτήσεις ϕ μπορούμε να κατασκευάσουμε ολικά συμμετρικές ή αντισυμμετρικές κυματοσυναρτήσεις απαραίτητες για να περιγράψουμε συστήματα όμοιων μποζονίων ή φερμιονίων, αντίστοιχα. Έτσι, παραδείγματος χάρη, για την κατασκευή ολικά συμμετρικών ή αντισυμμετρικών κυματοσυναρτήσεων για $N = 2$ σωματίδια έχουμε

$$\psi_{\Sigma}^A(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(q_1) \phi_b(q_2) \pm \phi_a(q_2) \phi_b(q_1)] \quad (8.11)$$

Για τη γενική περίπτωση N όμοιων σωματιδίων θα έχουμε

$$\text{Μποζόνια: } \psi_{\Sigma}(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \phi_a(q_1) \dots \phi_n(q_N) \quad (8.12)$$

$$\begin{aligned} \text{Φερμιόνια: } \psi_{\Lambda}(q_1, \dots, q_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_a(q_1) & \dots & \phi_n(q_1) \\ \phi_a(q_2) & \dots & \phi_n(q_2) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_a(q_N) & \dots & \phi_n(q_N) \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \phi_a(q_1) \dots \phi_n(q_N) \end{aligned} \quad (8.13)$$



όπου τα αθροίσματα είναι πάνω σε όλες τις δυνατές μεταθέσεις των q_i και $(-1)^P$ είναι $+1$ για άρτια μετάθεση και -1 για περιττή. Η ορίζουσα (8.13) είναι γνωστή σαν ορίζουσα Slater.

Η $\Psi_A(q_1, \dots, q_N)$ μηδενίζεται, όταν δύο σωματίδια καταλαμβάνουν την ίδια κατάσταση (δύο στήλες της ορίζουσας (8.13) ίσες). Αυτό βέβαια συνιστά την αρχή του Pauli, που επομένως εκφράζεται μέσω της αντισυμμετρικότητας της κυματοσυνάρτησης των φερμιονίων, ένα πραγματικά θεμελιακό από φυσική άποψη αποτέλεσμα.

Μια πολύ ενδιαφέρουσα εφαρμογή των παραπάνω πραγματοποιείται στο άτομο του ηλίου, που αποτελείται από έναν πυρήνα με $Z=2$ και δύο ηλεκτρόνια σε τροχιά. Η ολική κυματοσυνάρτηση για τα δύο ηλεκτρόνια θα είναι αντισυμμετρική

$$\Psi_A(q_1, q_2) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(1,2) \quad (8.14)$$

Αυτό σημαίνει ότι όταν η κυματοσυνάρτηση για τη θέση $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ είναι συμμετρική, η κυματοσυναρτηση για το σπιν $\chi(1,2)$ πρέπει να είναι αντισυμμετρική, και αντίστροφα. Έτσι, πρέπει να συνδυάσουμε τη συμμετρική κυματοσυνάρτηση θέσης

$$\begin{aligned} \phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [& \psi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_2) \\ & + \psi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_1)] \end{aligned} \quad (8.15)$$

με την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν (βλ. (5.154))

$$\chi_A(1,2) = \chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+(1)} \chi_{-(2)} - \chi_{-(1)} \chi_{+(2)}] \quad (8.16)$$

ή την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση θέσης

$$\begin{aligned} \phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [& \psi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_2) \\ & - \psi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_1)] \end{aligned} \quad (8.17)$$

με τη συμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν (βλ. (5.155))

$$\chi_S(1,2) = \begin{cases} \chi_{1,1} = \chi_{+(1)} \chi_{+(2)} \\ \chi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+(1)} \chi_{-(2)} + \chi_{-(1)} \chi_{+(2)}] \\ \chi_{1,-1} = \chi_{-(1)} \chi_{-(2)} \end{cases} \quad (8.18)$$



Όταν το άτομο του ηλίου περιλαμβάνει την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν χ_A , είναι γνωστό σαν παραήλιο, ενώ όταν περιλαμβάνει την συμμετρική χ_S , είναι γνωστό σαν ορθοήλιο. Παραήλιο είναι η ενεργειακά κατώτερη κατάσταση του ηλίου, στην οποία και τα δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στην κατάσταση $1s(n=1, l=0)$, με τα σπιν τους αναγκαστικά αντίθετα, λόγω της αρχής του Pauli. Όμως, στις αμέσως επόμενες ενεργειακές καταστάσεις, το ορθοήλιο θ' αντιστοιχεί πάντα σε χαμηλότερη ενέργεια από το παραήλιο, γιατί στην πρώτη περίπτωση τα δύο ηλεκτρόνια, λόγω της αρχής του Pauli, θα τείνουν να είναι σε μεγαλύτερη απόσταση και, συνεπώς, η ηλεκτροστατική τους άπωση θα είναι μικρότερη (βλ. και §12.1).

8.2. Αέριο Fermi

Σε πολλά φυσικά συστήματα έχουμε να κάνουμε μ' ένα μεγάλο αριθμό όμοιων μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων (σπιν $\frac{1}{2}$), που περιέχονται μέσα σε μια περιοχή του χώρου με αδιαπέραστα τοιχώματα. Αν η περιοχή είναι αρκετά μεγάλη, οι ιδιότητες του συστήματος δεν εξαρτώνται από την μορφή της. Αν επί πλέον ο αριθμός των σωματιδίων (φερμιονίων) είναι πολύ μεγάλος, το σύστημά μας θα ονομάζεται αέριο Fermi. Ένα τέτοιο σύστημα αποτελούν, παραδείγματος χάρη, τα "ελεύθερα" ηλεκτρόνια ενός μετάλλου. Σ' ένα αέριο Fermi δεν είναι δύσκολο να πεισθεί κανείς ότι, λόγω της αρχής του Pauli, τα φερμόνια θα καταλαμβάνουν τις ενεργειακές στάθμες από τη βασική μέχρι μια μέγιστη. Η ενέργεια της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης ενός αερίου Fermi είναι γνωστή σαν ενέργεια Fermi. Θα πρέπει να σημειώσουμε εδώ ότι τα παραπάνω αναφέρονται σε θερμοκρασία απόλυτου μηδενός. Πάντως, η ενέργεια Fermi είναι της τάξης μερικών eV, ενώ για θερμοκρασίες δωματίου η αντίστοιχη μέση θερμική ενέργεια είναι μικρό μόνο κλάσμα του eV.

Ας θεωρήσουμε, συγκεκριμένα, ότι η περιοχή του συστήματός μας είναι ένα κυβικό κουτί με πλευρά L και η αρχή των συντεταγμένων βρίσκεται σε μια κορυφή του κύβου. Χρησιμοποιώντας τ' αποτελέσματα της §3.7, έχουμε για το χωρικό μέρος της κυματοσυνάρτησης ενός σωματιδίου

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_1\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n_3\pi}{L}z\right) \quad (8.19)$$

και για τις ιδιοτιμές της ενέργειας

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} n^2, \quad n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \quad (8.20)$$

όπου n_1, n_2, n_3 είναι θετικοί ακέραιοι αριθμοί (1, 2, 3, ...). Η ολική κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου θα είναι



$$\Psi_{n_1, n_2, n_3, m_s}(q) = \Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) \chi_{(1/2) m_s}, \quad (8.21)$$

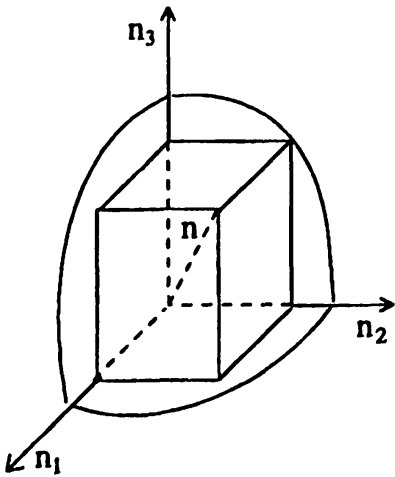
όπου το m_s παίρνει τις τιμές $\pm \frac{1}{2}$.

Επειδή τα ενεργειακά επίπεδα (8.20) απέχουν πολύ λίγο μεταξύ τους για ένα μακροσκοπικό κουτί πλευράς L , μπορούμε σε μια καλή προσέγγιση να θεωρήσουμε ότι συνιστούν ένα συνεχές φάσμα. Εισάγουμε τότε την πυκνότητα καταστάσεων $\rho(E)$, που ορίζεται σαν ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων ανά μονάδα ενεργειακού διαστήματος

$$\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} \quad (8.22)$$

Έτσι, $\rho(E) dE$ είναι ο αριθμός των καταστάσεων με ενέργεια που βρίσκεται στο διάστημα $(E, E + dE)$. Επειδή n_1, n_2, n_3 είναι θετικοί ακέραιοι αριθμοί, τότε, όπως φαίνεται και από το σχήμα 8.1, ο ολικός αριθμός των καταστάσεων με ενέργειες μέχρι μια ορισμένη τιμή E είναι κατά προσέγγιση ίσος με

$$N(E) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n^3 = \frac{1}{3} \pi n^3 \quad (8.23)$$



Σχήμα 8.1. Ο τριδιάστατος χώρος (n_1, n_2, n_3) για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων $\rho(E)$

όπου ο παράγοντας 2 προέρχεται από τις δύο δυνατές καταστάσεις του σπιν και το $\frac{1}{8}$ αφορά στο πρώτο ογδοημόριο της σφαίρας ακτίνας $n = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{1/2}$.

Χρησιμοποιώντας την (8.23) και θέτοντας $V = L^3$, παίρνουμε

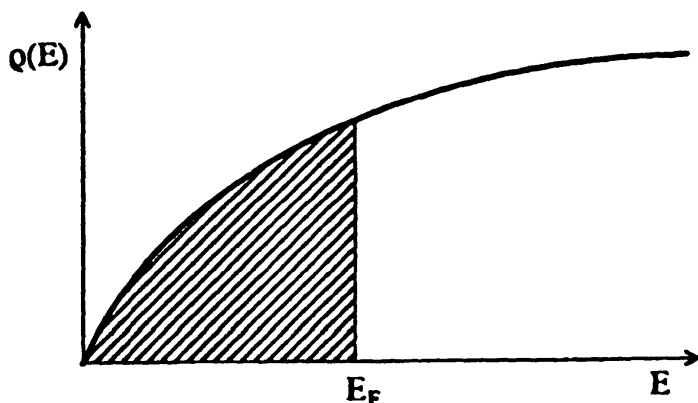
$$N(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{3/2} \quad (8.24)$$

και, συνεπώς,



$$\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (8.25)$$

Η γραφική παράσταση της (8.25) φαίνεται στο σχήμα 8.2



Σχήμα 8.2. Η πυκνότητα καταστάσεων $\rho(E)$ συναρτήσει του E .

Δεν είναι δύσκολο από εδώ να υπολογισθεί η ενέργεια Fermi E_F (το αέριο Fermi αναφέρεται σε απόλυτη θερμοκρασία $T = 0$). Ο συνολικός αριθμός N των σωματιδίων του συστήματος θα πρέπει να είναι

$$N = \int_0^{E_F} \rho(E) dE \quad (8.26)$$

Συνεπώς, έχουμε

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_F} E^{1/2} dE \\ &= \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2} \end{aligned} \quad (8.27)$$

Άρα, για την ενέργεια Fermi έχουμε

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \rho)^{2/3} \quad (8.28)$$

όπου

$$\rho = \frac{N}{V} \quad (8.29)$$

ο αριθμός των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου.

Για την ολική ενέργεια ενός αερίου Fermi στη βασική του κατάσταση, δηλαδή σε απόλυτη θερμοκρασία $T = 0$, έχουμε

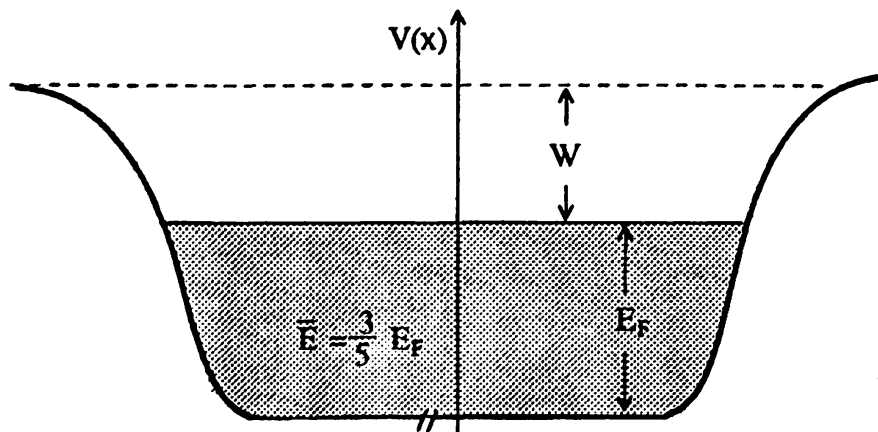


$$\begin{aligned}
 E_{ολ} &= \int_0^{E_F} E \rho(E) dE \\
 &= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_F} E^{3/2} dE \\
 &= \frac{3}{5} N E_F
 \end{aligned} \tag{8.30}$$

Για τη μέση τιμή της ενέργειας έχουμε

$$\bar{E} = \frac{E_{ολ}}{N} = \frac{3}{5} E_F \tag{8.31}$$

Το σχήμα 8.3 δείχνει χαρακτηριστικές ποσότητες ενός αερίου Fermi.



Σχ.8.3. Αέριο Fermi: E_F ενέργεια Fermi, \bar{E} μέση ενέργεια, W έργο εξόδου

Είναι διδακτικό να δούμε το ίδιο πρόβλημα του αερίου Fermi χρησιμοποιώντας για την περιοχή του συστήματός μας περιοδικές συνοριακές συνθήκες (βλ. §3.1)). Η χωρική κυματοσυνάρτηση είναι τώρα

$$\psi_{k_1 k_2 k_3}(x, y, z) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i(k_1 x + k_2 y + k_3 z)} \tag{8.32}$$

όπου

$$k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1, \quad k_2 = \frac{2\pi}{L} n_2, \quad k_3 = \frac{2\pi}{L} n_3 \tag{8.33}$$

και οι n_1, n_2, n_3 είναι εδώ ακέραιοι θετικοί ή αρνητικοί ή και μηδεν. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι



$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 \quad (8.34)$$

Ο αριθμός των καταστάσεων στο διάστημα $dk = dk_1 dk_2 dk_3$ είναι $2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_1 dk_2 dk_3$ (ο παράγοντας 2 λόγω των δύο καταστάσεων του σπιν). Έτσι, στη μονάδα όγκου του χώρου k θα έχουμε $\frac{L^3}{4\pi^3} = \frac{V}{4\pi^3}$ καταστάσεις. Συνεπώς, ο ολικός αριθμός των καταστάσεων με ενέργεια μέχρι μια ορισμένη τιμή E θα είναι

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{V}{4\pi^3} \frac{4}{3} \pi k^3 \\ &= \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{3/2}, \end{aligned} \quad (8.35)$$

που συμπίπτει με την (8.24). Στη βασική κατάσταση του αερίου Fermi ($T=0$), όλες οι καταστάσεις στο χώρο k καταλαμβάνονται μέχρι μια μέγιστη τιμή k_F (κυματαριθμός Fermi), που σχετίζεται με την ενέργεια Fermi με τη σχέση

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (8.36)$$

Ο συνολικός αριθμός N των σωματιδίων θα είναι

$$N = \frac{V}{4\pi^3} \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad (8.37)$$

και, συνεπώς,

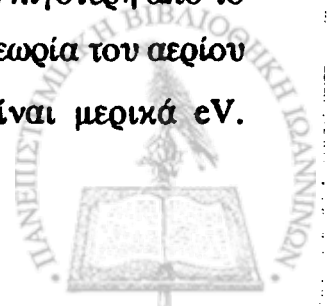
$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} = (3\pi^2 \rho)^{1/3} \quad (8.38)$$

και

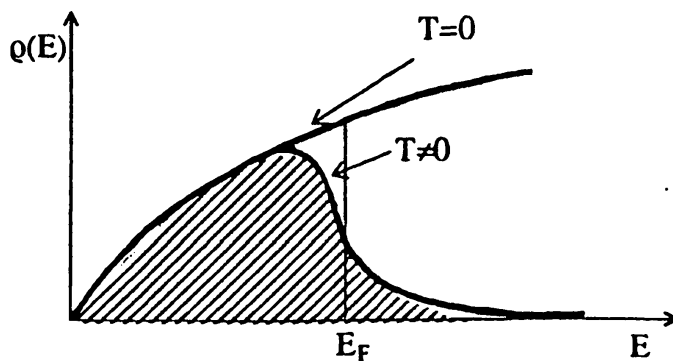
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \rho)^{2/3}, \quad (8.39)$$

που συμπίπτει με την (8.28).

Μια απλή εφαρμογή του αερίου Fermi έχουμε στην θερμοχωρητικότητα των μετάλλων. Η κλασική στατιστική μηχανική προβλέπει ότι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας, που κινούνται ελεύθερα μέσα στο μέταλλο, συνεισφέρουν στην θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο το ποσό $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2} kN$, όπου N ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων. Η πειραματική τιμή, όμως, είναι λιγότερη από το $\frac{1}{100}$ αυτής της πρόβλεψης. Η αντίφαση εξηγείται με την κβαντική θεωρία του αερίου Fermi, που μόλις αναπτύξαμε. Μια τυπική ενέργεια Fermi είναι μερικά eV.



Παραδείγματος χάρη, για τον άργυρο είναι $\rho \approx 5.8 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ και $E_F \approx 8.8 \times 10^{-19} \text{ J} \approx 5.5 \text{ eV}$, άρα $\bar{E} \approx 3.3 \text{ eV}$. Η αντίστοιχη θερμοκρασία, στην οποία ένα κλασικό αέριο πρέπει να βρίσκεται για να έχει αυτή την ενέργεια, είναι $\frac{3}{2} kT_{\kappa\lambda} = \bar{E}$, δηλαδή $T_{\kappa\lambda} \approx 2.6 \times 10^4 \text{ }^\circ\text{K}$. Αντίθετα, σε θερμοκρασίες δωματίου $T_\delta \approx 300 \text{ }^\circ\text{K}$, η αντίστοιχη θερμική ενέργεια είναι $\frac{3}{2} kT_\delta = 0.039 \text{ eV} \ll E_F$. Έτσι μόνο λίγα ηλεκτρόνια, όσα βρίσκονται κοντά στην ενέργεια Fermi σε διάστημα 0.039 eV , μπορούν να διεγερθούν θερμικά (σχήμα 8.4) και να συνεισφέρουν στην θερμοχωρητικότητα του μετάλλου.



Σχήμα 8.4. Η κυκνότητα καταστάσεων $\rho(E)$ για $T=0$ και για $T \neq 0$.

Το κλάσμα αυτό είναι της τάξης $0.039/5.5 \approx 7 \times 10^{-3}$, όσο και ο παράγοντας κατά τον οποίο διαφέρει η κλασική πρόβλεψη από την πειραματική τιμή. Βλέπουμε ότι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας συνεισφέρουν κατά ένα πολύ μικρό μέρος στην θερμοχωρητικότητα του μετάλλου (που σύμφωνα με το μοντέλο Debye καθορίζεται κυρίως από την θερμική κίνηση των ιόντων του κρυσταλλικού πλέγματος, η οποία όπως είδαμε στην §4.6 είναι κβαντισμένη με τη μορφή φωνονίων).

Είναι χαρακτηριστικό, εδώ, ν' αναφέρουμε το πόσο μεγάλες πιέσεις αναπτύσσονται από ένα αέριο Fermi, λόγω ακριβώς της αρχής του Pauli. Έτσι, θα έχουμε για την πίεση

$$P = - \frac{\partial E_{ολ}}{\partial V} = \frac{2}{5} \rho E_F \quad (8.40)$$

Στο αριθμητικό παράδειγμα, που μόλις αναφέραμε, με $\rho \approx 5.8 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ και $E_F \approx 5.5 \text{ eV}$ βρίσκουμε $P \approx 10^{11} \text{ dyn cm}^{-2} \approx 10^5 \text{ at}$. Αυτή η τεράστια πίεση θα εξασκείτο από τα ηλεκτρόνια του μετάλλου, αν δεν υπήρχαν τα θετικά ιόντα του κρυσταλλικού πλέγματος να την εξουδετερώνουν.



8.3. Ηλεκτρόνια σε στερεά

Ας έρθουμε τώρα να δούμε σε συντομία μερικά βασικά χαρακτηριστικά στην ηλεκτρική αγωγιμότητα των στερεών με βάση τα όσα αναπτύξαμε κυρίως στην §3.12 και στο παρόν κεφάλαιο.

Κατ' αρχήν, στην συμπυκνωμένη κατάσταση της ύλης διακρίνουμε τα κρυσταλλικά στερεά, τα άμορφα στερεά και τα υγρά. Στα κρυσταλλικά στερεά, που είναι αυτά που μας ενδιαφέρουν εδώ, τ' άτομα εμφανίζουν μια κανονική διάταξη ή κρυσταλλική δομή: οι πυρήνες των ατόμων (ιόντα) κατέχουν θέσεις ισορροπίας με ορισμένη περιοδικότητα και συμμετρία, που εκτείνεται σε απόσταση η οποία είναι μερικές χιλιάδες φορές μεγαλύτερη από το μέγεθος των ατόμων. Τα λιγότερο ισχυρά δεσμευμένα ηλεκτρόνια (ηλεκτρόνια σθένους) δεν είναι εντοπισμένα και κινούνται ελεύθερα μέσα στον κρύσταλλο. Κάθε άτομο (ιόν) στον κρύσταλλο είναι ένας κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής (§4.6). Τα περισσότερα μέταλλα ανήκουν σ' αυτή την κατηγορία. Αντίθετα, στ' άμορφα υλικά (π.χ. γυαλί) δεν έχουμε μια κανονικότητα μακράς εμβέλειας όπως στα κρυσταλλικά στερεά, ενώ, τέλος, σ' ένα υγρό τ' άτομα δεν κατέχουν ορισμένες θέσεις και έτσι δεν εμφανίζουν ούτε μακράς, ούτε μικρής εμβέλειας κανονικότητα.

Η κίνηση των ηλεκτρονίων σθένους στο κρυσταλλικό πλέγμα μπορεί να μελετηθεί σε καλή προσέγγιση ανεξάρτητα από τις ταλαντώσεις των ατόμων (ιόντων) γύρω από τις θέσεις ισορροπίας τους (ανάλογη προσέγγιση γίνεται και κατά τη μελέτη των μορίων, βλ. §12.3). Η κίνηση αυτή μελετήθηκε στην §3.12 για μια μονοδιάστατη διάταξη ατόμων που σχηματίζουν ένα γραμμικό κρύσταλλο. Τ' αποτελέσματα αυτής της (εξιδανικευμένης) μελέτης αρκούν για να καταλάβουμε βασικές ιδιότητες των σχετικών υλικών.

Ας πάρουμε, λοιπόν, μια μακροσκοπική ποσότητα N ατόμων (π.χ. $N=10^{23}$ της τάξης του αριθμού Avogadro). Η περιοδικότητα της κυματοσυνάρτησης $\psi(x)$, που πρέπει να είναι μια μονοσήμαντη συνάρτηση, μας οδηγεί στο να έχουμε

$$\psi(x + Nx_0) = \psi(x) \quad (8.41)$$

όπου x_0 η περίοδος του μονοδιάστατου κρυστάλλου. Η συνθήκη Bloch (3.222) μας δίνει τότε

$$e^{iNKx_0} = 1 \quad (8.42)$$

και, συνεπώς,

$$K = \frac{2\pi n}{Nx_0}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.43)$$



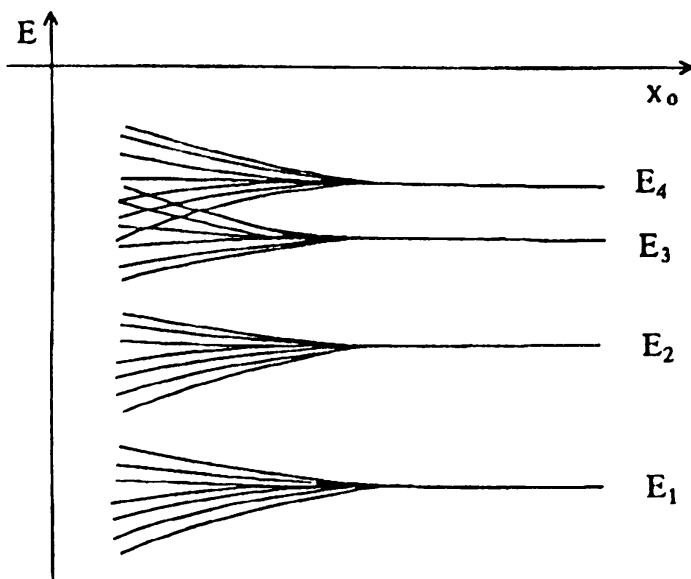
Εξ άλλου, όπως προκύπτει από τις σχέσεις (3.222)-(3.224) και (3.229)-(3.231), τόσο η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, όσο και η αντίστοιχη ιδιοτιμή της ενέργειας E δεν μεταβάλλονται αν το K αυξηθεί ή ελαττωθεί κατά $2\pi/x_0$. Έτσι, μπορούμε αρχικά να υιοθετήσουμε για το K την περιοχή

$$-\frac{\pi}{x_0} \leq K \leq \frac{\pi}{x_0} \quad (8.44)$$

που, όπως αναφέραμε στην §3.12, ονομάζεται πρώτη ζώνη Brillouin. Η δεύτερη ζώνη Brillouin καλύπτει τα γειτονικά διαστήματα

$$-\frac{2\pi}{x_0} \leq K \leq -\frac{\pi}{x_0} \quad \text{και} \quad \frac{\pi}{x_0} \leq K \leq \frac{2\pi}{x_0} \quad (8.45)$$

και όμοια για τις επόμενες ζώνες Brillouin. Από την (8.43) συμπεραίνουμε, τότε, αμέσως ότι υπάρχουν N επιτρεπόμενες τιμές για το K και σε κάθε μια από τις επιτρεπόμενες αυτές τιμές αντιστοιχεί η ίδια τιμή της ενέργειας για κάθε ζώνη. Έτσι, κάθε ζώνη αγωγιμότητας περιλαμβάνει N επιτρεπόμενα ενεργειακά επίπεδα. Τα παραπάνω μπορούμε να τα κατανοήσουμε αν σκεφτούμε ότι στο όριο $x_0 \rightarrow \infty$ κάθε ζώνη ανάγεται σ' ένα μόνο ενεργειακό επίπεδο που παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης N (επειδή το ηλεκτρόνιο μπορεί να είναι δεσμευμένο σ' ένα από τα N άτομα). Για πεπερασμένες τιμές του x_0 ο εκφυλισμός αίρεται και κάθε διάκριτο ενεργειακό επίπεδο απλώνεται σε μια ζώνη N ενεργειακών επιπέδων. Για τις χαμηλότερες ενεργειακά ζώνες το εύρος είναι μικρότερο (το φράγμα δυναμικού που έχουν να περάσουν τα ηλεκτρόνια είναι μεγαλύτερο). Υψηλότερες ενεργειακά ζώνες παρουσιάζουν μεγαλύτερο εύρος και είναι μάλιστα δυνατόν να έχουμε αλληλοεπικάλυψη των ζωνών. Τα χαρακτηριστικά αυτά, που απεικονίζονται στο σχήμα 8.5,

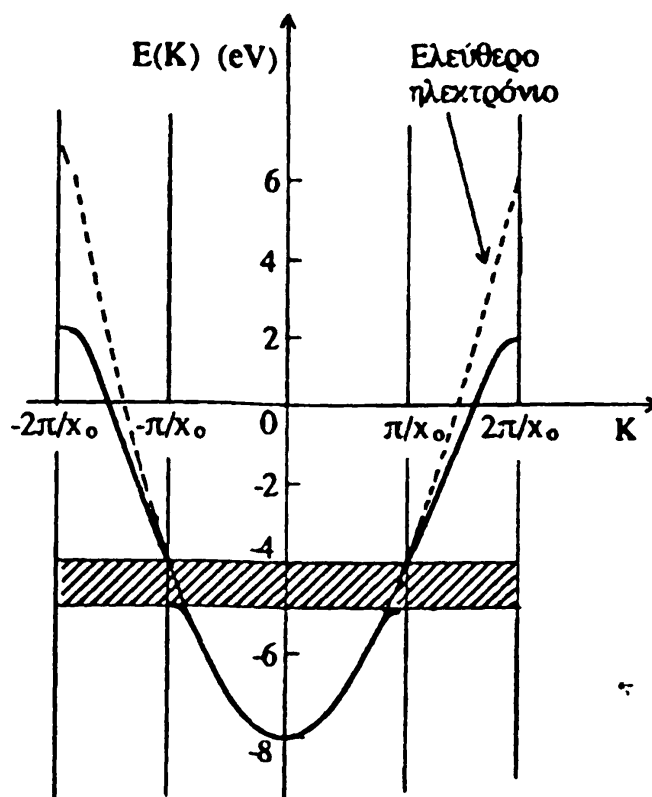


Σχ. 8.5. Δομή ενεργειακών ζωνών σαν αποτέλεσμα της άρσης εκφυλισμού σ' ένα σύστημα N ατόμων.



πράγματι παρατηρούνται, π.χ. στο νάτριο, το οποίο είναι ένας καλός αγωγός και παραμένει τέτοιος ακόμη και όταν τήκεται (μολονότι η περιοδική δομή επηρεάζεται τότε).

Η εξάρτηση της ενέργειας $E(K)$ από το K αντιστοιχεί σε μια καμπύλη γνωστή σαν καμπύλη διασκορπισμού. Το σχήμα 3.35 έδειχνε τυπικές καμπύλες διασκορπισμού για την πρώτη ζώνη Brillouin. Το σχήμα 8.6 δείχνει αντίστοιχες καμπύλες διασκορπισμού για τις δύο πρώτες ζώνες Brillouin στον κρύσταλλο του νατρίου. Στο ίδιο σχήμα δείχνεται με διακεκομ-μένη γραμμή η καμπύλη διασκορπισμού (παραβολή) $E(K) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$, που θ' αντιστοιχούσε σ' ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο (βλ. σχέσεις (3.229)-(3.230), απ' όπου στο όριο $b \rightarrow 0$ προκύπτει $k = K$). Σ' αυτή την περίπτωση η μέση ταχύτητα των ηλεκτρονίων είναι (βλ. πρόβλημα 3.24) $\langle v_x \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(K)}{dK} = \hbar K/m$. Στα σημεία $K = \pm \pi/\chi_0$ φαίνεται η ύπαρξη των ενεργειακών κενών.



Σχ. 8.6. Ενέργεια ηλεκτρονίου συναρτήσει του K για κρυσταλλικό στερεό (νάτριο) στις δύο πρώτες ζώνες Brillouin.

Από το προηγούμενο σχήμα φαίνεται ότι για ένα ενεργητικό ηλεκτρόνιο η αύξηση της ενέργειας με το K είναι μικρότερη από αυτήν που θ' αντιστοιχούσε σ' ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο. Πάντως, και σ' αυτή την περίπτωση τα ηλεκτρόνια μπορούν ακόμη να περιγραφούν σαν ελεύθερα σωματίδια αρκεί να τους αποδώσουμε μια ενεργό μάζα m_e^* , η οποία είναι μεγαλύτερη από την πραγματική μάζα m_e του ηλεκτρονίου. Έτσι, στο νάτριο παραδείγματος χάρη για ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο έχουμε ενεργειακή διαφορά $\Delta E = 14\text{eV}$ ανάμεσα στις τιμές $K=0$ και $K = \frac{2\pi}{\chi_0}$, οπότε

ισχύει $\Delta E = 14\text{ eV} = \frac{\hbar^2 (\Delta K)^2}{2m_e}$. Από την άλλη μεριά, για ένα ενεργητικό ηλεκτρόνιο

στον κρύσταλλο του νατρίου η πραγματική ενεργειακή διαφορά για την δεύτερη ζώνη Brillouin είναι 6eV. Συνεπώς, η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου θα είναι τότε



$$m_e^* \approx \frac{\hbar^2(\Delta K)^2}{2 \times 6eV} \approx \left(\frac{14}{6}\right) m_e \approx 1.2 \text{ MeV} \text{ όπου } m_e \approx 0.5 \text{ MeV} \text{ η μάζα του ηλεκτρονίου.}$$

Όμως, θα πρέπει να πούμε ότι υπάρχουν κρύσταλλοι για τους οποίους η ενεργός μάζα είναι μικρότερη από την μάζα του ηλεκτρονίου. Γενικότερα, όπως προκύπτει από το πρόβλημα 8.6, η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου, που καθορίζει την απόκλιση από την περίπτωση του ελεύθερου ηλεκτρονίου, δίνεται με βάση την καμπύλη διασκορπισμού από την σχέση

$$m_e^* \approx \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2E(K)}{dK^2}\right)} \quad (8.46)$$

Κοντά στο ελάχιστο της ενέργειας στον πυθμένα μιας ενεργειακής ζώνης, όπου $d^2E(K)/dK^2 > 0$, η ενεργός μάζα είναι θετική και έχουμε να κάνουμε μ' ένα σωματίδιο (ηλεκτρόνιο) με την συνηθισμένη έννοια του όρου. Όμως, κοντά στο μέγιστο της ενέργειας στην κορυφή μιας ενεργειακής ζώνης είναι $d^2E(K)/dK^2 < 0$ και η ενεργός μάζα m_e^* είναι αρνητική. Σ' αυτή την περίπτωση έχουμε να κάνουμε μ' ένα σωματίδιο, που συμπεριφέρεται σαν ένα θετικά φορτισμένο σωματίδιο (φορτίο $+e$) και είναι γνωστό σαν οπτή με θετική ενεργό μάζα $m_{\text{οπτή}}^* = -m_e^* > 0$.

Οι ιδιότητες ενός στερεού, και ειδικότερα η ηλεκτρική αγωγιμότητα, εξαρτώνται από τις λεπτομέρειες της δομής των ηλεκτρονικών ζωνών. Διακρίνουμε τρεις κύριες κατηγορίες όπως αυτές απεικονίζονται και στο σχήμα 8.7.

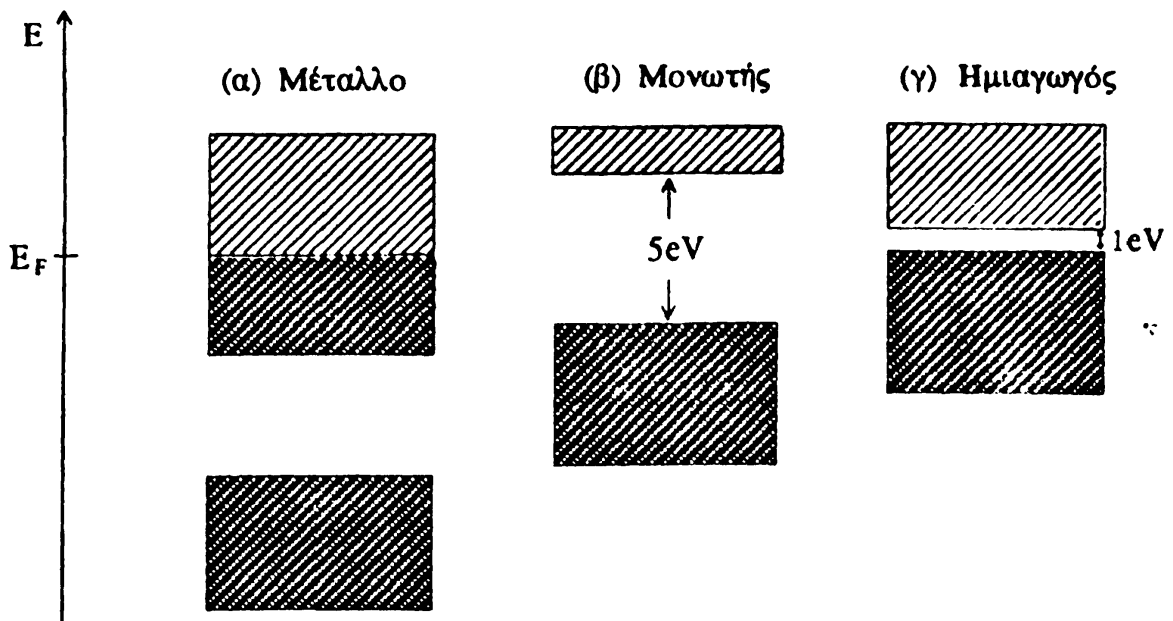
(1) Η πρώτη κατηγορία είναι αυτή στην οποίαν η εξωτερική ζώνη, που είναι γνωστή σαν ζώνη αγωγιμότητας, είναι μερικώς κατειλημμένη. Αυτή η περίπτωση αντιστοιχεί στα μέταλλα. Τα ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν καταστάσεις στην εξωτερική ζώνη αγωγιμότητας (ηλεκτρόνια αγωγιμότητας) είναι ελεύθερα να κινούνται στην μερικώς κατειλημμένη ζώνη, επειδή προφανώς υπάρχουν μη κατειλημμένα ενεργειακά επίπεδα με ελάχιστα υψηλότερη ενέργεια. Τα μεγέθη που χαρακτηρίζουν την ηλεκτρική αγωγιμότητα των στερεών είναι, ως γνωστόν, η ειδική αντίσταση ρ ή η αγωγιμότητα $\sigma = 1/\rho$. Έτσι, ο άργυρος που είναι ο καλύτερος ηλεκτρικός αγωγός έχει αγωγιμότητα $\sigma = 6.2 \times 10^7 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ σε θερμοκρασίες δωματίου.

(2) Η δεύτερη κατηγορία είναι αυτή στην οποίαν η εξωτερική ζώνη είναι πλήρως κατειλημμένη (ονομάζεται τότε ζώνη σθένους) και το ενεργειακό κενό ανάμεσα σ' αυτή και την επόμενη ζώνη, που είναι άδεια, είναι μεγάλο, της τάξης μερικών eV. Έτσι, τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να κινηθούν, αν δεν αποκτήσουν αρκετή ενέργεια για να διασχίσουν το κενό. Αυτή είναι η περίπτωση των μονωτών. Παραδείγματος χάρη, το διαμάντι είναι ένας μονωτής που χαρακτηρίζεται από ενεργειακό κενό περίπου 5.5 eV και ηλεκτρική αγωγιμότητα περίπου $10^{-18} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$.

(3) Τέλος, η τρίτη κατηγορία αφορά σ' εκείνα τα υλικά στα οποία το ενεργειακό κενό ανάμεσα στην ζώνη σθένους και την επόμενη ζώνη, είναι μικρό (συγκρινόμενο με το



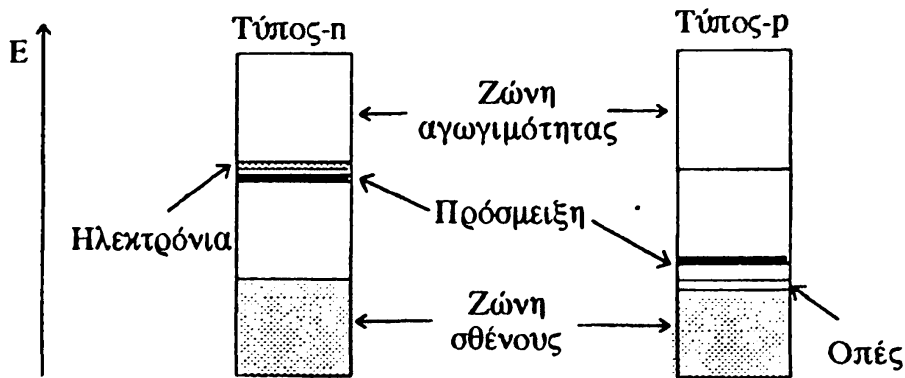
αντίστοιχο στους μονωτές), της τάξης του 1eV. Αυτή είναι η κατηγορία των ημιαγωγών. Έτσι, στο πυρίτιο το ενεργειακό κενό είναι 1.1 eV και στο γερμάνιο 0.7 eV. Η αγωγιμότητα των ημιαγωγών εξαρτάται από την θερμοκρασία και αυξάνεται με αυτήν, γιατί ηλεκτρόνια μπορούν να διεγερθούν θερμικά στην ζώνη αγωγιμότητας (αφήνοντας πίσω τους στη ζώνη σθένους μη κατειλημμένες καταστάσεις ή οπές). Έτσι, σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες το πυρίτιο και το γερμάνιο είναι καλοί μονωτές, αλλά σε θερμοκρασίες δωματίου η αγωγιμότητά τους αυξάνεται (μεγαλύτερη για το γερμάνιο $\sim 2 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$, που έχει μικρότερο ενεργειακό κενό, και μικρότερη για το πυρίτιο $\sim 10^{-3} \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$).



Σχ. 8.7. Γενική δομή των ηλεκτρονικών ζωνών στα στερεά. Το όριο ανάμεσα σε κατειλημμένες και μη καταστάσεις είναι η ενέργεια Fermi E_F .

Το μέγεθος του ενεργειακού κενού ανάμεσα στις ζώνες και, συνεπώς, οι ιδιότητες αγωγιμότητας μπορούν να μεταβληθούν σημαντικά, αν προσθέσουμε άτομα άλλου στοιχείου σ' ένα ημιαγωγό υλικό. Έχουμε τότε τους ημιαγωγούς πρόσμιξης (doping), που διακρίνονται σε δύο κύριες κατηγορίες, όπως φαίνεται στο σχήμα 8.8.





Σχ. 8.8. Ενεργειακές ζώνες σε ημιαγωγούς πρόσμειξης.

Σ' ένα ημιαγωγό τύπου - n τα ενεργειακά επίπεδα των ατόμων πρόσμειξης είναι ελαφρά διαφορετικά από εκείνα του αρχικού ημιαγωγού και τα εξωτερικά ηλεκτρόνια των ατόμων πρόσμειξης βρίσκονται σε ενεργειακά επίπεδα μόλις κάτω από τη ζώνη αγωγιμότητας του ημιαγωγού. Μ' ένα μικρό ποσό ενέργειας λόγω θερμικών διεγέρσεων, ηλεκτρόνια προωθούνται στην ζώνη αγωγιμότητας (χωρίς ν' αφήνουν πίσω τους οπές). Παράδειγμα τέτοιου ημιαγωγού αποτελεί το γερμάνιο με πρόσμειξη ατόμων αρσενικού. Αντίθετα, σ' ένα ημιαγωγό τύπου- p τ' άτομα πρόσμειξης έχουν ένα λιγότερο εξωτερικό ηλεκτρόνιο από τον αρχικό ημιαγωγό και αφήνουν μη κατειλημμένες θέσεις μόλις πάνω από την ζώνη σθένους του ημιαγωγού. Ηλεκτρόνια από την ζώνη σθένους μπορούν τότε να διεγερθούν θερμικά, με αποτέλεσμα να δημιουργηθούν οπές στη ζώνη σθένους, χωρίς να υπάρχει έτσι ανάγκη ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας. Παράδειγμα τέτοιου ημιαγωγού αποτελεί το γερμάνιο με πρόσμειξη ατόμων γαλλίου αυτή τη φορά.

Η δημιουργία ημιαγωγών πρόσμειξης αποτελεί κρίσιμη διαδικασία στην κατασκευή διόδων (επαφή p -n), τρανζίστορς (επαφές p -n -p ή n -p -n) και άλλων ηλεκτρονικών συσκευών μεγάλης τεχνολογικής σημασίας.

8.4. Υπεραγωγιμότητα.

Το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας, κατά το οποίο η αντίσταση ορισμένων υλικών εξαφανίζεται τελείως "σε χαμηλές θερμοκρασίες", είναι ένα εξαιρετικά ενδιαφέρον και περίπλοκο φαινόμενο στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης. Το ενδιαφέρον του έγκειται στις όλο και πιο σπουδαιές τεχνολογικές εφαρμογές του, η δε περιπλοκότητά του στο ότι έχουμε να κάνουμε με κβαντική συμπεριφορά σε μεσοσκοπική κλίμακα. Τα φαινόμενα "χαμηλών θερμοκρασιών", τα οποία μας αφορούν εδώ, έχουν να κάνουν με την αυθόρμητη εμφάνιση μιας φάσης "τάξης"



ξεκινώντας από μια φάση "αταξίας" - μετατροπή φάσης - και αυτό όταν μια εξωτερική παράμετρος μεταβάλλεται. Σ' αυτή την κατηγορία φαινομένων, το μεν φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας που θα δούμε εδώ έχει να κάνει μ' ένα φορτισμένο σύστημα (ηλεκτρόνια), το δε ανάλογο φαινόμενο της υπερρρευσιμότητας (στο οποίο ήδη αναφερθήκαμε και θα επανέλθουμε στην §Π-Π.7) έχει να κάνει μ' ένα αφόρτιστο σύστημα (άτομα ^4He και ^3He).

ι) Φαινομενολογική περιγραφή της υπεραγωγιμότητας

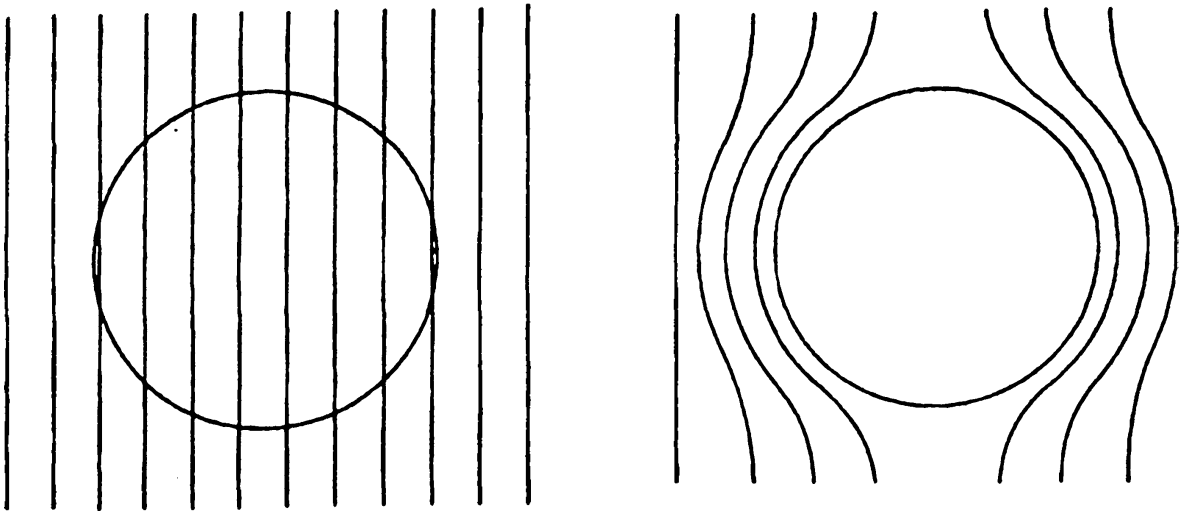
Σ' αντίθεση με τα κανονικά μέταλλα, στα οποία η ειδική αντίσταση ρ (που είναι αντιστρόφως ανάλογη της μέσης ελεύθερης διαδρομής d των ηλεκτρονίων) είναι για $T \geq 15^\circ\text{K}$ ανάλογη της θερμοκρασίας, αλλά για χαμηλότερες θερμοκρασίες γίνεται σταθερή (λόγω της ύπαρξης προσμείξεων), σ' έναν υπεραγωγό παρατηρείται μια απότομη μεταβολή στην αντίσταση που γίνεται μηδέν (άπειρη, αντίστοιχα, αγωγιμότητα) κάτω από μια κρίσιμη θερμοκρασία T_c . Αυτό παρατηρήθηκε για πρώτη φορά το 1911 από τον H. Kamerlingh Onnes στον υδράργυρο με κρίσιμη θερμοκρασία 4.2°K . Για εκείνα τα καθαρά μέταλλα, που γίνονται υπεραγωγοί σε χαμηλές θερμοκρασίες, η κρίσιμη θερμοκρασία στην οποίαν η αντίσταση μηδενίζεται ποικίλει από κοντά στο 0°K μέχρι περίπου 10°K .

Τα υπεραγωγά καθαρά στοιχεία ανήκουν στην λεγόμενη κατηγορία υπεραγωγών τύπου - I. Το χαρακτηριστικό φαινόμενο εδώ είναι η ιδιότητα του μηδενισμού του μαγνητικού πεδίου μέσα στον υπεραγωγό, εκτός από ένα λεπτό επιφανειακό στρώμα του οποίου το τυπικό πάχος, γνωστό σαν βάθος διείσδυσης λ , είναι περίπου 50 nm. Το φαινόμενο αυτό του αποκλεισμού του μαγνητικού πεδίου από το εσωτερικό ενός υπεραγωγού είναι ανάλογο του αποκλεισμού του ηλεκτρικού πεδίου από το εσωτερικό ενός κανονικού αγωγού. Ο αποκλεισμός της μαγνητικής ροής από το εσωτερικό ενός υπεραγωγού συνιστά το φαινόμενο Meissner (W. Meissner - R. Ochsenfeld 1933) και συμβαίνει, αρκεί το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο να μην ξεπερνά μια ορισμένη κρίσιμη τιμή $B_c(T)$ που εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Το σχήμα 8.9 απεικονίζει το φαινόμενο Meissner. Το κρίσιμο μαγνητικό πεδίο $B_c(T)$ έχει τη μορφή του σχήματος 8.10 και η εξάρτηση από τη θερμοκρασία είναι της μορφής

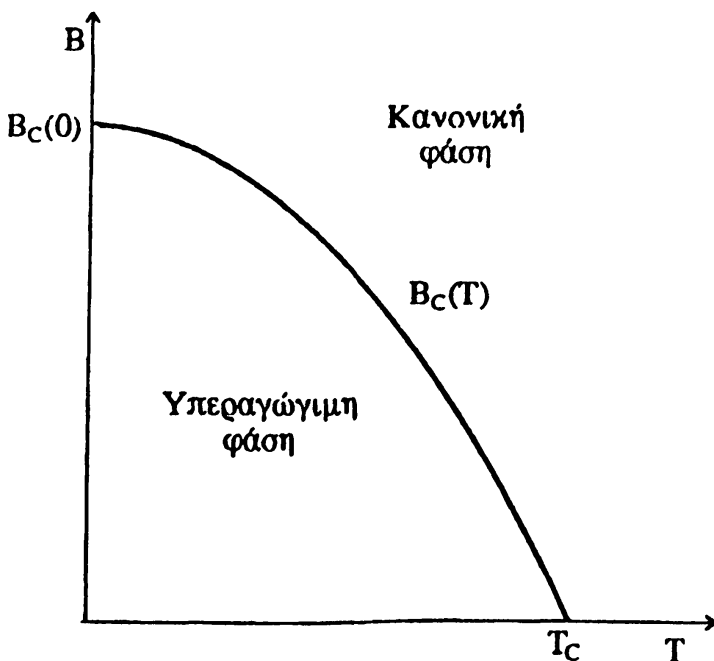
$$B_c(T) = B_c(0) \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right) \quad (8.47)$$

Τυπική τιμή για το κρίσιμο μαγνητικό πεδίο $B_c(0)$ σε θερμοκρασία μηδέν είναι 0.1 T . Το σχήμα 8.10 είναι γνωστό σαν διάγραμμα φάσης και καθορίζει το όριο ανάμεσα στην κανονική και την υπεραγωγιμη κατάσταση.



Κανονική κατάσταση ($T > T_c$)Υπεραγώγιμη κατάσταση ($T < T_c$)

Σχ. 8.9. Φαινόμενα Meissner (αποκλεισμός του μαγνητικού πεδίου από το εσωτερικό ενός υπεραγωγού).



Σχ. 8.10 Το διάγραμμα φάσης ενός υπεραγωγού τύπου - I

Δεν είναι δύσκολο να καταλάβει κανείς γιατί για ενεργειακούς λόγους υπάρχει ένα κρίσιμο μαγνητικό πεδίο πάνω από το οποίο η υπεραγωγιμότητα εξαφανίζεται. Η ύπαρξη της υπεραγωγιμότητας για μηδενικό μαγνητικό πεδίο σημαίνει ότι το υλικό στην κανονική του κατάσταση έχει ενεργειακή πυκνότητα υψηλότερη από εκείνη της υπεραγώγιμης κατάστασης, ας πούμε κατά ένα ποσό Δ



(γνωστό σαν ενέργεια συμπίκνωσης ανά μονάδα όγκου). Όταν ένας υπεραγωγός με γραμμικές διαστάσεις αρκετά μεγαλύτερες από το λ τοποθετηθεί μέσα σ' ένα μαγνητικό πεδίο B , το μαγνητικό πεδίο εξοστρακίζεται από σχεδόν ολόκληρο το υλικό με ενεργειακό κόστος ανά μονάδα όγκου ίσο με $B^2/8\pi$. Επομένως, είναι ενεργειακά προτιμότερο για το υλικό να βρεθεί στην υπεραγώγιμη κατάσταση μόνον αν το μαγνητικό πεδίο είναι κάτω από μια κρίσιμη τιμή (θερμοδυναμικό κρίσιμο πεδίο)

$$B_c(T) = \sqrt{8\pi\Delta} \quad (8.48)$$

Ένα μαγνητικό πεδίο $B < B_c(T)$ θα διεισδύσει μέσα στον υπεραγωγό σε βάθος λ , αλλά βέβαια αυτό δεν εξαφανίζει την υπεραγωγιμότητα στο αντίστοιχο επιφανειακό στρώμα. Πράγματι, όπως προκύπτει από την εξίσωση Maxwell $\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$, το ηλεκτρικό ρεύμα περιορίζεται σ' αυτό ακριβώς το επιφανειακό στρώμα του υπεραγωγού. Η μετάβαση από την κανονική στην υπεραγώγιμη φάση κάτω από την παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου συνοδεύεται από έκλυση ενός ποσού ενέργειας (ίσου με την ενέργεια συμπίκνωσης). Η έκλυση μιας τέτοιας ενέργειας (ανάλογης με την λανθάνουσα θερμότητα) χαρακτηρίζει μια μετατροπή φάσης πρώτης τάξης. Σε μια μετατροπή φάσης πρώτης τάξης παρατηρείται συνύπαρξη περιοχών κανονικής και υπεραγώγιμης κατάστασης (σε αναλογία με ό,τι συμβαίνει με τον πάγο στο νερό).

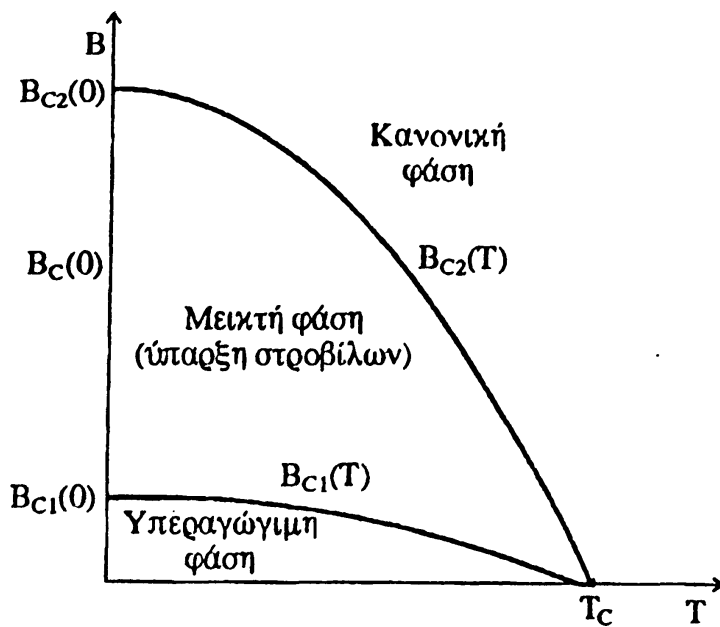
Στην κρίσιμη θερμοκρασία η ενέργεια συμπίκνωσης μηδενίζεται, ενώ πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία δεν υπάρχει υπεραγώγιμη κατάσταση. Εξ άλλου, σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο η μετατροπή φάσης είναι θερμοδυναμικά αντιστρεπτή. Σε μια τέτοια περίπτωση μιλάμε για μια μετατροπή φάσης δεύτερης τάξης.

Αυτό το σημείο μας φέρνει στη δεύτερη κατηγορία υπεραγωγών, τους υπεραγωγούς τύπου-II. Σ' αυτή την κατηγορία ανήκουν τα υπεραγώγιμα κράματα (σύνθετα υλικά). Η διάκριση ανάμεσα στους υπεραγωγούς τύπου - I και τύπου - II οφείλεται κυρίως στις μαγνητικές τους ιδιότητες. Οι υπεραγωγοί τύπου - II χαρακτηρίζονται από δύο κρίσιμα μαγνητικά πεδία B_{c1} και B_{c2} και η σχέση ανάμεσα στα κρίσιμα μαγνητικά πεδία τύπου - II και το (θερμοδυναμικό) κρίσιμο πεδίο B_c ενός υπεραγωγού τύπου - I είναι

$$B_{c1} < B_c < B_{c2} \quad (8.49)$$

Τα B_{c1} και B_{c2} είναι συναρτήσεις της θερμοκρασίας, όπως το B_c . Η τιμή του B_{c2} για διάφορους υπεραγωγούς τύπου-II ξεπερνά τα 10T στην θερμοκρασία του υγρού ηλίου (4.2°K). Το διάγραμμα φάσης ενός υπεραγωγού τύπου-II φαίνεται στο σχήμα 8.11.

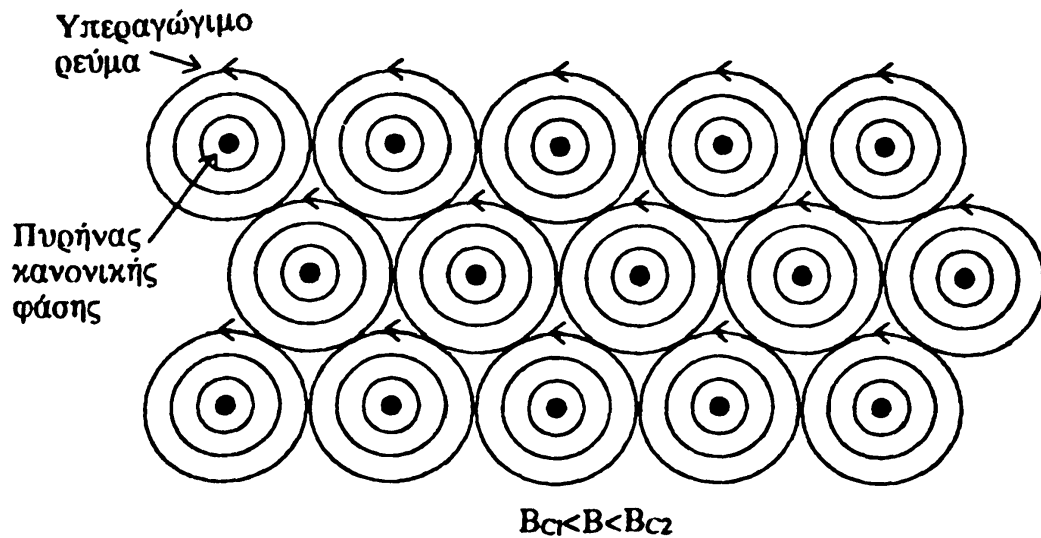




Σχ. 8.11. Το διάγραμμα φάσης ενός υπεραγωγού τύπου-II.

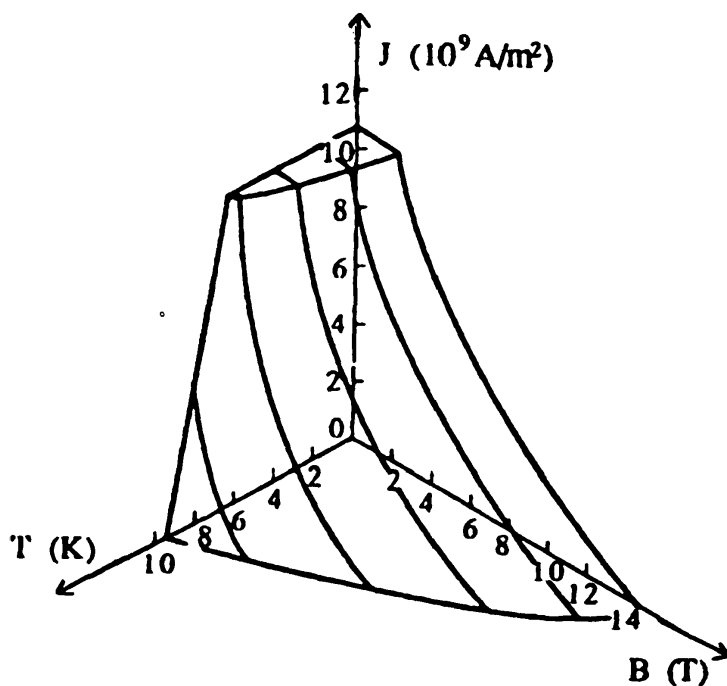
Όταν το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο είναι κάτω από το κατώτερο κρίσιμο πεδίο B_{c1} , το υλικό βρίσκεται στην υπεραγώγιμη κατάσταση και το μαγνητικό πεδίο εξοστρακίζεται σχεδόν εξ ολοκλήρου από το εσωτερικό του υπεραγωγού, όπως σ' έναν υπεραγωγό τύπου-I. Όταν το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο είναι πάνω από το ανώτερο κρίσιμο μαγνητικό πεδίο B_{c2} , το υλικό είναι στην κανονική κατάσταση. Για τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου μεταξύ των $B_{c1}(T)$ και $B_{c2}(T)$, το υλικό βρίσκεται σε μια ειδική μεικτή κατάσταση, που είναι μερικά κανονική και μερικά υπεραγώγιμη (το μαγνητικό πεδίο διεισδύει στο υλικό στις περιοχές της κανονικής φάσης). Η μεικτή κατάσταση χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη στροβίλων και απαρτίζεται από μια διάταξη υπεραγώγιμων ρευμάτων, τα οποία περιβάλλουν πυρήνες κανονικής κατάστασης, όπως φαίνεται στο σχήμα 8.12. Το τυπικό μέγεθος ενός πυρήνα κανονικής κατάστασης είναι 300 nm. Όταν αυξάνεται το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, η απόσταση μεταξύ των στροβίλων μειώνεται και χρειάζονται ισχυρότερα υπεραγώγιμα ρεύματα για να διατηρηθεί το πεδίο έξω από τον υπεραγωγό. Για αρκετά μεγάλα μαγνητικά πεδία, οι στροβίλοι έρχονται τόσο κοντά, ώστε οι πυρήνες κανονικής φάσης αλληλοεπικαλύπτονται εξ ολοκλήρου και το υλικό παύει να είναι υπεραγωγό.





Σχ. 8.12. Η μεικτή (στροβιλώδης) κατάσταση σ' έναν υπεραγωγό τύπου - II

Η ύπαρξη κρίσιμων μαγνητικών πεδίων και κρίσιμων υπεραγωγικών ρευμάτων (αντίστοιχες πυκνότητες ρεύματος J μεγαλύτερες του 10^9 A/m^2) σ' έναν υπεραγωγό τύπου - II απεικονίζονται και σ' ένα τριδιάστατο διάγραμμα φάσης, όπως αυτό του σχήματος 8.13.



Σχ. 8.13. Τριδιάστατο διάγραμμα φάσης ενός υπεραγωγού τύπου - II (νιόβιο - τιτάνιο NbTi).

Μέχρι το 1986 πιστευόταν ότι ήταν αδύνατο να υπάρχουν υπεραγωγοί με κρίσιμη θερμοκρασία T_c πάνω από περίπου 25°K . Όμως, το 1986 οι J.G. Bednorz

και Κ.Α. Müller ανακάλυψαν μια νέα κατηγορία υπεραγωγών τύπου -II σε κεραμικά υλικά (κράματα La_2CuO_4 με προσμείξεις, π.χ. $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ή $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$) με κρίσιμη T_c θερμοκρασία περίπου 35°K . Εκτοτε, οικογένειες υπεραγωγών υψηλής T_c ανακαλύφθηκαν σε σύνθετα υλικά με οξειδία του χαλκού και με κρίσιμη θερμοκρασία υψηλότερη από εκείνη του υγρού αζώτου (77°K). Έτσι, υπάρχουν υπεραγωγοί με κρίσιμη θερμοκρασία μέχρι 130°K (92°K για το $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, 125°K για το $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$) και η έρευνα συνεχίζεται.

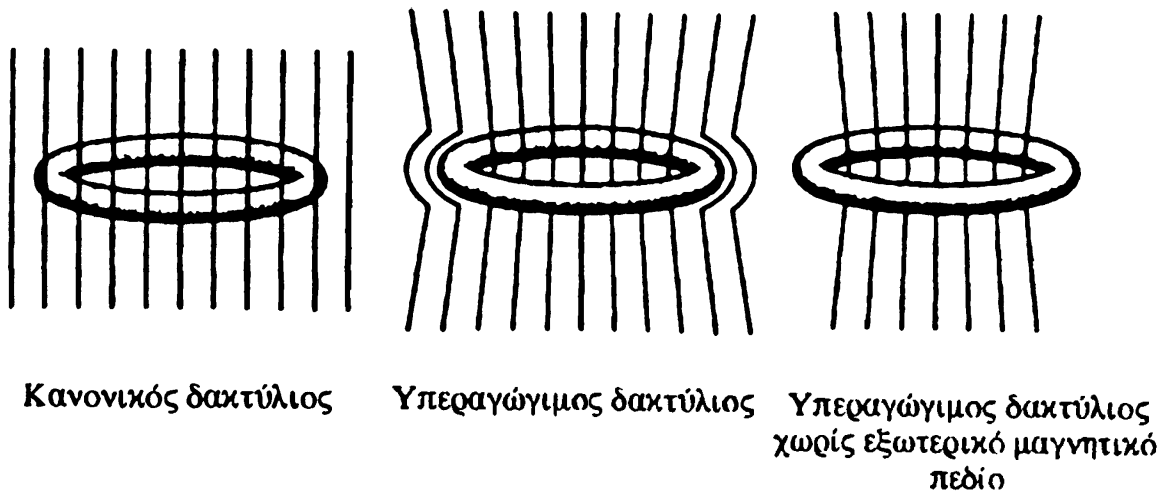
Στη μικροσκοπική θεωρία της υπεραγωγιμότητας, στην οποία θ' αναφερθούμε παρακάτω, εκτός από το βάθος διείσδυσης λ υπάρχει και ένα άλλο χαρακτηριστικό μέγεθος. Αυτό είναι το μήκος συμφωνίας ή συσχετισμού ξ , που αποτελεί ένα μέτρο της απόστασης στην οποία συσχετίζονται τα δύο ηλεκτρόνια της δέσμιας κατάστασης ενός ζευγαριού ηλεκτρονίων σ' έναν υπεραγωγό. Η έλξη μεταξύ δύο ηλεκτρονίων σ' έναν υπεραγωγό μπορεί να κατανοηθεί σαν μια διαδικασία δύο βημάτων, όπου υπό ορισμένες προϋποθέσεις η διέλευση ενός ηλεκτρονίου δια μέσου του κρυσταλλικού πλέγματος προκαλεί μια παραμόρφωσή του με αποτέλεσμα ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο να έλκεται. Ένα τέτοιο ζευγάρι ηλεκτρονίων, γνωστό σαν ζεύγος Cooper, συμπεριφέρεται σαν μποζόνιο (συνολικό σπιν μηδέν) και το "μέγεθός" του είναι μερικές εκατοντάδες nm. Έτσι, σ' έναν υπεραγωγό τύπου - I το μήκος συσχετισμού ξ είναι μεγαλύτερο από το βάθος διείσδυσης λ : $\xi > \lambda$. Όταν σχηματίζεται όμως ένα κράμα, το μήκος συσχετισμού ξ μειώνεται (λόγω μείωσης της μέσης ελεύθερης διαδρομής των ηλεκτρονίων), ενώ το βάθος διείσδυσης λ αυξάνεται. Έτσι, στους υπεραγωγούς τύπου-II έχουμε : $\xi < \lambda$. Ουσιαστικά, ο λόγος του μήκους συσχετισμού προς το βάθος διείσδυσης καθορίζει αν ένας υπεραγωγός είναι τύπου-I ή τύπου-II. Σ' έναν υπεραγωγό τύπου-II χρειάζεται να διακρίνουμε μαγνητικά πεδία στις τρεις περιοχές $B < B_{c1}$, $B_{c1} < B < B_{c2}$ και $B > B_{c2}$, όπου B_{c1} και B_{c2} είναι τα δύο κρίσιμα μαγνητικά πεδία τάξης

$$B_{c1} \approx \sqrt{8\pi\Delta} \frac{\xi}{\lambda}, \quad (8.50)$$

$$B_{c2} \approx \sqrt{8\pi\Delta} \frac{\lambda}{\xi} \quad (8.51)$$

Ένα τελευταίο σχετικό χαρακτηριστικό των υπεραγωγών που πρέπει ν' αναφέρουμε είναι η κβάντωση της μαγνητικής ροής, που παρατηρείται σ' έναν υπεραγωγό διακτύλιο. Όπως φαίνεται στο σχήμα 8.14, για ένα κανονικό αγωγό μέσα σ' ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο οι δυναμικές γραμμές περνάνε τόσο μέσα από το δακτύλιο, όσο και μέσα από το αγωγό υλικό. Στην περίπτωση του υπεραγωγίου δακτυλίου, δημιουργείται ρεύμα στην επιφάνεια του υπεραγωγίου υλικού και το μαγνητικό πεδίο αποβάλλεται από το εσωτερικό του. Όμως,





Σχ. 8.14. Μαγνητική ροή στην περιοχή ενός δακτυλίου.

υπάρχουν δυναμικές γραμμές δια μέσου του δακτυλίου. Όταν απομακρυνθεί το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, το παραμένον υπεραγωγίμο ρεύμα διατηρεί μια παγιδευμένη μαγνητική ροή δια μέσου του δακτυλίου. Μια μετρηθείσα τιμή του παγιδευμένου μαγνητικού πεδίου είναι $B_0 = 0.21 \text{ T}$ με μεταβολή $\Delta B = -1.7 \times 10^{-7} \text{ T}$ σε μια περίοδο ενός μηνός ($\Delta t = 3 \times 10^6 \text{ sec}$). Αυτό σημαίνει ότι ο χρόνος ζωής τ του παγιδευμένου μαγνητικού πεδίου και του παραμένοντος ρεύματος, που το δημιουργεί, είναι $\tau = -\frac{B_0 \Delta t}{\Delta B} = 3.7 \times 10^{12} \text{ sec} = 1.2 \times 10^5 \text{ έτη!}$ Η μαγνητική ροή, που διαπερνά την επιφάνεια που περικλείεται από τον υπεραγωγίμο δακτύλιο, παρατηρείται ότι είναι κβαντισμένη

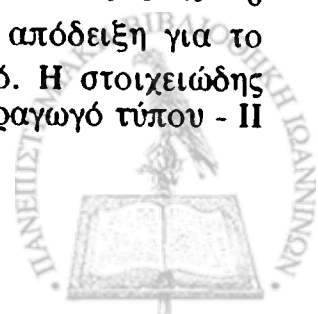
$$\Phi = \oint \mathbf{B} \, d\mathbf{S} = n \Phi_0 \quad (8.52)$$

όπου

$$\Phi_0 = \frac{2\pi \hbar c}{2e} = \frac{hc}{2e} \quad (8.53)$$

το στοιχειώδες κβάντο μαγνητικής ροής (ελάχιστη μαγνητική ροή) με αριθμητική τιμή $2 \times 10^{-15} \text{ T m}^2$.

Ο πειραματικός προσδιορισμός της στοιχειώδους μαγνητικής ροής Φ_0 (Deaver-Fairbank, Doll-Näbauer 1961) υπήρξε η αδιάψευστη απόδειξη για το σχηματισμό των ζευγών Cooper ($|q| = 2e$) στον υπεραγωγό. Η στοιχειώδης μαγνητική ροή Φ_0 συνδέεται με κάθε στρόβιλο μέσα σ' ένα υπεραγωγό τύπου - II



(βλ. σχ. 8.12) και δείχνει ότι ένας τέτοιος στρόβιλος είναι ευσταθής. Στρόβιλοι μεγαλύτερης μαγνητικής ροής δεν μπορούν να εξαφανιστούν, αλλά η κβάντωση της μαγνητικής ροής από μόνη της δεν τους εμποδίζει να διασπαστούν σε στρόβιλους μικρότερης ροής. Έχειδειχθεί ότι στρόβιλοι ροής $n \Phi_0$ με $n > 1$ είναι ασταθείς στο να διασπαστούν σε n στρόβιλους ροής Φ_0 μόνον εάν $\xi < \lambda$. Αυτός είναι ένας από τους λόγους της διάκρισης των υπεραγωγών σε τύπου - I ή τύπου - II ανάλογα με τις σχετικές τιμές των παραμέτρων ξ και λ , όπως ήδη αναφέραμε.

ii) Θεωρητική περιγραφή υπεραγωγιμότητας

Ας επιχειρήσουμε τώρα μια σύντομη αναφορά στη θεωρία της υπεραγωγιμότητας. Όπως είπαμε στην αρχή, η θεωρία της υπεραγωγιμότητας έχει τόσο πλούσια ιστορία, όσο και οι πειραματικές ανακαλύψεις που την συνοδεύουν, και ο λόγος είναι ότι έχουμε εδώ να κάνουμε με μια περιοχή της φυσικής που μερικές πλευρές της απευθύνονται σε μικροσκοπικά φαινόμενα, ενώ μερικές άλλες σε μεσοσκοπικά.

Η πρώτη μεγάλη πρόοδος στη θεωρητική κατανόηση της υπεραγωγιμότητας έγινε το 1935 από τους Fritz και Heinz London, που βρήκαν μια θεωρητική έκφραση που περιέγραφε τόσο την άπειρη αγωγιμότητα, όσο και το φαινόμενο Meissner στους υπεραγωγούς. Η ιδέα ήταν να βρεθεί μια έκφραση, η οποία σε αντίθεση με ό,τι συμβαίνει σ' έναν κανονικό αγωγό, όπου $\mathbf{J}_{\eta\lambda} \propto \mathbf{E}$ ($\mathbf{J}_{\eta\lambda} = \sigma \mathbf{E}$, νόμος του Ohm), να προβλέπει $\mathbf{J}_{\eta\lambda} \propto \mathbf{A}$, όπου \mathbf{A} το ανυσματικό δυναμικό. Τότε $\frac{\partial \mathbf{J}_{\eta\lambda}}{\partial t} \propto \mathbf{E}$, οπότε σε απουσία πεδίου η χρονική παράγωγος του ρεύματος είναι μηδέν, αλλά όχι αναγκαστικά το ίδιο το ρεύμα, το οποίο θα διατηρείται σταθερό (έλλειψη αντίστασης). Έτσι, γράφοντας για το (υπεραγωγίμο) ρεύμα την έκφραση

$$\mathbf{J}_{\eta\lambda} = -n_e e \mathbf{v}_d \quad (8.54)$$

όπου n_e η πυκνότητα των (υπεραγωγίμων) ηλεκτρονίων και \mathbf{v}_d η ταχύτητα τριβής τους, έχουμε

$$\frac{\partial \mathbf{J}_{\eta\lambda}}{\partial t} = -n_e e \frac{d\mathbf{v}_d}{dt} \quad (8.55)$$

Επειδή

$$\frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = \frac{-e \mathbf{E}}{m_e} \quad (8.56)$$

προκύπτει ότι



$$\frac{\partial \mathbf{J}_{\eta\lambda}}{\partial t} = \frac{n_e e^2}{m_e} \mathbf{E} \quad (8.57)$$

Η εξίσωση London (8.57) προβλέπει το φαινόμενο Meissner. Πράγματι, από την (8.57) βρίσκουμε ότι

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{J}_{\eta\lambda}) = \frac{n_e e^2}{m_e} \nabla \times \mathbf{E} \quad (8.58)$$

και από την αντίστοιχη εξίσωση Maxwell (νόμος του Faraday) έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{J}_{\eta\lambda}) = - \frac{n_e e^2}{m_e c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (8.59)$$

δηλαδή

$$\nabla \times \mathbf{J}_{\eta\lambda} = - \frac{n_e e^2}{m_e c} \mathbf{B} \quad (8.60)$$

Από την εξίσωση Maxwell (νόμος του Ampère με $\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0$)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_{\eta\lambda} \quad (8.61)$$

και την ταυτότητα

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}) - (\nabla \cdot \nabla) \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} \quad (8.62)$$

παίρνουμε με βάση την (8.60) την εξίσωση

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{4\pi n_e e^2}{m_e c^2} \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B} \quad (8.63)$$

Η μόνη λύση ομογενούς μαγνητικού πεδίου που ικανοποιεί την εξίσωση αυτή είναι

$$\mathbf{B} = 0 \quad (8.64)$$

Το μαγνητικό πεδίο είναι μηδέν στο εσωτερικό του υπεραγωγού (φαινόμενο Meissner). Στην πραγματικότητα, η λύση της (8.63) παριστάνει ένα εξωτερικό πεδίο που διεισδύει μέσα στον υπεραγωγό με εκθετική μείωση: περιοριζόμενοι σε μια διάσταση έχουμε

$$B(x) = B_0 e^{-x/\lambda_L} \quad (8.65)$$

όπου $\lambda_L = \sqrt{\frac{m_e c^2}{4\pi n_e e^2}}$ το βάθος διείσδυσης London. Το πραγματικό βάθος διείσδυσης λ μπορεί να μετρηθεί και βρίσκεται σε καλή συμφωνία με τον τύπο του London $\lambda \approx \lambda_L$. Το βάθος διείσδυσης λ μεταβάλλεται με την θερμοκρασία: είναι ελάχιστο για $T = 0$ και απειρίζεται στην κρίσιμη θερμοκρασία $T = T_c$, οπότε το μαγνητικό πεδίο διεισδύει πλήρως μέσα στο υλικό (απώλεια υπεραγωγιμότητας - μετατροπή φάσης).



Ας υποθέσουμε ότι γράφουμε την κυματοσυνάρτηση της υπεραγωγίμης κατάστασης με τη γενική μορφή

$$\Psi(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) e^{iS(\mathbf{x})} \quad (8.66)$$

Το ηλεκτρικό ρεύμα που συνδέεται με την κυματοσυνάρτηση αυτή είναι

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\eta\lambda} &= q \mathbf{J} = \frac{i \hbar q}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \\ &= \frac{\hbar q}{m} |\Psi|^2 \nabla S \end{aligned} \quad (8.67)$$

όπου $|\Psi|^2 = A^2$ και q, m το φορτίο και η μάζα του φορέα του υπεραγωγίμου ρεύματος. Μέσα σ' ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ πρέπει να κάνουμε την αντικατάσταση $\nabla \rightarrow \nabla - \frac{iq}{\hbar c} \mathbf{A}$, οπότε

$$\mathbf{J}_{\eta\lambda} = \frac{\hbar q}{m} |\Psi|^2 \nabla S - \frac{q^2}{mc} |\Psi|^2 \mathbf{A} \quad (8.68)$$

Η εξίσωση London (8.57) γράφεται ισοδύναμα

$$\mathbf{J}_{\eta\lambda} = - \frac{n_e e^2}{m_e c} \mathbf{A} \quad (8.69)$$

Σύγκριση με την (8.68) δείχνει ότι στην μικροσκοπική περιγραφή της υπεραγωγιμότητας πρέπει να υποθέσουμε ότι η φάση S δεν εξαρτάται από το \mathbf{x} και ότι $|\Psi|^2 = n$ είναι η πυκνότητα των φορέων της υπεραγωγιμότητας.

Το 1950 οι V.L. Ginzburg και L.D. Landau προχώρησαν ακριβώς σε μια φαινομενολογική θεωρία της υπεραγωγιμότητας εισάγοντας μια κυματοσυνάρτηση Ψ , της οποίας το τετράγωνο παριστάνει την πυκνότητα των φορέων της υπεραγωγιμότητας $|\Psi|^2 = n$. Η κυματοσυνάρτηση Ψ ικανοποιεί μια εξίσωση τύπου Schrödinger, γνωστή σαν εξίσωση Ginzburg - Landau, που σε μια διάσταση μπορεί να γραφεί σαν

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Psi \quad (8.70)$$

όπου α είναι μια σταθερά εξαρτώμενη από τη θερμοκρασία. Η λύση της (8.70) είναι της μορφής

$$\Psi(x) = C e^{-x/\xi} \quad (8.71)$$

όπου C σταθερά και

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\alpha}} \quad (8.72)$$

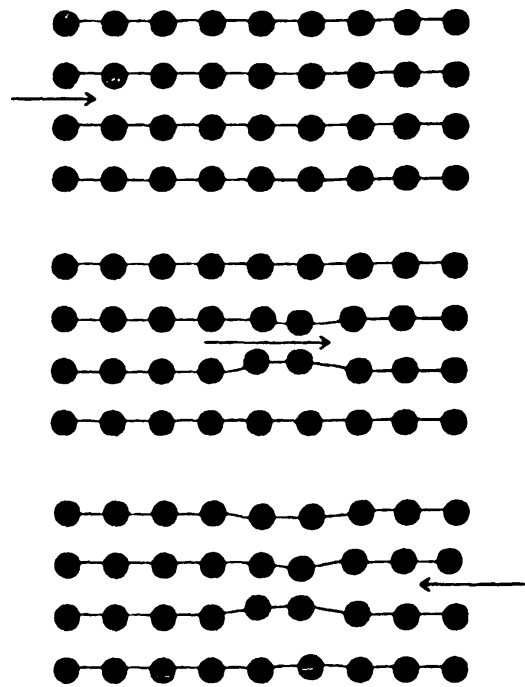
παράμετρος, γνωστή σαν μήκος συμφωνίας ή συσχετισμού, που χαρακτηρίζει την κλίμακα αποστάσεων σε μια μικροσκοπική θεωρία της υπεραγωγιμότητας. Η φαινομενολογική θεωρία Ginzburg - Landau μπορεί να προκύψει από την



μικροσκοπική θεωρία της υπεραγωγιμότητας, που αναπτύχθηκε στη συνέχεια και στην οποία ερχόμαστε τώρα.

Έτσι, το 1956 έγινε το επόμενο βήμα στην κατανόηση της φύσης της υπεραγωγιμότητας από τον L.N. Cooper. Η βασική ιδέα ήταν ότι η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με το κρυσταλλικό πλέγμα οδηγεί σε μια έμμεση ασθενή αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου. Αυτό φαίνεται παραστατικά στο σχήμα 8.15, όπου η διέλευση ενός ηλεκτρονίου δημιουργεί παραμόρφωση του κρυσταλλικού πλέγματος των θετικών ιόντων με αποτέλεσμα (μέσω της ανταλλαγής φωνονίων) ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο να έλκεται και να

προκύπτουν δέσμιες καταστάσεις από ζευγάρια ηλεκτρονίων. Πράγματι, ο Cooper λαμβάνοντας υπ' όψη τις αλληλεπιδράσεις που συνιστούν το δυναμικό μιας τέτοιας διάταξης, όπου αρχικά τα ενεργειακά επίπεδα μέχρι την ενέργεια Fermi είναι κατειλημμένα από ηλεκτρόνια, έδειξε ότι πράγματι παραμένει μια ασθενής αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων, που είναι ισχυρότερη για ηλεκτρόνια αντίθετου σπιν και ορμής. Οι δέσμιες καταστάσεις τέτοιων ζευγαριών ηλεκτρονίων - ζεύγη Cooper - συμπεριφέρονται, συνεπώς, σαν ένα σύστημα μποζονίων (ανάλογο φαινόμενο έχουμε στην υπερρευστότητα του ^3He , βλ. §Π-II.7) Αν τα ζεύγη Cooper δημιουργούν μια ευσταθή βασική κατάσταση και συνιστούν τους φορείς της υπεραγωγιμότητας, θα έχουμε $m = 2m_e$ και $q = -2e$ στην φαινομενολογική θεωρία που περιγράψαμε προηγουμένως.

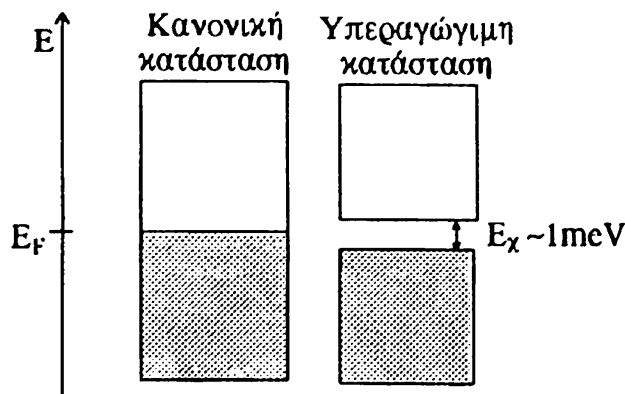


Σχ. 8.15. Η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - κρυσταλλικού πλέγματος - ηλεκτρονίου για την θεωρία της υπεραγωγιμότητας.

Την επόμενη χρονιά 1957

δημοσιεύτηκε μια από τις σημαντικότερες εργασίες στο πεδίο που συζητάμε, η θεωρία των J. Bardeen, L. N. Cooper και R. Schrieffer, γνωστή έκτοτε με τα αρχικά τους σαν θεωρία BCS. Η ιδέα βασίστηκε στην ανακάλυψη ότι μια σύμφωνη κατάσταση από ζεύγη Cooper παραμορφώνει την ενεργειακή κατανομή κοντά στην ενέργεια Fermi, κατεβάζοντας τα κατειλημμένα ενεργειακά επίπεδα κάτω από την ενέργεια Fermi κατά ένα ποσό $E_F/2$ και ανεβάζοντας τα κενά ενεργειακά επίπεδα πάνω από αυτή κατά ένα ίσο ποσό δημιουργώντας έτσι ένα συνολικό ενεργειακό

χάσμα E_χ . Το ενεργειακό χάσμα είναι αποτέλεσμα της ενέργειας σύνδεσης λόγω του σχηματισμού των ζευγών Cooper. Ο σχηματισμός των ζευγών Cooper εμποδίζεται από τις θερμικές διεγέρσεις των ηλεκτρονίων. Καθώς η θερμοκρασία ελαττώνεται, ο αριθμός των ηλεκτρονίων που μπορούν να διασχίσουν το ενεργειακό χάσμα μειώνεται, ο αριθμός των ζευγών Cooper που σχηματίζονται αυξάνεται και το ενεργειακό χάσμα γίνεται μεγαλύτερο. Έτσι, η εμφάνιση του ενεργειακού χάσματος, καθώς η θερμοκρασία ελαττώνεται κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία T_c , παρουσιάζει ένα κατώφλι. Σε μηδενική θερμοκρασία, όλες οι καταστάσεις κάτω από το ενεργειακό χάσμα είναι κατειλημμένες και η συνολική ενέργεια της υπεραγώγιμης κατάστασης είναι χαμηλότερη από αυτήν της κανονικής κατάστασης. Το σχετικό διάγραμμα των ενεργειακών ζωνών δείχνεται στο σχήμα 8.16.



Σχ. 8.16. Το ενεργειακό διάγραμμα ενός κανονικού αγωγού και ενός υπεραγωγού.

Η θεωρία BCS κάνει μια ποσοτική πρόβλεψη για το ενεργειακό χάσμα E_χ συναρτήσει της θερμοκρασίας. Σε καλή προσέγγιση, για θερμοκρασίες πάνω από την κρίσιμη T_c το ενεργειακό χάσμα είναι μηδέν, ενώ κάτω από αυτήν είναι σταθερό. Κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία, η θεωρία BCS προβλέπει ότι

$$E_\chi(T) \approx E_\chi(0) \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \quad (8.73)$$

όπου το ενεργειακό χάσμα $E_\chi(0)$ σε μηδενική θερμοκρασία προκύπτει να είναι ανάλογο της κρίσιμης θερμοκρασίας

$$E_\chi(0) \approx 3.5 k T_c \quad (8.74)$$

Η τάξη μεγέθους του ενεργειακού χάσματος $E_\chi(0)$ είναι $E_\chi(0) \approx 10^{-4} E_F \approx 1 \text{ meV}$. Η θεωρία BCS προβλέπει, επίσης, την εξάρτηση (8.47) του κρίσιμου μαγνητικού πεδίου από την θερμοκρασία. Τέλος, η θερμοχωρητικότητα ενός υπεραγώγιμου υλικού προβλέπεται να έχει την θερμοκρασιακή εξάρτηση



$$C = A e^{-B/kT} \quad (8.75)$$

όπου A και B σταθερές. Η εκθετική συμπεριφορά (8.75) είναι σε συμφωνία με το πείραμα και ενδεικτική της ύπαρξης ενεργειακού χάσματος.

Η κβάντωση της μαγνητικής ροής (8.52) προκύπτει από την οριακή συνθήκη της κυματοσυνάρτησης της υπεραγωγίσιμης κατάστασης, η οποία είδαμε ότι μπορεί να γραφεί σαν

$$\Psi = \sqrt{n_C} e^{i\phi} \quad (8.76)$$

όπου n_C η πυκνότητα των φορέων της υπεραγωγιμότητας, δηλαδή των ζευγών Cooper (μέσα σ' ένα υπεραγωγίσιμο δακτύλιο), και ϕ η σταθερή φάση. Από την συνθήκη κβάντωσης Bohr-Sommerfeld (E.9) (βλ. και §7.6, 9.4) έχουμε

$$\begin{aligned} nh &= \oint \mathbf{p}_C \cdot d\mathbf{r} = \oint (\nabla \times \mathbf{p}_C) \cdot d\mathbf{S} \\ &= \frac{m_C}{q_C n_C} \oint (\nabla \times \mathbf{J}_C) \cdot d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (8.77)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση

$$\mathbf{p}_C = m_C \mathbf{v}_C = \frac{m_C}{q_C n_C} \mathbf{J}_C \quad (8.78)$$

μεταξύ της ορμής \mathbf{p}_C των ζευγών Cooper ($m_C = 2m_e$, $q_C = -2e$) και της αντίστοιχης πυκνότητας ρεύματος. Η σχέση (8.68) δίνει

$$\mathbf{J}_C = - \frac{q_C^2 n_C}{m_C c} \mathbf{A} \quad (8.79)$$

$$\nabla \times \mathbf{J}_C = - \frac{q_C^2 n_C}{m_C c} \mathbf{B} \quad (8.80)$$

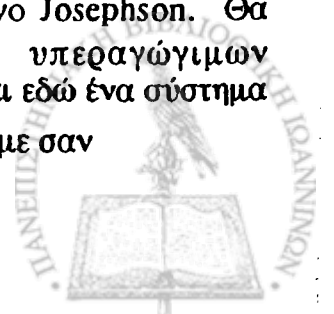
Η συνθήκη κβάντωσης (8.77) συνεπάγεται, λοιπόν,

$$nh = - \frac{q_C}{c} \oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = - \frac{q_C}{c} \Phi_B \quad (8.81)$$

δηλαδή την κβάντωση της μαγνητικής ροής

$$\Phi_B = n \frac{h c}{2e} \quad (8.82)$$

Το 1962 ο B. Josephson προέβλεψε ότι ένα ζεύγος Cooper μπορεί να διασχίσει λόγω φαινομένου σήραγγας ένα λεπτό στρώμα μονωτή που παρεμβάλλεται μεταξύ δύο ημιαγωγών (επαφή Josephson). Το χαρακτηριστικό αυτό φαινόμενο είναι γνωστό σαν φαινόμενο Josephson και έχει σημαντικές εφαρμογές. Ας δούμε πρώτα πώς μπορούμε να καταλάβουμε το φαινόμενο Josephson. Θα πρέπει να εξετάσουμε την χρονική εξάρτηση των υπεραγωγίμων κυματοσυναρτήσεων Ψ_1 και Ψ_2 των δύο υπεραγωγών (έχουμε και εδώ ένα σύστημα δύο καταστάσεων, όπως και στις §3.10 και §7.2), που τις γράφουμε σαν



$$\Psi_1 = \sqrt{n_{C1}} e^{i\phi_1} \quad (8.83\alpha)$$

$$\Psi_2 = \sqrt{n_{C2}} e^{i\phi_2} \quad (8.83\beta)$$

Εάν υπάρχει μια διαφορά δυναμικού V ανάμεσα στις δύο πλευρές της επαφής και συμβολίζουμε με T το ρυθμό μετάβασης λόγω φαινομένου σήραγγας μέσω του λεπτού στρώματος μονωτή που ζευγνύει τους δύο υπεραγωγούς, οι χρονικά εξαρτημένες εξισώσεις Schrödinger μπορούν να γραφούν σαν

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{q_C V}{2} & \hbar T \\ \hbar T & -\frac{q_C V}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (8.84)$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις (8.83) στην (8.84) παίρνουμε τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2\sqrt{n_{C1}}} e^{i\phi_1} \frac{\partial n_{C1}}{\partial t} - \hbar \sqrt{n_{C1}} e^{i\phi_1} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} &= \\ &= \frac{q_C V}{2} \sqrt{n_{C1}} e^{i\phi_1} + \hbar T \sqrt{n_{C2}} e^{i\phi_2} \end{aligned} \quad (8.85)$$

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2\sqrt{n_{C2}}} e^{i\phi_2} \frac{\partial n_{C2}}{\partial t} - \hbar \sqrt{n_{C2}} e^{i\phi_2} \frac{\partial \phi_2}{\partial t} &= \\ &= \hbar T \sqrt{n_{C1}} e^{i\phi_1} - \frac{q_C V}{2} \sqrt{n_{C2}} e^{i\phi_2} \end{aligned} \quad (8.86)$$

οι οποίες δίνουν

$$\frac{\partial n_{C1}}{\partial t} = -2i n_{C1} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} - 2i T \sqrt{n_{C1} n_{C2}} e^{i(\phi_2 - \phi_1)} - i \frac{q_C V}{\hbar} n_{C1} \quad (8.87)$$

$$\frac{\partial n_{C2}}{\partial t} = -2i n_{C2} \frac{\partial \phi_2}{\partial t} - 2i T \sqrt{n_{C1} n_{C2}} e^{i(\phi_1 - \phi_2)} + i \frac{q_C V}{\hbar} n_{C2} \quad (8.88)$$

Παίρνοντας το πραγματικό μέρος της (8.87) έχουμε

$$\frac{\partial n_{C1}}{\partial t} = 2 T \sqrt{n_{C1} n_{C2}} \sin(\phi_2 - \phi_1) \quad (8.89)$$

Επειδή το ρεύμα που διαρρέει την επαφή είναι ανάλογο της χρονικής παραγώγου του n_{C1} , προκύπτει ότι, ακόμη και σε απουσία μιας διαφοράς δυναμικού V , υπάρχει ένα ρεύμα ζευγών ηλεκτρονίων που διαρρέει την επαφή και είναι ανάλογο του ημιτόνου της διαφοράς φάσης:

$$I = I_0 \sin(\phi_2 - \phi_1) \quad (8.90)$$

Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό σαν φαινόμενο Josephson συνεχούς ρεύματος (dc φαινόμενο Josephson). Παίρνοντας, τώρα, το φανταστικό μέρος των εξισώσεων (8.87) και (8.88) βρίσκουμε ότι



$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = - \frac{q_C V}{2\hbar} - T \sqrt{\frac{n_{C2}}{n_{C1}}} \cos(\phi_2 - \phi_1) \quad (8.91)$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial t} = \frac{q_C V}{2\hbar} - T \sqrt{\frac{n_{C1}}{n_{C2}}} \cos(\phi_2 - \phi_1) \quad (8.92)$$

Επειδή το κβαντικό φαινόμενο σήραγγας για τα ζεύγη ηλεκτρονίων δεν μεταβάλλει σημαντικά τις πυκνότητες n_{C1} και n_{C2} , έχουμε $n_{C1} \approx n_{C2}$. Οπότε, παίρνοντας τη διαφορά των (8.91) και (8.92) έχουμε

$$\frac{\partial(\phi_2 - \phi_1)}{\partial t} = \frac{q_C V}{\hbar} = - \frac{2e V}{\hbar} \quad (8.93)$$

Ολοκληρώνοντας βρίσκουμε την χρονική εξάρτηση της διαφοράς φάσης

$$\phi_2 - \phi_1 = - \frac{2e V}{\hbar} t + \phi_0 \quad (8.94)$$

όπου ϕ_0 μια αρχική (σταθερή) φάση. Συνεπώς, σ' αυτή την περίπτωση το ρεύμα στην επαφή ταλαντώνεται με κυκλική συχνότητα $\frac{2e V}{\hbar}$:

$$I = I_0 \sin \left(- \frac{2e V}{\hbar} t + \phi_0 \right) \quad (8.95)$$

Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό σαν φαινόμενο Josephson εναλλασσόμενου ρεύματος (ac φαινόμενο Josephson). Έτσι, εάν εφαρμοστεί μια σταθερή φάση, δημιουργείται ένα εναλλασσόμενο ρεύμα με κυκλική συχνότητα

$$\omega = \frac{2e V}{\hbar} \quad (8.96)$$

Επειδή είναι δυνατόν να μετρηθούν συχνότητες και δυναμικά με μεγάλη ακρίβεια, το παραπάνω φαινόμενο έχει χρησιμοποιηθεί για μια πολύ ακριβή μέτρηση της σταθεράς e/\hbar . Σήμερα, πάντως, μια τέτοια επαφή Josephson χρησιμοποιείται για να οριστεί το "standard volt".

Ένα παραπέρα εξαιρετικά ενδιαφέρον φαινόμενο είναι αυτό της υπεραγωγμής κβαντικής συμβολής. Τα πρώτα πειράματα (1964) έγιναν με τις πρώτες συσκευές υπεραγωγμής κβαντικής συμβολής, γνωστές έκτοτε με την επωνυμία SQUID (Superconducting QUantum Interference Device). Αυτές οι συσκευές SQUID συνεχούς ρεύματος δημιουργούσαν κβαντική συμβολή δύο υπεραγωγμικών ρευμάτων δύο επαφών Josephson συνδεδεμένων παράλληλα. Το συνολικό ρεύμα θα εξαρτάται από τη μαγνητική ροή δια μέσου του βρόχου που περικλείεται από τις δύο επαφές, σαν συνέπεια της κβαντικής συμβολής των δύο ρευμάτων που περνάνε ξεχωριστά από τις δύο επαφές (βλ. §7.4). Η διαφορά φάσης που προκύπτει γύρω από το βρόχο που περιέχει μαγνητική ροή Φ_B θα είναι (βλ. σχέση (7.69))



$$\phi_2 - \phi_1 = \frac{q_C \Phi_B}{\hbar c} \quad (8.97)$$

Το συνολικό ρεύμα θα γράφεται τότε

$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 = I_0 \sin \phi_1 + I_0 \sin \phi_2 = I_0 \sin \left(\phi_0 - \frac{q_C \Phi_B}{2\hbar c} \right) + I_0 \sin \left(\phi_0 + \frac{q_C \Phi_B}{2\hbar c} \right) \\ &= 2 I_0 \sin \phi_0 \cos \left(-\frac{q_C \Phi_B}{2\hbar c} \right) \\ &= 2 I_0 \sin \phi_0 \cos \frac{e \Phi_B}{\hbar c} \end{aligned} \quad (8.98)$$

Συνεπώς, το συνολικό ρεύμα θα μεταβάλλεται συνημιτονοειδώς με το μαγνητικό πεδίο με χαρακτηριστικά μέγιστα και ελάχιστα, η θέση των οποίων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να μετρηθούν πολύ μικρές τιμές του μαγνητικού πεδίου. Ακόμη καλύτερα αποτελέσματα μπορεί να πραγματοποιηθούν με συσκευές SQUID εναλλασσόμενου ρεύματος, που συνδυάζουν ένα υπεραγωγίμο βρόχο με μόνο μία επαφή Josephson και ένα κύκλωμα συντονισμού LC (μέτρηση πεδίων μέχρι 10^{-14} - 10^{-15} T).

Μέχρι την ανακάλυψη το 1986 της υπεραγωγιμότητας υψηλής T_c , η κυρίαρχη θεωρία για την υπεραγωγιμότητα ήταν η θεωρία BCS (που βασίζεται στην αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - κρυσταλλικού πλέγματος - ηλεκτρονίου μέσω ανταλλαγής φωνονίων). Η κυματοσυνάρτηση των ζευγών Cooper σ' αυτή την περίπτωση είναι ιστροπική με κβαντικό αριθμό στροφορμής μηδέν (γνωστή σαν s-κύμα). Όμως, για υπεραγωγούς με κρίσιμη θερμοκρασία πάνω από περίπου 40 °K η κυματοσυνάρτηση δεν φαίνεται να είναι τόσο απλή. Τα περισσότερα πρόσφατα πειράματα είναι συμβιβαστά με μια εικόνα d-κύματος, όπως είναι γνωστή μια κυματοσυνάρτηση με κβαντικό αριθμό στροφορμής δύο. Σ' αυτή την περίπτωση υπάρχει ανισοτροπία, δηλαδή τα ζεύγη Cooper ζευγνύονται πιο ισχυρά σε ορισμένες κατευθύνσεις απ' ό,τι σε άλλες (αυτή η ιδιότητα της ανισοτροπίας παρατηρείται και στην υπερρευστότητα του ^3He , που συμβαίνει με ανάλογο μηχανισμό, βλ. §Π-II.7). Το φαινόμενο αυτό εκδηλώνεται στους υπεραγωγίμους δακτύλιους. Υπεραγωγίμοι δακτύλιοι συνηθισμένων υπεραγωγών (με κυματοσυναρτήσεις s - κύματος) περικλείουν ακέραια πολλαπλάσια της στοιχειώδους μαγνητικής ροής. Αντίθετα, υπεραγωγίμοι δακτύλιοι υπεραγωγών υψηλής T_c (με κυματοσυναρτήσεις d-κύματος) μπορούν να παγιδεύσουν μαγνητική ροή, που είναι ημιακέραιο πολλαπλάσιο της στοιχειώδους μαγνητικής ροής. Αυτό παρατηρήθηκε πρώτα το 1993 και, επίσης, μετέπειτα χρησιμοποιώντας συσκευές φαινομένου Josephson, οπότε παρατηρήθηκαν τιμές της μαγνητικής ροής $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$ κ.ο.κ. φορές την στοιχειώδη μαγνητική ροή (εδώ αξίζει ν' αναφέρουμε το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall με ανάλογες ημιακέραιες τιμές στην αντίσταση Hall, βλ. §7.6). Έτσι, υπεραγωγοί υψηλής T_c φαίνεται ότι χρειάζονται



για να περιγραφούν κυματοσυναρτήσεις d -κύματος. Το πρόβλημα παραμένει ανοικτό: πολλοί πιστεύουν ότι ο μηχανισμός ζευγαρώματος είναι εξ ολοκλήρου d -κύματος, ενώ άλλοι ότι χρειάζεται ένας συνδυασμός s - και d -κύματος. Ένας μηχανισμός ζευγαρώματος, που οδηγεί σε d -κύματα, είναι αυτός των "κυμάτων σπιν", όπου η αλληλεπίδραση γίνεται μέσω ανταλλαγής "σπινονίων", δηλαδή διεγέρσεων του σπιν. Υπάρχουν, όμως, και άλλοι μηχανισμοί ζευγαρώματος που συμφωνούν με τα πειραματικά αποτελέσματα. Έτσι, στην καθιερωμένη θεωρία Fermi των μετάλλων (γνωστή σαν θεωρία "υγρών Fermi") αντιπαρατίθενται θεωρίες που την τροποποιούν (γνωστές σαν θεωρίες "υγρών μη - Fermi"), στις οποίες οι διεγέρσεις είναι "σπινόνια" και "ολόνια" (διεγέρσεις φορτίου). Υπάρχουν, επίσης, θεωρίες που αναφέρονται σε φυσικές καταστάσεις με κλασματικούς κβαντικούς αριθμούς, π.χ. καταστάσεις που ουσιαστικά σε δύο διαστάσεις δεν έχουν απαραίτητα ακέραιο ή ημιακέραιο σπιν, αν και αυτές οι θεωρίες φαίνεται να έχουν σχέση περισσότερο με το (κλασματικό) κβαντικό φαινόμενο Hall. Η έρευνα πάνω στη θεωρία της υπεραγωγιμότητας υψηλής T_c είναι ένα από τα πιο ενδιαφέροντα και καυτά προβλήματα της φυσικής σήμερα.

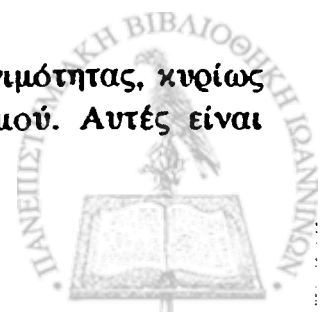
iii) Εφαρμογές της υπεραγωγιμότητας.

Οι τεχνολογικές εφαρμογές της υπεραγωγιμότητας αποτελούν ένα τεράστιο διευρυνόμενο πεδίο.

Η πρώτη μεγάλη εφαρμογή των υπεραγωγών βασίζεται στην κατασκευή υπεραγωγίων ηλεκτρομαγνητών. Οι συνηθισμένοι ηλεκτρομαγνήτες έχουν μεγάλες απώλειες θερμότητας και υψηλές απαιτήσεις ισχύος. Αντίθετα, ένας υπεραγωγίμος ηλεκτρομαγνήτης έχει πολύ μικρό μέγεθος, σχεδόν μηδενική κατανάλωση ισχύος και εύκολο κρυογενετικό σύστημα για να τον διατηρήσει κάτω από τη θερμοκρασία T_c . Τέτοιοι υπεραγωγίμοι ηλεκτρομαγνήτες χρησιμοποιούνται π.χ. σήμερα στα πειράματα επιταχυντών στη φυσική υψηλών ενεργειών για τη μελέτη των στοιχειωδών σωματιδίων.

Υπεραγωγίμοι ηλεκτρομαγνήτες είναι, επίσης, χρήσιμοι σε περιπτώσεις που χρειάζονται πολύ υψηλά μαγνητικά πεδία, όπου το όφελος λόγω ελάχιστης κατανάλωσης ισχύος εξουδετερώνει το κόστος της διατήρησης χαμηλών θερμοκρασιών (κρυογενετική). Τέτοιες είναι οι περιπτώσεις μαζικών μεταφορών (π.χ. τρένων με υπεραγωγίμους ηλεκτρομαγνήτες που υπερίπτανται των γραμμών λόγω απωστικών μαγνητικών δυνάμεων) ή υπεραγωγίων ηλεκτρομαγνητών που περιορίζουν το πλάσμα στην πυρηνική σύντηξη.

Η ευρείας κλίμακας εμπορική εφαρμογή της υπεραγωγιμότητας, κυρίως στην ιατρική, βασίζεται στις εικόνες μαγνητικού συντονισμού. Αυτές είναι



διδιάστατες εικόνες σημάτων πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (βλ. §7.2), που προέρχονται από διάφορα σημεία του ανθρώπινου σώματος (αξονικοί - μαγνητικοί τομογράφοι).

Οι συσκευές SQUID υπεραγώγιμης κβαντικής συμβολής, που όπως είδαμε μπορούν να μετρήσουν πολύ μικρά μαγνητικά πεδία, είναι σε θέση να μετρήσουν μαγνητικά πεδία της καρδιάς ($\sim 10^{-10} \text{T}$) και του εγκεφάλου ($\sim 10^{-13} \text{T}$) (ανάπτυξη μαγνητοκαρδιογραφημάτων και μαγνητοεγκεφαλογραφημάτων, αντίστοιχων των ηλεκτροκαρδιογραφημάτων και ηλεκτροεγκεφαλογραφημάτων).

Συσκευές SQUID, που είναι ευαίσθητες επίσης στο να μετρήσουν τάσεις ή θέσεις, θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την ανίχνευση κουάρκς ή κυμάτων βαρύτητας.

Τέλος, στην μικροηλεκτρονική επαφές Josephson, που χαρακτηρίζονται από πολύ μικρό χρόνο καθυστέρησης (μετάβαση από την υπεραγώγιμη στην κανονική κατάσταση) και πολύ χαμηλή κατανάλωση ισχύος, θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή υπολογιστών υψηλής ταχύτητας, μεγάλης μνήμης και μικρού όγκου.

Προβλήματα

8.1. Ας θεωρήσουμε ένα σύστημα δύο όμοιων, μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων μέσα στο (μονοδιάστατο) δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{L}{2} \\ \infty & |x| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

i) Υποθέτουμε ότι τα δύο όμοια σωματίδια είναι φερμιόνια (π.χ. ηλεκτρόνια) και ότι η κυματοσυνάρτηση του σπιν είναι συμμετρική. Να γραφεί η ολική κυματοσυνάρτηση θέσης για τις δύο κατώτερες ενεργειακές καταστάσεις και να δειχθεί ότι η μέση τιμή του τετραγώνου της απόστασής τους είναι

$$\begin{aligned} \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle &= \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle = \\ &= \left(\frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{2\pi^2} \right) + \left(\frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{8\pi^2} \right) + 2 \left(\frac{16L}{9\pi^2} \right)^2 \end{aligned}$$

ii) Να γίνει το ίδιο για δύο όμοια μποζόνια (π.χ. π μεσόνια) και να δειχθεί ότι τώρα

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \left(\frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{2\pi^2} \right) + \left(\frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{8\pi^2} \right) - 2 \left(\frac{16L}{9\pi^2} \right)^2$$



iii) Ποιός είναι ο βαθμός εκφυλισμού των δύο κατώτερων ενεργειακών επιπέδων του συστήματος

α) όταν τα δύο σωματίδια είναι φερμόνια με σπιν $1/2$,

β) όταν τα δύο σωματίδια είναι μποζόνια με σπιν 1 .

8.2. Ας θεωρήσουμε το αέριο Fermi της §8.2, αλλά με τα N σωματίδια να κινούνται μέσα σ' ένα σταθερό δυναμικό V_0 . Ναδειχθεί ότι τότε η φυσική εικόνα είναι όμοια με αυτή της §8.2, όπου όμως τώρα θα έχουμε

$$E_n' = E_n + V_0$$

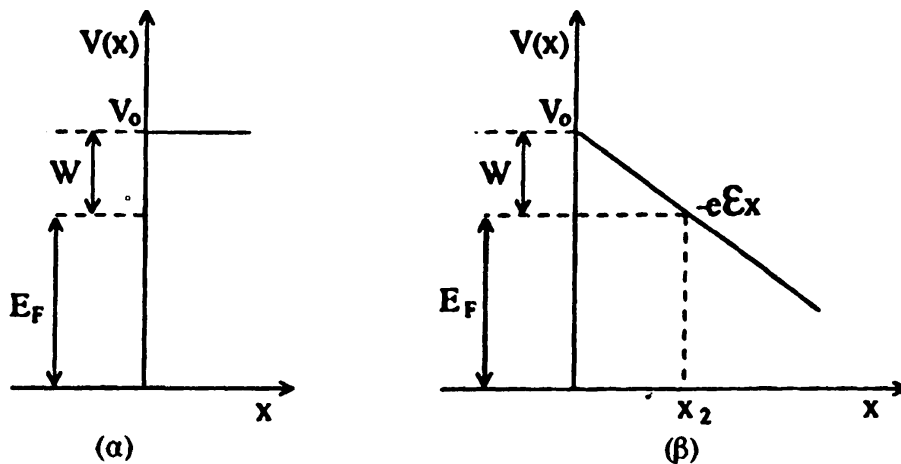
και

$$E_{0λ}' = E_{0λ} + NV_0$$

8.3. Αν θεωρήσουμε ότι τα πρωτόνια και τα νετρόνια ενός πυρήνα ακτίνας $R = 1.2 \times 10^{-13} \times A^{1/3}$ cm, όπου A ο ατομικός μαζικός αριθμός, συνιστούν δύο ανεξάρτητα αέρια Fermi (μοντέλο Fermi ενός πυρήνα), να υπολογιστεί η ενέργεια Fermi E_F και η μέση κινητική ενέργεια \bar{E} ανά νουκλεόνιο.

Αν το έργο εξόδου για ένα νουκλεόνιο είναι 16 MeV, πόσο είναι το συνολικό βάθος του ελκτικού δυναμικού;

8.4 Μέσα σ' ένα μέταλλο τα ηλεκτρόνια είναι δέσμια μέσα σ' ένα δυναμικό, που σε πρώτη προσέγγιση περιγράφεται από ένα "κουτί" πεπερασμένου



Σχήμα (α) Δυναμικό που περιορίζει τα ηλεκτρόνια μέσα σ' ένα μέταλλο. E_F = ενέργεια Fermi, $W = V_0 - E_F$ έργο εξόδου. (β) Τροποποιημένο δυναμικό από την πρόσθεση εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου: $x_2 = \frac{W}{eE}$.

ύψους V_0 (βλ. σχήμα (α))

Με την εφαρμογή σταθερού εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου έντασης E , το δυναμικό τροποποιείται, όπως στο σχήμα (β)



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

Τα ηλεκτρόνια έχουν τώρα πιθανότητα να περάσουν το φράγμα δυναμικού και να διαφύγουν από το μέταλλο (ψυχρή εκπομπή ηλεκτρονίων). Να δειχθεί ότι ο συντελεστής διέλευσης T δίνεται από την έκφραση (βλ. §3.4)

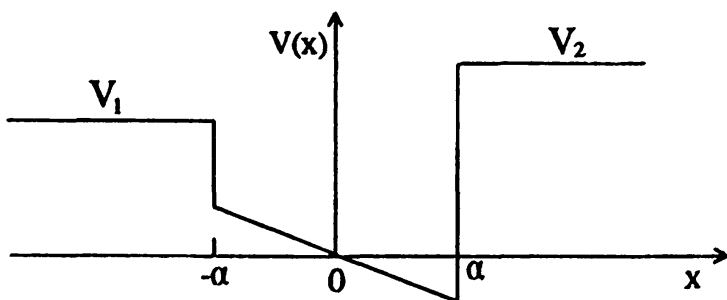
$$T \approx \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m_e} W^{3/2}}{3 \hbar e E} \right]$$

Να υπολογιστεί ο T για $W = 4\text{eV} = 6.4 \times 10^{-19} \text{ J}$ και $E = 10^9 \text{ V/m}$.

- 8.5. Ένα ηλεκτρόνιο σ' ένα ημιαγωγό στρώμα ανάμεσα σε δύο αγωγούς που βρίσκονται σε δυναμικά V_1 και V_2 υφίσταται την επίδραση ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου E , έτσι ώστε το προκύπτον δυναμικό να είναι

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x \leq -a \\ -eEx & |x| < a \\ V_2 & x \geq a \end{cases}$$

όπως φαίνεται στο σχήμα.



Να γραφούν οι εξισώσεις Schrödinger για τις τρεις περιοχές και να μελετηθεί η λύση τους με βάση τις §3.5 και 3.8.

- 8.6. Ας υποθέσουμε ότι εφαρμόζουμε ένα στατικό ηλεκτρικό πεδίο έντασης E σ' ένα μονοδιάστατο κρύσταλλο, οπότε η δυναμική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου αποκτά τον πρόσθετο όρο $V(x) = -eEx$.

i) Να δειχθεί ότι



$$\hbar \frac{dK}{dt} = e \varepsilon$$

και να εξηγηθεί γιατί το ηλεκτρόνιο ταλαντώνεται κατά μήκος του άξονα x.

ii) Να δειχθεί ότι η εξίσωση κίνησης του ηλεκτρονίου μπορεί να γραφεί με τη μορφή της θεμελιώδους εξίσωσης κίνησης ελεύθερου σωματιδίου που κινείται μέσα στο πεδίο ε :

$$m_e^* \ddot{x} = e \varepsilon$$

όπου

$$m_e^* = \hbar^2 / \left(\frac{d^2 E(K)}{dK^2} \right)$$

η λεγόμενη ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου.

Στην κορυφή μιας ενεργειακής ζώνης, όπου $\frac{d^2 E(K)}{dK^2} < 0$, η θεμελιώδης

εξίσωση κίνησης μπορεί να γραφεί

$$m_{\text{οπη}}^* \ddot{x} = -e \varepsilon$$

και, συνεπώς, μπορούμε να πούμε ότι έχουμε να κάνουμε μ' ένα σωματίδιο (οπή), που συμπεριφέρεται σαν θετικά φορτισμένο (φορτίο $+e$) με θετική ενεργό μάζα $m_{\text{οπη}}^* = -m_e^* > 0$.

- 8.7. Η μεταβολή στην ενέργεια ανά μονάδα όγκου των ηλεκτρονίων σ' έναν υπεραγωγό, λόγω της εμφάνισης του ενεργειακού χάσματος, είναι ίση με την ενέργεια συμπύκνωσης ανά μονάδα όγκου Δ , που συνδέεται με το κρίσιμο μαγνητικό πεδίο B_c με την σχέση (8.48). Να δειχθεί ότι

$$E_{\chi}(0) \approx \sqrt{\frac{4 \Delta E_F}{n_e}}$$

Να υπολογιστεί το ενεργειακό χάσμα $E_{\chi}(0)$ σε μηδενική θερμοκρασία για τον μόλυβδο, στον οποίον $B_c(0) = 0.08 \text{ T}$, $n_e = 1.3 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$ και $E_F = 9.4 \text{ eV}$.

- 8.8. Εάν υποθέσουμε ότι υπάρχουν μαγνητικά μονόπολα, να υπολογιστεί η ελάχιστη τιμή του μαγνητικού φορτίου g που είναι συμβιβαστή με το στοιχειώδες κβάντο μαγνητικής ροής (8.53).



ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΧ

ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Όπως στην κλασική, έτσι και στην κβαντική φυσική υπάρχουν λίγα, από φυσική άποψη ενδιαφέροντα, προβλήματα που μπορούν να λυθούν ακριβώς. Γι' αυτό προσεγγιστικές μέθοδοι είναι πολύ σημαντικές σε σχεδόν όλες τις εφαρμογές της κβαντικής θεωρίας. Σ' αυτό το κεφάλαιο θ' ασχοληθούμε με μερικές προσεγγιστικές μεθόδους, κυρίως για δέσμιες καταστάσεις φυσικών συστημάτων, που αφορούν σε περιπτώσεις στις οποίες η χαμιλτονιανή δεν εξαρτάται από το χρόνο. Στις §9.1 και 9.2 θα γνωρίσουμε διαταρακτικές προσεγγιστικές μεθόδους, δηλαδή μεθόδους που εφαρμόζονται όταν η ολική χαμιλτονιανή περιέχει ένα κομμάτι, που χαρακτηρίζεται σαν μικρή διαταραχή σε σύγκριση με μια αρχική χαμιλτονιανή της οποίας το πρόβλημα ιδιοτιμών είναι γνωστό. Αυτές οι μέθοδοι συνιστούν τη θεωρία διαταραχών. Στις §9.6 και 9.7, από την άλλη μεριά, θα γνωρίσουμε δύο από τις λεγόμενες μη διαταρακτικές προσεγγιστικές μεθόδους.

9.1. Θεωρία διαταραχών ανεξάρτητη από το χρόνο για μη εκφυλισμένη ενεργειακή στάθμη.

Το πρόβλημα που έχουμε να λύσουμε εδώ είναι το εξής: Αν η πλήρης χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' , \quad (9.1)$$

με γνωστή τη λύση του προβλήματος ιδιοτιμών για την \hat{H}_0 :



$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle, \quad (9.2)$$

ζητούμε να λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών για την \hat{H} :

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}') |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (9.3)$$

Το κομμάτι \hat{H}' είναι γνωστό σαν διαταραχή. Συνήθως εισάγουμε μια παράμετρο ανάπτυξης λ και αντί για την (9.3) γράφουμε

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (9.4)$$

Η λ είναι μια πραγματική παράμετρος, που τη χρησιμοποιούμε για να διακρίνουμε μεταξύ τους τις διάφορες τάξεις διόρθωσης στη θεωρία διαταραχών. Τέτοια παράμετρο ανάπτυξης μπορεί να αποτελέσει και μια οποιαδήποτε μικρή παράμετρος που ήδη περιλαμβάνεται στη διαταραχή. Για μας εδώ μπορεί να πάρει τιμές από $\lambda=0$ (αδιατάρακτο πρόβλημα) μέχρι $\lambda=1$ (πλήρες πρόβλημα). Στο τέλος του υπολογισμού θα διαλέξουμε $\lambda = 1$. Η επιτυχία ή όχι της διαταρακτικής μεθόδου έγκειται στο τί αποτέλεσμα θα μας δώσει. Θα πρέπει οι διορθώσεις να είναι μικρές συγκρινόμενες με τις αντίστοιχες ποσότητες του αδιατάρακτου προβλήματος.

Ας δούμε πως θα προσδιορίσουμε τις διορθώσεις στις ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$ και τις ιδιοκαταστάσεις $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Αναπτύσσουμε, λοιπόν, σε δυνάμεις της παραμέτρου λ και γράφουμε

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (9.5)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (9.6)$$

Βάζοντας τις (9.5) και (9.6) στην (9.4) και εξισώνοντας τους συντελεστές ίσων δυνάμεων του λ στα δύο μέλη, παίρνουμε πρώτα από τους όρους λ^0 τη σχέση (9.2), όπως περιμένουμε. Στη συνέχεια από τους όρους λ , λ^2 κ.λ.π. βρίσκουμε

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}' |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (9.7)$$

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}' |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (9.8)$$

κ.λ.π.



Παίρνοντας τώρα το γινόμενο της (9.7) με $\langle \psi_n^{(0)} |$, βρίσκουμε την πρώτη διόρθωση στη θεωρία διαταραχών

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle \equiv H'_{nn} \quad (9.9)$$

Επί πλέον, μια και οι $|\psi_k^{(0)}\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ιδιοκαταστάσεων, χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_k C_{nk}^{(1)} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (9.10)$$

στη σχέση (9.7) και μετά σχηματίζοντας το εσωτερικό γινόμενο με $\langle \psi_l^{(0)} |$, βρίσκουμε

$$C_{nl}^{(1)} (E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) + \langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{nl} = 0 \quad (9.11)$$

Για $n=l$ η (9.11) δίνει το αποτέλεσμα (9.9). Για $n \neq l$ έχουμε για τους συντελεστές του αναπτύγματος (9.10) τις εκφράσεις

$$C_{nl}^{(1)} = \frac{\langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \equiv \frac{H'_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \quad (9.12)$$

Σημειωτέον ότι μ' αυτό τον τρόπο ο συντελεστής $C_{nn}^{(1)}$ παραμένει απροσδιόριστος. Σε πρώτη προσέγγιση έχουμε, λοιπόν, τ' αποτελέσματα

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} \quad (9.13)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{l \neq n} \frac{H'_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} |\psi_l^{(0)}\rangle \quad (9.14)$$

Μπορούμε να προχωρήσουμε με την ίδια διαδικασία για να υπολογίσουμε τις επόμενες διορθώσεις στη θεωρία διαταραχών. Έτσι, θέτοντας το ανάπτυγμα

$$|\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_k C_{nk}^{(2)} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (9.15)$$

στην (9.8) και χρησιμοποιώντας την (9.10) μαζί με την (9.12), βρίσκουμε τη σχέση



$$C_{nl}^{(2)} (E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) + \sum_k H'_{lk} C_{nk}^{(1)} - E_n^{(1)} C_{nl}^{(1)} - E_n^{(2)} \delta_{nl} = 0 \quad (9.16)$$

Για $l=n$ η (9.16) δίνει την διόρθωση δεύτερης τάξης

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{H'_{nk} H'_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} = \sum_{k \neq n} \frac{|H'_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \quad (9.17)$$

Για $l \neq n$ βρίσκουμε για τους συντελεστές του αναπτύγματος (9.15)

$$C_{nl}^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \sum_{k \neq n} \frac{H'_{lk} H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - \frac{H'_{nn} H'_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} - C_{nn}^{(1)} \frac{H'_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \quad (9.18)$$

Πάλι ο $C_{nn}^{(2)}$ παραμένει, όπως και ο $C_{nn}^{(1)}$, απροσδιόριστος. Βέβαια, η οποιαδήποτε

εκλογή δεν μπορεί να έχει φυσικές συνέπειες. Ένας τρόπος προσδιορισμού τους είναι ο εξής. Επειδή γενικά είναι $C_{nn}^{(j)} = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(j)} \rangle$, $j \geq 1$, μπορούμε ν'

απαιτήσουμε $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$. Η απαίτηση αυτή, για τους συντελεστές των όρων λ και λ^2 , οδηγεί στις σχέσεις

$$C_{nn}^{(1)} + C_{nn}^{(1)*} = 0$$

$$C_{nn}^{(2)} + C_{nn}^{(2)*} + \sum_k |C_{nk}^{(1)}|^2 = 0 \quad (9.19)$$

Επειδή δεν προσδιορίζεται το φανταστικό μέρος των $C_{nn}^{(j)}$, διαλέγοντας $\text{Im } C_{nn}^{(j)} = 0$

βρίσκουμε τελικά από τις (9.19)

$$C_{nn}^{(1)} = 0, \quad C_{nn}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} |C_{nk}^{(1)}|^2 \quad (9.20)$$

Συνοψίζουμε αναφέροντας ότι έχουμε για τις διορθώσεις πρώτης τάξης τις εκφράσεις (9.13), (9.14) και για τις διορθώσεις δεύτερης τάξης τις εκφράσεις (9.17) για τις ιδιοτιμές και (9.15), (9.18), (9.20) για τις ιδιοκαταστάσεις.



9.2. Θεωρία διαταραχών ανεξάρτητη από το χρόνο για εκφυλισμένη ενεργειακή στάθμη

Για την περίπτωση που η ενεργειακή στάθμη $E_n^{(0)}$ παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης ν :

$$E_n^{(0)}, |\psi_{nr}^{(0)}\rangle \quad (r=1,2,\dots,\nu),$$

γίνεται φανερό ότι πρέπει να τροποποιήσουμε την διαπραγμάτευση της προηγούμενης παραγράφου. Ιδιαίτερα, αντί για τις (9.5) και (9.6) θα πρέπει να γράψουμε τις εκφράσεις

$$|\chi_{nr}\rangle = |\chi_{nr}^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_{nr}^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_{nr}^{(2)}\rangle + \dots \quad (9.21)$$

$$E_{nr} = E_n^{(0)} + \lambda E_{nr}^{(1)} + \lambda^2 E_{nr}^{(2)} + \dots, \quad (9.22)$$

όπου τώρα θα έχουμε ν αναπτύγματα

$$|\chi_{nr}^{(0)}\rangle = \sum_{s=1}^{\nu} C_{rs}^{(1)} |\psi_{rs}^{(0)}\rangle \quad (9.23)$$

$$|\psi_{nr}^{(1)}\rangle = \sum_k \sum_s C_{nr,ks}^{(1)} |\psi_{ks}^{(0)}\rangle \quad (9.24)$$

Επαναλαμβάνοντας τα ίδια βήματα, όπως και στην § 9.1, αλλά με τις εκφράσεις (9.21)-(9.24), καταλήγουμε για τον όρο λ στη σχέση

$$\sum_{s=1}^{\nu} C_{rs}^{(1)} \left[H'_{nu,ns} - E_n^{(1)} \delta_{us} \right] = 0 \quad (9.25)$$

όπου $H'_{nu,ns} \equiv \langle \psi_{nu}^{(0)} | H' | \psi_{ns}^{(0)} \rangle$. Για να έχει το σύστημα (9.25) λύση θα πρέπει η ορίζουσα των συντελεστών του να είναι μηδέν :

$$\begin{vmatrix} H'_{n1,n1} - E_n^{(1)} & H'_{n1,n2} & \dots & H'_{n1,n\nu} \\ H'_{n2,n1} & H'_{n2,n2} - E_n^{(1)} & & \dots \\ & & \dots & \\ \dots & & & H'_{n\nu,n\nu} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (9.26)$$



Η ορίζουσα (9.26) είναι τάξης $n \times n$ και οι n ρίζες της αποτελούν τις πρώτες διορθώσεις $E_{nr}^{(1)}$ ($r = 1, 2, \dots, n$) στις ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$.

Πολύ συχνά οι εκφυλισμένες καταστάσεις $|\psi_{nr}^{(0)}\rangle$, που αντιστοιχούν στη στάθμη $E_n^{(0)}$, δεν συνδέονται μεταξύ τους σε πρώτη τάξη, οπότε θα είναι $H'_{nr,ns} = \langle \psi_{nr}^{(0)} | \hat{H}' | \psi_{ns}^{(0)} \rangle = 0$, $r \neq s$. Τότε όλα τα μη διαγώνια στοιχεία της ορίζουσας (9.26) είναι μηδέν και οι ρίζες της εξίσωσης (9.26) είναι απλά

$$E_{nr}^{(1)} = H'_{nr, nr} \quad (r = 1, 2, \dots, n), \quad (9.27)$$

ένα αποτέλεσμα που συμπίπτει ακριβώς με την έκφραση (9.9). Γίνεται φανερό ότι αυτό θα συμβαίνει κάθε φορά, που οι $|\psi_{nr}^{(0)}\rangle$ θα μπορούν να προσδιοριστούν συναρτήσει ενός συνόλου τελεστών, που όλοι τους μετατίθενται με την διαταραχή \hat{H}' .

Στις επόμενες τρεις παραγράφους θα συζητήσουμε μερικές σημαντικές, από φυσική άποψη, εφαρμογές της θεωρίας διαταραχών.

9.3. Φαινόμενο Stark

Σάν πρώτη εφαρμογή, θ' αναφερθούμε στο φαινόμενο Stark. Το φαινόμενο Stark συνίσταται στη διάσπαση των ενεργειακών επιπέδων του ατόμου του υδρογόνου (καθώς και άλλων ατομικών συστημάτων) μέσα σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο. Αν το ηλεκτρικό πεδίο είναι παράλληλο με τον άξονα z : $\mathcal{E} \parallel Oz$, τότε η διαταραχή είναι

$$H' = -e \mathcal{E} \cdot \mathbf{r} = -e\mathcal{E}z = -e\mathcal{E}r \cos \theta \quad (9.28)$$

Ας αναφερθούμε πρώτα στις διορθώσεις πρώτης τάξης. Είναι φανερό ότι η διόρθωση $E_1^{(1)}$ για το ενεργειακό επίπεδο $E_1^{(0)}$ της βασικής κατάστασης $|100\rangle$ είναι μηδέν, μια και το αντίστοιχο ολοκλήρωμα είναι πάνω σε μια περιττή συνάρτηση. Για την πρώτη διεγερμένη ενεργειακή στάθμη $E_2^{(0)}$, που είναι τετραπλά εκφυλισμένη, βολεύει να χρησιμοποιήσουμε το συμβολισμό

$$|\psi_1\rangle \equiv |200\rangle, \quad |\psi_2\rangle \equiv |210\rangle, \quad |\psi_{3,4}\rangle \equiv |21\pm 1\rangle$$



Στην οριζούσα (9.26) είναι τότε εύκολο να δει κανείς ότι τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία πίνακα είναι τα H'_{12} και H'_{21} . Πράγματι, $H'_{11} = H'_{22} = H'_{33} = H'_{44} = H'_{34} = H'_{43} = 0$, γιατί το αντίστοιχο ολοκλήρωμα είναι πάνω σε περιττή συνάρτηση, και $H'_{13} = H'_{14} = H'_{23} = H'_{24} = H'_{31} = H'_{41} = H'_{32} = H'_{42} = 0$, γιατί το αντίστοιχο ολοκλήρωμα περιέχει τον όρο $e^{i\varphi}$ και η ολοκλήρωση γίνεται από $\varphi=0$ έως $\varphi=2\pi$. Για τα μη μηδενικά στοιχεία πίνακα H'_{12} και H'_{21} βρίσκουμε

$$\begin{aligned} H'_{12} = H'_{21} &= \langle \psi_1 | H' | \psi_2 \rangle = \int \psi_{200}^*(\mathbf{r})(-e\mathcal{E}r\cos\theta)\psi_{210}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &\approx 3e\mathcal{E}a_0, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \end{aligned} \quad (9.29)$$

Η οριζούσα (9.26) δίνει τότε

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & 3e\mathcal{E}a_0 & 0 & 0 \\ 3e\mathcal{E}a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (9.30)$$

Από την (9.30) βρίσκουμε για τις διορθώσεις πρώτης τάξης τις τιμές

$$E_2^{(1)} = 3e\mathcal{E}a_0, \quad -3e\mathcal{E}a_0, \quad 0, \quad 0 \quad (9.31)$$

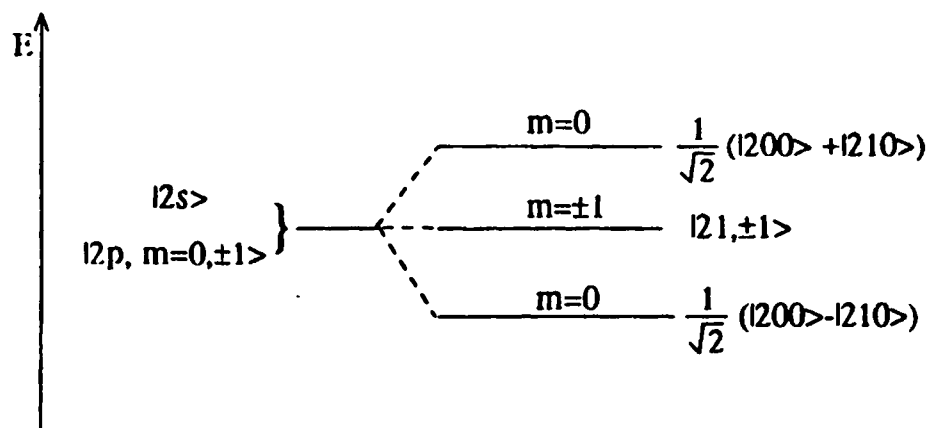
Οι μη μηδενικές διορθώσεις είναι της τάξης του 1.5×10^{-3} eV για $\mathcal{E} \approx 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$. Συνολικά, για τα τέσσερα ενεργειακά επίπεδα E_2 και τις αντίστοιχες μηδενικής τάξης ιδιοκαταστάσεις $|\chi_2^{(0)}\rangle$, από τις σχέσεις (9.23) και (9.25) παίρνουμε τις εκφράσεις

$$\begin{aligned} E_2 = E_2^{(0)} + 3e\mathcal{E}a_0, & \quad |\chi_2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \\ E_2 = E_2^{(0)} - 3e\mathcal{E}a_0, & \quad |\chi_2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \\ E_2 = E_2^{(0)}, & \quad |\chi_2^{(0)}\rangle = \cos\omega|\psi_3\rangle + \sin\omega|\psi_4\rangle \\ E_2 = E_2^{(0)}, & \quad |\chi_2^{(0)}\rangle = -\sin\omega|\psi_3\rangle + \cos\omega|\psi_4\rangle \end{aligned} \quad (9.32)$$

όπου ω αυθαίρετη γωνία. Βλέπουμε ότι ο εκφυλισμός ανάμεσα στις δύο τελευταίες καταστάσεις παραμένει. Εξ άλλου, από τις εκφράσεις (9.31) προκύπτει ότι η ηλεκτρική διπολική ροπή του ατόμου του υδρογόνου έχει μέγεθος $3ea_0$ και είναι



αντιπαράλληλη προς το ηλεκτρικό πεδίο για την πρώτη και παράλληλη προς αυτό για την δεύτερη κατάσταση, ενώ για τις δύο τελευταίες καταστάσεις είναι κάθετη προς το ηλεκτρικό πεδίο. Έτσι, το γραμμικό φαινόμενο Stark (οι διορθώσεις στα ενεργειακά επίπεδα είναι γραμμικές ως προς το ηλεκτρικό πεδίο) για την εκφυλισμένη $n=2$ στάθμη του ατόμου του υδρογόνου είναι αποτέλεσμα ακριβώς της παραπάνω χαρακτηριστικής ηλεκτρικής ροπής για τις καταστάσεις $|χ_2^{(0)}\rangle$, που είναι επαλληλία των καταστάσεων $|2s\rangle \equiv |200\rangle$ και $|2p, m=0\rangle \equiv |210\rangle$ του ατόμου του υδρογόνου (σχ. 9.1). Το γραμμικό φαινόμενο Stark είναι μη μηδενικό μόνο για εκφυλισμένες στάθμες ατομικών συστημάτων.



Σχ. 9.1. Γραμμικό φαινόμενο Stark για την εκφυλισμένη $n=2$ στάθμη του ατόμου του υδρογόνου.

Ας έλθουμε τώρα στις διορθώσεις δεύτερης τάξης. Αυτές είναι πάντα ανάλογες προς το $|E|^2$. Για τη βασική μη εκφυλισμένη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου έχουμε την διόρθωση

$$E_1^{(2)} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n \neq 1} \sum_{l, m} \frac{|\langle nlm | z | 100 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (9.33)$$

Επειδή η διαφορά $E_1^{(0)} - E_n^{(0)}$ είναι πάντα αρνητική και, όπως είδαμε, η διόρθωση πρώτης τάξης είναι $E_1^{(1)} = 0$, η ενέργεια της βασικής κατάστασης μειώνεται πάντα κατά την αλληλεπίδραση με ηλεκτρικό πεδίο. Το τετραγωνικό φαινόμενο Stark (9.33) είναι πολύ μικρό (της τάξης του -2.5×10^{-12} eV για $\mathcal{E} \approx 10^5$ V/cm) και γι' αυτό συνήθως δεν είναι σημαντικό. Σε άλλα άτομα, τόσο η βασική, όσο και οι διεγερμένες καταστάσεις είναι μη εκφυλισμένες, οπότε δεν έχουμε γραμμικό, αλλά μονάχα το πολύ μικρότερο τετραγωνικό φαινόμενο Stark. Θα πρέπει, τέλος, ν'

αναφέρουμε ότι σε ορισμένες περιπτώσεις ατομικών συστημάτων δεν υπάρχει μια μέση ηλεκτρική διπολική ροπή, αλλά το άτομο πολώνεται από το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο. Σ' αυτή την περίπτωση, η επαγόμενη διπολική ροπή είναι ανάλογη με το πεδίο E και, συνεπώς, ήδη η διόρθωση πρώτης τάξης στην ενέργεια θα είναι ανάλογη με το E^2 . Αυτό αποτελεί μια άλλη εκδήλωση τετραγωνικού φαινομένου Stark.

Τα πειράματα έχουν επαληθεύσει τις παραπάνω προβλέψεις της κβαντικής μηχανικής για το φαινόμενο Stark και για ηλεκτρικά πεδία $E \approx 10^3 - 10^5$ V/cm. Σε ισχυρότερα ηλεκτρικά πεδία το φαινόμενο Stark τείνει να εξαφανιστεί, γιατί τότε τ' άτομα χάνουν ηλεκτρόνιά τους από διεγερμένες στάθμες και ιονίζονται.

9.4. Ρεαλιστικό άτομο υδρογόνου - Λεπτή υφή

Το ρεαλιστικό άτομο του υδρογόνου είναι η δεύτερη εφαρμογή, που θα συζητήσουμε. Σ' αυτό περιλαμβάνονται διορθώσεις στις ενεργειακές στάθμες $E_n^{(0)}$, που οφείλονται κυρίως σε σχετικιστικά φαινόμενα. Γράφουμε για τη συνολική χαμιλτονιανή ($\mu = m_e$)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \equiv \hat{T} + \hat{V} \quad (9.34)$$

όπου για τη διαταραχή \hat{H}' θα μελετήσουμε τρεις επί μέρους συνεισφορές

$$\hat{H} = \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 + \hat{H}'_3 \quad (9.35)$$

i) Θεωρούμε πρώτα τη διαταραχή

$$\hat{H}'_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3c^2} = -\frac{1}{2m_e c^2} \hat{T}^2 \quad (9.36)$$

Η διαταραχή αυτή δεν είναι δύσκολο να δούμε ότι αποτελεί σχετικιστική διόρθωση στην κινητική ενέργεια: ξεκινώντας από την σχετικιστική έκφραση για την ενέργεια $E = (m_e^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2}$ και αναπτύσσοντας σε δυνάμεις του p^2 προκύπτει η έκφραση

(9.36) σαν κύρια σχετικιστική διόρθωση στην κινητική ενέργεια. Επειδή η διαταραχή \hat{H}'_1 δεν περιέχει καθόλου μεταβλητές στροφορμής, οι εκφυλισμένες καταστάσεις του ενεργειακού επιπέδου $E_n^{(0)}$ δεν συνδέονται μεταξύ τους σε πρώτη τάξη μέσω της

\hat{H}'_1 . Συνεπώς, οι διορθώσεις στην ενέργεια δίνονται από την έκφραση (9.27) και βρίσκουμε



$$\begin{aligned}
E_{n,1}^{(1)} &= \langle \psi_{nlmjm_s}^{(0)} | \hat{H}'_1 | \psi_{nlmjm_s}^{(0)} \rangle \\
&= -\frac{1}{2m_e c^2} \langle \psi_{nlmjm_s}^{(0)} | \hat{T}^2 | \psi_{nlmjm_s}^{(0)} \rangle \\
&= -\frac{1}{2m_e c^2} \langle \psi_{nlmjm_s}^{(0)} | (\hat{H}_0 - \hat{V})^2 | \psi_{nlmjm_s}^{(0)} \rangle \\
&= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{3}{4} - \frac{n}{1+(1/2)} \right] \quad (9.37)
\end{aligned}$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τις σχέσεις (βλ. πρόβλημα 6.9)

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{nlmjm_s}^{(0)} | \frac{1}{r} | \psi_{nlmjm_s}^{(0)} \rangle &= \frac{1}{\alpha_0 n^2} \\
\langle \psi_{nlmjm_s}^{(0)} | \frac{1}{r^2} | \psi_{nlmjm_s}^{(0)} \rangle &= \frac{1}{\alpha_0^2 n^3 (1+(1/2))} \quad (9.38)
\end{aligned}$$

ii) Θεωρούμε στη συνέχεια τη διαταραχή

$$\hat{H}'_2 = \frac{-e}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (9.39)$$

Η διαταραχή αυτή, γνωστή σαν ζεύξη σπιν-τροχιάς, οφείλεται στην αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου λόγω του σπιν $\mathbf{M}_s = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$ και του "εσωτερικού" μαγνητικού πεδίου $\mathbf{B} = -\mathbf{v} \times \mathbf{E}/c$, που προκύπτει, κατά τα γνωστά από τον ηλεκτρομαγνητισμό, λόγω της τροχιακής κίνησης του ηλεκτρονίου με ταχύτητα \mathbf{v} σε σχέση με το πρωτόνιο, το οποίο δημιουργεί το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} . Ο όρος αλληλεπίδρασης μας δίνει τότε

$$\begin{aligned}
W &= -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B} = \frac{-e}{m_e c^2} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \\
&= \frac{-e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \left[\mathbf{p} \times \left(-\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right] \\
&= \frac{-e}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \quad (9.40)
\end{aligned}$$

Στην πραγματικότητα υπάρχουν σχετικιστικές διορθώσεις, που έχουν να κάνουν με το γεγονός ότι το ηλεκτρόνιο δεν κινείται σ' ευθεία γραμμή (το φαινόμενο είναι γνωστό σαν μετάπτωση Thomas). Αυτές διορθώνουν την παραπάνω έκφραση κατά ένα παράγοντα 2. Έτσι, η σωστή διαταραχή είναι

$$\hat{H}'_2 = -\frac{1}{2} \mathbf{M}_s \cdot \hat{\mathbf{B}} = \frac{-e}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (9.41)$$

Από αυτήν παίρνουμε τελικά



$$\hat{H}'_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \equiv f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (9.42)$$

Για να εφαρμόσουμε τις απλοποιημένες εκφράσεις (9.27) γίνεται φανερό ότι μας διευκολύνει να διαλέξουμε σαν βάση, όχι τις ιδιοκαταστάσεις $|\psi_{nljm_j}^{(0)}\rangle$ των \hat{H}_0 , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 , S_z , αλλά τις ιδιοκαταστάσεις $|\psi_{nljm_j}^{(0)}\rangle$ των \hat{H}_0 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 , \hat{J}^2 , \hat{J}_z , όπου $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ η ολική στροφορμή. Αυτό γιατί είναι

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (9.43)$$

οπότε η διαταραχή \hat{H}'_2 γράφεται

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2} f(r) (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (9.44)$$

Τότε βρίσκουμε εύκολα για τις διορθώσεις στα ενεργειακά επίπεδα $E_n^{(0)}$ τις εκφράσεις

$$\begin{aligned} E_{n,2}^{(1)} &= \langle \psi_{nljm_j}^{(0)} | \hat{H}'_2 | \psi_{nljm_j}^{(0)} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] \langle f(r) \rangle \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{2nl(l+\frac{1}{2})(l+1)} \cdot \begin{cases} 1 & j=l+\frac{1}{2} \\ -(l+1) & j=l-\frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned} \quad (9.45)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τη σχέση (βλ. πρόβλημα 6.9)

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{1}{\alpha_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad (9.46)$$

Για $l=0$ (καταστάσεις s) ο όρος αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς εξαφανίζεται από την αρχή και δεν υπάρχει αντίστοιχη διόρθωση στα ενεργειακά επίπεδα.

iii) Τέλος, θεωρούμε τη διαταραχή

$$\hat{H}'_3 = \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\mathbf{r}) \quad (9.47)$$

Η διαταραχή αυτή, γνωστή σαν όρος Darwin, μπορεί ναδειχθεί ότι αποτελεί μια σχετικιστική διόρθωση στη δυναμική ενέργεια και αφορά μόνο στις καταστάσεις s ,



όπου $l=0$, μια και ο H' δρα μόνο στην αρχή και οι ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του υδρογόνου μηδενίζονται για $r=0$, όταν $l \neq 0$. Έτσι, έχουμε

$$\begin{aligned} E_{n,3}^{(1)} &= \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2} \langle \psi_{n00}^{(0)} | \delta(r) | \psi_{n00}^{(0)} \rangle \\ &= \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2} | \psi_{n00}^{(0)}(0) |^2 \\ &= - E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n}, \quad l=0 \end{aligned} \quad (9.48)$$

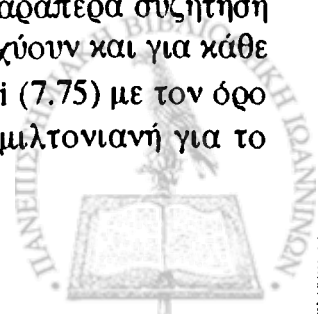
Μπορούμε τώρα να συνδυάσουμε τις επί μέρους διορθώσεις για να πάρουμε την ολική διόρθωση $E_n^{(1)} = E_{n,1}^{(1)} + E_{n,2}^{(1)} + E_{n,3}^{(1)}$. Οι διορθωμένες ιδιοτιμές της ενέργειας για τις καταστάσεις (n,l,j) θα είναι τότε

$$E(nlj) = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+(1/2)} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (9.49)$$

Η συνολική διόρθωση $E_n^{(0)} \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+(1/2)} - \frac{3}{4} \right)$ είναι γνωστή σαν διόρθωση λεπτής υφής. Οι διορθώσεις λεπτής υφής είναι μικρότερες από τις αδιατάρακτες ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$ κατά το τετράγωνο της σταθεράς λεπτής υφής $\alpha^2 = (1/137)^2$. Για τις κατώτερες στάθμες του ατόμου του υδρογόνου είναι της τάξης του 10^{-5} eV , όπως φαίνεται από το πρόβλημα 9.11. Να σημειωθεί, επίσης, ότι είναι σύνηθες να εκφράζονται οι ενεργειακές διαφορές λεπτής υφής ΔE σε μονάδες κυματαριθμού $1/\lambda = \nu/c = \Delta E/hc$.

Αξίζει ν' αναφέρουμε εδώ ότι όλες οι διαταραχές, που θεωρήσαμε παραπάνω, προκύπτουν αβίαστα και επακριβώς στη σχετικιστική θεωρία του Dirac για το ηλεκτρόνιο. Παραπέρα, μέσα στο πλαίσιο αυτής της θεωρίας, οι καταστάσεις $|2s \frac{1}{2}\rangle$ και $|2p \frac{1}{2}\rangle$ του υδρογόνου είναι εκφυλισμένες. Η πειραματική τιμή για τη διάσταση των δύο αυτών ενεργειακών επιπέδων είναι $\Delta E = 4 \times 10^{-6} \text{ eV}$ (αντίστοιχη συχνότητα $\nu = 10^3 \text{ MHz}$) και είναι γνωστή σαν μετατόπιση Lamb. Η μετατόπιση Lamb υπολογίζεται επακριβώς μέσα στο πλαίσιο της κβαντικής θεωρίας πεδίων και αποτελεί μια από τις θαυματικότερες επιτυχίες της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής.

Στο σημείο αυτό είναι σκόπιμο να επανέλθουμε σε μια παραπέρα συζήτηση του φαινομένου Zeeman για το άτομο του υδρογόνου (τα ίδια ισχύουν και για κάθε υδρογονοειδές άτομο). Συνδυάζοντας τη χαμιλτονιανή του Pauli (7.75) με τον όρο ζεύξης σπιν-τροχιάς (9.41) -(9.42) παίρνουμε την ακόλουθη χαμιλτονιανή για το



άτομο του υδρογόνου μέσα σ' ένα σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο παράλληλο με τον άξονα z

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + 2S_z) B + f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (9.50)$$

Με βάση τη χαμιλτονιανή (9.50) μπορούμε να διακρίνουμε τις παρακάτω τρεις περιπτώσεις:

i) Το φαινόμενο Zeeman ισχυρού πεδίου. Σ' αυτή την περίπτωση ο μαγνητικός όρος είναι αρκετά μεγάλος, έτσι ώστε ο όρος σπιν-τροχιάς να μπορεί ν' αγνοηθεί. Καλοί κβαντικοί αριθμοί είναι εδώ οι l, s, m_l, m_s και οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$E_{nlm_l m_s} = E_n^{(0)} + \mu_B (m_l + 2m_s) B \quad (9.51)$$

Παρατηρούμε ότι παραμένει ο εκφυλισμός των ενεργειακών επιπέδων ως προς l , ενώ αίρεται εκείνος ως προς m_l και m_s .

ii) Το φαινόμενο Paschen-Back. Σ' αυτήν την περίπτωση το μαγνητικό πεδίο εξακολουθεί να είναι ισχυρό, αλλά και ο όρος σπιν-τροχιάς είναι σημαντικός και τον προσθέτουμε σαν διαταραχή. Τα ενεργειακά επίπεδα θα είναι

$$E_{nlm_l m_s} = E_{nlm_l m_s}^{(0)} + \langle \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} | f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} \rangle \quad (9.52)$$

όπου τώρα υπολογίζουμε την αναμενόμενη τιμή ως προς τις ιδιοκαταστάσεις $|\psi_{nlm_l m_s}^{(0)}\rangle$. Επειδή είναι

$$\begin{aligned} \langle \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} \rangle &= \langle \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} | L_z S_z + \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+) | \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} \rangle \\ &= \langle \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} | L_z S_z | \psi_{nlm_l m_s}^{(0)} \rangle = \hbar^2 m_l m_s, \end{aligned} \quad (9.53)$$

βρίσκουμε εδώ

$$E_{nlm_l m_s} = E_{nlm_l m_s}^{(0)} - E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \frac{m_l m_s}{1 + (1/2)(l+1)} \quad (9.54)$$

Βλέπουμε τώρα ότι αίρεται και ο εκφυλισμός ως προς l των ενεργειακών επιπέδων.

iii) Το φαινόμενο Zeeman ασθενούς πεδίου. Σ' αυτήν την περίπτωση ο όρος σπιν-τροχιάς είναι πολύ μεγαλύτερος από τον μαγνητικό όρο, ο οποίος προστίθεται μετά σαν διαταραχή. Καλοί κβαντικοί αριθμοί είναι εδώ, όπως είδαμε



προηγούμενα, οι l, s, j, m_j . Από την (9.49) και τη σχέση $L_z + 2S_z = J_z + S_z$, έχουμε ότι τα ενεργειακά επίπεδα είναι τώρα

$$E_{nljm_j} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+(1/2)} - \frac{3}{4} \right) \right] + \frac{\mu_B B}{\hbar} \langle \psi_{nljm_j}^{(0)} | J_z + S_z | \psi_{nljm_j}^{(0)} \rangle \quad (9.55)$$

Ως προς τις αναμενόμενες τιμές, έχουμε κατ' αρχήν ότι $\langle J_z \rangle_{nljm_j} = m_j \hbar$. Ως προς την αναμενόμενη τιμή $\langle S_z \rangle_{nljm_j}$, από την έκφραση (5.135) για την πρόσθεση στροφορμών και τους γνωστούς από πίνακες συντελεστές Clebsch-Gordan έχουμε τη σχέση $(m_s = \pm \frac{1}{2})$

$$|j = l \pm \frac{1}{2}, m_j\rangle = \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + (1/2)}{2l+1}} |m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l \mp m_j + (1/2)}{2l+1}} |m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \quad (9.56)$$

Τότε παίρνουμε

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle_{nljm_j} &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2l+1} \left[(l \pm m_j + \frac{1}{2}) - (l \mp m_j + \frac{1}{2}) \right] \\ &= \pm \frac{m_j \hbar}{2l+1} \end{aligned} \quad (9.57)$$

Είναι, συνεπώς, σ' αυτήν την περίπτωση

$$E_{nljm_j} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+(1/2)} - \frac{3}{4} \right) \right] + g \mu_B B m_j, \quad (9.58)$$

όπου

$$g = 1 \pm \frac{m_j \hbar}{2l+1} \quad (9.59)$$

είναι ο παράγων Landé για τη μετατόπιση στην ενέργεια λόγω του πεδίου B . Σημειώνουμε ότι ο εκφυλισμός ως προς m_j αίρεται πλήρως με την παρουσία του μαγνητικού πεδίου.

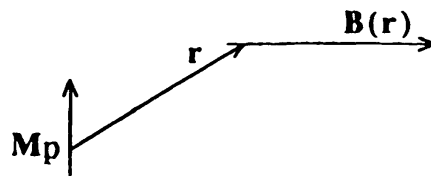
Καθώς το μέγεθος του μαγνητικού πεδίου B αυξάνεται από το όριο ασθενούς πεδίου στο όριο ισχυρού πεδίου, έχουμε μια ομαλή μετάβαση από τη μια στην άλλη έκφραση για τις ενεργειακές στάθμες.



9.5. Υπέρλεπτη υφή-Γραμμή 21 cm του υδρογόνου

Εκτός από τις διορθώσεις λεπτής υφής, υπάρχουν και οι διορθώσεις υπέρλεπτης υφής (της τάξης του 10^{-6} eV) με πολύ σπουδαίες πρακτικές εφαρμογές. Πρόκειται για διορθώσεις, που προέρχονται από την αλληλεπίδραση ανάμεσα στα μαγνητικά δίπολα του ηλεκτρονίου και του πρωτονίου. Κατά κάποιο τρόπο, πρόκειται για ένα μόνιμο φαινόμενο Zeeman, που προέρχεται από την αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου με το μαγνητικό πεδίο, που δημιουργεί το μαγνητικό δίπολο του πρωτονίου. Θα θεωρήσουμε εδώ τις διορθώσεις υπέρλεπτης υφής για τη βασική κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου ($n=1, l=0$).

Το μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, που δημιουργεί το μαγνητικό δίπολο \mathbf{M}_p του πρωτονίου, είναι εύκολο να υπολογιστεί. Θα έχουμε για το ανυσματικό δυναμικό \mathbf{A} τον γνωστό από τον ηλεκτρομαγνητισμό τύπο



Σχ. 9.2

$$\mathbf{A} = \nabla \times \left(\frac{\mathbf{M}_p}{r} \right) \quad (9.60)$$

Συνεπώς

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \left[-\mathbf{M}_p \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{M}_p \cdot \nabla) \frac{1}{r} \right], \quad (9.61)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη γνωστή ανυσματική ταυτότητα

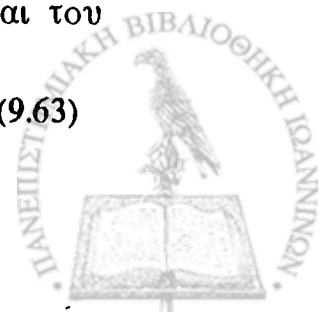
$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{a} = \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla^2 \mathbf{a}$$

Η ενέργεια αλληλεπίδρασης (διαταραχή) ανάμεσα στη μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου και το μαγνητικό πεδίο (9.61) είναι

$$\begin{aligned} \hat{W} &= -\mathbf{M}_e \cdot \mathbf{B} \\ &= \mathbf{M}_e \mathbf{M}_p \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) - (\mathbf{M}_e \cdot \nabla) (\mathbf{M}_p \cdot \nabla) \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (9.62)$$

Ο τελεστής (9.62) δρα, βέβαια, και στο χώρο των θέσεων και στο χώρο του σπιν. Η βασική κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου είναι, τώρα, τετραπλά εκφυλισμένη, μια και από την πρόσθεση των σπιν του ηλεκτρονίου και του πρωτονίου έχουμε τις τέσσερις δυνατές καταστάσεις (5.154)-(5.155)

$$\chi_{0,0}, \quad \chi_{1,1}, \quad \chi_{1,0}, \quad \chi_{1,-1} \quad (9.63)$$



Κάνοντας πρώτα τη θεωρία διαταραχών στο χώρο των θέσεων, θα πάρουμε έναν τελεστή που θα δρα στο χώρο του σπιν, οπότε και θα υπολογίσουμε την τελική έκφραση για τη διόρθωση. Αρχικά, λοιπόν, στο χώρο των θέσεων έχουμε

$$\begin{aligned}\hat{H}_1^{(1)} &= \langle \psi_{100}^{(0)} | \hat{W} | \psi_{100}^{(0)} \rangle \\ &= \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \hat{W} \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= M_e M_p \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &\quad - \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left[(\mathbf{M}_e \cdot \nabla) (\mathbf{M}_p \cdot \nabla) \frac{1}{r} \right] \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}\quad (9.64)$$

Ο δεύτερος όρος στην παραπάνω έκφραση γράφεται

$$\begin{aligned}\int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left[(\mathbf{M}_e \cdot \nabla) (\mathbf{M}_p \cdot \nabla) \frac{1}{r} \right] \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) M_e^i M_p^j \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}\quad (9.65)$$

Για $i \neq j$ όλοι οι όροι, εκτός των παραγώγων, παρουσιάζουν σφαιρική συμμετρία και, συνεπώς, η γωνιακή ολοκλήρωση θα δώσει μηδέν. Από την άλλη μεριά, όλες οι συνεισφορές με $i=j$ θα είναι ίσες για τους ίδιους λόγους σφαιρικής συμμετρίας. Παίρνουμε, λοιπόν,

$$\begin{aligned}\int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left[(\mathbf{M}_e \cdot \nabla) (\mathbf{M}_p \cdot \nabla) \frac{1}{r} \right] \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) M_e^i M_p^i \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = \frac{1}{3} M_e M_p \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}\quad (9.66)$$

Έτσι, η διόρθωση (9.64) γίνεται

$$\hat{H}_1^{(1)} = \frac{2}{3} M_e M_p \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Με βάση τη γνωστή σχέση

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}), \quad (9.67)$$

η διόρθωση παίρνει τη τελική μορφή

$$\hat{H}_1^{(1)} = -\frac{8\pi}{3} M_e M_p |\psi_{100}(0)|^2 \quad (9.68)$$



Γράφοντας

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e &= -2\mu_B \frac{\mathbf{S}_e}{\hbar} = -\frac{e\hbar}{m_e c} \frac{\mathbf{S}_e}{\hbar} \\ \mathbf{M}_p &= g_p \mu_N \frac{\mathbf{S}_p}{\hbar} = g_p \frac{e\hbar}{2m_p c} \frac{\mathbf{S}_p}{\hbar}, \end{aligned} \quad (9.69)$$

όπου έχουμε συμβολίσει με $\mathbf{S}_e, \mathbf{S}_p$ το σπίν του ηλεκτρονίου και του πρωτονίου, αντίστοιχα, και $g_p = 5.58$ είναι ο παράγοντας Landé για το πρωτόνιο. Αντικαθιστώντας στην (9.68) έχουμε την τελική έκφραση

$$\hat{H}_1^{(1)} = A \frac{\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p}{\hbar^2}, \quad (9.70)$$

όπου

$$A = \frac{4g_p}{3} \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 \alpha^4, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (9.71)$$

Αν συμβολίσουμε τώρα με $\mathbf{F} = \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p$ το ολικό σπίν, οπότε

$$\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{S}_e^2 - \mathbf{S}_p^2), \quad (9.72)$$

λαμβάνοντας υπ' όψη τις ιδιοτιμές του σπιν, έχουμε για την διόρθωση της ενέργειας της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου την έκφραση

$$E_1^{(1)} = \frac{A}{2} [F(F+1) - \frac{3}{2}] = \begin{cases} \frac{A}{4}, & F=1 \\ -\frac{3A}{4}, & F=0 \end{cases} \quad (9.73)$$

Έτσι, ο εκφυλισμός της τετραπλά εκφυλισμένης βασικής κατάστασης αίρεται μερικά. Οι τρεις καταστάσεις $\psi_{100} \chi_{1,1}, \psi_{100} \chi_{1,0}, \psi_{100} \chi_{1,-1}$, με ολικό σπιν $F=1$ έχουν ενέργεια $E_1 + \frac{A}{4}$ και η κατάσταση $\psi_{100} \chi_{0,0}$ με $F=0$ έχει ενέργεια $E_1 - \frac{3A}{4}$. Η διαφορά ενέργειας ανάμεσά τους είναι

$$\Delta E = A \approx 5.87 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad (9.74)$$

Η συχνότητα της ακτινοβολίας, που αντιστοιχεί στην παραπάνω διαφορά ενέργειας, είναι

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \approx 1420 \text{ MHz} \quad (9.75)$$

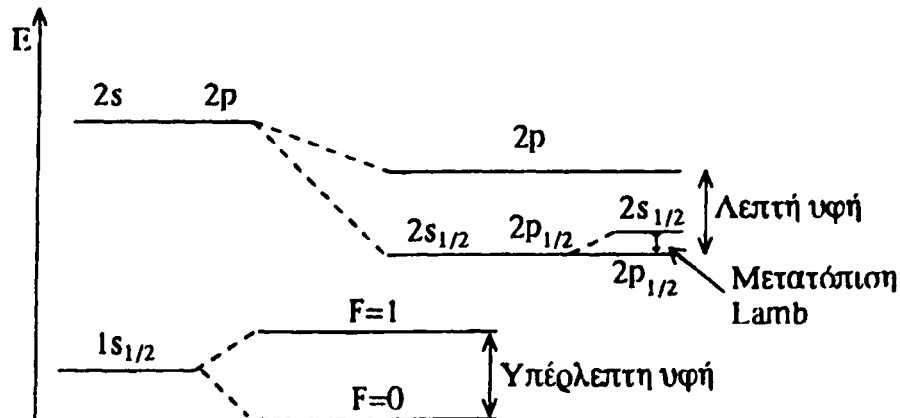
και το μήκος κύματος

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \approx 21 \text{ cm} \quad (9.76)$$



που αποτελεί μια χαρακτηριστική γραμμή του ατόμου του υδρογόνου.

Το σχήμα 9.3 δείχνει τα κατώτερα επίπεδα του ατόμου του υδρογόνου πριν και μετά τις κβαντικές διορθώσεις που είδαμε σ' αυτή και την προηγούμενη παράγραφο.



Σχ. 9.3. Τα κατώτερα επίπεδα του ατόμου του υδρογόνου και οι κβαντικές διορθώσεις.

Η διαφορά (9.74) ανάμεσα στα ενεργειακά επίπεδα $F=1$ και $F=0$, στα οποία διασπάται η βασική κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου, μπορεί να επιτρέψει με μια τεχνική όμοια με αυτή του μείζερ αμμωνίας, αλλά πολύ πιο περίπλοκη, τη δημιουργία ενός μείζερ υδρογόνου. Η κύρια χρησιμότητα ενός μείζερ υδρογόνου δεν είναι η ενίσχυση μικροκυμάτων, αλλά η δυνατότητα χρήσης του σαν ατομικού ρολογιού. Πράγματι, κύρια λόγω της μικρής τιμής της ΔE , ο χρόνος ζωής της διεγερμένης κατάστασης $F=1$ είναι της τάξης του $10^{14} \text{ sec} \approx 10^7$ έτη, εικοσιδύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερος από ένα τυπικό χρόνο ζωής μιας ατομικής στάθμης 10^{-8} sec . Η πειραματική τιμή του ν είναι γνωστή με εντυπωσιακή ακρίβεια:

$$\nu = 1420405751,7684 \pm 0,0017 \text{ Hz} \quad (9.77)$$

Για την ώρα οι θεωρίες που διαθέτουμε δεν είναι δυνατόν να προβλέψουν την παραπάνω τιμή με ακρίβεια πέρα από το έκτο δεκαδικό ψηφίο. Ειδικότερα, η ακρίβεια (9.77) ενός ατομικού ρολογιού από μείζερ υδρογόνου έχει χρησιμοποιηθεί για την πειραματική επαλήθευση της γενικής σχετικότητας.

Ο εκφυλισμός (9.73) της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου μπορεί να αρθεί πλήρως αν τοποθετήσουμε το άτομο του υδρογόνου μέσα σ' ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B}_0 (φαινόμενο Zeeeman υπέρλεπτης υφής). Η χαμιλτονιανή θα είναι

$$\hat{H}_M = A \frac{\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p}{\hbar^2} - \mathbf{M}_e \cdot \mathbf{B}_0 - \mathbf{M}_p \cdot \mathbf{B}_0 \quad (9.78)$$



Επειδή η πυρηνική μαγνητόνη είναι μικρότερη από τη μαγνητόνη του Bohr κατά $m_e/m_p \approx 1/2000$, μπορούμε σε πρώτη προσέγγιση ν' αγνοήσουμε τον τελευταίο όρο στην (9.78). Θέτοντας

$$-\mathbf{M}_e \cdot \mathbf{B}_0 = \frac{eB_0}{m_e c} \hat{S}_{ez} \equiv \omega_0 \hat{S}_{ez}, \quad (9.79)$$

έχουμε

$$\hat{H}_M = A \frac{\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p}{\hbar^2} + \omega_0 \hat{S}_{ez} \quad (9.80)$$

Θα πρέπει τώρα να βρούμε στο χώρο του σπιν τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις της (9.80), που δρα πάνω στο τετραδιάστατο χώρο των καταστάσεων (9.63). Το πρόβλημα απλοποιείται, αν παρατηρήσουμε ότι οι $\chi_{1,1}$ και $\chi_{1,-1}$ είναι ιδιοκαταστάσεις του όρου $\omega_0 \hat{S}_{ez}$

$$\begin{aligned} \omega_0 \hat{S}_{ez} \chi_{1,1} &= \frac{\omega_0 \hbar}{2} \chi_{1,1} \\ \omega_0 \hat{S}_{ez} \chi_{1,-1} &= -\frac{\omega_0 \hbar}{2} \chi_{1,-1} \end{aligned} \quad (9.81)$$

Συνεπώς, έχουμε αμέσως τις δύο πρώτες ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις της ολικής χαμιλτονιανής (9.80) (δεν σημειώνουμε τις μεταβλητές του χώρου των θέσεων)

$$\begin{aligned} \frac{A}{4} + \frac{\omega_0 \hbar}{2} &\rightarrow \chi_{1,1} \\ \frac{A}{4} - \frac{\omega_0 \hbar}{2} &\rightarrow \chi_{1,-1} \end{aligned} \quad (8.82)$$

Το πρόβλημα που μένει είναι ουσιαστικά ένα πρόβλημα δύο καταστάσεων, ανάλογο μ' εκείνο που λύσαμε στο μείζερ αμμωνίας (βλ. εξισώσεις (3.179)-(3.188)). Πράγματι, για τις καταστάσεις $\chi_{0,0}$ και $\chi_{1,0}$ έχουμε

$$\begin{aligned} \omega_0 \hat{S}_{ez} \chi_{0,0} &= \frac{\omega_0 \hbar}{2} \chi_{1,0} \\ \omega_0 \hat{S}_{ez} \chi_{1,0} &= \frac{\omega_0 \hbar}{2} \chi_{0,0} \end{aligned} \quad (9.83)$$

δηλαδή

$$\omega_0 \hat{S}_{ez} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\omega_0 \hbar}{2} \\ \frac{\omega_0 \hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (9.84)$$

Για την ολική χαμιλτονιανή έχουμε, λοιπόν,



$$\hat{H}_M = \begin{pmatrix} -\frac{3A}{4} & \frac{\omega_0 \hbar}{2} \\ \frac{\omega_0 \hbar}{2} & \frac{A}{4} \end{pmatrix} \quad (9.85)$$

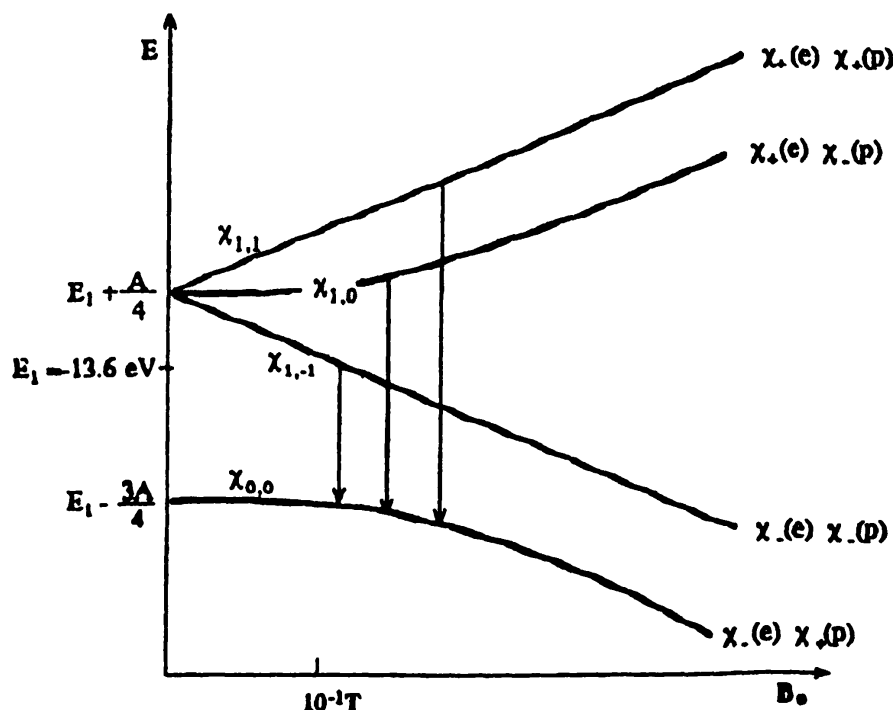
Οι ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις είναι, συνεπώς,

$$\begin{aligned} -\frac{A}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{A + \omega_0^2 \hbar^2} &\rightarrow \cos \theta \chi_{1,0} + \sin \theta \chi_{0,0} \\ -\frac{A}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{A + \omega_0^2 \hbar^2} &\rightarrow -\sin \theta \chi_{1,0} + \cos \theta \chi_{0,0} \end{aligned} \quad (9.86)$$

όπου

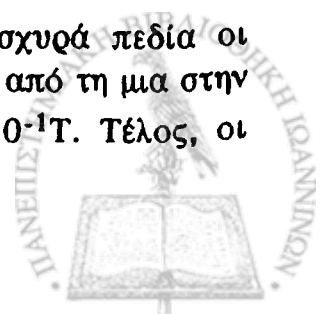
$$\tan \theta = \frac{\omega_0 \hbar}{A + \sqrt{A + \omega_0^2 \hbar^2}} \quad (9.87)$$

Το σχήμα 9.4 δείχνει το διαχωρισμό της γραμμής των 21 cm του ατόμου του υδρογόνου. Δεδομένου ότι $\omega_0 = \frac{eB_0}{m_e c}$, βλέπουμε ότι για ασθενή πεδίο B_0 οι καταστάσεις $\chi_{1,0}$ και $\chi_{0,0}$ δεν επηρεάζονται πολύ από το B_0 , ενώ οι ενέργειες



Σχ. 9.4. Το φαινόμενο Zeeman για τη γραμμή των 21 cm της υπέρλεπτης υψής του ατόμου του υδρογόνου.

των $\chi_{1,1}$ και $\chi_{1,-1}$ αυξάνονται γραμμικά με το B_0 . Για ισχυρά πεδία οι ιδιοκαταστάσεις είναι οι καταστάσεις $\chi_{\pm}(e)\chi_{\pm}(p)$. Το πέρασμα από τη μια στην άλλη περίπτωση συμβαίνει όταν $A = \omega_0 \hbar$, δηλαδή για $B_0 \approx 10^{-1} \text{ T}$. Τέλος, οι



μεταβάσεις από το ένα στο άλλο ενεργειακό επίπεδο υπέρλεπτης υψής μπορούν να μελετηθούν με τρόπο ανάλογο μ' εκείνο του μείζερ αμμωνίας με πιθανότητες που δίνονται από τον τύπο του Rabi (βλ. και το επόμενο κεφάλαιο X, §10.3 - 10.4).

Τη σημασία της γραμμής των 21 cm του υδρογόνου για την αστροφυσική θα γνωρίσουμε στο Παράρτημα I (§ Π-Ι.4).

9.6. Η μέθοδος WKB

Σ' αυτή και την επόμενη παράγραφο θ' ασχοληθούμε με προσεγγιστικές μεθόδους, που χαρακτηρίζονται σαν μη διαρακτικές. Πρώτα, θα συζητήσουμε την προσεγγιστική μέθοδος WKB, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν η δυναμική ενέργεια είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση της θέσης (αδιαβατική προσέγγιση, βλ. και §4.5, 10.7 και 12.3). Η μέθοδος ονομάζεται έτσι από τους G.Wentzel, H.A. Kramers και L.Brillouin, που την εφάρμοσαν στην κβαντική μηχανική το 1926, αν και η μέθοδος αυτή καθεαυτή είναι αρκετά πιο παλιά από την κβαντική θεωρία. Η μέθοδος WKB μπορεί να εφαρμοστεί εύκολα σε μονοδιάστατα προβλήματα, όπου το δυναμικό μπορεί να γραφεί $V(x)$, ή και σε προβλήματα με σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό, όπου το δυναμικό V αντικαθίσταται από το $V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$.

Ας αρχίσουμε από τη μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))} \quad (9.88)$$

Αν το V είναι σταθερό $V(x)=V_0$, οι λύσεις της (9.88) είναι γραμμικός συνδυασμός των επιπέδων κυμάτων

$$\psi(x) = A e^{\pm i p_0 x / \hbar}$$

$$p_0 = \sqrt{2m(E-V_0)} \quad (9.89)$$

Ας θεωρήσουμε τώρα την περίπτωση, που το δυναμικό $V(x)$ είναι "αργά μεταβαλλόμενο". Αυτό σημαίνει ότι το $V(x)$ μεταβάλλεται λίγο σε αποστάσεις ίσες με το μήκος κύματος de Broglie

$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)} \quad (9.90)$$

Κλασικά το μήκος κύματος de Broglie τείνει στο μηδέν. Έτσι, ένα αργά μεταβαλλόμενο δυναμικό αντιστοιχεί σε μια σχεδόν κλασική κατάσταση. Γι' αυτό η μέθοδος WKB λέγεται και ημικλασική προσέγγιση. Οδηγημένοι από τη μορφή των



λύσεων (9.89) για σταθερό δυναμικό, είναι λογικό να δοκιμάσουμε λύσεις της (9.88) της μορφής

$$\psi(x) = A e^{iS(x)/\hbar} \quad (9.91)$$

όπου η απόκλιση της $S(x)$ από τη γραμμικότητα θ' αντανακλά τις μεταβολές του $V(x)$. Αντικαθιστώντας την (9.91) στην (9.88) παίρνουμε για την $S(x)$ την εξίσωση

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2S}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + V(x) - E = 0 \quad (9.92)$$

Η λύση της μη γραμμικής εξίσωσης (9.92) μπορεί να γίνει προσεγγιστικά. Παρατηρούμε πρώτα ότι για το σταθερό δυναμικό V_0 είναι $S(x) = \pm p_0 x$ και ο πρώτος όρος στην (9.92) μηδενίζεται. Εξ άλλου, ο όρος αυτός είναι τάξης \hbar και στο κλασικό όριο μηδενίζεται ($\hbar \rightarrow 0$). Αυτό μας υποδεικνύει ότι μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την \hbar σαν την (μικρή) παράμετρο ανάπτυξης της $S(x)$ σε δυναμοσειρά

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \frac{\hbar^2}{2} S_2(x) + \dots \quad (9.93)$$

Αντικαθιστώντας την (9.93) στην (9.92) και εξισώνοντας τους συντελεστές ίσων δυνάμεων του \hbar , βρίσκουμε τη σειρά των εξισώσεων

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_0}{dx} \right)^2 + V(x) - E = 0 \quad (9.94)$$

$$\frac{dS_0}{dx} \frac{dS_1}{dx} - \frac{i}{2} \frac{d^2S_0(x)}{dx^2} = 0 \quad (9.95)$$

$$\frac{dS_0}{dx} \frac{dS_2}{dx} + \left(\frac{dS_1}{dx} \right)^2 - i \frac{d^2S_1}{dx^2} = 0 \quad (9.96)$$

κλπ. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, η μέθοδος WKB μας δίνει τους δύο πρώτους όρους στο ανάπτυγμα (9.93).

Ας υποθέσουμε πρώτα ότι $E > V(x)$, είμαστε δηλαδή στην κλασικά επιτρεπόμενη περιοχή θετικής κινητικής ενέργειας. Από την (9.94) έχουμε

$$S_0(x) = \pm \int^x p(x') dx' \quad (9.97)$$

που αποτελεί το κλασικό όριο της $S(x)$ (αφήνουμε ακαθόριστο το κάτω όριο του ολοκληρώματος, μια και η σταθερά ολοκλήρωσης ενσωματώνεται στην σταθερά A). Χρησιμοποιώντας την (9.97) στην (9.95), βρίσκουμε την συνάρτηση $S_1(x)$:

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \log p(x) \quad (9.98)$$



Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις $S_0(x)$ και $S_1(x)$ από τις παραπάνω εκφράσεις και θέτοντάς τις στην (9.96), βρίσκουμε την $S_2(x)$:

$$S_2(x) = \frac{m}{2p^3(x)} \frac{dV}{dx} - \frac{1}{4} m^2 \int \frac{1}{p^5(x')} \left(\frac{dV(x')}{dx'} \right)^2 dx' \quad (9.99)$$

Από την έκφραση αυτή συμπεραίνουμε ότι η $S_2(x)$ θα είναι μικρή, όσο το $\frac{dV}{dx}$ είναι μικρό και το $(E-V) = p^2/2m$ δεν είναι πολύ κοντά στο μηδέν. Παρόμοια, όταν και οι ανώτερες παράγωγοι του $V(x)$ είναι μικρές, τότε οι $S_3(x)$, $S_4(x)$ κ.λ.π. θα είναι επίσης μικρές. Συνεπώς, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι, αν το $V(x)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση και το $E-V(x)$ δεν είναι πολύ μικρό, τότε αρκούν οι δύο πρώτοι όροι στο ανάπτυγμα (9.93). Από τις (9.97)-(9.98), παίρνουμε τη γενική λύση στην προσέγγιση WKB και στην κλασικά επιτρεπόμενη περιοχή $E > V$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A \exp \left[i \frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' \right] + B \exp \left[-i \frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' \right] \right], \quad E > V \quad (9.100)$$

Ας υποθέσουμε τώρα ότι $E < V(x)$, ότι δηλαδή είμαστε στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή αρνητικής κινητικής ενέργειας. Τότε, με την ίδια διαδικασία, παίρνουμε τη γενική λύση στην προσέγγιση WKB:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{q(x)}} \left[C \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int^x q(x') dx' \right] + D \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int^x q(x') dx' \right] \right], \quad E < V \quad (9.101)$$

όπου $q(x) = \sqrt{2m(V(x)-E)}$. Θα πρέπει πάντα το $V(x)$ να μεταβάλλεται αργά και το $V(x)-E$ να μην είναι πολύ μικρό.

Εύκολα μπορούμε να δούμε ποιό είναι το κριτήριο ισχύος της προσέγγισης WKB, όπως την περιγράψαμε παραπάνω. Απαιτώντας να ισχύει (βλ. σχέσεις (9.91) και (9.93)) για τη συνεισφορά του τρίτου όρου του αναπτύγματος της $S(x)$ στην κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$

$$\left| \frac{\hbar}{2} S_2(x) \right| \ll 1, \quad (9.102)$$

βρίσκουμε από την (9.99) ότι η συνθήκη αυτή γράφεται

$$\left| \frac{\hbar m (dV/dx)}{[2m(E-V(x))]^{3/2}} \right| \ll 1 \quad (9.103)$$

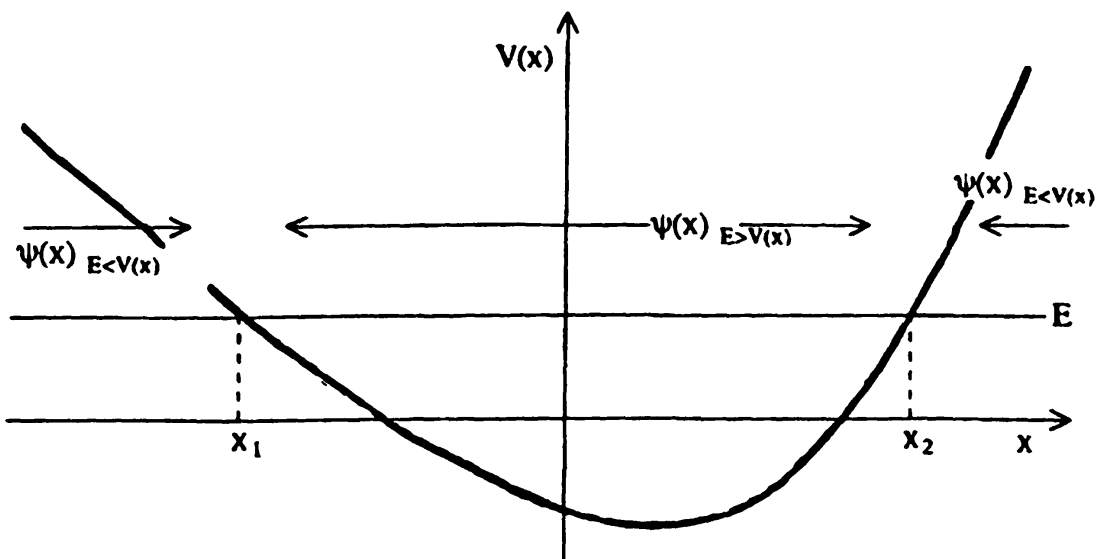
όπου λάβαμε υπ' όψη ότι και οι δύο όροι της $S_2(x)$ από την (9.99) είναι της ίδιας τάξης μεγέθους. Το κριτήριο αυτό ικανοποιείται, όταν η δυναμική ενέργεια $V(x)$ μεταβάλλεται αργά και η κινητική ενέργεια $E-V(x)$ δεν είναι μικρή (για την



περίπτωση της λύσης (9.101) πρέπει αντίστοιχα η ποσότητα $V(x)-E$ να μην είναι μικρή).

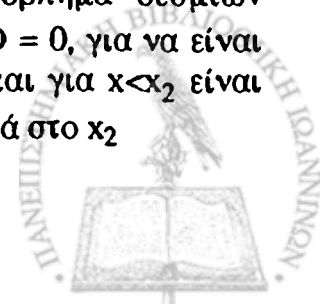
α) Εφαρμογή σε δέσμιες καταστάσεις

Από το κριτήριο (9.103) βλέπουμε ότι η προσέγγιση WKB παύει να ισχύει κοντά στα σημεία, για τα οποία είναι $E = V(x)$. Τα σημεία αυτά είναι γνωστά σαν σημεία αναστροφής, γιατί εκεί η ταχύτητα ενός κλασικού σωματιδίου μηδενίζεται και στη συνέχεια αλλάζει κατεύθυνση. Συνεπώς, οι δύο λύσεις (9.100) και (9.101) είναι ασυμπτωτικές λύσεις, που ισχύουν μακριά από σημεία αναστροφής. Επειδή οι ακριβείς λύσεις είναι συνεχείς για κάθε x , θα πρέπει να υπάρχουν τύποι σύνδεσης, που θα επιτρέπουν να ενώσουμε τις δύο λύσεις για $E > V(x)$ και $E < V(x)$, που ισχύουν από την μια και την άλλη πλευρά ενός σημείου αναστροφής. Ο τρόπος που χειριζόμαστε αυτό το πρόβλημα είναι κάπως τεχνικός. Ας δούμε, όμως, τα κύρια σημεία μιας τέτοιας ανάλυσης για ένα πρόβλημα δέσμιας κατάστασης (σχ.9.5). Η ανάλυση αυτή συνίσταται στο να ενώσουμε τις λύσεις WKB με την ασυμπτωτική μορφή των λύσεων της εξίσωσης Schrödinger, που βρίσκουμε κοντά σ' ένα σημείο αναστροφής, όταν προσεγγίζουμε το $V(x)$ με μια γραμμική συνάρτηση του x . Αυτό είναι κάτι λογικό για ένα αργά μεταβαλλόμενο δυναμικό, όπως φαίνεται και στο σχήμα 9.5.



Σχ. 9.5. Η προσέγγιση WKB για τη λύση ενός προβλήματος δέσμιας κατάστασης. x_1 και x_2 είναι σημεία αναστροφής.

Έτσι, για το δεξιό σημείο αναστροφής x_2 στο πρόβλημα δέσμιων καταστάσεων του σχήματος 9.5, στη λύση (9.101) θα πάρουμε $D = 0$, για να είναι $\psi(x) \rightarrow 0$, όταν $x \rightarrow +\infty$. Τώρα, επειδή για $x > x_2$ είναι $p^2(x) < 0$ και για $x < x_2$ είναι $p^2(x) > 0$, μπορούμε να γράψουμε προσεγγιστικά για x αρκετά κοντά στο x_2



$$p^2(x) \approx \left. \frac{dp^2(x)}{dx} \right|_{x=x_2} \cdot (x-x_2) \quad (9.104)$$

όπου $\left. \frac{dp^2(x)}{dx} \right|_{x=x_2} < 0$. Θέτοντας

$$\xi(x) = \hbar^{-2/3} \left(\left. \frac{dp^2(x)}{dx} \right|_{x=x_2} \right)^{1/3} (x_2-x) \quad (9.105)$$

η εξίσωση Schrödinger (9.88) γίνεται

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi \psi(\xi) = 0, \quad \psi(\xi) = \psi(x) \quad (9.106)$$

Η εξίσωση (9.106) είναι η γνωστή μας από την §3.5 εξίσωση Airy. Η λύση της, που συμπίπτει ασυμπτωτικά με τις λύσεις WKB (μακριά από το σημείο x_2) και είναι η ακριβής λύση της εξίσωσης Schrödinger στο σημείο x_2 και γύρω από αυτό, είναι η συνάρτηση Airy $Ai(\xi)$. Από την ασυμπτωτική συμπεριφορά (3.93) της συνάρτησης Airy $Ai(\xi)$ συμπεραίνουμε ότι θα πρέπει να διαλέξουμε $A=Ce^{i(\pi/4)}$, $B=Ce^{-i(\pi/4)}$, οπότε ο τύπος σύνδεσης για το δεξιό σημείο αναστροφής μπορεί να εκφραστεί σαν (παίρνουμε το σημείο x_2 σαν το κάτω όριο των σχετικών ολοκληρωμάτων)

$$\frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \leftarrow \frac{C}{\sqrt{q(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x q(x') dx' \right] \quad (9.107)$$

όπου για το αριστερό μέλος είναι $x < x_2$ και για το δεξιό $x > x_2$, αρκεί το x να μην είναι πολύ κοντά στο x_2 . Από την άλλη μεριά, για το αριστερό σημείο αναστροφής x_1 , θα πάρουμε αρχικά $C=0$, για να είναι $\psi(x) \rightarrow 0$, όταν $x \rightarrow -\infty$. Με την ίδια συλλογιστική, όπως προηγούμενα, καταλήγουμε ότι τώρα θα πρέπει διαλέξουμε $A=De^{-i\pi/4}$, $B=De^{+i\pi/4}$, οπότε ο τύπος σύνδεσης για το αριστερό σημείο αναστροφής μπορεί να εκφραστεί σαν (παίρνουμε το x_1 σαν το κάτω όριο των σχετικών ολοκληρωμάτων)

$$\frac{D}{\sqrt{q(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x q(x') dx' \right] \rightarrow \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad (9.108)$$

όπου για το αριστερό μέλος είναι $x < x_1$ και για το δεξιό $x > x_1$ αρκεί το x να μην είναι πολύ κοντά στο x_1 . Θα πρέπει να υπογραμμίσουμε ότι η φορά των βελών στις σχέσεις (9.107) και (9.108) δείχνει τον τρόπο με τον οποίον πρέπει να γίνουν οι συνδέσεις.

Για να βρούμε τα ενεργειακά επίπεδα των δέσμιων καταστάσεων μέσα στο φρέαρ δυναμικού του σχήματος 9.5 (μεταξύ x_1 και x_2), αρκεί να παρατηρήσουμε ότι



η λύση WKB εκεί μπορεί να γραφεί είτε σαν πολλαπλάσιο του δεξιού μέλους της (9.108) είτε σαν πολλαπλάσιο του αριστερού μέλους της (9.107), δηλαδή

$$N_1 \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) = N_2 \sin \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad (9.109)$$

όπου N_1 και N_2 σταθερές. Η σχέση αυτή ικανοποιείται όταν είναι

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n + \frac{1}{2}) \pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.110)$$

και $N_2 = \pm N_1$. Η (9.110) μας δίνει το διάκριτο φάσμα ενεργειών $E = E_0, E_1, E_2, \dots$ για $n = 0, 1, 2, \dots$ και αυτό αποτελεί την προσέγγιση WKB στις πραγματικές τιμές της ενέργειας των δέσμιων καταστάσεων του προβλήματος. Αξίζει να σημειώσουμε ότι η συνθήκη (9.110) μπορεί να γραφεί με τη μορφή

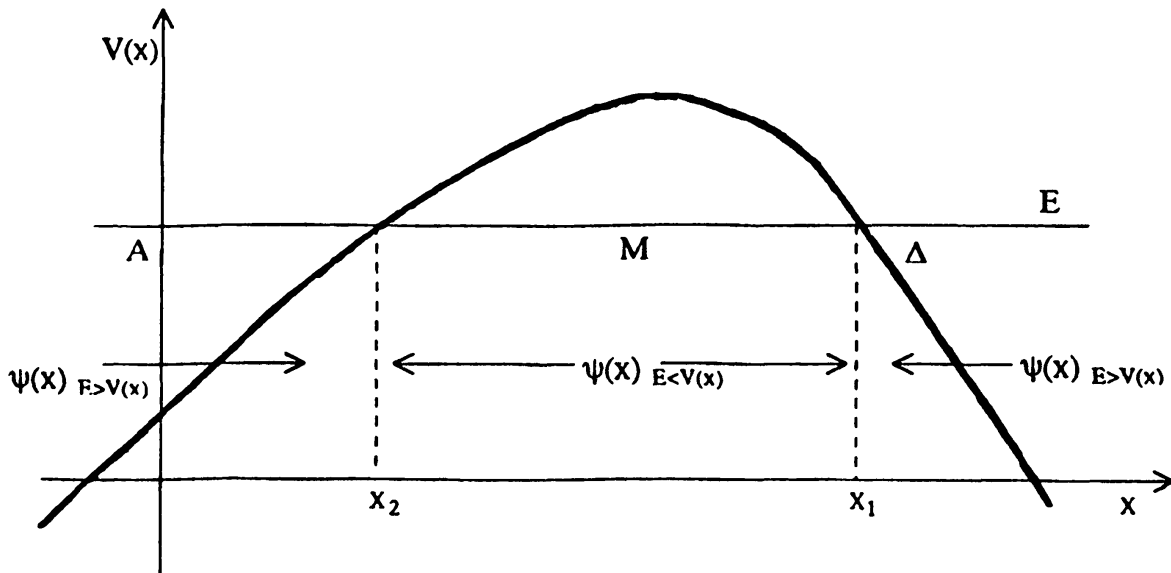
$$\oint p(x) dx \equiv 2 \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n + \frac{1}{2}) h \quad (9.111)$$

όπου το \oint σημαίνει ολοκλήρωση της οριμής $p(x)$ πάνω σ' ένα πλήρη κύκλο της κλασικής κίνησης (δηλαδή από το x_1 στο x_2 και πίσω στο x_1). Η (9.111) δεν είναι άλλη από τη συνθήκη κβάντωσης των Bohr-Sommerfeld-Wilson στην παλιά κβαντική θεωρία (βλ. και σχέση (E.9)). Στην πραγματικότητα, η εφαρμογή της συνθήκης (9.110) απαιτεί το n να είναι μεγάλο, σε συμφωνία με το γεγονός ότι η μέθοδος WKB αποτελεί μια ημικλασική προσέγγιση, που ισχύει, συνεπώς, για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς. Όμως, σε πολλές περιπτώσεις η μέθοδος WKB δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα ακόμα και για μικρά n . Στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή, μάλιστα, δίνει το ακριβές αποτέλεσμα (βλ. πρόβλημα 9.14).

β) Εφαρμογή στη διέλευση μέσω φράγματος.

Μια άλλη ενδιαφέρουσα εφαρμογή της προσεγγιστικής μεθόδου WKB έχουμε στη διέλευση μέσω ενός φράγματος δυναμικού (φαινόμενο σήραγγας) (σχ. 9.6). Παρόμοιο πρόβλημα μελετήσαμε στην παράγραφο §3.4, χρησιμοποιώντας τότε μια περισσότερο απλουστευμένη προσέγγιση.





Σχ. 9.6. Η προσέγγιση WKB για τη διέλευση μέσω ενός φράγματος δυναμικού

Ας υποθέσουμε ότι μια δέσμη σωματιδίων πέφτει πάνω στο φράγμα δυναμικού του σχήματος 9.6 από αριστερά. Θα έχουμε τότε στη δεξιά περιοχή Δ τη λύση WKB

$$\psi_{\Delta}(x) = A \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[i \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right], \quad x > x_1 \quad (9.112)$$

όπου γράψαμε τον παράγοντα φάσης $e^{-i(\pi/4)}$ ξεχωριστά από τη σταθερά A για να διευκολύνουμε την εφαρμογή των τύπων σύνδεσης. Ισοδύναμα, γράφουμε την έκφραση (9.112) σαν

$$\psi_{\Delta}(x) = A \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[\cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) + i \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad x > x_1 \quad (9.113)$$

Στην ανάλυση που κάναμε προηγούμενα για την εύρεση των τύπων σύνδεσης (9.107) και (9.108), είχαμε χρησιμοποιήσει τις εκθετικά μειούμενες κληματοσυναρτήσεις - λύσεις Airy $Ai(\xi)$ της εξίσωσης Schrödinger (9.106). Όμως στο πρόβλημα που μελετάμε εδώ φαίνεται αμέσως ότι κάτι τέτοιο δεν είναι αναγκαίο, μια και δεν ενδιαφερόμαστε αριστερά του x_1 και δεξιά του x_2 να φθάσουμε μέχρι το άπειρο. Υπάρχουν λύσεις της εξίσωσης (9.106) που είναι εκθετικά αυξανόμενες. Είναι οι συναρτήσεις Airy $Bi(\xi)$, που έχουν ασυμπτωτική συμπεριφορά

$$Bi(\xi) = -\frac{1}{\sqrt{\pi} |\xi|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) \quad \xi \rightarrow -\infty$$



$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \xi^{1/4}} e^{(2/3) |\xi|^{3/2}} \quad \xi \rightarrow +\infty \quad (9.114)$$

Αφήνουμε σαν πρόβλημα στον αναγνώστη να δείξει με ίδια βήματα, όπως προηγούμενα, ότι οι τύποι σύνδεσης είναι τώρα

$$-\frac{1}{\sqrt{q(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x q(x') dx'\right] \leftarrow \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \quad (9.115)$$

$$\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{q(x)}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x q(x') dx'\right] \quad (9.116)$$

για τα σημεία αναστροφής x_1 και x_2 , αντίστοιχα.

Έτσι, στο πρόβλημά μας, επειδή καθώς το x απομακρύνεται προς τα αριστερά του σημείου αναστροφής x_1 η εκθετικά αυξανόμενη κυματοσυνάρτηση θα είναι η πιο σημαντική, θα έχουμε από τον τύπο σύνδεσης (9.115) ότι

$$\psi_M(x) = -iA \frac{1}{\sqrt{q(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x q(x') dx'\right], \quad x_2 < x < x_1 \quad (9.117)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\psi_M(x) = -iA \frac{1}{\sqrt{q(x)}} e^{\Lambda} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x q(x') dx'\right], \quad x_2 < x < x_1 \quad (9.118)$$

όπου

$$\Lambda = \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} q(x) dx = \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} [2m(V(x)-E)]^{1/2} dx \quad (9.119)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τον τύπο σύνδεσης (9.107) για το σημείο αναστροφής x_2 , έχουμε

$$\begin{aligned} \psi_A(x) &= -2iA \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\Lambda} \sin\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] \\ &= A \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\Lambda} \left[\exp\left[-i\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right)\right] - \exp\left[-i\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right)\right] \right], \\ &\quad x < x_2 \quad (9.120) \end{aligned}$$

Από τις εκφράσεις (9.112) και (9.120) βρίσκουμε αμέσως για το συντελεστή διέλευσης T ότι



$$T = e^{-2\Lambda} = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} [2m(V(x)-E)]^{1/2} dx \right] \quad (9.121)$$

Η έκφραση αυτή συμπίπτει με την (3.84), που είχαμε βρει στην πιο απλουστευμένη προσέγγιση της §3.4. Σημειώνουμε ότι η παραπάνω μέθοδος δικαιολογείται μόνο όσο το $V(x)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση και τα σημεία αναστροφής είναι αρκετά μακριά το ένα από το άλλο, έτσι ώστε το εύρος (x_1-x_2) να περιέχει αρκετά αντίστοιχα μήκη κύματος. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να είναι το Λ πολύ μεγάλο και ο συντελεστής T πολύ μικρός. Αντίστοιχα, ο συντελεστής ανάκλασης $R=1-T$ θα είναι πολύ κοντά στη μονάδα, όπως υποδεικνύει και η έκφραση (9.120).

9.7. Η μέθοδος των μεταβολών

Θα τελειώσουμε αυτό το κεφάλαιο, συζητώντας μια άλλη προσεγγιστική μέθοδο, γνωστή σαν μέθοδο των μεταβολών, που είναι αρκετά χρήσιμη στον προσεγγιστικό υπολογισμό των ενεργειών δέσμιων καταστάσεων και των αντίστοιχων ιδιοσυναρτήσεων. Ας θεωρήσουμε τη μέση τιμή $E(\psi)$ της χαμιλτονιανής \hat{H}

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int \psi^*(r) \hat{H} \psi(r) dr}{\int \psi^*(r) \psi(r) dr} \quad (9.122)$$

ως προς μια κατάσταση $|\psi\rangle$. Δεχόμαστε ότι η \hat{H} έχει τουλάχιστον μια δέσμια κατάσταση. Θα δείξουμε τώρα ότι κάθε κατάσταση $|\psi\rangle$ για την οποία η $E(\psi)$ είναι στάσιμη είναι ιδιοκατάσταση της \hat{H} . Τότε, προφανώς, η $E(\psi)$ θα είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή. Για να το δείξουμε αυτό θεωρούμε την απειροστή μεταβολή

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle \quad (9.123)$$

Μεταβάλλοντας την (9.122), παίρνουμε

$$\begin{aligned} \langle \psi | \delta E(\psi) + \langle \delta \psi | \psi \rangle E(\psi) + \langle \psi | \delta \psi \rangle E(\psi) = \\ = \langle \delta \psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | \delta \psi \rangle \end{aligned} \quad (9.124)$$

Για να έχουμε στάσιμη $E(\psi)$ κάτω από τη μεταβολή (9.123) θα πρέπει να είναι

$$\delta E(\psi) = 0 \quad (9.125)$$

οπότε η (9.124) δίνει

$$\langle \delta \psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \psi \rangle + \langle \psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \delta \psi \rangle = 0 \quad (9.126)$$

Θεωρώντας τώρα την απειροστή μεταβολή

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle + i|\delta\psi\rangle \quad (9.127)$$



βρίσκουμε ανάλογα

$$-i\langle \delta\psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \psi \rangle + i\langle \psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \delta\psi \rangle = 0 \quad (9.128)$$

Συνδυάζοντας τις (9.126) και (9.128) παίρνουμε τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \langle \delta\psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \psi \rangle &= 0 \\ \langle \psi | (\hat{H} - E(\psi)) | \delta\psi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (9.129)$$

Επειδή η χαμιλτονιανή \hat{H} είναι ερμιτιανός τελεστής, βλέπουμε αμέσως ότι οι δύο αυτές εξισώσεις είναι ισοδύναμες με την εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}|\psi\rangle = E(\psi)|\psi\rangle \quad (9.130)$$

που σημαίνει ότι η $|\psi\rangle$, για την οποία η (9.122) είναι στάσιμη, είναι ιδιοκατάσταση της \hat{H} με ιδιοτιμή την $E(\psi)$. Αντίστροφα, αν η $|\psi\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση της \hat{H} , τότε προφανώς η $E(\psi)$ είναι στάσιμη: $\delta E(\psi) = 0$.

Μια σημαντική ιδιότητα της μέσης τιμής $E(\psi)$ ως προς μια οποιαδήποτε αυθαίρετη κατάσταση $|\psi\rangle$ είναι ότι αυτή είναι μεγαλύτερη ή ίση προς την ενέργεια E_0 της βασικής κατάστασης

$$E(\psi) \geq E_0, \quad \forall |\psi\rangle \quad (9.131)$$

Πράγματι, αν αναπτύξουμε την $|\psi\rangle$ συναρτήσει των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας, έχουμε

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \frac{(\sum_{E'} c_{E'}^* \langle E' |) \hat{H} (\sum_E c_E | E \rangle)}{\sum_{E'} \sum_E c_{E'}^* c_E \langle E' | E \rangle} \\ &= \frac{\sum_E |c_E|^2 E}{\sum_E |c_E|^2} \geq E_0 \end{aligned} \quad (9.132)$$

Έτσι, η $E(\psi)$ δίνει ένα άνω όριο για την ενέργεια της βασικής κατάστασης. Η ιδιότητα (9.132) συνιστά την προσεγγιστική μέθοδο μεταβολών (γνωστή με το ιδιαίτερο όνομα Rayleigh-Ritz) για τον υπολογισμό της E_0 .

Η μέθοδος των μεταβολών έχει περιορισμένες εφαρμογές στον προσδιορισμό άλλων καταστάσεων εκτός της βασικής κατάστασης ενός συστήματος. Η χρησιμότητά της τότε εξαρτάται από την ικανότητά μας να μαντέψουμε καλά τη



μορφή της αντίστοιχης ιδιοσυνάρτησης. Κριτήρια συμμετρίας και άλλες φυσικές ιδιότητες του συστήματος είναι χρήσιμοι οδηγοί για κάτι τέτοιο. Η μέθοδος συνίσταται στο να διαλέξουμε μια δοκιμαστική συνάρτηση $\psi(\mathbf{r})$, που να εξαρτάται από ένα ορισμένο αριθμό παραμέτρων, και να υπολογίσουμε την μέση τιμή της ενέργειας $E(\psi)$ ως προς αυτή. Μεταβάλλοντας τις παραμέτρους, έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε την $E(\psi)$, θα πάρουμε την καλύτερη δυνατή προσέγγιση της E_0 για τη μορφή της $\psi(\mathbf{r})$ που διαλέξαμε.

Σαν εφαρμογή, ας θεωρήσουμε τον αρμονικό ταλαντωτή. Η κυματοσυνάρτηση $\psi_0(x)$ της βασικής κατάστασης πρέπει να έχει τη μορφή, που είδαμε στο σχ.4.2. Συνεπώς, η δοκιμαστική συνάρτηση, που θα διαλέξουμε, πρέπει να προσεγγίζει εκείνη τη μορφή. Έτσι, ας διαλέξουμε πρώτα την δοκιμαστική συνάρτηση

$$\psi(x,\lambda) = \sqrt{\frac{2\lambda^3}{\pi}} \frac{1}{x^2+\lambda^2} \quad (9.133)$$

που εξαρτάται από την παράμετρο λ . Είναι

$$\begin{aligned} E_\lambda(\psi) &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi dx \end{aligned} \quad (9.134)$$

Χρησιμοποιώντας το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2+\lambda^2} = \frac{\pi}{\lambda}$$

και τις παραγώγους του ως προς λ , μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της ενέργειας. Βρίσκουμε

$$E_\lambda = \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} + m\omega^2 \lambda^2 \right], \quad (9.135)$$

που είναι ελάχιστη για $\lambda^2 = \frac{\hbar}{m\omega\sqrt{2}}$, απ' όπου

$$E_{\min} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar\omega \approx 0.707 \hbar\omega \quad (9.136)$$

Η τιμή αυτή είναι κοντά στην ακριβή τιμή $\frac{1}{2} \hbar\omega$. Βέβαια, η δοκιμαστική συνάρτηση (9.133) είναι εξαιρετικά απλή και θα πρέπει να περιμένουμε ότι, όσο πιο πολύ την



περιπλέκουμε για να πλησιάσει την επιθυμητή μορφή, τόσο πιο καλά αποτελέσματα θα έχουμε. Έτσι, αν διαλέξουμε την γκαουσιανή συνάρτηση

$$\psi(x,\lambda) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\lambda x^2/2}, \quad (9.137)$$

βρίσκουμε

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (9.138)$$

όπως φυσικά θα περιμέναμε, μια και η ιδιοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης ξέρουμε ότι έχει τη μορφή (9.137).

Η μέθοδος των μεταβολών βρίσκει εκτεταμένη εφαρμογή στη μελέτη της ατομικής και μοριακής δομής (βλ. κεφάλαιο XII).

Προβλήματα

- 9.1. Ας θεωρήσουμε μια αρμονική διαταραχή στη χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2, \quad \hat{H}' = \frac{1}{2} k' x^2$$

Είναι

$$E_n^{(0)} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 + \frac{k'}{k}}$$

Ναδειχθεί ότι η θεωρία διαταραχών δίνει

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{1}{2} \frac{k'}{k} - \frac{1}{8} \frac{k'^2}{k^2} \dots \right),$$

που είναι το ανάπτυγμα του ακριβούς αποτελέσματος.

- 9.2. i) Να βρεθούν τα ενεργειακά επίπεδα για ένα σωματίδιο μάζας m , που κινείται στο δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 & x > 0 \end{cases}$$



ii) Στο παραπάνω δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή θεωρούμε την επί πλέον διαταραχή

$$H' = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 x^2, \quad \epsilon \ll 1$$

Να γραφεί η ακριβής μορφή της ιδιοτιμής και της ιδιοσυνάρτησης της βασικής κατάστασης.

Να υπολογιστεί η διόρθωση που δίνει η θεωρία διαταραχών στην ιδιοτιμή και την ιδιοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης και να συγκριθεί με το ακριβές αποτέλεσμα.

9.3. Για τον λεγόμενο αναομοιικό ταλαντωτή με

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda x^4,$$

ναδειχθεί ότι η θεωρία διαταραχών δίνει

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{4} \lambda \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$$

9.4. Για γραμμική διαταραχή στον αρμονικό ταλαντωτή

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + kcx,$$

ναδειχθεί ότι είναι $E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} kc^2$. Ναδειχθεί στη συνέχεια ότι η θεωρία διαταραχών δίνει το ίδιο αποτέλεσμα.

9.5. Ένα φορτισμένο σωματίδιο σε σύστημα αρμονικού ταλαντωτή τοποθετείται μέσα σ' ένα ηλεκτρικό πεδίο E , έτσι ώστε η χαμιλτονιανή του να είναι

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 - qEx$$

i) Να βρεθεί το ενεργειακό φάσμα και η ιδιοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης του συστήματος

ii) Ναδειχθεί ότι η θεωρία διαταραχών δίνει για το ενεργειακό φάσμα το ίδιο αποτέλεσμα.

9.6. Για τη βασική κατάσταση $1s$ του ατόμου του υδρογόνου, να υπολογιστεί η διόρθωση πρώτης τάξης $E_1^{(1)}$ λόγω της βαρυτικής διαταραχής $H' = -G$

$$\frac{m_e m_p}{r} \text{ και να συγκριθεί με την ιδιοτιμή } E_1^{(0)}. \text{ Ναδειχθεί ότι } \frac{E_1^{(1)}}{E_1^{(0)}} \approx 10^{-39}.$$



Ποιά είναι (υποθετικά) η ακτίνα Bohr που θ' αντιστοιχούσε στις βαρυτικές δυνάμεις;

9.7. Θεωρούμε ένα υδρογονοειδές άτομο με πυρήνα φορτίου Z και ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $1s$. Χρησιμοποιώντας τη θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης, να υπολογιστεί η μεταβολή στην ενέργεια όταν το φορτίο Z αυξηθεί κατά ένα ($Z \rightarrow Z + 1$) και να συγκριθεί με το ακριβές αποτέλεσμα.

9.8. Υποθέτουμε ότι στο άτομο του υδρογόνου το πρωτόνιο δεν είναι ένα σημειακό φορτίο, αλλά ένας σφαιρικός φλοιός ακτίνας $r_0 = 10^{-13}$ cm με ομογενές φορτίο e . Να υπολογιστεί σε eV και σε πρώτη προσέγγιση της θεωρίας διαταραχών η μεταβολή στην ενέργεια της βασικής κατάστασης $1s$, λαμβάνοντας υπ' όψη ότι η διαταραχή μπορεί να γραφεί (να εξηγηθεί γιατί)

$$H' = \begin{cases} \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r_0} & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases}$$

9.9. i) Χρησιμοποιώντας το δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} fx & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

σαν διαταραχή για ένα σωματίδιο, που αρχικά περιορίζεται από αδιαπέραστα τοιχώματα μέσα στην περιοχή $0 < x < a$ με κυματοσυνάρτηση

$$\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

και ιδιοτιμή της ενέργειας

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

να βρεθεί η ενέργεια της βασικής του κατάστασης $E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$

ii) Να γίνει το ίδιο για το δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} f(x - \frac{a}{2}) & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

δείχνοντας ότι η ενέργεια της βασικής του κατάστασης είναι τώρα

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} \left[1 - \left(\frac{8fa}{\pi^2 E_1^{(0)}} \right)^2 \sum_{m \text{ άρτιος} > 0} \frac{m^2}{(m^2 - 1)^5} \right]$$



iii) Ένα σωματίδιο βρίσκεται μέσα στο δυναμικό

$$V = \begin{cases} V_0 & -b \leq x \leq b \\ 0 & -b < |x| < L \\ \infty & |x| \geq L \end{cases}$$

όπου το V_0 είναι μικρό και μπορεί να θεωρηθεί σαν διαταραχή. Να υπολογιστούν οι διορθώσεις πρώτης τάξης $E_n^{(1)}$ για τα δύο πρώτα ενεργειακά επίπεδα.

Να αιτιολογηθεί το αποτέλεσμα στο όριο $b \rightarrow L$.

9.10. i) Να γραφεί η ακτινική εξίσωση για το κεντρικό δυναμικό

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^2} - \frac{\beta}{r} \quad (\alpha, \beta > 0)$$

Στη συνέχεια να βρεθούν συναρτήσει των α, β τα ενεργειακά επίπεδα ενός σωματιδίου μάζας m στο παραπάνω δυναμικό, φέρνοντας την ακτινική εξίσωση σε μορφή όμοια μ' εκείνη του ατόμου του υδρογόνου.

ii) Θεωρώντας τον όρο $\frac{\alpha}{r^2}$ σαν διαταραχή, να βρεθούν οι διορθώσεις πρώτης τάξης στα ενεργειακά επίπεδα του δυναμικού Coulomb $-\frac{\beta}{r}$ και να συγκριθούν με την ακριβή έκφραση του αποτελέσματος i).

Υπενθυμίζεται (βλ. πρόβλημα 6.9) ότι

$$\langle n|ml| \frac{1}{r^2} |n|lm\rangle = \frac{1}{\alpha_1^2 n^3 (1 + \frac{1}{2})}, \quad \alpha_1 = \frac{\hbar^2}{m\beta}$$

9.11. Να δειχθεί ότι η διαφορά λεπτής υφής των ενεργειακών επιπέδων $E(2p \frac{3}{2})$ και $E(2p \frac{1}{2})$ είναι $\Delta E \approx 4.5 \times 10^{-5} \text{ eV}$ με αντίστοιχη συχνότητα $\approx 10^4 \text{ MHz}$. Να εκφραστεί η διαφορά ΔE σε μονάδες κυματαριθμού cm^{-1} .

9.12. Το άτομο του δευτερίου είναι μια δέσμη κατάσταση ενός ηλεκτρονίου και ενός δευτερίου (βλ. §6.4). Η διαφορά ανάμεσα στην υπέρλεπτη υφή του ατόμου του υδρογόνου και σ' εκείνη του ατόμου του δευτερίου έγκειται στο γεγονός ότι στην δεύτερη περίπτωση η μαγνητική ροπή του δευτερίου είναι (βλ. §7.1)



$$M_d = g_d \frac{e \hbar}{2m_p c} \frac{S_d}{\hbar}$$

όπου $g_d = 0.86$ και $s_d = 1$

i) Προσαρμόζοντας κατάλληλα τη συζήτηση της §9.5, να βρεθεί σε cm το μήκος κύματος της γραμμής υπέρλεπτης υφής για το άτομο του δευτερίου.

ii) Να συζητηθεί όμοια το φαινόμενο Zeeman υπέρλεπτης υφής για το άτομο του δευτερίου.

9.13. Να δειχθεί ότι το κριτήριο ισχύος (9.103) για την προσέγγιση WKB γράφεται ισοδύναμα σαν

$$\left| \frac{\hbar}{[p(x)]^2} \frac{dp(x)}{dx} \right| = \left| \frac{1}{p(x)} \frac{\lambda(x)}{2\pi} \frac{dp(x)}{dx} \right| \ll 1$$

ή σαν

$$\left| \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1$$

ή σαν

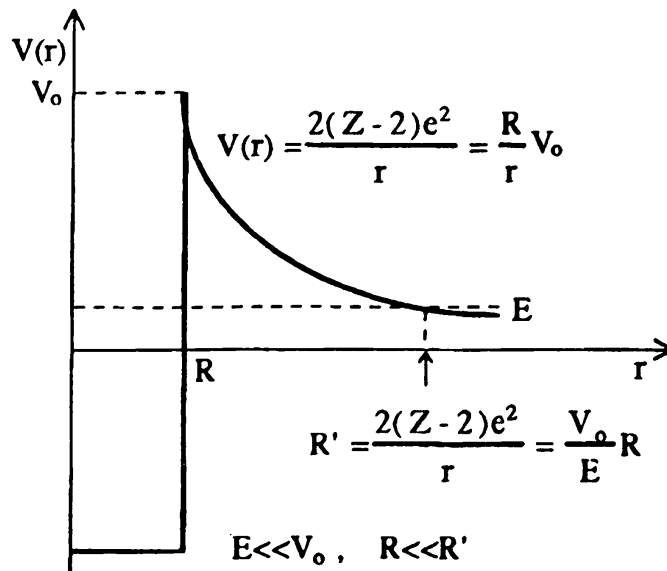
$$\left| \frac{1}{2\pi} \delta\lambda(x) \right| = \left| \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda(x)}{dx} \lambda(x) \right| \ll \lambda(x),$$

όπου $\delta\lambda(x) = \frac{d\lambda}{dx} \cdot \delta x$ η μεταβολή στο μήκος κύματος λ σε απόσταση δx , την οποία παίρνουμε $\delta x = \lambda(x)$. Η τελευταία έκφραση δείχνει ότι το $\lambda(x)$ πρέπει ν' αλλάξει μόνο κατά ένα μικρό κλάσμα του εαυτού του για απόσταση της τάξης του ίδιου του μήκους κύματος $\lambda(x)$.

9.14. Να δειχθεί ότι η συνθήκη (9.110) δίνει τις σωστές εκφράσεις για τα ενεργειακά επίπεδα ενός γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή. Βλέπουμε, έτσι, ότι η μέθοδος WKB αναπαράγει το ακριβές ενεργειακό φάσμα στην περίπτωση αυτή.

9.15. Σαν εφαρμογή της έκφρασης (9.121) για τον συντελεστή διέλευσης T , ας θεωρήσουμε την ακτινοβολία άλφα, δηλαδή την εκπομπή ενός σωματιδίου άλφα μάζας M (πυρήνας He με φορτίο $2e$) από ένα βαρύ μητρικό πυρήνα φορτίου Ze . Η δυναμική ενέργεια $V(r)$ του σωματιδίου άλφα μέσα και έξω από τον πυρήνα μπορεί να παρασταθεί όπως στο σχήμα, όπου φαίνονται οι εκφράσεις των σχετικών ποσοτήτων.





Υποθέτοντας ότι το σωματίδιο άλφα βρίσκεται σε κατάσταση μηδενικής τροχιακής στροφορμής, να δειχθεί ότι ο συντελεστής διέλευσης T για να λάβει χώρα το φαινόμενο σήραγγας και να εκπεμφθεί το σωματίδιο άλφα από την πυρήνα είναι

$$T = T_G \exp \left[-\frac{4\sqrt{2MV_0}}{\hbar} R \right]$$

όπου η ποσότητα

$$T_G = \exp \left[-\frac{\pi\sqrt{2M}}{\hbar} \frac{V_0 R}{\sqrt{E}} \right]$$

είναι γνωστή σαν παράγοντας Gamow και, όπως φαίνεται, τείνει να εμποδίσει το σωματίδιο άλφα να περάσει μέσα από το φράγμα.

- 9.16. Να εφαρμοστεί η μέθοδος WKB στα ενεργειακά επίπεδα που είναι κάτω από την κορυφή του φράγματος σ' ένα συμμετρικό δυναμικό διπλού φρέατος (όπως π.χ. εκείνο της §3.9 για το μόριο της αμμωνίας και της §4.5 για τον διπλό αρμονικό ταλαντωτή). Να δειχθεί ότι τα ενεργειακά επίπεδα προσδιορίζονται από μια συνθήκη της μορφής

$$\tan \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx + \alpha \right) = \pm 2 \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_3} q(x) dx \right)$$

όπου x_1, x_2 τα σημεία αναστροφής σ' ένα από τα δύο φρέατα, x_3 το σημείο εξόδου από το φράγμα προς το άλλο φρέαρο και α σταθερά, που εξαρτάται από τις οριακές συνθήκες.



9.17. Παίρνοντας σαν δοκιμαστική συνάρτηση την

$$\psi(x,\lambda) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\lambda}} \cos\left(\frac{\pi x}{2\lambda}\right) & , |x| \leq \lambda \\ 0 & , |x| > \lambda \end{cases}$$

που αντιστοιχεί σ' ένα φρέαρ δυναμικού άπειρου βάθους, να δειχθεί ότι η μέθοδος των μεταβολών για τον αρμονικό ταλαντωτή δίνει

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{3}} \hbar \omega \approx 0.568 \hbar \omega$$

Η τιμή αυτή αποτελεί καλύτερη προσέγγιση στην ακριβή τιμή (9.138) απ' ό,τι η (9.136).

9.18. Για τον τριδιάστατο ιστροπικό αρμονικό ταλαντωτή

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2,$$

παίρνοντας σαν δοκιμαστική συνάρτηση την $\psi(r,\lambda) = e^{-\lambda r}$, να δειχθεί ότι η μέθοδος των μεταβολών δίνει $E_{\min} = \sqrt{3} \hbar \omega = 1.73 \hbar \omega$ (ακριβής τιμή της ιδιοτιμής της βασικής κατάστασης

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega = 1.5 \hbar \omega)$$

Χρήσιμο ολοκλήρωμα : $\int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx = n!$

9.19. Για τον διπλό αρμονικό ταλαντωτή της §4.5, παίρνοντας σαν δοκιμαστική συνάρτηση στη μέθοδο των μεταβολών την

$\psi(x) = \lambda \psi_n(x - b) + \mu \psi_n(x + b)$, όπου ψ_n η ιδιοσυνάρτηση του απλού αρμονικού ταλαντωτή, να δειχθεί ότι

$$E(\psi) = \frac{A_n \pm B_n}{1 \pm C_n}$$

όπου

$$A_n = \int \psi_n(x - b) \hat{H} \psi_n(x - b) dx = \int \psi_n(x + b) \hat{H} \psi_n(x + b) dx$$

$$B_n = \int \psi_n(x - b) \hat{H} \psi_n(x + b) dx = \int \psi_n(x + b) \hat{H} \psi_n(x - b) dx$$

$$C_n = \int \psi_n(x + b) \psi_n(x - b) dx$$



ΚΕΦΑΛΑΙΟ X

ΧΡΟΝΙΚΗ ΕΞΕΛΙΞΗ ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Τη γενική θεωρία για τη δυναμική εξέλιξη της κατάστασης ενός φυσικού συστήματος, μέσω της χρονικής εξέλιξης των καταστατικών διανυσμάτων και των τελεστών των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών (κβαντική δυναμική), είδαμε στο κεφάλαιο II (§ 2.8- 2.9). Η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος εξελίσσεται με το χρόνο σύμφωνα με την εξίσωση

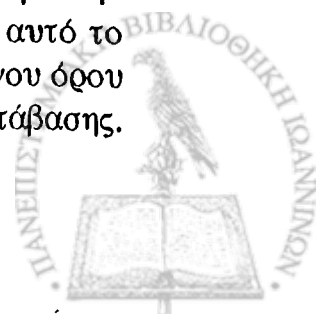
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (10.1)$$

Βέβαια, για ένα απομονωμένο σύστημα, αν γνωρίζουμε σε μια χρονική στιγμή τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας, η χρονική του εξέλιξη είναι τετριμμένη

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n(0)\rangle \quad (10.2)$$

Σε μια τέτοια περίπτωση, όμως, οι πιθανότητες $P(E_n)$ να βρούμε τις διάφορες ιδιοτιμές είναι σταθερές (στάσιμες καταστάσεις) και δεν υπάρχει δυνατότητα μετάβασης από μια ιδιοκατάσταση σε μια άλλη. Δεν μπορούμε λοιπόν, έτσι, να περιγράψουμε παραδείγματος χάρη μεταβάσεις ατομικών συστημάτων από μια κατάσταση σε μια άλλη, ραδιενεργές διασπάσεις κλπ.

Θα πρέπει, συνεπώς, ν' αναπτύξουμε τη θεωρία, που θα περιγράφει την εξέλιξη με το χρόνο τέτοιων ακριβώς συστημάτων. Αυτό θα κάνουμε σ' αυτό το κεφάλαιο. Αρχικά, θα διατυπώσουμε το πρόβλημα ενός χρονικά εξαρτημένου όρου αλληλεπίδρασης (δυναμικού) και θα δούμε την έννοια της πιθανότητας μετάβασης.



Θα μελετήσουμε στη συνέχεια μια πρώτη μέθοδο σχετικού υπολογισμού, τη χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών. Στη συνέχεια, παράλληλα με άλλες προσεγγίσεις (αιφνίδια - αδιαβατική), θα εξετάσουμε μερικές εφαρμογές: την αλληλεπίδραση κβαντικών συστημάτων με εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και το πρόβλημα της διάσπασης ενός κβαντικού συστήματος.

10.1. Πιθανότητα μετάβασης σ' ένα κβαντικό σύστημα

Θεωρούμε ένα σύστημα, του οποίου η χαμιλτονιανή H αποτελείται από δύο μέρη

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \quad (10.3)$$

\hat{H}_0 είναι ο κύριος όρος που μας επιτρέπει να περιγράψουμε το σύστημα, όταν δεν υπάρχουν πιθανές μεταβάσεις από μια κατάσταση σε μια άλλη. $\hat{H}'(t)$ είναι ο όρος αλληλεπίδρασης, που εξαρτάται από το χρόνο και που υποθέτουμε ότι είναι μικρός σε σχέση με τον \hat{H}_0 . Η μορφή του $\hat{H}'(t)$ εξαρτάται από τη φύση της αλληλεπίδρασης, που είναι υπεύθυνη για τη μετάβαση του συστήματος από μια ιδιοκατάσταση του \hat{H}_0 σε μια άλλη.

Υποθέτουμε ότι σε μια αρχική χρονική στιγμή t_0 το σύστημά μας βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση $|n\rangle$ του \hat{H}_0

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (10.4)$$

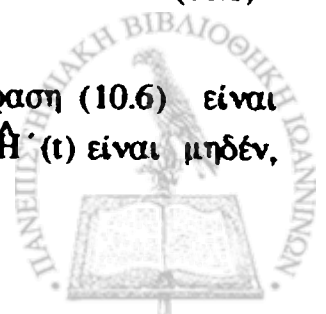
Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοκαταστάσεις του \hat{H}_0 θεωρούνται γνωστές. Προφανώς η κατάσταση $|n\rangle$ δεν είναι ιδιοκατάσταση της πλήρους χαμιλτονιανής \hat{H} . Η χρονική εξέλιξη του συστήματός μας μπορεί να μελετηθεί ακολουθώντας την εξίσωση Schrödinger (10.1). Το βασικό ερώτημα είναι: Ποιά είναι η πιθανότητα σαν συνάρτηση του χρόνου που έχει το σύστημά μας να βρεθεί στην ιδιοκατάσταση $|f\rangle$ της \hat{H}_0 τη χρονική στιγμή $t(t > t_0)$, όταν θα περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα $|\psi(t)\rangle$. Ενδιαφερόμαστε, λοιπόν, για την πιθανότητα μετάβασης

$$P = |\langle f|\psi(t)\rangle|^2 \quad (10.5)$$

Για κάθε χρονική στιγμή, η κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ γράφεται στη βάση των ιδιοκαταστάσεων $|n\rangle$ του \hat{H}_0 σαν

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (10.6)$$

Ο τρόπος που γράφουμε τη χρονική εξάρτηση στην έκφραση (10.6) είναι ενδεικτικός. Ο παράγων $e^{-iE_n t/\hbar}$ είναι παρών, ακόμα και αν ο $\hat{H}'(t)$ είναι μηδέν,



και αντανακλά τη χρονική εξάρτηση μιας στάσιμης κατάστασης του \hat{H}_0 . Η χρονική εξάρτηση του συντελεστή $c_n(t)$ οφείλεται αποκλειστικά στη παρουσία του όρου $\hat{H}'(t)$: ο $c_n(t)$ θα ήταν ανεξάρτητος από το χρόνο (και ίσος με $c_n(t_0)$), αν ο όρος $\hat{H}'(t)$ ήταν μηδέν. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, αυτός ο διαχωρισμός στη χρονική εξάρτηση είναι πολύ βολικός, γιατί ο $c_n(t)$ ικανοποιεί μια σχετικά απλή διαφορική εξίσωση.

Πράγματι, αντικαθιστώντας την (10.6) στην (10.1) παίρνουμε

$$i\hbar \sum_n \left[\frac{d}{dt} c_n(t) - \frac{iE_n}{\hbar} c_n(t) \right] e^{-iE_n t/\hbar} |ln\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} [\hat{H}_0 + \hat{H}'(t)] |ln\rangle \quad (10.7)$$

και, συνεπώς,

$$i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |ln\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \hat{H}'(t) |ln\rangle \quad (10.8)$$

Πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με $\langle k|$ βρίσκουμε τελικά

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_k(t) = \sum_n \langle k|\hat{H}'(t)|ln\rangle e^{-i(E_n - E_k)t/\hbar} c_n(t) \quad (10.9)$$

ή, ισοδύναμα, με προφανή συμβολισμό

$$i\hbar \dot{c}_k(t) = \sum_n \hat{H}'(t)_{kn} e^{i\omega_{kn}t} c_n(t) \quad (10.10)$$

Οι εξισώσεις (10.10) μπορούν να γραφούν συμβολικά

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}'(t)_{11} & \hat{H}'(t)_{12} e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ \hat{H}'(t)_{21} e^{i\omega_{21}t} & \hat{H}'(t)_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

Αυτό είναι το σύστημα των βασικών διαφορικών εξισώσεων, που πρέπει να λύσουμε για να υπολογίσουμε τους συντελεστές $c_n(t)$ και από αυτούς τις πιθανότητες μετάβασης. Έτσι, αν για $t = t_0$ το σύστημά μας βρίσκεται στην αρχική κατάσταση $|li\rangle$ με



$$\begin{aligned} c_i(t_0) &= 1 \\ c_j(t_0) &= 0, \quad j \neq i, \end{aligned} \quad (10.12)$$

η πιθανότητα μετάβασης $P_{i \rightarrow f}$ από την κατάσταση $|i\rangle$ τη χρονική στιγμή $t = t_0$ στην κατάσταση $|f\rangle$ τη χρονική στιγμή t θα δίνεται από την έκφραση

$$P_{i \rightarrow f} = |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 = |c_f(t)|^2, \quad (10.13)$$

όπου ο συντελεστής $c_f(t)$ έχει υπολογιστεί από τις (10.11) με αρχικές συνθήκες τις (10.12)

Τα παραπάνω μπορούμε να δούμε και διαφορετικά, χρησιμοποιώντας την εικόνα (ή περιγραφή) αλληλεπίδρασης (βλ. §2.9). Σ' αυτήν ορίζουμε το καταστατικό διάνυσμα (παίρνουμε $t_0 = 0$):

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{H} t/\hbar} |\psi(t_0=0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}' t/\hbar} |\psi(t_0=0)\rangle, \end{aligned} \quad (10.14)$$

όπου το σύμβολο I δείχνει την εικόνα αλληλεπίδρασης. Έτσι, η εξέλιξη του καταστατικού διανύσματος στην εικόνα αλληλεπίδρασης καθορίζεται από τον όρο \hat{H}' (ακριβέστερα τον $H_I(t)$ - βλ. παρακάτω), ενώ βέβαια η αντίστοιχη εξέλιξη στην εικόνα Schrödinger καθορίζεται από ολόκληρη τη χαμιλτονιανή \hat{H} . Για τους τελεστές ορίζουμε στην εικόνα αλληλεπίδρασης

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_S(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (10.15)$$

Ειδικότερα

$$\hat{H}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (10.16)$$

Έτσι, η χρονική εξέλιξη ενός τελεστή στην εικόνα αλληλεπίδρασης καθορίζεται από τον όρο \hat{H}_0 . Υπενθυμίζουμε ότι στην εικόνα Heisenberg η εξέλιξη ενός τελεστή καθορίζεται από ολόκληρη τη χαμιλτονιανή \hat{H} .

Οι διαφορικές εξισώσεις, που καθορίζουν την χρονική εξέλιξη του καταστατικού διανύσματος $|\psi(t)\rangle_I$ και του τελεστή $A_I(t)$, είναι εύκολο να προκύψουν από τις προηγούμενες σχέσεις. Από τη (10.14) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{H}') |\psi(t)\rangle_S \\ &= (e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}) e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \end{aligned}$$



$$= \hat{H}_I |\psi(t)\rangle_I \quad (10.17)$$

Μπορούμε επίσης εύκολα να δείξουμε από την (10.15) ότι η εξίσωση Heisenberg για τον τελεστή $A_I(t)$ είναι

$$\frac{dA_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0] \quad (10.18)$$

Φαίνεται αμέσως από τις (10.17) και (10.18) ότι η χρονική εξέλιξη των $|\psi(t)\rangle_I$ και $A_I(t)$ γίνεται με τους όρους \hat{H}_I και \hat{H}_0 , αντίστοιχα. Έτσι, η εικόνα αλληλεπίδρασης ή εικόνα Dirac, όπως αλλιώς λέγεται, είναι ενδιάμεση ανάμεσα στις εικόνες Schrödinger και Heisenberg (πίνακας 10.1)

	<u>Εικόνα Schrödinger</u>	<u>Εικόνα Heisenberg</u>	<u>Εικόνα αλληλεπίδρασης</u>
Καταστατικά διανύσματα	$ \psi(t)\rangle_S =$ $= e^{-i\hat{H}t/\hbar} \psi(0)\rangle$ μεταβαλλόμενα με \hat{H}	$ \psi(t)\rangle_H = \psi(0)\rangle$ αμετάβλητα	$ \psi(t)\rangle_I =$ $= e^{-i\hat{H}_I t/\hbar} \psi(0)\rangle$ μεταβαλλόμενα με \hat{H}_I (εξίσωση (10.17))
Τελεστές	\hat{A}_S αμετάβλητοι	$\hat{A}_H =$ $= e^{iH_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ μεταβαλλόμενοι με \hat{H}	$\hat{A}_I =$ $= e^{iH_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$ μεταβαλλόμενοι με \hat{H}_0 (εξίσωση (10.18))

Πίνακας 10.1. Εικόνες Schrödinger, Heisenberg και αλληλεπίδρασης

Στην εικόνα αλληλεπίδρασης εξακολουθούμε να χρησιμοποιούμε τις $|n\rangle$ σαν βάση και γράφουμε

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (10.19)$$

Οι συντελεστές $c_n(t)$ είναι ίδιοι με αυτούς που εμφανίζονται στη σχέση (10.6), όπως φαίνεται εύκολα. Αντικαθιστώντας την (10.19) στην (10.17) καταλήγουμε, όπως και



προηγούμενα, στο σύστημα (10.11), από το οποίο υπολογίζουμε τους συντελεστές $c_n(t)$ και, συνεπώς, βρίσκουμε τις πιθανότητες μετάβασης από τις εκφράσεις (10.13).

Ακριβείς λύσεις για το σύστημα (10.11) σπάνια έχουμε. Στις περισσότερες περιπτώσεις καταφεύγουμε σε προσεγγιστικές μεθόδους, όπως η εξαρτημένη από το χρόνο θεωρία διαταραχών, που θα δούμε στην επόμενη παράγραφο. Υπάρχει όμως μια εξαίρεση! Σ' ένα σύστημα δύο καταστάσεων, με όρο αλληλεπίδρασης που μεταβάλλεται ημιτονοειδώς με το χρόνο, μπορούμε να έχουμε ακριβή λύση. Πράγματι, ο προσεκτικός αναγνώστης θα σημείωσε ότι τα συστήματα δύο καταστάσεων, που μελετήσαμε στο μείζον αμμωνίας (εξισώσεις (3.189)-(3.201)) και στο μαγνητικό συντονισμό (εξίσωση (7.34) -(7.44)), αποτελούν ειδική περίπτωση του γενικού φορμαλισμού που αναπτύξαμε εδώ, ενώ ο τύπος του Rabi (3.201) ή (7.44) είναι ειδική περίπτωση της σχέσης (10.13) για την πιθανότητα μετάβασης από μια κατάσταση σε μια άλλη. Τα δύο αυτά προβλήματα έχουν βέβαια τεράστια πρακτική σημασία (βλ. και ανάλογες περιπτώσεις στην §8.4 - φαινόμενο Josephson - και στην §9.5 - μεταβάσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων υπέρλεπτης υφής).

10.2. Θεωρία διαταραχών εξαρτημένη από το χρόνο

Η συνηθέστερη προσεγγιστική μέθοδος επίλυσης του συστήματος (10.11) είναι η εξαρτημένη από το χρόνο θεωρία διαταραχών. Όπως και στην περίπτωση της ανεξάρτητης από το χρόνο θεωρίας διαταραχών, έτσι κι εδώ συνήθως γράφουμε

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t) \quad (10.20)$$

όπου λ είναι μια μικρή παράμετρος "ισχύος" για τον όρο αλληλεπίδρασης. Υποθέτουμε ότι η διαταραχή $\lambda \hat{H}'$ είναι μικρή σε σχέση με τον όρο \hat{H}_0 και θέτουμε

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots \quad (10.21)$$

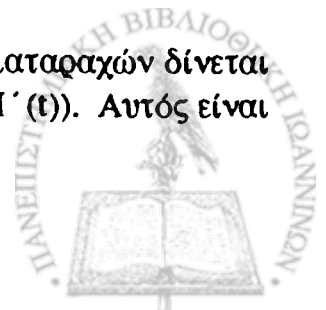
Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα (10.21) στο σύστημα (10.10)-(10.11) και εξισώνοντας τους συντελεστές ίσων δυνάμεων της παραμέτρου λ βρίσκουμε ότι

$$i\hbar \dot{c}_k^{(0)}(t) = 0 \quad (10.22)$$

$$i\hbar \dot{c}_k^{(1)}(t) = \sum_n H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} c_n^{(0)} \quad (10.23)$$

·
·
·

Βλέπουμε, λοιπόν, ότι κάθε όρος στο ανάπτυγμα της θεωρίας διαταραχών δίνεται συναρτήσει των προηγούμενων (και των στοιχείων πίνακα του $H'(t)$). Αυτός είναι



ο τρόπος που ο Dirac ανέπτυξε την εξαρτημένη από το χρόνο θεωρία διαταραχών το 1927.

Η πρώτη εξίσωση (10.22) δίνει $c_k^{(0)}(t) = \text{σταθ.}$ Λαμβάνοντας υπ' όψη τις αρχικές συνθήκες (10.12) έχουμε τότε

$$c_k^{(0)}(t) = \delta_{ki} \quad (10.24)$$

Βάζοντας το αποτέλεσμα αυτό στη δεύτερη εξίσωση (10.23) έχουμε για μια τελική κατάσταση $f \neq i$

$$i\hbar \dot{c}_f^{(1)}(t) = H'_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} \quad (10.25)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψη ότι αρχικά $c_f^{(1)}(t_0) = 0$, βρίσκουμε ότι

$$c_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H'_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \quad (10.26)$$

Συνεπώς, η πιθανότητα μετάβασης από μια αρχική κατάσταση $|i\rangle$ σε μια τελική $|f\rangle$ ($f \neq i$) είναι σ' αυτή την προσέγγιση, γνωστή σαν προσέγγιση Born,

$$P_{i \rightarrow f} = |c_f^{(1)}(t)|^2 \quad (10.27)$$

Η προσέγγιση αυτή είναι καλή όσο $P_{i \rightarrow f} \ll 1$.

10.3. Αρμονικές διαταραχές

Υποθέτουμε, πάντα, ότι έχουμε λύσει το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας ενός ατομικού συστήματος με χαμιλτονιανή \hat{H}_0 και ας θεωρήσουμε μεταβάσεις από μια αρχική κατάσταση $|i\rangle$ σε μια τελική $|f\rangle$, που συμβαίνει λόγω μιας διαταραχής $\hat{H}'(t)$. Έχουμε

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |i\rangle \\ c_i(0) &= 1 \\ c_j(0) &= 0, \quad j \neq i \end{aligned} \quad (10.28)$$

Για τη χρονική στιγμή t παίρνουμε

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= c_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle + c_f(t) e^{-iE_f t/\hbar} |f\rangle + \\ &+ \sum_{n \neq i, f} c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \end{aligned} \quad (10.29)$$

και, συνεπώς,



$$\dot{c}_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle f | \hat{H}' | i \rangle e^{i\omega_{fi}t}, \quad (10.30)$$

όπου

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}. \quad (10.31)$$

Ας θεωρήσουμε μια αρμονική διαταραχή της μορφής

$$\hat{H}'(t) = \hat{H}'_0 \cos \omega t = \frac{1}{2} \hat{H}'_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (10.32)$$

Αντικαθιστώντας στην (10.30) παίρνουμε

$$\dot{c}_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle [e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} + e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}] \quad (10.33)$$

και ολοκληρώνοντας έχουμε

$$c_f(t) = -\frac{1}{i\hbar} \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \left[\frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right] \quad (10.34)$$

Από την έκφραση (10.34) φαίνεται ότι για t μεγάλο η πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση f είναι σημαντική, όταν ο παρονομαστής του πρώτου ή του δεύτερου όρου είναι κοντά στο μηδέν. Για $E_f \neq E_i$ κάτι τέτοιο δεν μπορεί να συμβαίνει ταυτόχρονα. Μια καλή προσέγγιση είναι, συνεπώς, ν' αγνοήσουμε την αλληλεπίδραση ανάμεσα στους δύο αυτούς όρους. Έτσι, όταν είναι

$$\omega_{fi} \approx -\omega \rightarrow E_f \approx E_i - \hbar \omega \quad (10.35)$$

μόνο ο πρώτος όρος είναι σημαντικός και αυτό συμβαίνει όταν έχουμε εκπομπή ακτινοβολίας από το σύστημα, που θα πρέπει να βρίσκεται αναγκαστικά σε μια διεγερμένη κατάσταση. Μιλάμε τότε για εξαναγκασμένη εκπομπή του συστήματος κάτω από την επίδραση της εξωτερικής διαταραχής $\hat{H}'(t)$. Από την άλλη μεριά, όταν

$$\omega_{fi} \approx \omega \rightarrow E_f \approx E_i + \hbar \omega \quad (10.36)$$

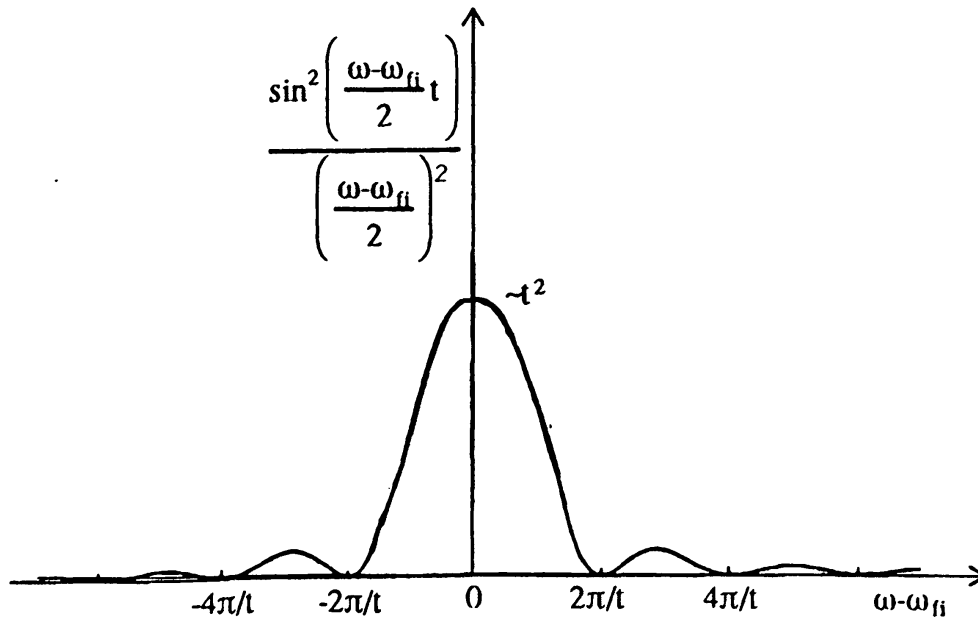
μόνο ο δεύτερος όρος είναι σημαντικός και αυτό αντιστοιχεί σε απορρόφηση ακτινοβολίας από το σύστημα κάτω από την επίδραση του εξωτερικού αιτίου $\hat{H}'(t)$. Στη συνέχεια θα μελετήσουμε κάθε μια περίπτωση χωριστά.

Ας πάρουμε πρώτα την περίπτωση της απορρόφησης. Έχουμε τότε $\omega \approx \omega_{fi}$, οπότε ο πρώτος όρος είναι τάξης $\frac{1}{\omega}$, ενώ ο δεύτερος τάξης t . Για $t \gg \tau = \frac{2\pi}{\omega}$ μπορούμε ν' αγνοήσουμε τον πρώτο όρο στην (10.34) και έχουμε τότε



$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{(\omega_{fi} - \omega)t}{2} \right)}{\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2} \right)^2} \quad (10.37)$$

Στο σχήμα 10.1 φαίνεται η εξάρτηση της πιθανότητας μετάβασης $P_{i \rightarrow f}$ από την κυκλική συχνότητα ω της διαταραχής.



Σχήμα 10.1. Εξάρτηση της πιθανότητας μετάβασης $P_{i \rightarrow f}$ από την ω .

Σημειώνουμε ότι η πιθανότητα $P_{i \rightarrow f}$ παρουσιάζει μέγιστο στην περιοχή του $\omega \sim \omega_{fi}$, ενώ είναι πρακτικά μηδέν αλλού. Έχουμε, συνεπώς, συντονισμό για $\omega = \omega_{fi}$ και οι μεταβάσεις είναι σημαντικές στην περιοχή των συχνοτήτων $\hbar\omega = E_f - E_i$. Ακριβώς στο συντονισμό είναι

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 t^2 \quad (10.38)$$

και η πιθανότητα μετάβασης αυξάνει τετραγωνικά με το χρόνο.

Στην περίπτωση της εξαναγκασμένης εκπομπής έχουμε $\omega \sim -\omega_{fi}$, οπότε μόνον ο πρώτος όρος στην έκφραση (10.34) είναι σημαντικός και η $P_{i \rightarrow f}$ εκφράζει την πιθανότητα εκπομπής από μια διεγερμένη κατάσταση ενός ποσού ενέργειας $\hbar\omega = E_i - E_f$ με προσέγγιση $2\pi\hbar/t$. Πάλι, συντονισμός συμβαίνει όταν είναι ακριβώς $\omega = -\omega_{fi}$, οπότε η πιθανότητα μετάβασης αυξάνει τετραγωνικά με το χρόνο. Όπως αναφέραμε ήδη, ο χρόνος t είναι πρακτικά μεγάλος $t \gg \frac{2\pi}{\omega}$ και οι δύο περιπτώσεις απορρόφησης και εξαναγκασμένης εκπομπής δεν συμβαίνουν μαζί. Από την άλλη



μεριά, είναι φανερό ότι υπάρχει μια συμμετορία ανάμεσα στην απορρόφηση και την εξαναγκασμένη εκπομπή: η πιθανότητα μετάβασης $P_{i \rightarrow f}$ είναι ίδια.

Η τετραγωνική, και όχι γραμμική, εξάρτηση από το χρόνο της πιθανότητας μετάβασης στο συντονισμό μπορεί να φαίνεται διαισθητικά όχι αναμενόμενη. Στην πραγματικότητα, όμως, αντί για μεταβάσεις σε μια συγκεκριμένη τελική κατάσταση $|f\rangle$, συνήθως αντιμετωπίζουμε περιπτώσεις μεταβάσεων σ' ένα σύνολο τελικών καταστάσεων με ενέργεια μέσα σ' ένα διάστημα $(E_f - \epsilon, E_f + \epsilon)$. Μελετάμε σ' αυτές τις περιπτώσεις μεταβάσεις σε καταστάσεις του συνεχούς φάσματος. Είναι συνηθισμένο, τότε, να ορίζουμε την πυκνότητα $\rho(E_f)$ των τελικών καταστάσεων, έτσι ώστε η έκφραση $\rho(E_f) dE_f$ να είναι ο αριθμός των τελικών καταστάσεων στο διάστημα dE_f . Έχουμε τότε για την πιθανότητα μετάβασης

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 \int_{E_f - \epsilon}^{E_f + \epsilon} \frac{\sin^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2}\right)^2} \rho(E_f) dE_f \quad (10.39)$$

Μπορούμε τώρα να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση¹

¹ Με βάση τις ιδιότητες της δ -συνάρτησης

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^{+t} e^{i\omega\tau} d\tau = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin\omega t}{\pi\omega},$$

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t/2}^{+t/2} e^{i\omega\tau} d\tau,$$

$$\delta(0) = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t/2}^{+t/2} d\tau = \frac{t}{2\pi},$$

$$\delta(x) \phi(x) = \phi(0) \delta(x)$$

$$\delta^2(x) = \delta(0) \delta(x) = \frac{t}{2\pi} \delta(x),$$

έχουμε

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2}\right)^2} = \pi^2 \delta^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar}\right) = \pi^2 [2\hbar \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)]^2$$



$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2}\right)^2} = 2\pi \hbar t \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (10.40)$$

οπότε η έκφραση (10.39) παίρνει τη μορφή

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \rho(E_f) t, \quad E_f = E_i + \hbar\omega \quad (10.41)$$

Έτσι, η πιθανότητα μετάβασης αυξάνει τώρα γραμμικά με το χρόνο για μεγάλα t και για μεταβάσεις σ' ένα σύνολο τελικών καταστάσεων, που διατηρούν την ενέργεια. Το γεγονός της γραμμικής εξάρτησης από το t οφείλεται στο ότι η ολική πιθανότητα μετάβασης είναι ανάλογη με την επιφάνεια κάτω από την κορυφή του σχήματος 10.1, όπου το ύψος μεταβάλλεται σαν t^2 και το εύρος σαν $1/t$. Μπορούμε τώρα να ορίσουμε την πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου ή ρυθμό μετάβασης

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \rho(E_f), \quad E_f = E_i + \hbar\omega \quad (10.42)$$

Η σχέση (10.42) αποτελεί το χρυσό κανόνα του Fermi, αν και ο βασικός φορμαλισμός οφείλεται στον Dirac. Ο χρυσός κανόνας διατυπώνεται παρόμοια σε κάθε ανάλογη περίπτωση μετάβασης σ' ένα σύνολο τελικών καταστάσεων και έχει ευρεία εφαρμογή στην κβαντική φυσική. Πολλές φορές η (10.42) γράφεται

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (10.43)$$

όπου εννοούμε ότι η έκφραση αυτή μπαίνει κάτω από το ολοκλήρωμα $\int dE_f \rho(E_f)$,

οπότε προκύπτει η ολοκληρωμένη μορφή (10.42). Οι αντίστοιχες εκφράσεις για την εξαναγκασμένη εκπομπή σ' ένα σύνολο τελικών καταστάσεων είναι

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \rho(E_f) t, \quad E_f = E_i - \hbar\omega \\ W_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \rho(E_f), \quad E_f = E_i - \hbar\omega \\ W_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{1}{2} \hat{H}'_0 | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \end{aligned} \quad (10.44)$$

$$= \pi^2 4\hbar^2 \delta(0) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = 2\pi\hbar t \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$



Από τις εκφράσεις (10.37) - (10.39) και (10.41) - (10.44) βλέπουμε τη συμμετρία που υπάρχει ανάμεσα στην απορρόφηση και την εξαναγκασμένη εκπομπή:

$$\frac{\text{ρυθμός απορρόφησης } i \rightarrow f}{\text{πυκνότητα τελικών καταστάσεων}} = \frac{\text{ρυθμός εξαναγκασμένης εκπομπής } f \rightarrow i}{\text{πυκνότητα τελικών καταστάσεων}} \quad (10.45)$$

Η σχέση αυτή είναι γνωστή σαν αρχή της λεπτομερούς ισορροπίας (principle of detailed balance).

10.4. Αλληλεπιδράσεις κβαντικών συστημάτων με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

Σε κβαντικά συστήματα (ατομικά ή μοριακά), οι μεταβάσεις που οφείλονται στην αλληλεπίδρασή με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία παίζουν σημαντικό ρόλο στη φυσική. Τρεις βασικές διαδικασίες εξετάζουμε σχετικά. Πρώτον, ένα σύστημα μπορεί ν' απορροφήσει ενέργεια (φωτόνια) από μια ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία κάνοντας μια μετάβαση από μια κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας σε μια άλλη υψηλότερης. Δεύτερον, μπορεί να εκπέμψει ακτινοβολία ευρισκόμενο κάτω από την επίδραση ενός εξωτερικά εφαρμοζόμενου ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Μιλάμε τότε για εξαναγκασμένη εκπομπή του συστήματος από μια κατάσταση υψηλότερης σε μια κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας. Χαρακτηριστικό παράδειγμα έχουμε στα συστήματα μείζερ και λέιζερ. Και, τρίτον, μπορούμε να έχουμε αυθόρμητες μεταβάσεις από μια διεγερμένη κατάσταση σε μια άλλη χαμηλότερης ενέργειας με την εκπομπή ακτινοβολίας (φωτονίων). Αυτή η διαδικασία είναι γνωστή σαν αυθόρμητη εκπομπή και συμβαίνει σε απουσία οποιουδήποτε εξωτερικού πεδίου (αιτίου).

Βέβαια, σε μια ακριβή διαπραγμάτευση του θέματος, θα έπρεπε να θεωρήσουμε την κβαντική θεωρία του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου (κβαντική ηλεκτροδυναμική). Όμως, ακόμα και για σχετικά ασθενή πεδία, η πυκνότητα των φωτονίων είναι μεγάλη και σαν αποτέλεσμα μπορεί το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο να θεωρηθεί κλασικό. Η αλληλεπίδραση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου με το κβαντικό σύστημα μπορεί, συνεπώς, να μελετηθεί μέσα στο πλαίσιο μιας ημικλασικής θεωρίας, στην οποία το μεν ηλεκτρομαγνητικό πεδίο περιγράφεται κλασικά, το δε σύστημά μας κβαντικά. Στην περίπτωση μάλιστα της αυθόρμητης εκπομπής, που συμβαίνει σε απουσία εξωτερικού πεδίου, η διαπραγμάτευση μπορεί να γίνει με στατιστικούς όρους, όπως έγινε πρώτα από τον Einstein.



Εμείς εδώ θα μελετήσουμε, για απλότητα, τη συμπεριφορά ενός υδρογονοειδούς ατόμου μέσα σ' ένα ηλεκτρικό πεδίο, που μεταβάλλεται με το χρόνο. Ο όρος αλληλεπίδρασης που παίρνουμε είναι

$$\begin{aligned} H'(t) &= -\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) \\ &= -(-e\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) = e\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) \quad , \end{aligned} \quad (10.46)$$

όπου $\mathbf{D} = -e\mathbf{r}$ είναι η ηλεκτρική διπολική ροπή του ατόμου. Η αλληλεπίδραση (10.46), στην οποία το ηλεκτρικό πεδίο λαμβάνεται ανεξάρτητο από τη θέση, είναι γνωστή σαν ηλεκτρική διπολική προσέγγιση. Αξίζει σ' αυτό το σημείο να δώσουμε μια δικαιολόγηση του γιατί αγνοούμε την επίδραση του μαγνητικού πεδίου \mathbf{B} στην προσέγγιση αυτή. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η τυπική ταχύτητα του ηλεκτρονίου στα άτομα που θεωρούμε είναι μικρή, της τάξης του $ac \sim \frac{c}{137}$ (βλ. π.χ. πρόβλημα 6.7). Κατά συνέπεια, στη δύναμη Lorentz κυριαρχεί ο ηλεκτρικός όρος σε σύγκριση με το μαγνητικό (για επίπεδα κύματα στο κενό είναι $|\mathbf{B}| = |\mathbf{E}|$). Έτσι, η ηλεκτρική διπολική προσέγγιση (10.46) αποτελεί τον πρώτο κύριο όρο μιας πολυπολικής ανάπτυξης, που θα περιείχε και άλλα φαινόμενα (π.χ. μαγνητικά, σχετικιστικά), πολύ λιγότερο όμως έντονα.

Ας θεωρήσουμε τώρα το επίπεδο μονοχρωματικό κύμα

$$\boldsymbol{\varepsilon}(t) = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cos \omega t \quad , \quad (10.47)$$

οπότε έχουμε την αρμονική διαταραχή

$$H'(t) = e\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cos \omega t \quad (10.48)$$

Οι εκφράσεις που χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε τις πιθανότητες μετάβασης, έχουν βρεθεί στην προηγούμενη παράγραφο, όπου τώρα θα είναι $H'_0 = e\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_0$. Για την περίπτωση της απορρόφησης έχουμε $\omega \sim \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$ και η πιθανότητα μετάβασης δίνεται από την έκφραση (10.41), ενώ το σχήμα 10.1 δείχνει την εξάρτησή της από την ω . Υπάρχει συντονισμός για $\omega = \omega_{fi}$ και οι μεταβάσεις είναι σημαντικές στη γειτονιά των συχνοτήτων Bohr του ατόμου. Έχουμε εδώ μια γενίκευση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου: αν η κατάσταση $|f\rangle$ αντιστοιχεί σε μια ιονισμένη κατάσταση του ατόμου, αναγόμαστε στο αρχικό φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Από την άλλη μεριά, όπως έχουμε ήδη παρατηρήσει, υπάρχει συμμετρία ανάμεσα στην απορρόφηση και την εξαναγκασμένη εκπομπή: μπορούμε ν' αντικαταστήσουμε την κατάσταση $|f\rangle$ με την κατάσταση $|i\rangle$ και να καταλήξουμε στην ίδια έκφραση για την πιθανότητα μετάβασης. Οι δύο αυτές διαδικασίες δρουν, βέβαια, αντίστροφα: η απορρόφηση αυξάνει τον πληθυσμό των ατόμων στη



μια από τις δύο καταστάσεις, ενώ η εξαναγκασμένη εκπομπή αυξάνει τον πληθυσμό των ατόμων στην άλλη κατάσταση.

Για τη διαταραχή (10.48) η έκφραση (10.37) για την πιθανότητα μετάβασης κατά την απορρόφηση γράφεται

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{e^2}{4\hbar^2} |\langle f | \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cdot \mathbf{r} | i \rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2}\right)^2} \quad (10.49)$$

Η έκφραση αυτή ισχύει μόνον όσο $P_{i \rightarrow f} \ll 1$ (συνθήκη ισχύος της θεωρίας διαταραχών) και για ένα μονοχρωματικό πεδίο. Για τον υπολογισμό μετρήσιμων μεγεθών, πρέπει να προσδιορίσουμε τις πειραματικές συνθήκες κάτω από τις οποίες γίνεται μια διαδικασία, π.χ. εδώ τη φύση του προσπίπτοντος κύματος, του ατόμου που υφίσταται την ακτινοβολία κλπ.

Ας παρατηρήσουμε πρώτα ότι είναι δυνατό να έχουμε μια προσπίπτουσα ακτινοβολία εξαιρετικά μονοχρωματική και σύμφωνη (δέσμη λέιζερ). Αν $\omega = \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$, τότε μόνο το ενεργειακό επίπεδο E_f θα καταληφθεί. Κάτω από αυτές τις συνθήκες έχουμε ουσιαστικά να κάνουμε μ' ένα σύστημα δύο καταστάσεων, όπως το σύστημα μείζερ αμμωνίας ή ο μαγνητικός συντονισμός που εξετάσαμε στα προηγούμενα. Ο ακριβής τύπος, που δίνει τότε την πιθανότητα μετάβασης, είναι ο τύπος Rabi

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_{fi})^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_{fi})^2 + \omega_1^2}\right) \quad (10.50)$$

όπου

$$\omega_1^2 = \frac{e^2}{\hbar^2} |\langle f | \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cdot \mathbf{r} | i \rangle|^2 \quad (10.51)$$

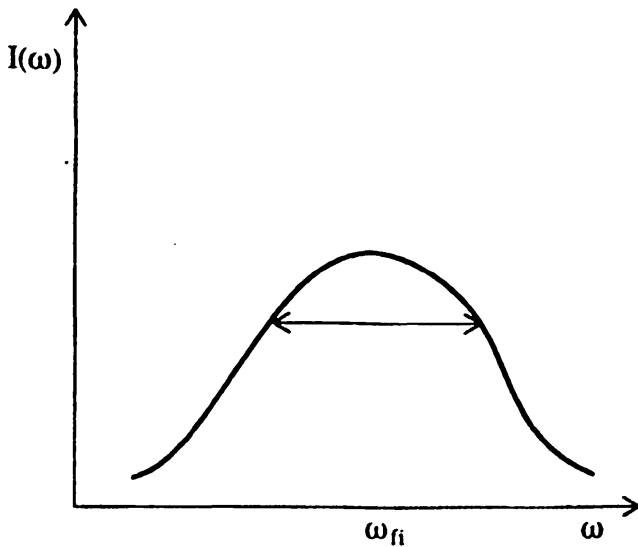
Βλέπουμε ότι ο ακριβής τύπος (10.50) και ο προσεγγιστικός (10.49), που μας δίνει η θεωρία διαταραχών, συμπίπτουν τελικά αν η πιθανότητα μετάβασης είναι μικρή, παραδείγματος χάρη αν $|\omega - \omega_{fi}| \gg \omega_1$, ή για το συντονισμό $\omega = \omega_{fi}$ αν $\omega_1 t/2 \ll 1$, δηλαδή για χρόνους παρατήρησης όχι πολύ μεγάλους.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι η προσπίπτουσα ακτινοβολία δεν είναι μονοχρωματική, αλλά κατανέμεται σ' ένα εύρος συχνοτήτων: το πεδίο είναι ένα κυματοπακέτο. Αν είναι I ο ολικός ρυθμός ροής της ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας ανά μονάδα επιφάνειας κάθετα στην κατεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας, γράφουμε



$$I = \int_0^{\infty} I(\omega) d\omega \quad (10.52)$$

Για την $I(\omega)$ δεχόμαστε την κατανομή του σχήματος 10.2



Σχ. 10.2. Διάγραμμα προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

Υποθέτουμε, επί πλέον, ότι η ακτινοβολία είναι μη σύμφωνη, δηλαδή ότι οι σχετικές φάσεις των επί μέρους συνιστωσών της είναι τυχαίες. Τέτοιες περιπτώσεις στη φυσική είναι συχνές: τα άτομα μιας πηγής εκπέμπουν την ακτινοβολία κατά τρόπο τελείως τυχαίο, ανεξάρτητα τα μεν από τα δε. Το γεγονός της μη σύμφωνης ακτινοβολίας μας επιτρέπει να προσθέτουμε πιθανότητες για τις διαφορετικές συχνότητες και όχι πλάτη πιθανότητας, όπως θα κάναμε κανονικά για μια σύμφωνη ακτινοβολία.

Στην περίπτωση της μη μονοχρωματικής και μη σύμφωνης ακτινοβολίας, θα χρειαστεί να εκφράσουμε την παράμετρο ϵ_0 συναρτήσει της $I(\omega)$. Για ένα επίπεδο κύμα, ο ρυθμός ροής της ενέργειας ανά μονάδα επιφάνειας κάθετα στην κατεύθυνση διάδοσης δίνεται από το μέτρο του ανύσματος Poynting $\mathbf{P} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$.

Επειδή $|\mathbf{B}| = |\mathbf{E}|$ και $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0$, έχουμε $|\mathbf{P}| = \frac{c}{4\pi} |\mathbf{E}|^2$. Για $\mathbf{E} = \epsilon_0 \cos \omega t$, έχουμε

κατά μέσο όρο στο χρόνο, $|\mathbf{P}| = \frac{c}{4\pi} |\epsilon_0|^2 \cos^2 \omega t = \frac{c}{8\pi} |\epsilon_0|^2$. Συνεπώς, επειδή από

την έκφραση (10.52) έχουμε τη σύνδεση $|\mathbf{P}|^2 = I(\omega)d\omega$, καταλήγουμε στη σχέση

$$|\epsilon_0|^2 = \frac{8\pi}{c} I(\omega)d\omega \quad (10.53)$$



Έτσι, ξεκινώντας από την έκφραση (10.49) και με βάση την ιδιότητα της άθροισης των πιθανοτήτων για μια μη σύμφωνη ακτινοβολία, γράφουμε για την πιθανότητα μετάβασης

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} (\cos^2 \chi) |\langle f | r | i \rangle|^2 \int_0^\infty I(\omega) \frac{\sin^2\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2}\right)^2} d\omega, \quad (10.54)$$

όπου χ είναι η γωνία ανάμεσα στα διανύσματα \mathbf{E}_0 και \mathbf{r} . Επειδή στο ολοκλήρωμα

στη σχέση (10.54) η συνάρτηση $\frac{\sin^2\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2}\right)^2}$ παρουσιάζει μέγιστο γύρω από το $\omega = \omega_{fi}$ και η $I(\omega)$ μεταβάλλεται πολύ πιο αργά εκεί, μόνο η τιμή $I(\omega_{fi})$ θα έχει

σημαντική συνεισφορά και, συνεπώς, μπορούμε να γράψουμε

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} (\cos^2 \chi) |\langle f | r | i \rangle|^2 I(\omega_{fi}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2}\right)^2} d\omega \quad (10.55)$$

Επειδή σύμφωνα με γνωστό ολοκλήρωμα έχουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2}\right)^2} d\omega = 2t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = 2\pi t, \quad (10.56)$$

καταλήγουμε στην τελική έκφραση

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2} (\cos^2 \chi) |\langle f | r | i \rangle|^2 I(\omega_{fi}) t \quad (10.57)$$

Η πιθανότητα αυτή είναι ανάλογη με το χρόνο. Γι' αυτό μπορούμε κατά την απορρόφηση στη διπολική προσέγγιση να ορίσουμε την πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου ή ρυθμό μετάβασης

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2} (\cos^2 \chi) |\langle f | r | i \rangle|^2 I(\omega_{fi}) \quad (10.58)$$

Ίδια έκφραση ισχύει, βέβαια, και για εξαναγκασμένη εκπομπή, όπως έχουμε ήδη σημειώσει.



Δύο παρατηρήσεις μπορούμε να κάνουμε εδώ. Η πρώτη είναι ότι η πιθανότητα μετάβασης είναι ανάλογη με την προσπίπτουσα ροή ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας $I(\omega_{fi})$, κάτι αναμενόμενο. Η δεύτερη έχει να κάνει με το γεγονός ότι η πιθανότητα μετάβασης είναι επίσης ανάλογη με το τετράγωνο των στοιχείων πίνακα $\langle f|r|i\rangle$. Το τελευταίο είναι πολύ σημαντικό και οδηγεί σε ορισμένους κανόνες επιλογής, τους οποίους θα συζητήσουμε αμέσως.

Ας θεωρήσουμε τα στοιχεία πίνακα

$$\langle f|r|i\rangle \equiv \langle n_f l_f m_f | r | n_i l_i m_i \rangle = \int R_{n_f l_f}^*(r) Y_{l_f m_f}^*(\theta, \varphi) r R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) dr \quad (10.59)$$

Σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι $x \pm iy = r \sin\theta e^{\pm i\varphi}$, $z = r \cos\theta$ και συνεπώς οι συντεταγμένες του \mathbf{r} εκφράζονται γραμμικά συναρτήσεις των $r Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)$, $r Y_{10}(\theta, \varphi)$. Αυτό που μας ενδιαφέρει στα παραπάνω στοιχεία πίνακα είναι τα γωνιακά ολοκληρώματα

$$\int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \varphi) Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) d\Omega$$

$$\int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \varphi) Y_{10}(\theta, \varphi) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) d\Omega$$

Σε ότι αφορά τους μαγνητικούς κβαντικούς αριθμούς m , φαίνεται αμέσως από την εξάρτηση $e^{im\varphi}$ ότι η ολοκλήρωση ως προς φ θα δώσει μη μηδενική συνεισφορά μόνον εφ' όσον ισχύει $m_f = m_i \pm 1, m_i$. Σε ότι αφορά τους κβαντικούς αριθμούς l της τροχιακής στροφορμής, με βάση την πρόσθεση στροφορμών τα παραπάνω ολοκληρώματα γράφονται

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_f m_f}^*(\theta, \varphi) [\alpha Y_{l_i+1, m}(\theta, \varphi) + \beta Y_{l_i, m}(\theta, \varphi) + \gamma Y_{l_i-1, m}(\theta, \varphi)]$$

όπου α, β, γ σταθερές. Τα ολοκληρώματα αυτά φαίνεται αμέσως ότι δίνουν μη μηδενική συνεισφορά μόνον εφ' όσον ισχύει $l_f = l_i \pm 1, l_i$. Αλλά είναι εύκολο να δούμε ότι η τιμή $l_f = l_i$ πρέπει ν' αποκλειστεί: επειδή οι σφαιρικές αρμονικές Y_{lm} έχουν ομοτιμία $(-1)^l$, η ομοτιμία της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης είναι $(-1)^{2l_i+1} = -1$ και, συνεπώς, το ολοκλήρωμα είναι μηδέν. Ανακεφαλαιώνοντας, βλέπουμε πως οι μεταβάσεις στην ηλεκτρική διπολική προσέγγιση συμβαίνουν μόνον όταν ισχύουν οι κανόνες επιλογής

$$l_f = l_i \pm 1$$

$$m_f = m_i \pm 1, m_i$$

(10.60)



Όταν οι (10.60) δεν ισχύουν, οι μεταβάσεις λέμε ότι είναι απαγορευμένες. Στην πραγματικότητα όμως, ακόμα και απαγορευμένες μεταβάσεις μπορεί να παρατηρηθούν, αλλά βέβαια με πολύ μικρότερους ρυθμούς σε σύγκριση με τις επιτρεπόμενες μεταβάσεις, μια και οφείλονται σε αλληλεπιδράσεις πέρα από την ηλεκτρική διπολική προσέγγιση (αλληλεπιδράσεις μαγνητικού διπόλου, ηλεκτρικού τετραπόλου κλπ.).

Θα τελειώσουμε αυτή την παράγραφο με λίγα λόγια για την αυθόρμητη εκπομπή. Όπως σημειώσαμε στην αρχή της παραγράφου, η σωστή διαπραγμάτευση και του προβλήματος αυτού απαιτεί τη χρήση της κβαντικής θεωρίας του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, δηλαδή της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής. Κάτι τέτοιο βέβαια ξεπερνά τα πλαίσια αυτού του βιβλίου. Το αποτέλεσμα, πάντως, μιας τέτοιας διαπραγμάτευσης για την πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου κατά την αυθόρμητη εκπομπή ενός φωτονίου και στην ηλεκτρική διπολική προσέγγιση είναι $(E_i - E_f = \hbar\omega_{if}, E_i > E_f)$

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \frac{4\omega_{if}^3}{3\hbar c^3} |\langle f | \mathbf{D} | i \rangle|^2, \quad (10.61)$$

όπου \mathbf{D} η ηλεκτρική διπολική ροπή. Σημειωτέον ότι οι μεταβάσεις αυτές υπακούουν στους ίδιους κανόνες επιλογής (10.60), που συζητήσαμε προηγουμένα:

Πολύ πριν από την ανάπτυξη της κβαντικής μηχανικής (και πολύ περισσότερο της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής) ο Einstein έδειξε το 1916 ότι η πιθανότητα μιας αυθόρμητης εκπομπής μπορεί να συσχετιστεί με τις πιθανότητες απορρόφησης και εξαναγκασμένης εκπομπής.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα απομονωμένο μέσα σε μια κοιλότητα, που περιέχει άτομα και ακτινοβολία και βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία σε θερμοκρασία T . Υποθέτουμε, για απλότητα, ότι οι ενεργειακές καταστάσεις $|i\rangle$ και $|f\rangle$ ($E_i > E_f$) είναι μη εκφυλισμένες. Ο αριθμός των ατόμων ανά μονάδα χρόνου, που μεταβαίνουν από την κατάσταση $|f\rangle$ στην κατάσταση $|i\rangle$ απορροφώντας ακτινοβολία συχνότητας ω_{if} είναι ανάλογος του ολικού αριθμού N_f των ατόμων στην κατάσταση $|f\rangle$ και της πυκνότητας ενέργειας της ακτινοβολίας ανά μονάδα συχνότητας $u(\omega_{if})$:

$$\frac{dN_f}{dt} = N_f u(\omega_{if}) B, \quad (10.62)$$

όπου B ο λεγόμενος συντελεστής Einstein για την απορρόφηση. Συναρτήσει του ρυθμού απορρόφησης $W_{i \rightarrow f}$, προφανώς μπορούμε να γράψουμε

$$\frac{dN_f}{dt} = W_{i \rightarrow f} N_f$$



Η πυκνότητα $u(\omega_{if})$ είναι γνωστόν ότι είναι $u(\omega_{if}) = \frac{I(\omega_{if})}{c}$ και, συνεπώς, έχουμε

$$B = \frac{W_{i \rightarrow f}}{u(\omega_{if})} = \frac{cW_{i \rightarrow f}}{I(\omega_{if})} \quad (10.64)$$

Ο ρυθμός απορρόφησης $W_{i \rightarrow f}$ δίνεται από την έκφραση (10.58). Αν η ακτινοβολία είναι μη πολωμένη και ιστροπική θα πρέπει ν' αντικαταστήσουμε τον παράγοντα $\cos^2 \chi$ με τη μέση τιμή του, που εύκολα βλέπουμε ότι είναι $\frac{1}{3}$: $\cos^2 \chi = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \cos^2 \chi$

$\sin \chi \, d\chi \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{3}$. Έτσι, έχουμε τελικά για τον συντελεστή B:

$$B = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} |\langle i|D|f \rangle|^2 \quad (10.65)$$

Από την άλλη μεριά, ο αριθμός των ατόμων ανά μονάδα χρόνου που μεταβαίνουν από την κατάσταση $|i\rangle$ στην κατάσταση $|f\rangle$, είναι ίσος με το άθροισμα του αριθμού των αυθόρμητων μεταβάσεων $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ ανά μονάδα χρόνου, που είναι ανεξάρτητος από το $u(\omega_{if})$, και του αριθμού των εξαναγκασμένων μεταβάσεων $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ ανά μονάδα χρόνου, που είναι ανάλογος με το $u(\omega_{if})$. Έτσι, γράφουμε

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i A + N_i u(\omega_{if}) B \quad (10.66)$$

όπου A ο λεγόμενος συντελεστής Einstein για την αυθόρμητη εκπομπή και B ο συντελεστής Einstein για την εξαναγκασμένη εκπομπή, που με βάση την αρχή της λεπτομερούς ισορροπίας είναι ίδιος με τον συντελεστή για την απορρόφηση. Επειδή στην θερμοδυναμική ισορροπία είναι $\frac{dN_f}{dt} = \frac{dN_i}{dt}$, βρίσκουμε ότι

$$\frac{N_f}{N_i} = \frac{A + u(\omega_{if})B}{u(\omega_{if})B} \quad (10.67)$$

Αλλά στην θερμοδυναμική ισορροπία έχουμε (βλ. (3.205) και παράρτημα II)

$$\frac{N_f}{N_i} = e^{-(E_f - E_i)/kT} = e^{\hbar\omega_{if}/kT} \quad (10.68)$$

Από τις (10.67) και (10.68) βρίσκουμε

$$u(\omega_{if}) = \frac{A}{B(e^{\hbar\omega_{if}/kT} - 1)} \quad (10.69)$$

Αλλά από τον τύπο του Planck (βλ. εισαγωγή (E.3) και παράρτημα II) έχουμε



$$u(\omega_{if}) = u(\nu_{if}) \frac{d\nu_{if}}{d\omega_{if}} = \frac{\hbar\omega_{if}^3}{\pi^2c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{if}/kT}-1} \quad (10.70)$$

Παίρνουμε λοιπόν, τελικά, για τους συντελεστές Einstein A και B τη σχέση

$$A = B \frac{\hbar\omega_{if}^3}{\pi^2c^3} = \frac{4\omega_{if}^3}{3\hbar c^3} |\langle i|D|f\rangle|^2, \quad (10.71)$$

πράγμα που συμπίπτει με το ακριβές αποτέλεσμα (10.61).

10.5. Αιφνίδια προσέγγιση - Σταθερή διαταραχή

Θα μελετήσουμε τώρα την περίπτωση όπου η χαμιλτονιανή H ενός συστήματος αλλάζει με το χρόνο σε πολύ σύντομο χρονικό διάστημα. Αν πράγματι αυτό το διάστημα είναι πολύ μικρό (συγκρινόμενο με μια τυπική χρονική περίοδο της αρχικής χαμιλτονιανής), μπορούμε σε πρώτη προσέγγιση να υποθέσουμε ότι το χρονικό αυτό διάστημα είναι μηδέν και να πούμε ότι η χαμιλτονιανή αλλάζει στιγμιαία από μια αρχική μορφή σε μια νέα. Ισοδύναμα, αυτό σημαίνει ότι η διαταραχή $H'(t)$ αλλάζει στιγμιαία, παραδείγματος χάρη τη χρονική στιγμή $t = 0$ από την τιμή μηδέν σε μια καινούργια σταθερή τιμή. Αυτή η διαδικασία είναι γνωστή σαν αιφνίδια προσέγγιση.

Ας υποθέσουμε, λοιπόν, ότι η διαταραχή H' είναι μια σταθερή διαταραχή, που αρχίζει να δρα ξαφνικά τη χρονική στιγμή $t = 0$:

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ H'_0 & t \geq 0 \end{cases} \quad (10.72)$$

Σ' αυτή την περίπτωση πρώτης προσέγγισης ολοκληρώνουμε αμέσως την (10.30) και παίρνουμε (αρχικές συνθήκες οι (10.28))

$$c_f(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{if}} \langle f|H'_0|i\rangle [1 - e^{-i\omega_{if}t}] \quad (10.73)$$

$$P_{i \rightarrow f} = |c_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|H'_0|i\rangle|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{if}t}{2}}{(\frac{\omega_{if}}{2})^2} \quad (10.74)$$

Η (10.74) δίνει την πιθανότητα μετάβασης από την κατάσταση $|i\rangle$ στην κατάσταση $|f\rangle$ μετά από χρόνο t . Η έκφραση αυτή ισχύει μόνο εφ' όσον $P_{i \rightarrow f} \ll 1$ (προσέγγιση Born).



Η πιθανότητα μετάβασης $P_{i \rightarrow f}$ δεν εξαρτάται μόνον από το τετράγωνο του στοιχείου πίνακα $\langle f | H' | i \rangle$, αλλά και από την διαφορά ενέργειας $E_f - E_i = \hbar \omega_{if}$. Ας δούμε, λοιπόν, την εξάρτηση της $P_{i \rightarrow f}$ από την ενέργεια E_f της τελικής κατάστασης. Η εξάρτηση του παράγοντα $\sin^2 \frac{\omega_{if} t}{2} / (\frac{\omega_{if}}{2})^2$ από την E_f συνάγεται αμέσως από το σχήμα 10.1. Επικεντρώνεται γύρω από την αρχική ενέργεια E_i και είναι μη μηδενική για $E_f \neq E_i$. Το ύψος της κεντρικής κορυφής είναι t^2 και το εύρος ανάλογο με το $\frac{1}{t}$. Καθώς το t αυξάνει, η $P_{i \rightarrow f}$ είναι σημαντική μόνο για εκείνες τις τελικές καταστάσεις για τις οποίες είναι

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega_{if}|} = \frac{2\pi\hbar}{|E_i - E_f|} \quad (10.75)$$

Έτσι, γενικά, αν ονομάσουμε Δt το χρονικό διάστημα κατά το οποίο δρα η διαταραχή, η μετάβαση θα γίνει με σημαντική πιθανότητα μόνο προς μια τελική κατάσταση με μεταβολή ενέργειας ΔE , που ικανοποιεί τη σχέση

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \quad (10.76)$$

Η σχέση (10.76) είναι βέβαια η σχέση αβεβαιότητας του Heisenberg για την ενέργεια και το χρόνο. Αν το Δt είναι μικρό, έχουμε μεγαλύτερο εύρος καμπύλης και, συνεπώς, μεγαλύτερη διασπορά στην ενέργεια. Από την άλλη μεριά, αν η διαταραχή λάβει χώρα επί μεγάλο χρονικό διάστημα, έχουμε πολύ μικρό εύρος καμπύλης και μικρή διασπορά στην ενέργεια. Υπενθυμίζουμε εδώ την ερμηνεία που πρέπει να δοθεί στην σχέση αβεβαιότητας (10.76), στην οποία μόνο η ενέργεια είναι παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος, ενώ ο χρόνος είναι απλά μια παράμετρος (βλ. και §1.4).

Όπως και στην περίπτωση της αρμονικής διαταραχής, έτσι κι εδώ μπορούμε να θεωρήσουμε τις πραγματικές μεταβάσεις όχι σε μια τελική κατάσταση, αλλά σ' ένα σύνολο τελικών καταστάσεων με πυκνότητα τελικών καταστάσεων $\rho(E_f)$ (καταστάσεις συνεχούς φάσματος). Εντελώς ανάλογα βρίσκουμε κι εδώ, για μεγάλους χρόνους t , τις εκφράσεις για την πιθανότητα μετάβασης και τον ρυθμό μετάβασης (πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου)

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho(E_f) t, \quad E_f = E_i \quad (10.77)$$

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho(E_f), \quad E_f = E_i \quad (10.78)$$

Οι σχέσεις αυτές αποτελούν το χρυσό κανόνα του Fermi για την περίπτωση της σταθερής διαταραχής H' . Μπορούμε ισοδύναμα να γράψουμε



$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (10.79)$$

όπου βέβαια η έκφραση αυτή θεωρείται ότι μπαίνει κάτω από το ολοκλήρωμα $\int dE_f$ $\rho(E_f)$.

Η γραμμική εξάρτηση (10.77) από το χρόνο της πιθανότητας μετάβασης είναι χαρακτηριστική της έννοιας του μέσου χρόνου ζωής μιας ασταθούς κατάστασης. Πράγματι, αν η κατάσταση $|i\rangle$ είναι μια ασταθής κατάσταση ενός συστήματος, που διασπάται αυθόρμητα, έχουμε γενικά $P_{i \rightarrow i} + P_{i \rightarrow f} = 1$. Η πιθανότητα $P_{i \rightarrow i}$ που έχει το σύστημα να μη διασπαστεί, ακολουθεί, όπως κάθε αυθόρμητη διάσπαση, τον εκθετικό νόμο $e^{-t/\tau}$, όπου τ ο μέσος χρόνος ζωής. Για χρόνους $t \ll \tau$ η πιθανότητα $P_{i \rightarrow i}$ που έχει το σύστημα να διασπαστεί, είναι ανάλογη με το χρόνο: $P_{i \rightarrow f} \approx \frac{t}{\tau}$. Η σχέση (10.77) δείχνει ότι ο μέσος χρόνος ζωής τ μιας ασταθούς κατάστασης δίνεται από τον τύπο

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho(E_f) \quad (10.80)$$

Βέβαια, η έκφραση (10.80) ισχύει για χρόνους μικρούς σε σχέση με το μέσο χρόνο ζωής: $t \ll \tau$. Για μεγαλύτερους χρόνους, η θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης δεν ισχύει πια (για και δεν θα έχουμε πλέον $P_{i \rightarrow i} \ll 1$). Παρ' όλα αυτά, μπορούμε να μελετήσουμε τον εκθετικό νόμο διάσπασης ενός συστήματος διαφορετικά, όπως θα κάνουμε στην επόμενη παράγραφο (βλ. και πρόβλημα 10.5).

10.6. Διάσπαση ενός συστήματος

Ας θεωρήσουμε το ακόλουθο απλό (αλλά ρεαλιστικό) μοντέλο. Υποθέτουμε ότι το φάσμα του \hat{H}_0 αποτελείται από μια αρχική κατάσταση $|i\rangle$ και ένα συνεχές φάσμα τελικών καταστάσεων $|f\rangle$. Υποθέτουμε ότι η αρχική κατάσταση $|i\rangle$ συνδέεται με τις τελικές καταστάσεις $|f\rangle$ μόνο μέσω της διαταραχής \hat{H}' , έτσι ώστε μόνο τα στοιχεία πίνακα $\langle i | \rho(\hat{H}, \sqrt{\rho_4(\wedge)})' | f \rangle$ και $\langle f | \rho(\hat{H}, \sqrt{\rho_4(\wedge)})' | i \rangle$ να είναι μη μηδενικά, ενώ $\langle i | \hat{H}' | i \rangle = \langle f | \hat{H}' | f \rangle = 0$. Επειδή οι τελικές καταστάσεις είναι μη σύμφωνες, δεν μπορούν να δράσουν αθροιστικά, ούτως ώστε να δώσουν τις αντίστροφες μεταβάσεις. Έτσι, η πιθανότητα $P_{i \rightarrow i}$ να βρούμε το σύστημα στην αρχική κατάσταση $|i\rangle$ ελαττώνεται σταθερά με το χρόνο. Γράφουμε τότε

$$P_{i \rightarrow i}(t + dt) = P_{i \rightarrow i}(t) (1 - W_{i \rightarrow f} dt) \quad (10.81)$$

και, συνεπώς,



$$\frac{dP_{i \rightarrow i}}{dt} = -W_{i \rightarrow i} P_{i \rightarrow i} \quad (10.82)$$

Ολοκληρώνοντας παίρνουμε ($P_{i \rightarrow i}(0) = 1$)

$$P_{i \rightarrow i}(t) = e^{-t/\tau} \quad (10.83)$$

όπου η σταθερά

$$\tau = \frac{1}{W_{i \rightarrow i}} \quad (10.84)$$

ονομάζεται μέσος χρόνος ζωής της κατάστασης $|i\rangle$. Ο συντελεστής $c_i(t)$ δίνεται από τη σχέση

$$c_i(t) = e^{-t/2\tau} \quad (10.85)$$

Έτσι έχουμε για την κατάσταση $|i\rangle$ τη χρονική στιγμή t

$$\begin{aligned} |\psi_i(t)\rangle &= c_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle \\ &= e^{-i(E_i - i\hbar/2\tau)t/\hbar} |i\rangle \end{aligned} \quad (10.86)$$

Για $t < 0$ θέτουμε $|\psi_i(t)\rangle = 0$. Η μεταβολή με το χρόνο της $|\psi_i(t)\rangle$ δίνεται από τη σχέση

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i(t)\rangle = (E_i - i\frac{\hbar}{2\tau}) |\psi_i(t)\rangle \quad (10.87)$$

Η σχέση αυτή υπογραμμίζει ένα γενικό συμπέρασμα: Μια (αυθόρμητα) διασπώμενη κατάσταση δεν είναι ποτέ μια κατάσταση, που χαρακτηρίζεται από μια καθορισμένη πραγματική ενέργεια. Επειδή οποιαδήποτε συνάρτηση μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας, έχουμε:

$$|\psi_i(t)\rangle = e^{-i(E_i - i\hbar/2\tau)t/\hbar} |i\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE_f \alpha(E_f) e^{-iE_f t/\hbar} |i\rangle \quad (10.88)$$

Αντιστρέφοντας κατά Fourier παίρνουμε

$$\begin{aligned} \alpha(E_f) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_0^{+\infty} e^{iE_f t/\hbar} e^{-i(E_i - i\hbar/2\tau)t/\hbar} dt \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{-i\hbar}{E_i - E_f - i\frac{\hbar}{2\tau}}, \end{aligned} \quad (10.89)$$

όπου λάβαμε υπ' όψη ότι $|\psi_i(t)\rangle = 0$ για $t < 0$. Έτσι, η πιθανότητα μετά από χρόνο t να βρούμε το σύστημά μας σε μια κατάσταση καθορισμένης ενέργειας E_f είναι ανάλογη με το $|\alpha(E_f)|^2$, όπου



$$|\alpha(E_f)|^2 = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{(E_f - E_i)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \quad (10.90)$$

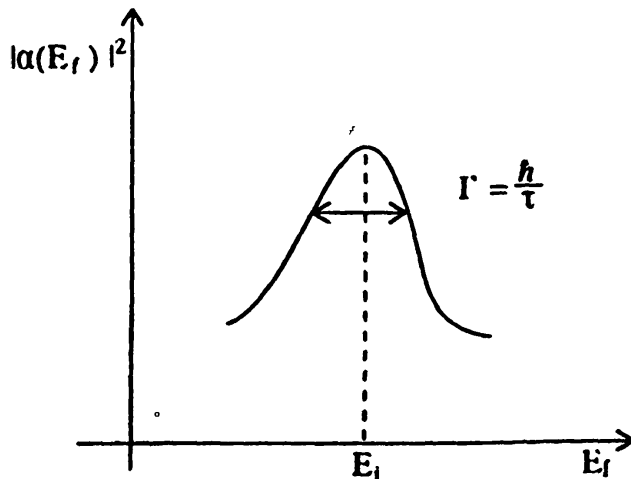
Θέτοντας $\Gamma = \hbar/\tau$, έχουμε

$$|\alpha(E_f)|^2 = \frac{\tau}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E_f - E_i)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (10.91)$$

Η συνάρτηση αυτή είναι γνωστή σαν ενεργειακή κατανομή γραμμής Lorentz (στην ατομική φασματοσκοπία) ή συντονισμού Breit-Wigner (στην πυρηνική και σωματιδιακή φυσική). Η παράμετρος Γ ονομάζεται φυσικό εύρος της κατανομής. Η συνάρτηση (10.91) φαίνεται στο σχήμα 10.3. Η κατανομή $|\alpha(E_f)|^2$ πέφτει στο μισό της μέγιστης τιμής $|\alpha(E_i)|^2$ στις θέσεις $E_f - E_i = \pm \frac{\Gamma}{2}$.

Με άλλα λόγια, η ενέργεια των τελικών καταστάσεων είναι κατά μέσο όρο ίση με E_i με αβεβαιότητα

$$\Delta E = \frac{\Gamma}{2} = \frac{\hbar}{2\tau} \quad (10.92)$$



Σχήμα 10.3. Η κατανομή Lorentz ή Breit-Wigner

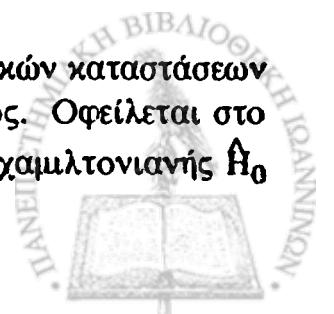
Σημειωτέον ότι στο όριο $\Gamma \rightarrow 0$ από τη σχέση (βλ. (2.60))

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{\Gamma/2}{(E_f - E_i)^2 + (\Gamma/2)^2} = \pi \delta(E_i - E_f),$$

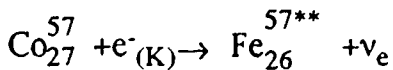
παίρνουμε τη μορφή που διατηρεί την ενέργεια (δέλτα συνάρτηση)

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} |\alpha(E_f)|^2 = \tau \delta(E_i - E_f) \quad (10.93)$$

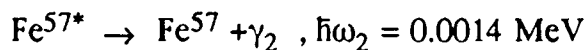
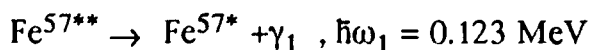
Η κατανομή που μόλις είδαμε για την ενέργεια των τελικών καταστάσεων είναι χαρακτηριστική κάθε ασταθούς (διασπώμενου) συστήματος. Οφείλεται στο γεγονός ότι η αρχική κατάσταση, ενώ είναι ιδιοκατάσταση της χαμιλτονιανής \hat{H}_0



χωρίς τον όρο αλληλεπίδρασης \hat{H}'_0 , δεν είναι ιδιοκατάσταση της ολικής χαμιλτονιανής $\hat{H}_0 + \hat{H}'_0$ και, συνεπώς, δεν έχει καθορισμένη ενέργεια (ίση με E_i). Μια τέτοια κατανομή παρουσιάζεται σε μια μεγάλη κατηγορία διασπώμενων κβαντικών συστημάτων. Παραδείγματος χάρη, η ακτινοβολία $\beta^- \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ έχει χρόνο ζωής $\tau = 918 \text{ sec}$ και φυσικό εύρος $\Gamma \sim 7 \times 10^{-25} \text{ MeV}$ (το εύρος αυτό είναι αμελητέο μπροστά στο πειραματικό σφάλμα για τη μάζα του νετρονίου $m_n c^2 = 939,5731 \pm 0.0027 \text{ MeV}$: μπορούμε να πούμε εδώ ότι έχουμε μια πολύ καλά ορισμένη τιμή μάζας, βλ. σχετικά τη (10.93)). Παρόμοιο φαινόμενο έχουμε στο ενεργειακό εύρος των ατομικών φασματικών γραμμών (βλ. σχετικά και την §1.4β). Οι ατομικές φασματικές γραμμές διευρύνονται, πάντως, ακόμα περισσότερο λόγω και άλλων φαινομένων (διεύρυνση κρούσεων, διεύρυνση Doppler). Αξίζει εδώ να κάνουμε ιδιαίτερη μνεία ενός άλλου σχετικού συστήματος, στο οποίο οι τάξεις μεγέθους των τ και Γ είναι τέτοιες, που μπορεί να μετρηθούν και οι δύο άμεσα με πολύ μεγάλη ακρίβεια. Έτσι μπορεί να ελεγχθεί και η σχέση $\Gamma \cdot \tau = \hbar$ ανάμεσά τους. Το σύστημα αυτό είναι η ακτινοβολία γ του πυρήνα του Fe^{57} . Ας δούμε την όλη εικόνα. Ξεκινάμε από μια πηγή Co^{57} . Ο πυρήνας αυτός είναι ασταθής (μέσος χρόνος ζωής 270 μέρες) και διασπάται, όταν ένα ηλεκτρόνιο της στοιβάδας K ("σύλληψη K") αντιδρά μ' ένα πρωτόνιο του πυρήνα για να δώσει την αντίδραση



Ο Fe^{57**} εκπέμπει πολύ γρήγορα ένα φωτόνιο γ_1 ενέργειας 0.123 MeV, δίνοντας την διεγερμένη κατάσταση Fe^{57*} . Στη συνέχεια, μετά από λίγο, ο Fe^{57*} εκπέμπει ένα δεύτερο φωτόνιο ενέργειας 0.014 MeV, αφήνοντας τον πυρήνα του Fe^{57} στη βασική του κατάσταση:



Μια ηλεκτρονική τεχνική μας επιτρέπει να μετρήσουμε το χρονικό διάστημα ανάμεσα στις δύο εκπομπές γ_1 και γ_2 . Η διάσπαση $\text{Fe}^{57*} \rightarrow \text{Fe}^{57} + \gamma$ ακολουθεί τον εκθετικό νόμο με μέσο χρόνο ζωής $\tau \sim 1.4 \times 10^{-7} \text{ sec}$. Στη συζήτηση που προηγήθηκε σ' αυτή την παράγραφο, έχουμε την αρχική κατάσταση $|i\rangle = |\text{Fe}^*\rangle$ και τις τελικές καταστάσεις $|f\rangle = |\text{Fe} + \gamma\rangle$. Η κατάσταση $|i\rangle = |\text{Fe}^*\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση της χαμιλτονιανής $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{Fe}}$, όμως επειδή δεν είναι ιδιοκατάσταση της ολικής χαμιλτονιανής $\hat{H}_0 + \hat{H}'_0$, δεν θα έχει μια καθορισμένη ενέργεια E_i , αλλά θα χαρακτηρίζεται από κάποιο εύρος Γ . Ο όρος αλληλεπίδρασης \hat{H}'_0 θα συνδέει τις διεγερμένες καταστάσεις του σιδήρου με τις τελικές καταστάσεις σιδήρου



+φωτονίων: $\langle \text{Fe} + \gamma | \hat{H}' | \text{Fe}^* \rangle \neq 0$. Οι τελικές ενέργειες θα είναι $E_f = E_f(\text{πυρήνα}) + E_f(\text{φωτονίου})$. Το εύρος Γ της γραμμής εκπομπής της ακτινοβολίας γ του πυρήνα Fe^{57*} μπορεί να μετρηθεί με την τεχνική του φαινομένου Mössbauer. Όπως είναι γνωστό, κάτω από ορισμένες περιστάσεις, για ένα πυρήνα τοποθετημένο μέσα σ' ένα κρύσταλλο, μπορούμε να έχουμε εκπομπή ακτινοβολίας χωρίς ανάδραση του πυρήνα. Για την περίπτωση μας, η ανάδραση του πυρήνα του σιδήρου κατά την εκπομπή και απορρόφηση των φωτονίων γ_1 και γ_2 απορροφάται πλήρως από την τεράστια, σε σύγκριση με την ατομική κλίμακα, μάζα του κρυστάλλου. Οι πυρήνες Fe^{57*} και Fe^{57} πρακτικά είναι ακίνητοι κατά τις μεταβάσεις $\text{Fe}^{57*} \rightarrow \text{Fe}^{57} + \gamma_2$, $+\gamma_2 + \text{Fe}^{57} \rightarrow \text{Fe}^{57*}$. Μια τέτοια διάταξη μας επιτρέπει να μετρήσουμε με μεγάλη ακρίβεια το φυσικό εύρος Γ . Βρίσκουμε $\Gamma \sim 5 \times 10^{-9}$ eV. Βλέπουμε, τώρα, ότι το γινόμενο $\Gamma \cdot \tau = 2\Delta E \cdot \tau$ είναι πράγματι ίσο με \hbar :

$$\Delta E \cdot \tau = \frac{1}{2} \Gamma \cdot \tau = \frac{1}{2} \times 7 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{sec} \approx \frac{1}{2} \hbar$$

Σημειωτέον ότι σε παρόμοιο πείραμα έχει μετρηθεί η ενεργειακή μετατόπιση της ακτινοβολίας γ , που εκπέμπεται από Fe^{57} επιταχυνόμενο πάνω σ' ένα γρήγορα περιστρεφόμενο πλαίσιο και το αποτέλεσμα είναι σε συμφωνία με την αρχή της ισοδυναμίας της γενικής θεωρίας της σχετικότητας.

10.7. Αδιαβατική προσέγγιση

Αν ο ρυθμός μεταβολής της χαμιλτονιανής ενός συστήματος είναι πολύ αργός, τότε μιλάμε για μια αδιαβατική μεταβολή και η προσέγγιση που χρησιμοποιούμε για τη μελέτη του συστήματος είναι γνωστή σαν αδιαβατική προσέγγιση. Σ' αυτή την περίπτωση η διαταραχή μπορεί να γραφεί σαν $H'(t) = f(t) H_0'$, όπου $f(t)$ μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση και H_0' σταθερά. Ας δούμε πως μπορούμε να μελετήσουμε το σύστημα σ' αυτή την περίπτωση και να πάρουμε ήδη γνωστά αποτελέσματα.

Θα διαλέξουμε εδώ να γράψουμε την διαταραχή σαν

$$H'(t) = e^{i\eta t} H_0' \quad (10.94)$$

όπου το η είναι μικρό και θετικό. Στο τέλος του υπολογισμού θα θέσουμε $\eta \rightarrow 0$. Η αρχική κατάσταση (για $t_0 = -\infty$) είναι πάντα $\eta |i\rangle$. Για τους συντελεστές $C_n(t)$ για $n \neq i$ έχουμε σε πρώτη προσέγγιση

$$C_n^{(0)}(t) = 0$$

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t H_{ni}'(t) e^{i\omega_{ni}t} dt$$



$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} \langle n | H_0' | i \rangle \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t e^{\eta t} e^{i\omega_{ni}t} dt \\
&= \frac{1}{i\hbar} \langle n | H_0' | i \rangle \frac{e^{\eta t} + i\omega_{ni}t}{\eta + i\omega_{ni}} \quad (10.95)
\end{aligned}$$

Συνεπώς, παίρνουμε για την πιθανότητα και τον ρυθμό μετάβασης τις εκφράσεις

$$\begin{aligned}
P_{i \rightarrow n} &= |C_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{|\langle n | H_0' | i \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \\
W_{i \rightarrow n} &= \frac{dP_{i \rightarrow n}}{dt} = \frac{2|\langle n | H_0' | i \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{\eta e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \quad (10.96)
\end{aligned}$$

Τώρα θα θέσουμε $\eta \rightarrow 0$. Με βάση τη σχέση (βλ. (2.60))

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \pi \delta(\omega_{ni}) = \pi \hbar \delta(E_n - E_i)$$

Ξαναβρίσκουμε το χρυσό κανόνα του Fermi

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | H_0' | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i) \quad (10.97)$$

Ας δούμε τώρα τον συντελεστή $C_i(t)$. Σε πρώτη προσέγγιση έχουμε

$$C_i(t) = C_i^{(0)}(t) + C_i^{(1)}(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \langle i | H_0' | i \rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta} \quad (10.98)$$

Από τη σχέση αυτή βρίσκουμε για το λόγο $\dot{C}_i(t)/C_i(t)$, αφού πάρουμε το όριο $\eta \rightarrow 0$, το αποτέλεσμα

$$\frac{\dot{C}_i(t)}{C_i(t)} = \frac{1}{i\hbar} \langle i | H_0' | i \rangle \quad (10.99)$$

δηλαδή εδώ ο λόγος $\dot{C}_i(t)/C_i(t)$ είναι ανεξάρτητος από το t . Διαλέγοντας να είναι $C_i(t=0) = 1$, παίρνουμε ολοκληρώνοντας

$$C_i(t) = \exp \left\{ -i \Delta_i^{(1)} \frac{t}{\hbar} \right\} \quad (10.100)$$

όπου

$$\Delta_i^{(1)} = \langle i | H_0' | i \rangle \quad (10.101)$$

Η φυσική σημασία του $\Delta_i^{(1)}$ φαίνεται αν σημειώσουμε ότι το καταστατικό διάνυσμα $\exp \left\{ -i \Delta_i^{(1)} \frac{t}{\hbar} \right\} |i\rangle$ στην εικόνα αλληλεπίδρασης γίνεται $\exp \left\{ -i E_i \frac{t}{\hbar} - i \Delta_i^{(1)} \frac{t}{\hbar} \right\} |i\rangle$ στην εικόνα Schrödinger. Το αποτέλεσμα, συνεπώς, της εξαρτημένης από το



χρόνο θεωρίας διαταραχών στην αδιαβατική προσέγγιση είναι να βρούμε την μετατόπιση των ενεργειακών επιπέδων

$$E_i \rightarrow E_i + \Delta_i^{(1)} \quad (10.102)$$

που περιμένουμε από την ανεξάρτητη από το χρόνο θεωρία διαταραχών. Το αποτέλεσμα αυτό, ότι δηλαδή σε μια πολύ αργή μεταβολή της χαμιλτονιανής από H_0 σε H ένα σύστημα περνάει ανεπαίσθητα από μια ιδιοκατάσταση της H_0 σε μια αντίστοιχη ιδιοκατάσταση της H , είναι γνωστό σαν αδιαβατικό θεώρημα.

Δεν είναι δύσκολο να δείξει κανείς, ακολουθώντας τα βήματα του προβλήματος 10.7, ότι στην επόμενη τάξη στη θεωρία διαταραχών έχουμε

$$C_i(t) = C_i^{(0)}(t) + C_i^{(1)}(t) + C_i^{(2)}(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \langle i|H_0'|i\rangle \frac{e^{i\eta t}}{\eta} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 |\langle i|H_0'|i\rangle|^2 \frac{e^{2i\eta t}}{2\eta^2} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|\langle m|H_0'|i\rangle|^2}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \frac{e^{2i\eta t}}{\eta} \quad (10.103)$$

$$\frac{\dot{C}_i(t)}{C_i(t)} = \frac{1}{i\hbar} \langle i|H_0'|i\rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|\langle m|H_0'|i\rangle|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \quad (10.104)$$

$$\Delta_i = \Delta_i^{(1)} + \Delta_i^{(2)} = \langle i|H_0'|i\rangle + \sum_{m \neq i} \frac{|\langle m|H_0'|i\rangle|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \quad (10.105)^{**}$$

$$E_i \rightarrow E_i + \Delta_i \quad (10.106)$$

Με βάση τώρα τη σχέση (βλ. (2.60))

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = \frac{1}{x} - i\pi \delta(x)$$

προκύπτει ότι

$$\text{Re } \Delta_i^{(2)} = \sum_{m \neq i} \frac{|\langle m|H_0'|i\rangle|^2}{E_i - E_m} \quad (10.107)$$

$$\text{Im } \Delta_i^{(2)} = -\pi \sum_{m \neq i} |\langle m|H_0'|i\rangle|^2 \delta(E_i - E_m) \quad (10.108)$$

Από τον χρυσό κανόνα του Fermi έχουμε, τότε, ότι

$$\sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq i} |\langle m|H_0'|i\rangle|^2 \delta(E_i - E_m) = -\frac{2}{\hbar} \text{Im } \Delta_i^{(2)} \quad (10.109)$$

Έτσι, γράφοντας γενικά



$$C_i(t) = \exp \left\{ -i \Delta_i \frac{t}{\hbar} \right\} = \exp \left\{ -i (\operatorname{Re} \Delta_i) \frac{t}{\hbar} + (\operatorname{Im} \Delta_i) \frac{t}{\hbar} \right\} \quad (10.110)$$

και ορίζοντας

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} = \frac{1}{\tau} \equiv -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \Delta_i = \frac{1}{\sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m}} \quad (19.111)$$

βρίσκουμε

$$|C_i(t)|^2 = \exp \left\{ 2(\operatorname{Im} \Delta_i) \frac{t}{\hbar} \right\} = \exp \left\{ -\Gamma_i \frac{t}{\hbar} \right\} = e^{-t/\tau} \quad (10.112)$$

Συνεπώς, το Γ_i χαρακτηρίζει το ρυθμό διάσπασης της κατάστασης $|i\rangle$ και το τ το μέσο χρόνο ζωής της. Ξαναβρίσκουμε, έτσι, τ' αποτελέσματα των δύο προηγούμενων παραγράφων μέσα σ' ένα διαφορετικό γενικότερο πλαίσιο.

Προβλήματα

- 10.1. Θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m και φορτίου q σ' ένα σύστημα αρμονικού ταλαντωτή

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Ένα ομογενές ηλεκτρικό πεδίο $E(t)$ με διεύθυνση κατά μήκος του άξονα x αρχίζει να δρα τη χρονική στιγμή $t_0 = 0$. Η διαταραχή είναι, συνεπώς,

$$H'(t) = -q x E(t)$$

Αν το $E(t)$ έχει τη μορφή

$$E(t) = E_0 e^{-t/\tau},$$

όπου E_0 και τ σταθερές, και αν ο αρμονικός ταλαντωτής για $t \leq 0$ βρίσκεται στη βασική κατάσταση, να βρεθεί η πιθανότητα μετάβασης σε μια διεγερμένη κατάσταση καθώς $t \rightarrow \infty$.

- 10.2. Ένα φορτισμένο σωματίδιο μάζας m και φορτίου q , που εκτελεί αρμονική κίνηση κατά μήκος του άξονα x , υφίσταται την επίδραση ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου, που έχει τώρα τη μορφή

$$E(t) = E_0 e^{-t^2/\tau^2}.$$



Αν για $t_0 = -\infty$ το σύστημα βρίσκεται στη βασική κατάσταση, να βρεθεί η πιθανότητα μετάβασης σε μια διεγερμένη κατάσταση καθώς $t \rightarrow \infty$.

- 10.3. Ένα άτομο υδρογόνου τοποθετείται μέσα σ' ένα ομογενές ηλεκτρικό πεδίο κατά μήκος του άξονα z , που έχει τη μορφή

$$E(t) = \frac{E_0}{t^2 + \tau^2}$$

Αν το άτομο βρίσκεται στη βασική κατάσταση $1s$ για $t_0 = -\infty$, να βρεθεί η πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση $2p$ καθώς $t \rightarrow \infty$.

Χρήσιμο ολοκλήρωμα
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} dt = \left(\frac{\pi}{\tau}\right) e^{-\omega\tau}$$

- 10.4. Η ποσότητα

$$f_{if} = \frac{2\pi\omega_{if}}{3\hbar e^2} |\langle i|D|f\rangle|^2$$

είναι γνωστή στην ατομική φυσική σαν "ισχύς ταλαντωτή" για τις μεταβάσεις $|i\rangle \leftrightarrow |f\rangle$. Ναδειχθεί ότι ισχύει ο αθροιστικός κανόνας Thomas-Reich-Kuhn

$$\sum_i f_{if} = 1,$$

όπου το άθροισμα αφορά σε όλες τις μεταβάσεις προς μια δοσμένη ενεργειακή κατάσταση. Στην περίπτωση του νατρίου η "ισχύς ταλαντωτή" για τις δύο κίτρινες γραμμές είναι 0.976 και, σχεδόν, καλύπτει την παραπάνω ισότητα για τις μεταβάσεις προς τη θεμελιώδη κατάσταση.

- 10.5. Ένας άλλος τρόπος μελέτης της διάσπασης ενός κβαντικού συστήματος είναι ο ακόλουθος. Υποθέτουμε πάντα ότι το φάσμα του \hat{H}_0 αποτελείται από μια αρχική κατάσταση $|i\rangle$ και ένα συνεχές φάσμα τελικών καταστάσεων $|f\rangle$, ενώ για τον όρο αλληλεπίδρασης \hat{H}'_0 έχουμε

$$\langle i|\hat{H}'_0|f\rangle = \langle f|\hat{H}'_0|i\rangle^* \neq 0, \quad \langle i|\hat{H}'_0|i\rangle = \langle f|\hat{H}'_0|f\rangle = 0.$$

Για μια κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ γράφουμε

$$|\psi(t)\rangle = c_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle + \int df c_f(E_f, t) e^{-iE_f t/\hbar} |f\rangle$$

i) Ναδειχθεί ότι οι $c_i(t)$ και $c_f(E_f, t)$ υπακούουν στις διαφορικές εξισώσεις

$$i\hbar \dot{c}_i(t) = \int df e^{-i(E_f - E_i)t/\hbar} \langle i|\hat{H}'_0|f\rangle c_f(E_f, t)$$



$$i\hbar \dot{c}_f(E_f, t) = e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar} \langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle c_i(t)$$

με αρχικές συνθήκες $c_i(0) = 1, c_f(E_f, 0) = 0$.

ii) Εισάγοντας την πυκνότητα $\rho(E_f)$ των τελικών καταστάσεων: $df = \rho(E_f) dE_f$, να δειχθεί ότι

$$\dot{c}_i(t) \approx -\frac{c_i(t)}{\hbar^2} \int_0^\infty dE_f \int_0^t dt' \rho(E_f) |\langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 e^{i(E_i - E_f)(t-t')/\hbar}$$

Χρησιμοποιώντας την αντικατάσταση

$$\int_0^t dt' e^{i(E_i - E_f)(t-t')/\hbar} \rightarrow \pi\hbar \delta(E_i - E_f),$$

να δειχθεί ότι

$$c_i(t) = e^{-t/2\tau} \quad (\text{σχέση (10.85)})$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 \rho(E_i) \quad (\text{σχέση (10.80)})$$

iii) Να δειχθεί ότι

$$c_f(E_f, t) = \frac{[e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar} - e^{-t/2\tau} - 1] \langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle}{E_i - E_f - i\frac{\hbar}{2\tau}}$$

Για $t \rightarrow \infty$, να δειχθεί ότι παίρνουμε για την ενέργεια των τελικών καταστάσεων την κατανομή ($\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$)

$$\begin{aligned} |c_f(E_f, \infty)|^2 &= |\langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 \frac{1}{(E_i - E_f)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 |\alpha(E_f)|^2 \end{aligned}$$

και για $\Gamma \rightarrow 0$

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} |c_f(E_f, \infty)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}'_0 | i \rangle|^2 \tau \delta(E_i - E_f)$$

10.6. Να υπολογισθεί ο μέσος χρόνος ζωής τ της ενεργειακής κατάστασης $2p$ του ατόμου του υδρογόνου (διάσπαση $2p \rightarrow 1s$) και να δειχθεί ότι το φυσικό εύρος είναι $\Gamma = 4 \times 10^{-7} \text{ eV}$.

10.7. i) Ακολουθώντας την διαδικασία της §10.2, να δειχθεί ότι η δεύτερη τάξη στην εξαρτημένη από το χρόνο θεωρία διαταραχών δίνει



$$C_n^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_{nm}(t') e^{i\omega_{nm}t'} H_{mi}(t'') e^{i\omega_{mi}t''}$$

Η πιθανότητα μετάβασης για $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ με $n \neq i$ θα είναι, τότε, γενικά

$$P_{i \rightarrow n} = |C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots|^2$$

ii) Χρησιμοποιώντας τη διαταραχή (10.94) της αδιαβατικής προσέγγισης και παίρνοντας στο τέλος $\eta \rightarrow 0$, να υπολογιστεί ο συντελεστής $C_n^{(2)}(t)$ από την προηγούμενη έκφραση και να επαναληφθούν οι σχέσεις (10.103) και (10.104).



ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΧΙ

ΘΕΩΡΙΑ ΣΚΕΔΑΣΗΣ

Μέχρι τώρα, ο κύριος τρόπος για τη γνώση των κβαντικών συστημάτων ήταν βασικά μέσω της ανάλυσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που εκπέμπεται ή απορροφάται κατά τις μεταβάσεις ανάμεσα σε δέσμιες καταστάσεις (θεωρία φασματοσκοπίας). Όμως, ένας άλλος αρκετά χρήσιμος τρόπος διερεύνησης των αλληλεπιδράσεων, ιδιαίτερα ανάμεσα σε σωματίδια, συνίσταται στη μελέτη του τρόπου που αυτά σκεδάζονται μεταξύ τους (θεωρία σκέδασης). Ιστορικά, κορυφαίο παράδειγμα αποτελεί το πείραμα του Rutherford κατά το οποίο τ' αποτελέσματα της σκέδασης σωματιδίων α από άτομα μεταλλικών ελασμάτων χρησιμοποιήθηκαν για να συναχθεί η ύπαρξη των πυρήνων των ατόμων. Σήμερα, η συστηματική μελέτη των διαδικασιών σκέδασης αποτελεί την κύρια πηγή πληροφοριών σε ότι αφορά τις βασικές αλληλεπιδράσεις της φύσης - ισχυρές, ηλεκτρομαγνητικές και ασθενείς - και πάνω σε τέτοιες πειραματικές πληροφορίες στηρίζεται η σύγχρονη εικόνα που έχουμε για τα βασικά συστατικά της ύλης - κουάρκς και λεπτόνια.

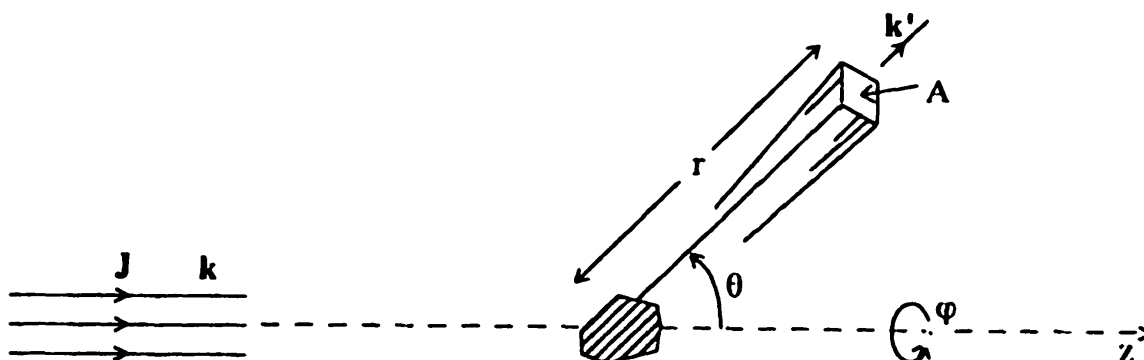
Σ' αυτό το κεφάλαιο, θα γνωρίσουμε τη βασική θεωρία της μη σχετικιστικής κβαντικής σκέδασης. Σε μια διαδικασία σκέδασης, φανταζόμαστε ότι τα σωματίδια προσεγγίζουν το ένα το άλλο σαν κυματοπακέτα με αρκετά καλά ορισμένη ορμή και θέση (μέσα στα όρια που επιτρέπονται από την αρχή της αβεβαιότητας). Αρχικά η κίνηση θεωρείται ελεύθερη, μια και τα σωματίδια βρίσκονται σε μεγάλες αποστάσεις, αν τις συγκρίνουμε με το εύρος του δυναμικού αλληλεπίδρασης V , που είναι μια συνάρτηση της απόστασης που χωρίζει τα σωματίδια. Μετά τη σκέδαση τα σωματίδια κινούνται απομακρυνόμενα σύμφωνα με μια εικόνα σκέδασης που προσδιορίζεται από το δυναμικό αλληλεπίδρασης. Στην πράξη, θα θεωρήσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση για το προσπίπτον σκεδαζόμενο σωματίδιο έχει ορισμένη ενέργεια



(επίπεδο κύμα). Πράγματι, η χρήση ενός επίπεδου κύματος είναι ικανοποιητική, εφόσον οι διαστάσεις του κυματοπακέτου είναι πολύ μεγαλύτερες από το πεπερασμένο εύρος του δυναμικού σκέδασης V .

11.1. Ενεργός διατομή σκέδασης

Το βασικό μέγεθος που ενδιαφέρει σε μια διαδικασία σκέδασης είναι η ενεργός διατομή σκέδασης. Ένα πείραμα σκέδασης με μια προσπίπτουσα δέσμη σωματιδίων, που κινούνται προς ένα σταθερό στόχο και σκεδάζονται για να ανιχνευτούν από μια συσκευή ανίχνευσης, φαίνεται στο σχήμα 11.1.



Σχ. 11.1. Ένα πείραμα σκέδασης με σταθερό στόχο.

Τα σωματίδια σκεδάζονται μέσα σε μια περιοχή αλληλεπίδρασης (γραμμωσκιασμένη περιοχή) μέσα στην οποία το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι μη μηδενικό και ανιχνεύονται σε απόσταση r , η οποία είναι πολύ μεγάλη συγκρινόμενη με το μέγεθος της περιοχής αλληλεπίδρασης. Υποθέτουμε, επίσης, ότι η δέσμη είναι ομοιόμορφη και ότι η πυκνότητα των σωματιδίων στη δέσμη είναι αρκετά μικρή έτσι ώστε να μπορούμε ν' αγνοήσουμε τις μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις. Κάτω από αυτές τις προϋποθέσεις, ο αριθμός των σωματιδίων $\frac{dN}{dt}$ που ανιχνεύονται στη συσκευή ανά μονάδα χρόνου είναι ανάλογος προς την προσπίπτουσα ροή σωματιδίων J (πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας) και τη στερεά γωνία $d\Omega = \frac{dA}{r^2} = \sin\theta d\theta d\phi$ μέσα στην οποία ανιχνεύονται. Η σταθερά αναλογίας ορίζεται σαν η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης $\frac{d\sigma}{d\Omega}$:



$$\frac{dN}{dt} = J \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot d\Omega \quad (11.1)$$

Η ολική ενεργός διατομή σκέδασης σ ορίζεται, τότε, σαν το ολοκλήρωμα της διαφορικής ενεργού διατομής σκέδασης πάνω σε όλες τις διευθύνσεις

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (11.2)$$

και παριστάνει τον αριθμό των σωματιδίων που σκεδάζονται ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα προσπίπτουσας ροής προς όλες τις διευθύνσεις. Από τον ορισμό είναι φανερό ότι οι διαστάσεις της $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ή της σ είναι διαστάσεις επιφάνειας. Είναι, επίσης, φανερό ότι η ενεργός διατομή σκέδασης θα καθορίζεται από το δυναμικό αλληλεπίδρασης.

Πριν προχωρήσουμε στη φυσική περιγραφή μιας διαδικασίας σκέδασης, είναι χρήσιμο να παραθέσουμε τις σχέσεις ανάμεσα στα δύο βασικά συστήματα αναφοράς που χρησιμοποιούμε σε μια διαδικασία σκέδασης δύο σωματιδίων. Στο σύστημα εργαστηρίου (E) ο στόχος ηρεμεί πριν από τη σκέδαση. Στο σύστημα κέντρου μάζας (KM), αντίθετα, είναι το κέντρο μάζας των δύο σωματιδίων που ηρεμεί, με άλλα λόγια τα δύο σωματίδια κινούνται με ίσες και αντίθετες ορμές $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$, όπου \mathbf{p} η σχετική ορμή (βλ. σχέση (6.4)). Η γωνία σκέδασης θ_E που μετρείται στο σύστημα εργαστηρίου δεν είναι ίδια με την αντίστοιχη γωνία σκέδασης θ_{KM} στο σύστημα κέντρου μάζας, όπως φαίνεται στο σχήμα 11.2.

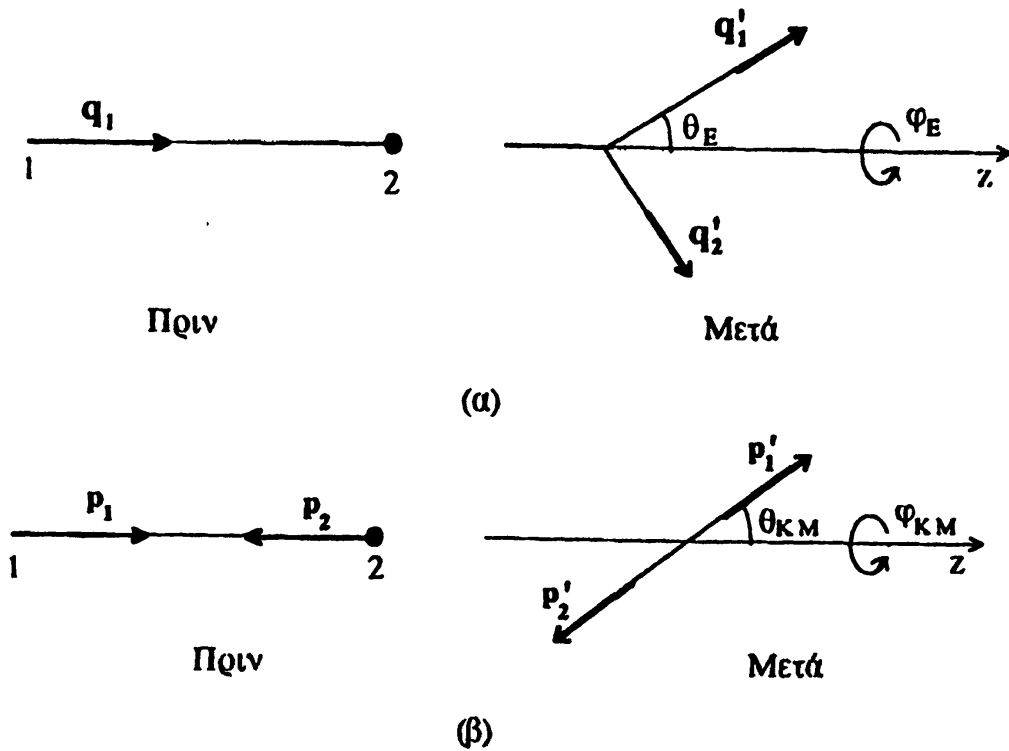
Επειδή η συσκευή που ανιχνεύει τα σκεδαζόμενα σωματίδια είναι μακροσκοπική, η σχέση μεταξύ των δύο γωνιών μπορεί να βρεθεί χρησιμοποιώντας τη διατήρηση ορμής και ενέργειας στη συνηθισμένη κλασική μηχανική. Επαληθεύεται, τότε, ότι

$$\tan \theta_E = \frac{\sin \theta_{KM}}{\cos \theta_{KM} + \frac{m_1}{m_2}} \quad (11.3)$$

Επειδή η ολική ενεργός διατομή σκέδασης είναι μια ποσότητα ανεξάρτητη από το σύστημα αναφοράς (είναι μέτρο της πιθανότητας που υπάρχει για σκέδαση, ανεξάρτητα από τη γωνία σκέδασης), θα πρέπει να έχουμε

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\varphi_E \int_{-1}^{+1} d \cos \theta_E \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_E = \int_0^{2\pi} d\varphi_{KM} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta_{KM} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{KM} \quad (11.4)$$





Σχ. 11.2. Ελαστική σκέδαση (α) στο σύστημα εργαστηρίου και (β) στο σύστημα κέντρου μάζας

Συνάγουμε, λοιπόν, ότι (είναι $\varphi_E = \varphi_{ΚΜ}$, μια και το επίπεδο σκέδασης είναι το ίδιο στα δύο συστήματα αναφοράς)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)'_E d \cos \theta_E = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{ΚΜ} d \cos \theta_{ΚΜ} \quad (11.5)$$

Από τη σχέση (11.3) προκύπτει ότι

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)'_E = \frac{\left(1 + 2 \frac{m_1}{m_2} \cos \theta_{ΚΜ} + \frac{m_1^2}{m_2^2}\right)^{3/2}}{\left|1 + \frac{m_1}{m_2} \cos \theta_{ΚΜ}\right|} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{ΚΜ} \quad (11.6)$$

11.2. Πλάτος σκέδασης

Το κβαντικό σύστημα για τη σκέδαση μιας δέσμης σωματιδίων από ένα σταθερό στόχο, όπως στο σχήμα 11.1, μπορεί να περιγραφεί από την εξίσωση Schrödinger



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11.7)$$

Για τη σκέδαση δύο σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μ' ένα δυναμικό $V(\mathbf{r})$, όπως στο σχήμα 11.2, η μάζα m θα πρέπει ν' αντικατασταθεί από την ανηγμένη μάζα μ (σχέση (6.4)) και \mathbf{r} θα είναι η σχετική τους απόσταση (σχέση (6.2)). Ψάχνουμε για λύσεις στάσιμων καταστάσεων

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \quad (11.8)$$

με ενέργεια $E_{\mathbf{k}} = \hbar \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ που αντιστοιχεί σε προσπίπτουσα ορμή $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση Schrödinger, που θέλουμε να λύσουμε, μπορεί να γραφεί τότε

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11.9)$$

όπου

$$U(\mathbf{r}) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \quad (11.10)$$

είναι το ανηγμένο δυναμικό. Για ένα δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας, για το οποίο είναι $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ καθώς $r \rightarrow \infty$, η εξίσωση (11.9) ανάγεται για μεγάλα r στην εξίσωση Schrödinger ελεύθερου σωματιδίου

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (11.11)$$

$$r \rightarrow \infty$$

Γι' αυτή την περιοχή των μεγάλων r , αρκετά μακριά από την περιοχή αλληλεπίδρασης, μπορούμε να πούμε ότι η $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ θα πρέπει να μπορεί να γραφεί σαν ένα άθροισμα της κυματοσυνάρτησης της προσπίπτουσας δέσμης σωματιδίων και ενός όρου που θα παριστάνει το φαινόμενο της σκέδασης των σωματιδίων, δηλαδή

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\pi}(\mathbf{r}) + \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (11.12)$$

$$r \rightarrow \infty$$

Για την κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\pi}(\mathbf{r})$ μπορούμε να πάρουμε το επίπεδο κύμα

$$\Psi_{\pi}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (11.13)$$

για το οποίο $|\Psi_{\pi}(\mathbf{r})|^2 = 1$ και $\mathbf{J} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \mathbf{v}$. Αυτό συμβαίνει γιατί στην πράξη οι εγκάρσιες διαστάσεις της προσπίπτουσας δέσμης είναι πολύ μεγάλες σε σχέση με τις ατομικές ή πυρηνικές διαστάσεις, που αντιστοιχούν στην περιοχή αλληλεπίδρασης. Σε ότι αφορά την κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$, που παριστάνει το αποτέλεσμα της σκέδασης, θα πρέπει να περιγράφει μια ακτινική ροή σωματιδίων



που απομακρύνονται από το σταθερό κέντρο της σκέδασης. Θα έχει, λοιπόν, τη μορφή

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \quad (11.14)$$

όπου η συνάρτηση $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$, που πολλαπλασιάζει το (εξερχόμενο) σφαιρικό κύμα $\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r}$, ονομάζεται πλάτος σκέδασης και προσδιορίζει τη ροή των σκεδαζομένων σωματιδίων στην κατεύθυνση (θ, φ) . Πράγματι, αυτό μπορούμε να το δούμε πιο εύκολα θεωρώντας ένα κεντρικό δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας, για το οποίο όπως είπαμε παίρνουμε $rV(r) \rightarrow 0$ καθώς $r \rightarrow \infty$. Τότε, η ακτινική εξίσωση (6.18) μπορεί να γραφεί εδώ με τη μορφή (11.9) σαν

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_{kl}(r) = U(r) R_{kl}(r) \quad (11.15)$$

Γράφοντας τις λύσεις για την ακτινική συνάρτηση $R_{kl}(r)$ και για μεγάλα r σαν

$$R_{kl}(r) = F_{kl}(r) \frac{e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \quad (11.16)$$

όπου $F_{kl}(r)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση του r , ο αναγνώστης μπορεί να δείξει (βλ. πρόβλημα 11.2) ότι η συνάρτηση F_{kl} είναι ανεξάρτητη από το r στο όριο $r \rightarrow \infty$. Οι λύσεις (11.16) παριστάνουν εξερχόμενα (+) ή εισερχόμενα (-) κύματα, αλλά οι φυσικές συνθήκες του προβλήματος υπαγορεύουν να θεωρήσουμε μόνο τα εξερχόμενα κύματα (11.14). Έχουμε, λοιπόν, για τη συνολική κυματοσυνάρτηση (11.12) την ασυμπτωτική μορφή

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \quad (11.17)$$

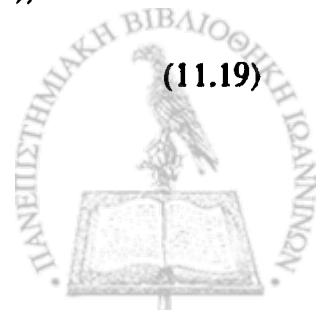
$r \rightarrow \infty$

Αυτό που μένει τώρα να δούμε είναι πώς συνδέεται το πλάτος σκέδασης $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$, που καθορίζεται από τη σκέδαση, με την ενεργό διατομή σκέδασης, που μετράμε. Από την κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ (11.14) μπορούμε να βρούμε τη ροή (πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας) J_{σ} με βάση τη γνωστή σχέση (1.101) και την έκφραση για τον τελεστή ∇ σε πολικές συντεταγμένες

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\phi} \quad (11.18)$$

Παραλείποντας το δεύτερο και τρίτο όρο στην προηγούμενη σχέση, μια και ενδιαφερόμαστε για μεγάλα r , βρίσκουμε (βλ. και πρόβλημα (1.14)) ότι

$$J_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{1}{r^2} |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \quad (11.19)$$



Από την ερμηνεία του J_{σ} , που παριστάνει τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα επιφάνειας, βλέπουμε ότι ο αριθμός των σκεδαζομένων σωματιδίων $\frac{dN}{dt}$ που ανιχνεύονται ανά μονάδα χρόνου είναι

$$\frac{dN}{dt} = J_{\sigma} dA = J_{\sigma} r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (11.20)$$

Από την έκφραση (11.1) και δεδομένου ότι $J = \frac{\hbar k}{m}$, συμπεραίνουμε ότι η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης συνδέεται με το πλάτος σκέδασης με τη σχέση

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \quad (11.21)$$

Στη συνέχεια θα συζητήσουμε μεθόδους υπολογισμού του πλάτους σκέδασης. Πριν όμως, είναι ενδιαφέρον να δούμε αυτό που ονομάζεται οπτικό θεώρημα.

11.3. Οπτικό θεώρημα

Το οπτικό θεώρημα (ονομαζόμενο, έτσι, ίσως γιατί ήταν γνωστό πολύ πριν την κβαντομηχανική από τις θεωρίες σκέδασης των ακουστικών και ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων) αποτελεί έκφραση της διατήρησης της πιθανότητας ροής.

Θα πρέπει πρώτα να σημειώσουμε ότι κανονικά στο ολοκλήρωμα (11.2) για την ολική ενεργό διατομή σκέδασης θα πρέπει να εξαιρέσουμε την πρόσθια κατεύθυνση ($\theta=0$), όπου υπάρχει αλληλοεπικάλυψη του σκεδαζόμενου κύματος με το προσπίπτον. Όμως, θεωρώντας πάντα μεγάλα r , μπορούμε να καταστήσουμε αμελητέα τη στερεά γωνία που πρέπει να αποκλείσουμε. Στη γλώσσα της κυματομηχανικής λέμε ότι υπάρχει (καταστροφική) συμβολή (δημιουργία "σκιάς") ανάμεσα στο αρχικό προσπίπτον κύμα και το πρόσθιο ($\theta=0$) τμήμα του σκεδασθέντος κύματος. Αυτή η συμβολή οδηγεί μέσα από τη διατήρηση της πιθανότητας ροής στην έκφραση του οπτικού θεωρήματος, όπως θα δούμε αμέσως τώρα σε μια πρώτη θεώρηση του θέματος αυτού.

Ας θεωρήσουμε ότι το προσπίπτον επίπεδο κύμα κινείται κατά μήκος του άξονα z όπως στο σχήμα 11.1, κάτι που θα κάνουμε και στη συνέχεια. Έχουμε τότε

$\Psi_{\pi} = e^{ikz}$ και προσπίπτουσα πυκνότητα πιθανότητας ροής $J = \frac{\hbar k}{m} = v$. Μετά τη

σκέδαση, η καθαρή πιθανότητα ροής για το εξερχόμενο σκεδασθέν κύμα είναι v_{σ} , όπως προκύπτει από τους ορισμούς (11.1) και (11.2). Συνεπώς, η καθαρή πιθανότητα ροής για το εξερχόμενο κατά την πρόσθια κατεύθυνση ($\theta=0$) κύμα θα



πρέπει να είναι μικρότερη από την πιθανότητα ροής για το εισερχόμενο κύμα ακριβώς κατά το ποσόν αυτό υσ. Όπως θα δούμε τώρα, γράφοντας για τη συνολική κυματοσυνάρτηση (11.17) και για κατευθύνσεις πολύ κοντά στην πρόσθια κατεύθυνση ($\theta=0$) τη μορφή

$$\Psi(\theta=0) = e^{ikz} + f_k(0) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.22)$$

το ποσό αυτό πιθανότητας ροής θα προέλθει από την αλληλεπίδραση (συμβολή) των δύο όρων της συνολικής κυματοσυνάρτησης (11.22).

Πράγματι, μπορούμε να γράψουμε για την ακτίνα r και για αποστάσεις x κάθετα προς τον άξονα z της προσπίπτουσας δέσμης, που είναι πολύ μικρές $x \ll z$, το ανάπτυγμα

$$r = (z^2 + x^2)^{1/2} \approx z + \frac{1}{2} \frac{x^2}{z} \quad (11.23)$$

Συνεπώς, για τη συνολική κυματοσυνάρτηση παίρνουμε σε πρώτη προσέγγιση

$$\Psi(\theta=0) = e^{ikz} \left[1 + f_k(0) \frac{e^{ikx^2/2z}}{z} \right] \quad (11.24)$$

από την οποία βρίσκουμε για την πυκνότητα πιθανότητας ροής

$$J(\theta=0) = \frac{\hbar k}{m} \left\{ 1 + \frac{2\text{Re} [f_k(0) e^{ikx^2/2z}]}{z} \right\} \quad (11.25)$$

Αυτό που μας ενδιαφέρει τώρα είναι η καθαρή πιθανότητα ροής για την πρόσθια σκέδαση, που είναι το ολοκλήρωμα της έκφρασης (11.25) πάνω στην επιφάνεια της

δέσμης, δηλαδή $\int 2\pi x dx J(\theta=0)$. Ο πρώτος όρος της (11.25) δίνει ό,τι θα έδινε το

προσπίπτον κύμα σε απουσία σκέδασης και θα έδινε μια ορισμένη πεπερασμένη τιμή, αν αντί για επίπεδο κύμα είχαμε χρησιμοποιήσει ένα κατάλληλο κυματοπακέτο για τα σωματίδια της προσπίπτουσας δέσμης. Αλλά το ενδιαφέρον έγκειται στον δεύτερο όρο της (11.25), που δίνει το αποτέλεσμα του πλάτους σκέδασης. Αυτό για την πιθανότητα ροής στην πρόσθια σκέδαση είναι

$$F(\theta=0) = \int_0^{\infty} 2\pi x dx \frac{\hbar k}{m} \frac{2\text{Re} [f_k(0) e^{ikx^2/2z}]}{z} \quad (11.26)$$



Κάνοντας το ολοκλήρωμα $I = \int_0^{\infty} x dx e^{ikx^2/2z}$ και παραλείποντας γρήγορα

ταλαντούμενους όρους που δίνουν μηδενική μέση τιμή, βρίσκουμε $I = \frac{iZ}{k}$. Επειδή θέλουμε το πραγματικό μέρος στο γινόμενο στην έκφραση (11.26), θα πρέπει να επιλέξουμε το φανταστικό μέρος για το πρόσθιο πλάτος σκέδασης και, έτσι, παίρνουμε τελικά

$$F(\theta=0) = - \frac{4\pi \hbar \text{Im} f_k(0)}{m} \quad (11.27)$$

Σύμφωνα με όσα είπαμε παραπάνω, το ποσόν $v\sigma = \frac{\hbar k}{m} \sigma$ πρέπει να είναι ίσο με το ποσό $-F(\theta=0)$ που πρέπει ν' αφαιρεθεί από την προσπίπτουσα πιθανότητα ροής και, συνεπώς, βρίσκουμε ότι

$$\sigma = \frac{4\pi \text{Im} f_k(0)}{k} \quad (11.28)$$

Αυτή η σχέση ανάμεσα στην ολική ενεργό διατομή σκέδασης και το φανταστικό μέρος του πλάτους σκέδασης κατά την πρόσθια κατεύθυνση ($\theta=0$) αποτελεί το οπτικό θεώρημα. Παρακάτω θα έχουμε την ευκαιρία ν' αναφερθούμε ξανά σ' αυτό.

11.4. Υπολογισμός πλάτους σκέδασης

Ας επανέλθουμε τώρα στις μεθόδους υπολογισμού του πλάτους σκέδασης $f_k(\theta, \varphi)$. Υπάρχουν, πράγματι, διάφορες μέθοδοι για να υπολογίσει κανείς το πλάτος σκέδασης. Σε μια ανεξάρτητη από το χρόνο διαπραγμάτευση του θέματος η μέθοδος των συναρτήσεων Green αποτελεί μια αρκετά γενική μέθοδο για ένα τέτοιο υπολογισμό. Εμείς εδώ θα χρησιμοποιήσουμε την χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger (11.7) σε μια χρονικά εξαρτημένη διαπραγμάτευση του προβλήματος σκέδασης στο πνεύμα του προηγούμενου κεφαλαίου και θα δούμε τη σκέδαση με τη χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών στην περίπτωση που το δυναμικό σκέδασης V μπορεί να θεωρηθεί ασθενές κατά μια έννοια (ή η ενέργεια πρόσπτωσης E μεγάλη). Σ' επόμενη παράγραφο θα γνωρίσουμε μια άλλη ακριβή μέθοδο υπολογισμού του πλάτους σκέδασης (συναρτήσεως των λεγόμενων μερικών πλατών σκέδασης), στην περίπτωση που το δυναμικό σκέδασης είναι ένα κεντρικό δυναμικό $V(r)$.

Στη μέθοδο που χρησιμοποιούμε εδώ το δυναμικό $V(r)$ στην εξίσωση (11.7) είναι βέβαια ανεξάρτητο από το χρόνο, αλλά αυτό είναι μια εξιδανίκευση, γιατί στην πράξη η διαδικασία αλληλεπίδρασης κατά τη σκέδαση διαρκεί μια ορισμένη



χρονική περίοδο, που όμως είναι μικρή συγκρινόμενη με τη διάρκεια του πειράματος. Ισοδύναμα, μπορούμε να πούμε ότι στο απώτερο παρελθόν ($t \rightarrow -\infty$) το προσπίπτον σωματίδιο είναι ελεύθερο και μετά το δυναμικό αρχίζει να δρα αδιαβατικά (δηλαδή πολύ αργά), όπως στην αδιαβατική προσέγγιση της §10.7: $V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} e^{\eta t} V$. Κατά τη διάρκεια της αλληλεπίδρασης το σύστημα περιγράφεται

από την εξίσωση (11.7) και οι λύσεις στάσιμων καταστάσεων είναι οι (11.8), όπου η ανεξάρτητη από το χρόνο κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ικανοποιεί την (11.9) με την ασυμπτωτική συνθήκη (11.17).

Μπορούμε ν' αναπτύξουμε την κυματοσυνάρτηση (11.8) συναρτήσει του πλήρους συνόλου των κυματοσυναρτήσεων επίπεδου κύματος

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \quad (11.29)$$

που αποτελεί λύση της (11.7) με $V=0$. Έχουμε τότε

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \int C_{\mathbf{k}}(t) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{k} \quad (11.30)$$

Αντικαθιστώντας την (11.30) στην εξίσωση (11.7), πολλαπλασιάζοντας στη συνέχεια και τα δύο μέλη της εξίσωσης από αριστερά με $\Phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}, t)$ και ολοκληρώνοντας σε όλο το χώρο, βρίσκουμε ότι

$$i \hbar \dot{C}_{\mathbf{k}'}(t) = \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})t} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11.31)$$

Την εξίσωση αυτή γράφουμε τώρα

$$i \hbar \dot{C}_{\mathbf{k}'}(t) = \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})t} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \quad (11.32)$$

όπου η έκφραση

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11.33)$$

είναι γνωστή σαν στοιχείο του πίνακα μετάβασης T . Από την έκφραση (11.33) είναι φανερό ότι μπορεί να οριστεί ο τελεστής μετάβασης \hat{T} από τη σχέση

$$\hat{T} |k\rangle = \hat{V} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (11.34)$$



οπότε σε προφανή συμβολισμό έχουμε για τα στοιχεία του αντίστοιχου πίνακα μετάβασης

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle \quad (11.35)$$

Η εξίσωση (11.32) ισχύει όσο διαρκεί το πείραμα. Ολοκληρώνοντας από μια αρχική χρονική στιγμή $t_0 = 0$, πριν από την οποία τα πλάτη $C_{\mathbf{k}'}(t)$ είναι μηδέν, μέχρι μια χρονική στιγμή $t = \tau$ που αντιστοιχεί στη διάρκεια του πειράματος, βρίσκουμε ότι

$$C_{\mathbf{k}'}(\tau) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar \omega} (1 - e^{i\omega\tau}) T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \quad (11.36)$$

όπου $\omega = \omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}}$. Ο ρυθμός μετάβασης $W(\mathbf{k}')d\mathbf{k}'$ για σκέδαση σε μια τελική κατάσταση, όπου το \mathbf{k}' θα βρίσκεται στο διάστημα μεταξύ \mathbf{k}' και $\mathbf{k}'+d\mathbf{k}'$, θα είναι τότε

$$W(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \frac{1}{\tau} |C_{\mathbf{k}'}(\tau)|^2 d\mathbf{k}' = \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{1}{\hbar^2} \frac{2(1-\cos\omega\tau)}{\tau \omega^2} |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 d\mathbf{k}' \quad (11.37)$$

Από την ιδιότητα (2.65) της δ-συνάρτησης

$$\delta(x) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda\pi x^2} (1 - \cos\lambda x)$$

συμπεραίνουμε ότι για μεγάλα τ θα είναι

$$W(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{1}{\hbar^2} 2\pi\delta(\omega) |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 d\mathbf{k}' \quad (11.38)$$

Η δ-συνάρτηση $\delta(\omega)$ εκφράζει το γεγονός ότι οι μεταβάσεις γίνονται σε τελικές καταστάσεις που διατηρούν την ενέργεια. Από το σχήμα 11.1 έχουμε ότι

$$d\mathbf{k}' = k'^2 dk' d\Omega = \frac{mk'}{\hbar} d\omega d\Omega \quad (11.39)$$

Έτσι, ο ρυθμός μετάβασης για σκέδαση μέσα στη στερεά γωνία $d\Omega$ θα προκύψει με ολοκλήρωση πάνω στο ω . Παίρνουμε

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}') d\Omega &= \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{1}{\hbar^2} \frac{m}{\hbar} d\Omega \int |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 2\pi\delta(\omega) k' d\omega \\ &= \frac{1}{(2\pi)^5} \frac{m}{\hbar^3} |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 k' d\Omega \end{aligned} \quad (11.40)$$

με $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$. Για να βρούμε τώρα τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης θα πρέπει να διαιρέσουμε το W με την προσπίπτουσα ροή, που από την (11.29) είναι



$J = \frac{1}{(2\pi)^3} v = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k}{m}$. Βρίσκουμε λοιπόν

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^3 m}{\hbar k} W = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{m^2}{\hbar^4} |\Gamma_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \quad (11.41)$$

Έτσι, για το πλάτος σκέδασης $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$ έχουμε από την (11.21)

$$|f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{m^2}{\hbar^4} |\Gamma_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \quad (11.42)$$

και με την καθιερωμένη εκλογή φάσης γράφουμε ότι

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) &= - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \\ &= - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= - \frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (11.43)$$

Οι εκφράσεις (11.41) - (11.43) είναι οι γενικές εκφράσεις που ζητούσαμε για τον υπολογισμό του πλάτους σκέδασης και της διαφορικής ενεργού διατομής σκέδασης, όταν μας δοθεί ένα ορισμένο δυναμικό σκέδασης $V(\mathbf{r})$. Οι εκφράσεις αυτές είναι γενικές και καμία προσέγγιση δεν έγινε μέχρι τώρα. Βέβαια, σ' αυτές υπάρχει η άγνωστη κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ κάτω από το ολοκλήρωμα και μ' αυτή την έννοια η έκφραση (11.17) για την $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ αποτελεί μια ολοκληρωτική εξίσωση. Η πρώτη προσέγγιση Born, που θα εξετάσουμε στην επόμενη παράγραφο, αποτελεί την προσέγγιση πρώτης τάξης στη θεωρία διαταραχών για τον πίνακα μετάβασης και οι επόμενες προσεγγίσεις προκύπτουν κάθε φορά με επανειλημμένη χρήση της προηγούμενης προσέγγισης (διαδοχικές προσεγγίσεις).

11.5. Προσέγγιση Born

Για να πάρουμε την πρώτης τάξης προσέγγιση στη θεωρία διαταραχών για τον πίνακα μετάβασης υποθέτουμε ότι μπορούμε να προσεγγίσουμε την $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ με το αδιατάρακτο προσπίπτον επίπεδο κύμα $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Μια τέτοια προσέγγιση δεν θα είναι κακή, αν το φαινόμενο που προκαλεί τη σκέδαση δεν είναι πολύ ισχυρό (παρακάτω αυτό θα το εκφράσουμε ποσοτικά).



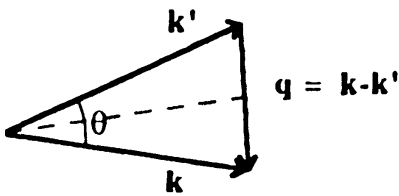
Παίρνουμε, έτσι, μια προσεγγιστική έκφραση για το πλάτος σκέδασης $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$, που την ονομάζουμε (πρώτη) προσέγγιση Born και θα την συμβολίσουμε με $f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta, \varphi)$:

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(1)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (11.44)$$

Βλέπουμε ότι η (πρώτη) προσέγγιση Born για το πλάτος σκέδασης είναι ανάλογη με το μετασχηματισμό Fourier του δυναμικού ως προς την ποσότητα

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (11.45)$$

Η ποσότητα αυτή αντιστοιχεί σε μεταφορά ορμής στο σκεδασθέν σωματίδιο ίση με $\Delta \mathbf{p} = \hbar \mathbf{q}$. Η σχέση μεταξύ μεταφοράς ορμής και γωνίας σκέδασης θ φαίνεται στο σχήμα 11.3.



Σχήμα 11.3. Σχέση μεταξύ μεταφοράς ορμής και γωνίας σκέδασης θ .

Για ένα σφαιρικά συμμετρικό (κεντρικό) δυναμικό, οι γωνιακές ολοκληρώσεις στην (11.44) γίνονται εύκολα. Όπως φαίνεται και στο σχήμα 11.3, είναι ($k' = k$ λόγω διατήρησης της ενέργειας)

$$q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (11.46)$$

Αν πάρουμε το \mathbf{q} σαν πολικό άξονα και ονομάσουμε (α, β) τις πολικές γωνίες του \mathbf{r} ως προς τον άξονα αυτό, οι γωνιακές ολοκληρώσεις δίνουν ότι το $f^{(1)}$ είναι συνάρτηση μόνο του q , δηλαδή της ενέργειας k και της γωνίας σκέδασης θ :

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} r^2 dr V(r) \int_0^{2\pi} d\beta \int_{-1}^{+1} d(\cos\alpha) e^{iqr\cos\alpha} \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^{\infty} r V(r) \sin(qr) dr \\ &= -\frac{1}{q} \int_0^{\infty} r U(r) \sin(qr) dr \end{aligned} \quad (11.47)$$



Αξίζει να σημειωθεί, εδώ, ότι η ολική ενεργός διατομή σκέδασης στην (πρώτη) προσέγγιση Born είναι

$$\sigma^{(1)}(k) = \int \frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} d\Omega = \int \left| f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) \right|^2 d\Omega = \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} \left| f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) \right|^2 q dq \quad (11.48)$$

Στο όριο των υψηλών ενεργειών $E = \frac{\hbar k^2}{2m} \rightarrow \infty$ έχουμε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [k^2 \sigma^{(1)}(k)] = 2\pi \int_0^{\infty} \left| f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) \right|^2 q dq \quad (11.49)$$

Επειδή το δεξιό μέλος της (11.49) γίνεται ανεξάρτητο από το k , συμπεραίνουμε ότι στις υψηλές ενέργειες η $\sigma^{(1)}$ πέφτει με την ενέργεια σαν E^{-1} :

$$\sigma^{(1)} \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} A E^{-1} \quad (11.50)$$

όπου A σταθερά.

Μια αξιόπιστη εκτίμηση για την ισχύ της (πρώτης) προσέγγισης Born δεν είναι εύκολο να δοθεί. Πάντως, για ένα κεντρικό δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας μια χονδρική εκτίμηση μπορεί να δοθεί από την έκφραση (11.47). Για να μη διαφέρει πολύ η $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ από το επίπεδο κύμα $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ θα πρέπει να ισχύει

$$\frac{2m}{\hbar^2} \left| \int_0^{\infty} r V(r) \sin(qr) dr \right| \ll 1 \quad (11.51)$$

Βλέπουμε, έτσι, ότι η (πρώτη) προσέγγιση Born φαίνεται να ισχύει για ασθενή δυναμικά και μεγάλες ενέργειες πρόσπτωσης.

Ας εφαρμόσουμε τώρα τα παραπάνω στο παράδειγμα ενός δυναμικού Yukawa

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-ar}}{ar} \quad (11.52)$$

όπου το V_0 είναι ανεξάρτητο από το r και το μήκος $\frac{1}{a}$ μπορεί να θεωρηθεί σαν η εμβέλεια του δυναμικού. Έτσι, το V τείνει προς το μηδέν πολύ γρήγορα για $r \gg \frac{1}{a}$. Σ' αυτή την περίπτωση το ολοκλήρωμα στην (11.47) μπορεί να γίνει κατ' ευθείαν χρησιμοποιώντας τη σχέση



$$\int_0^{\infty} e^{-ar} \sin(qr) dr = \text{Im} \left(\int_0^{\infty} e^{-ar} e^{iqr} dr \right) = \text{Im} \frac{1}{a - iq} = \frac{q}{a^2 + q^2} \quad (11.53)$$

Έτσι, βρίσκουμε για το πλάτος σκέδασης

$$f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) = - \frac{2m V_0}{\hbar^2} \frac{1}{a^2 + q^2} = - \frac{2m V_0}{\hbar^2} \frac{1}{a^2 + 4k^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \quad (11.54)$$

και για τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} = \left| f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) \right|^2 = \left(\frac{2m V_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{\left[a^2 + 4k^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right]^2} \quad (11.55)$$

Η συνθήκη (11.51) για την ισχύ της (πρώτης) προσέγγισης Born με βάση την (11.53) δίνει εδώ για μικρά $k \ll a$ ($q \ll a$)

$$\frac{2m |V_0|}{\hbar^2 a^2} \ll 1 \quad (11.56)$$

Επειδή η ύπαρξη μιας δέσμιας κατάστασης απαιτεί το μήκος κύματος ενός σωματιδίου με κινητική ενέργεια V_0 είναι μικρότερο από την εμβέλεια του δυναμικού, μπορούμε να πούμε ότι στο όριο μεγάλων μηκών κύματος η (πρώτη) προσέγγιση Born ισχύει αν το δυναμικό είναι αρκετά ασθενές για να δημιουργήσει μια δέσμια κατάσταση. Αντίθετα, για μεγάλες ενέργειες $k \gg a$ ($q \gg a$) φαίνεται ότι η (πρώτη) προσέγγιση Born μπορεί να γίνει ικανοποιητική αρκετά πιο εύκολα.

Το δυναμικό Coulomb ανάμεσα σε δύο φορτία q_1 και q_2 αποτελεί μια οριακή περίπτωση ενός δυναμικού Yukawa για $a \rightarrow 0$ και $V_0 \rightarrow 0$ με $\frac{V_0}{a} = q_1 q_2$:

$$V_c(r) = q_1 q_2 \frac{1}{r} \quad (11.57)$$

Σ' αυτή την περίπτωση η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης γίνεται

$$\frac{d\sigma_c^{(1)}}{d\Omega} = \left| f_{\mathbf{k}}^{(1)}(\theta) \right|^2 = \left(\frac{2m q_1 q_2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{16k^4 \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \quad (11.58)$$

Μάλιστα η εξάρτηση από το \hbar εξαφανίζεται, αν σημειώσουμε ότι $\hbar k = p = mv$. Γράφουμε τότε



$$\frac{d\sigma_c^{(1)}}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \frac{q_1^2 q_2^2}{16E^2} \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (11.59)$$

όπου

$$\gamma = \frac{q_1 q_2}{\hbar v} \quad (11.60)$$

Η έκφραση (11.59) είναι ακριβώς ο γνωστός τύπος του Rutherford που είχε βγει κλασικά.

Ένα αξιοσημείωτο χαρακτηριστικό της σκέδασης Coulomb είναι ότι η ακριβής κβαντομηχανική διαπραγμάτευση του θέματος δίνει το ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα (11.58) για τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης και μόνο το αντίστοιχο πλάτος σκέδασης $f_k^{(1)}(\theta)$ διαφέρει κατά ένα παράγοντα φάσης.

Πράγματι, η ακριβής κβαντομηχανική διαπραγμάτευση, που είναι αρκετά περίπλοκη και με την οποία δεν θ' ασχοληθούμε εμείς εδώ παραπέρα, δίνει για το πλάτος σκέδασης

$$f_k(\theta) = \frac{\gamma}{2k \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \frac{\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(1+i\gamma)} e^{2i\gamma \ln(\sin(\theta/2))} \quad (11.61)$$

όπου Γ η γάμμα συνάρτηση. Η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης, όμως, είναι πάντα

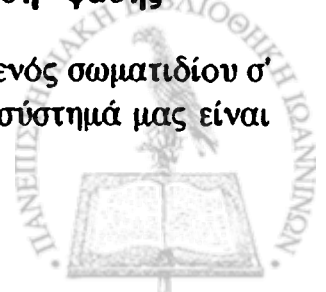
$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (11.62)$$

δηλαδή ο τύπος του Rutherford.

Θα πρέπει, τέλος, να σημειώσουμε ότι η $d\sigma_c/d\Omega$ απειρίζεται στην πρόσθια κατεύθυνση ($\theta=0$) και, συνεπώς, η ολική ενεργός διατομή δεν ορίζεται (βλ. και τη συζήτηση στην αρχή της § 11.3). Όμως, όταν θεωρούμε πραγματικές διαδικασίες σκέδασης, ένα δυναμικό Coulomb τροποποιείται σε μεγάλες αποστάσεις λόγω φαινομένων θωράκισης από άλλα φορτία. Σαν αποτέλεσμα, η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης γίνεται πεπερασμένη στην πρόσθια κατεύθυνση και η αντίστοιχη ολική ενεργός διατομή είναι τότε καθορισμένη.

11.6. Μέθοδος μερικών πλατών σκέδασης - Μετατόπιση φάσης

Ας υποθέσουμε τώρα ότι έχουμε να κάνουμε με σκέδαση ενός σωματιδίου σ' ένα κεντρικό δυναμικό $V(r)$. Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το σύστημά μας είναι



πλήρως συμμετρικό γύρω από την κατεύθυνση πρόσπτωσης που είναι ο άξονας z , όπως στο σχήμα 11.1. Έτσι, λόγω συμμετρίας, τόσο η κυματοσυνάρτηση $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, όσο και το πλάτος σκέδασης $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$ θα εξαρτώνται μόνο από τη γωνία σκέδασης θ και όχι από την αζιμουθιακή γωνία φ (θα έχουμε $m = 0$ και $e^{im\varphi} = 1$). Γι' αυτό το λόγο, τόσο η κυματοσυνάρτηση, όσο και το πλάτος σκέδασης θα μπορούν ν' αναπτυχθούν συναρτήσει του πλήρους συνόλου των πολωνύμων Legendre $P_l(\cos\theta)$ (που ουσιαστικά ταυτίζονται με τις συναρτήσεις $Y_{l0}(\theta, \varphi)$). Μπορούμε να γράψουμε, λοιπόν,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_{kl}(r) P_l(\cos\theta) \quad (11.63)$$

και

$$f_{\mathbf{k}}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (11.64)$$

Καθένας όρος στη σειρά (11.63) είναι γνωστός σαν μερικό κύμα και είναι συγχρόνως ιδιοσυνάρτηση των τελεστών \hat{L}^2 και \hat{L}_z με ιδιοτιμή $l(l+1)\hbar^2$ και 0, αντίστοιχα. Όμοια, καθένας όρος στη σειρά (11.64) περιέχει το μερικό πλάτος σκέδασης $f_l(k)$, το οποίο προσδιορίζεται από τη συνάρτηση $R_{kl}(r)$, όπως θα δούμε στη συνέχεια.

Ας υποθέσουμε ότι η εμβέλεια του δυναμικού σκέδασης είναι r_0 . Για αποστάσεις $r < r_0$, δηλαδή μέσα στην εμβέλεια του δυναμικού, η ακτινική συνάρτηση $R_{kl}(r)$ είναι λύση της ακτινικής εξίσωσης (11.15) με τη γνωστή οριακή συνθήκη $u_{kl}(r)|_{r=0} = [r R_{kl}(r)]|_{r=0} = 0$ (βλ. (6.26)). Για αποστάσεις $r > r_0$, δηλαδή έξω από την εμβέλεια του δυναμικού, το V μηδενίζεται και η $R_{kl}(r)$ είναι λύση της ίδιας ακτινικής εξίσωσης (11.15) με $U = \frac{2m^2}{\hbar^2} V = 0$. Οι δύο λύσεις θα πρέπει να ενώνονται ομαλά στο $r = r_0$.

Η ακτινική εξίσωση (11.15) για την εξωτερική περιοχή $r > r_0$ έχει λυθεί στην § 6.2. Η γενική λύση είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel $j_l(kr)$ και Neumann $n_l(kr)$ και έχει τη μορφή

$$R_{kl}(r) = A_l(k) j_l(kr) + B_l(k) n_l(kr), \quad r > r_0 \quad (11.65)$$

Χρησιμοποιώντας την ασυμπτωτική συμπεριφορά (6.39) και (6.40), παίρνουμε για μεγάλα r

$$R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{=} A_l(k) \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} - B_l(k) \frac{\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \quad (11.66)$$



Μπορούμε τώρα να γράψουμε την εξίσωση αυτή σαν

$$R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{=} a_l(k) \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr} \quad (11.67)$$

όπου $a_l(k) = \sqrt{A_l^2(k) + B_l^2(k)}$ και

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{B_l(k)}{A_l(k)} \quad (11.68)$$

Η πραγματική γωνία $\delta_l(k)$ ονομάζεται μετατόπιση φάσης και χαρακτηρίζει την ισχύ της σκέδασης για το μερικό κύμα l . Αυτό φαίνεται γιατί, αν $V = 0$ παντού (καθόλου σκέδαση), η φυσικά αποδεκτή λύση της ακτινικής εξίσωσης που συμπεριφέρεται σαν r^l στην αρχή (βλ. πρόβλημα 6.2) είναι η $j_l(kr)$ και αυτή έχει την ασυμπτωτική συμπεριφορά (11.67) με $\delta_l(k)$. Όπως είναι φανερό, η μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$ θα βρεθεί αφού λύσουμε αναλυτικά ή, αν χρειαστεί, αριθμητικά την πλήρη ακτινική εξίσωση (11.15) για την εσωτερική περιοχή $r < r_0$ και την ενώσουμε ομαλά στο $r = r_0$ με τη λύση (11.67) για την εξωτερική περιοχή $r > r_0$. Αυτό θα το δούμε στην επόμενη παράγραφο.

Ας δούμε τώρα πώς συσχετίζονται οι μετατοπίσεις φάσης $\delta_l(k)$ με τα μερικά πλάτη σκέδασης $f_l(k)$ και, κατά συνέπεια, με το συνολικό πλάτος σκέδασης $f_k(\theta)$. Ας ξαναγράψουμε πρώτα την ασυμπτωτική συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης $\Psi_k(r, \theta)$ για μεγάλα r χρησιμοποιώντας την (11.67):

$$\Psi_k(r, \theta) \underset{r \rightarrow \infty}{=} \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k) \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr} P_l(\cos\theta) \quad (11.69)$$

Έχουμε, όμως, παράλληλα ότι

$$\Psi_k(r, \theta) \underset{r \rightarrow \infty}{=} e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.70)$$

Το επίπεδο κύμα e^{ikz} μπορεί ν' αναπτυχθεί με βάση τη σχέση (6.50) σαν

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (11.71)$$

που για μεγάλα r γίνεται



$$\begin{aligned}
e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} P_l(\cos\theta) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \left[\frac{\exp\{i(kr - \frac{l\pi}{2})\}}{r} - \frac{\exp\{-i(kr - \frac{l\pi}{2})\}}{r} \right] \quad (11.72)
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τώρα και το ανάπτυγμα (11.64) για το πλάτος σκέδασης, παίρνουμε

$$\Psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} + f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos\theta) \quad (11.73)$$

Γράφοντας το ημίτονο με εκθετική μορφή και δεδομένου ότι $i^l = e^{i l\pi/2}$, βρίσκουμε ότι η σύγκριση της (11.73) με την (11.69) δίνει αφενός μεν

$$a_l(k) = (2l+1) i^l e^{i\delta_l(k)} \quad (11.74)$$

και

$$\Psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\delta_l(k)} \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr} P_l(\cos\theta) \quad (11.75)$$

αφετέρου δε

$$f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k)}{k} = \frac{1}{k \cot\delta_l(k) - ik} \quad (11.76)$$

Από τα μερικά πλάτη σκέδασης $f_l(k)$ παίρνουμε για το συνολικό πλάτος σκέδασης $f_k(\theta)$ την έκφραση

$$\begin{aligned}
f_k(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} P_l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (11.77)
\end{aligned}$$

Η έκφραση αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της ολικής ενεργού διατομής σκέδασης συναρτήσει των μετατοπίσεων φάσης $\delta_l(k)$ και των αντίστοιχων μερικών ενεργών διατομών σκέδασης. Έχουμε, λοιπόν,



$$\sigma = \int |f_k(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_{-1}^{+1} |f_k(\theta)|^2 d(\cos\theta) \quad (11.78)$$

Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα (11.77) και χρησιμοποιώντας την ιδιότητα ορθογωνιότητας των πολυωνύμων Legendre

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta) d(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (11.79)$$

βρίσκουμε

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (11.80)$$

όπου

$$\sigma_l = 4\pi(2l+1) |f_l(k)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (11.81)$$

Σημειώνουμε εδώ ότι για την πρόσθια κατεύθυνση $\theta=0$ έχουμε από την (11.77), όπου $P_l(1) = 1$, και τις (11.80) - (11.81) ότι

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_k(0) \quad (11.82)$$

Η σχέση αυτή συνιστά, βέβαια, το οπτικό θεώρημα που γνωρίσαμε ήδη στην §11.3.

Στο σημείο αυτό αξίζει να ξαναγράψουμε την ασυμπτωτική έκφραση (11.75) με τη μορφή

$$\Psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \left[S_l(k) \frac{e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{r} - \frac{e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{r} \right] \quad (11.83)$$

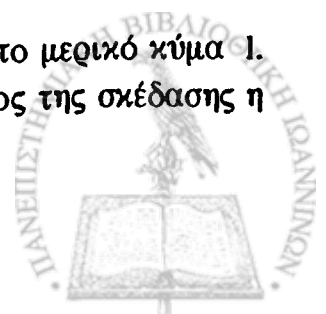
όπου

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (11.84)$$

Η φυσική εικόνα από τη σκέδαση γίνεται, έτσι, φανερή. Η παρουσία του δυναμικού σκέδασης έχει σαν αποτέλεσμα ν' αλλάξει το συντελεστή του εξερχόμενου σφαιρικού κύματος σε σχέση μ' εκείνον του εισερχόμενου κατά μία φάση, που δίνεται από την (11.84). Όπως βλέπουμε είναι

$$|S_l(k)| = 1 \quad (11.85)$$

Η εξίσωση αυτή είναι γνωστή σαν σχέση μοναδιακότητας για το μερικό κύμα l . Πράγματι, σε μια πιο προχωρημένη διαπραγμάτευση του θέματος της σκέδασης η



ποσότητα $S_l(k)$ είναι το l διαγώνιο στοιχείο του πίνακα σκέδασης ή (απλά) πίνακα S , που αντιστοιχεί σ' ένα μοναδιακό τελεστή σκέδασης \hat{S}

$$S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{S} | \mathbf{k} \rangle \quad (11.86)$$

Τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης S συνδέονται με τα στοιχεία (11.35) του πίνακα μετάβασης T με τη σχέση

$$S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} - i2\pi \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \quad (11.87)$$

Για το l διαγώνιο στοιχείο το μερικό πλάτος σκέδασης είναι

$$f_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = -\frac{\pi T_l(k)}{k} \quad (11.88)$$

Η μερική ενεργός διατομή σκέδασης είναι ανάλογη προς το $|S_l(k) - 1|^2$.

Μπορεί ναδειχθεί ότι η μοναδιακότητα του πίνακα σκέδασης S , η οποία βέβαια είναι απόρροια της διατήρησης της πιθανότητας (ισοδύναμα, της ερμιτιανότητας της χαμιλτονιανής), οδηγεί στο οπτικό θεώρημα, κάτι που αποτελεί την πιο γενική απόδειξη αυτού του σπουδαίου θεωρήματος. Επίσης, μπορεί ναδειχθεί ότι το ανάπτυγμα (11.74) του πλάτους σκέδασης συναρτήσει των μερικών πλατών σκέδασης προκύπτει από το αναλλοίωτο του πίνακα σκέδασης S ως προς τις περιστροφές.

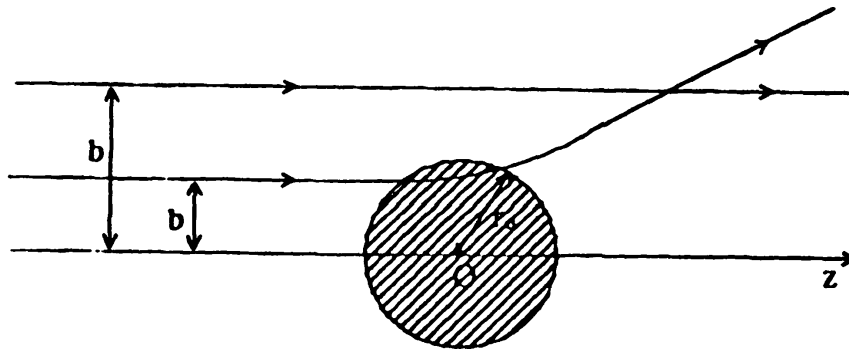
Τέλος, θα πρέπει να σημειώσουμε ότι τόσο το ανάπτυγμα (11.77) για το πλάτος σκέδασης, όσο και το αντίστοιχο (11.80) - (11.81) για την ενεργό διατομή σκέδασης, είναι χρήσιμα μόνον εφόσον οι αντίστοιχες σειρές ως προς το l συγκλίνουν κατά ένα ικανοποιητικά γρήγορο τρόπο. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα απλό ημικλασικό επιχείρημα για να δούμε τον αριθμό των μερικών κυμάτων που είναι σημαντικά. Έτσι, όπως φαίνεται από το σχήμα 11.4, αν υποθέσουμε ότι $k r_0 \gg 1$ για να ισχύει το κλασικό επιχείρημα (r_0 είναι η εμβέλεια του δυναμικού), η σκέδαση του μερικού κύματος l αναμένεται να είναι μικρή για

$$l > l_{\max} = k r_0 \quad (11.89)$$

Αντίθετα, για μικρότερες ενέργειες, όπου $k r_0 \ll 1$, το προσπίπτον μήκος κύματος γίνεται μεγάλο συγκρινόμενο με την περιοχή σκέδασης, κάθε χωρική έννοια κατεύθυνσης χάνεται και το πλάτος σκέδασης πρέπει να είναι ανεξάρτητο από τη γωνία θ . Επειδή $P_0(\cos\theta) = 1$, αυτό συνεπάγεται ότι μόνο το μερικό κύμα $l = 0$ είναι σημαντικό και έχουμε να κάνουμε με τη λεγόμενη σκέδαση s-κύματος (ισοτροπική σκέδαση). Μπορούμε να ορίσουμε, τότε, την ποσότητα που είναι γνωστή σαν μήκος σκέδασης a από τη σχέση

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k \cot \delta_0(k)} \quad (11.90)$$





Σχ. 11.4. Όσο μικρότερη είναι η παράμετρος κρούσης b σε σχέση με την εμβέλεια r_0 του δυναμικού, τόσο εντονότερα σκεδάζεται ένα κλασικό σωματίδιο. Η κλασική στροφορμή είναι $L = pb$ και για $L > pr_0$ το σωματίδιο δεν σκεδάζεται. Ημικλασικά έχουμε $l = kb$ και για $l > kr_0$ η σκέδαση είναι μικρή.

Από τις (11.76) - (11.77) παίρνουμε σ' αυτή την περίπτωση

$$f \underset{k \rightarrow 0}{=} -a \quad (11.91)$$

και

$$\sigma \underset{k \rightarrow 0}{=} \int |f|^2 d\Omega = 4\pi a^2 \quad (11.92)$$

Αυτό το αποτέλεσμα ισχύει γενικότερα για δυναμικά πεπερασμένης εμβέλειας. Αντίθετα, για την περίπτωση του δυναμικού Coulomb η σειρά των μερικών πλατών σκέδασης δεν συγκλίνει και πρέπει να χρησιμοποιηθεί άλλη μέθοδος.

11.7. Προσδιορισμός μετατόπισης φάσης και εφαρμογές: δέσμιες καταστάσεις και συντονισμοί

Ας επανέλθουμε τώρα στο σημείο της συζήτησης μετά τη σχέση (11.68) για να δούμε πώς μπορούμε να προσδιορίσουμε τη μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$. Αυτό απαιτεί να λύσουμε την ακτινική εξίσωση (11.15) στην εσωτερική περιοχή $r < r_0$ για κάποιο δυναμικό σκέδασης και να πάρουμε την ασυμπτωτική μορφή των λύσεων όπως στις (11.65) - (11.68), που ισχύουν στην εξωτερική περιοχή $r > r_0$. Η ομαλή ένωση των λύσεων στο όριο $r = r_0$ μπορεί να εκφραστεί μέσω της συνέχειας των λογαριθμικών παραγώγων εκεί:

$$\beta_l(k) = \left(\frac{r_0}{R_{kl}(r)} \frac{dR_{kl}(r)}{dr} \right) \Big|_{r=r_0} \quad (11.93\alpha)$$

με



$$\beta_l(k) \Big|_{\text{εσωτερική λύση}} = \beta_l(k) \Big|_{\text{εξωτερική λύση}} \quad (11.93\beta)$$

Το αριστερό μέλος αυτής της ισότητας υπολογίζεται από την αναλυτική ή αριθμητική λύση της ακτινικής εξίσωσης (11.15) και θα πρέπει ν' αντικατασταθεί στη σχέση που πρέπει να βρούμε ανάμεσα στο δεξιό μέλος της ισότητας και στη μετατόπιση φάσης. Δεν μένει, λοιπόν, παρά να συνδέσουμε το $\beta_l(k)$ με τη μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$ με βάση τις εκφράσεις (11.65) - (11.68) για τις λύσεις στην εξωτερική περιοχή. Πράγματι, δεν είναι δύσκολο να βρούμε ότι η σχέση ανάμεσα σε $\beta_l(k)$ και $\delta_l(k)$ είναι

$$\beta_l(k) = kr_0 \left[\frac{j_1'(kr_0) \cos \delta_l(k) - n_1'(kr) \sin \delta_l(k)}{j_1(kr_0) \cos \delta_l(k) - n_1(kr_0) \sin \delta_l(k)} \right] \quad (11.94)$$

όπου ο τόνος σημαίνει παραγωγή ως προς το kr που υπολογίζεται στο $kr = kr_0$. Αντίστροφα, γνωρίζοντας τη λογαριθμική παράγωγο $\beta_l(k)$ (από την εσωτερική λύση), μπορούμε να βρούμε τη μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$ από την έκφραση

$$\tan \delta_l(k) = \frac{kr_0 j_1'(kr_0) - \beta_l(k) j_1(kr_0)}{kr_0 n_1'(kr_0) - \beta_l(k) n_1(kr_0)} \quad (11.95)$$

Μπορούμε επίσης να πάρουμε ισοδύναμα την έκφραση

$$e^{2i\delta_l(k)} = - \frac{j_1 - in_1}{j_1 + in_1} \left(1 + kr_0 \frac{j_1 + in_1}{j_1 + in_1} \frac{j_1 - in_1}{j_1 + in_1} \right) \left(\beta_l - kr_0 \frac{j_1 - in_1}{j_1 + in_1} \right) \quad (11.96)$$

όπου όλες οι συναρτήσεις και οι παράγωγοί τους υπολογίζονται πάντα στο kr_0 .

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω σε μερικές χαρακτηριστικές περιπτώσεις.

I. Σκέδαση σε αδιαπέραστη σφαίρα

Ένα ενδιαφέρον παράδειγμα αποτελεί η σκέδαση σε αδιαπέραστη σφαίρα με δυναμικό

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (11.97)$$



Σ' αυτή την περίπτωση δεν χρειάζεται καν να υπολογίσουμε το β_l (το οποίο στην πραγματικότητα απειρίζεται). Πράγματι, από τις σχέσεις (11.65) και (11.68) και το γεγονός ότι η κυματοσυνάρτηση $R_{kl}(r)$ μηδενίζεται για $r = r_0$ παίρνουμε αμέσως ότι

$$\tan \delta_l(k) = \frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)} \quad (11.98)$$

Έτσι οι μετατοπίσεις φάσης είναι γνωστές για οποιοδήποτε l και χωρίς καμιά προσέγγιση.

Για να δούμε τη φυσική σημασία της μετατόπισης φάσης, ας θεωρήσουμε τη σκέδαση του s -κύματος ($l=0$). Τότε έχουμε

$$\tan \delta_0(k) = \frac{j_0(kr_0)}{n_0(kr_0)} = \frac{\sin(kr_0)/kr_0}{-\cos(kr_0)/kr_0} = -\tan(kr_0) \quad (11.99)$$

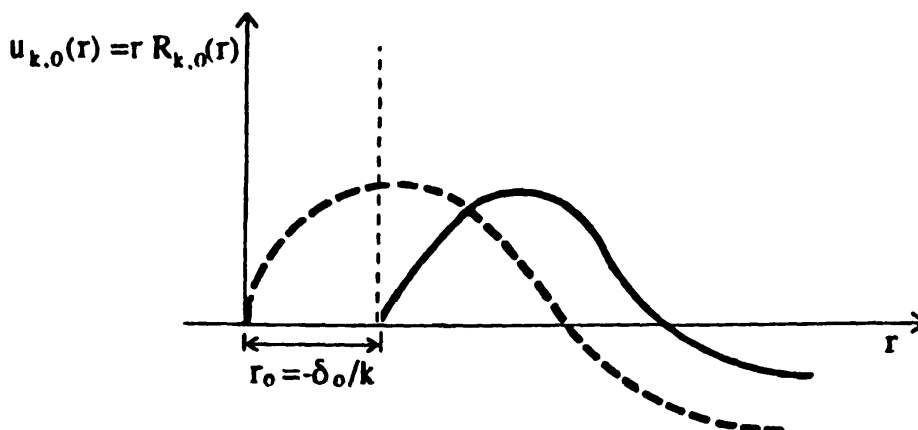
δηλαδή

$$\delta_0(k) = -kr_0 \quad (11.100)$$

Η ακτινική κυματοσυνάρτηση $R_{k,0}(r)$ γίνεται

$$\begin{aligned} R_{k,0}(r) &= A_0(k) [j_0(kr) - \tan \delta_0(k) n_0(kr)] \\ &= \frac{A_0(k)}{\cos \delta_0(k)} \left[\frac{\sin(kr)}{kr} \cos \delta_0(k) + \frac{\cos(kr)}{kr} \sin \delta_0(k) \right] \\ &= \frac{A_0(k)}{\cos \delta_0(k)} \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0(k)) \end{aligned} \quad (11.101)$$

Συνεπώς, όπως φαίνεται και στο σχήμα 11.5, η συνολική ακτινική κυματοσυνάρτηση $u_{k,0}(r) = rR_{k,0}(r)$ είναι ένα ημιτονοειδές κύμα μετατοπισμένο κατά $r_0 = -\delta_0/k$ σε σχέση με το ελεύθερο ($V=0$) ημιτονοειδές κύμα.



Σχ. 11.5. Η ακτινική κυματοσυνάρτηση $u_{k,0}(r) = r R_{k,0}(r)$ του s -κύματος ($l=0$) για το ελεύθερο κύμα (διακεκομμένη γραμμή) και για τη σκέδαση σε αδιαπέραστη σφαίρα (συνεχής γραμμή).



Ας μελετήσουμε τώρα τα όρια χαμηλών και υψηλών ενεργιών της $\tan\delta_l(k)$. Για χαμηλές ενέργειες ($kr_0 \ll 1$) με βάση τους τύπους (6.39) - (6.40) παίρνουμε ότι

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!! (2l-1)!!} \quad (11.102)$$

όπου

$$(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1) \quad (11.103)$$

Συνεπώς, η $|\tan\delta_l(k)|$ ελαττώνεται γρήγορα καθώς το l αυξάνει και είναι λογικό να πούμε ότι η σκέδαση για χαμηλές ενέργειες κυριαρχείται από το s -κύμα ($l=0$). Από την (11.100) έχουμε για τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης και για $kr_0 \ll 1$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_0(k)|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0(k)}{k^2} \approx r_0^2 \quad (11.104)$$

Η ολική ενεργός διατομή σκέδασης θα είναι τότε

$$\sigma = 4\pi r_0^2 \quad (11.105)$$

$kr_0 \ll 1$

που είναι τέσσερις φορές η κλασική τιμή πr_0^2 . Βέβαια, σκέδαση σε χαμηλές ενέργειες σημαίνει σκέδαση μεγάλου μήκους κύματος και, συνεπώς δεν περιμένουμε να βρούμε ένα κλασικά αναμενόμενο αποτέλεσμα.

Για μεγάλες ενέργειες τώρα $kr_0 \gg 1$, από την ασυμπτωτική συμπεριφορά (6.39)-(6.40) για τις συναρτήσεις $j_l(kr_0)$, $n_l(kr_0)$ και την (11.98) βρίσκουμε ότι

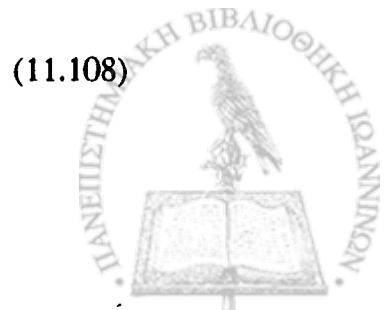
$$\delta_l(k) \approx \frac{l\pi}{2} - kr_0 \quad (11.106)$$

Έτσι, για την ολική ενεργό διατομή σκέδασης παίρνουμε από τις (11.80)-(11.81)

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) \sin^2 \left(\frac{l\pi}{2} - kr_0 \right) \quad (11.107)$$

όπου $l_{\max} = kr_0$ σύμφωνα με την (11.89). Ομαδοποιώντας κατάλληλα το άθροισμα (11.107) βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \sigma &\approx \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \left[\sin^2(kr_0) + \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} - kr_0 \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[\sin^2 \left(\frac{\pi}{2} - kr_0 \right) + \sin^2 (\pi - kr_0) \right] + \dots \right\} \\ &\approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} 1 \approx 2\pi r_0^2 \end{aligned} \quad (11.108)$$



Βλέπουμε ότι και για τις μεγάλες ενέργειες $kr_0 \gg 1$ η ολική ενεργός διατομή δεν είναι το κλασικά αναμενόμενο αποτέλεσμα πr_0^2 , αλλά δύο φορές η τιμή αυτή. Εκ πρώτης όψεως αυτό φαίνεται να είναι παράξενο, μιας και θα περιμέναμε σ' αυτό το όριο ν' αντιστοιχούσε το κλασικό αποτέλεσμα. Όμως, θα πρέπει να σημειώσουμε εδώ ότι για τη σκέδαση σε αδιαπέραστη σφαίρα το δυναμικό έχει μια απότομη ασυνέχεια στο $r = r_0$ και η σκέδαση δεν μπορεί ποτέ να μελετηθεί κλασικά. Μια λεπτομερής και πιο προχωρημένη διαπραγμάτευση του θέματος δείχνει ότι το μισό από την ολική κβαντομηχανική ενεργό διατομή σκέδασης (11.108) προέρχεται από σκέδαση "περίθλασης" (ή σκέδαση "σκιάς", όπως αλλιώς λέγεται), που προκύπτει από τη συμβολή ανάμεσα στο προσπίπτον και το εξερχόμενο κύμα και συμβαίνει μέσα σε μια στενή περιοχή στην πρόσθια κατεύθυνση (γωνιακού εύρους περίπου $1/kr_0$, βλ. και την αρχή της §11.3). Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ήδη στην κλασική κυματική φυσική.

II. Σκέδαση σε σφαιρικό φρέαρ δυναμικού

Ας δούμε τώρα το παράδειγμα της σκέδασης από ένα σφαιρικό φρέαρ δυναμικού

$$V = \begin{cases} V_0 \begin{cases} > 0 & \text{απωστικό} \\ < 0 & \text{ελκτικό} \end{cases} & r < r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (11.109)$$

Πολλά από τα χαρακτηριστικά που θα δούμε σ' αυτή την περίπτωση σκέδασης είναι κοινά με αυτά σε πιο περίπλοκες περιπτώσεις δυναμικών πεπερασμένης εμβέλειας.

Για την εσωτερική περιοχή $r < r_0$, η λύση της εξίσωσης (11.15) που είναι πεπερασμένη στην αρχή είναι (βλ. και § 6.3)

$$R_{kl}(r) = N_l(K) j_l(Kr) \quad r < r_0 \quad (11.110)$$

όπου $K^2 = k^2 - U_0$ ($U_0 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$). Για την εξωτερική περιοχή $r > r_0$ έχουμε

$$R_{kl}(r) = A_l(k) [j_l(kr) - \tan \delta_l(k) n_l(kr)] \quad (11.111)$$

Το $\beta_l(K)$ από την εσωτερική λύση (11.110) είναι

$$\beta_l(K) = \frac{Kr_0 j_l'(Kr_0)}{j_l(Kr_0)} \quad (11.112)$$

και, συνεπώς, για τη μετατόπιση φάσης παίρνουμε από την (11.95) ότι

$$\tan \delta_l(k) = \frac{k j_l'(kr_0) j_l(Kr_0) - K j_l(kr_0) j_l'(Kr_0)}{k n_l'(kr_0) j_l(Kr_0) - k n_l(kr_0) j_l'(Kr_0)} \quad (11.113)$$



α) Σκέδαση χαμηλής ενέργειας και δέσμες καταστάσεις

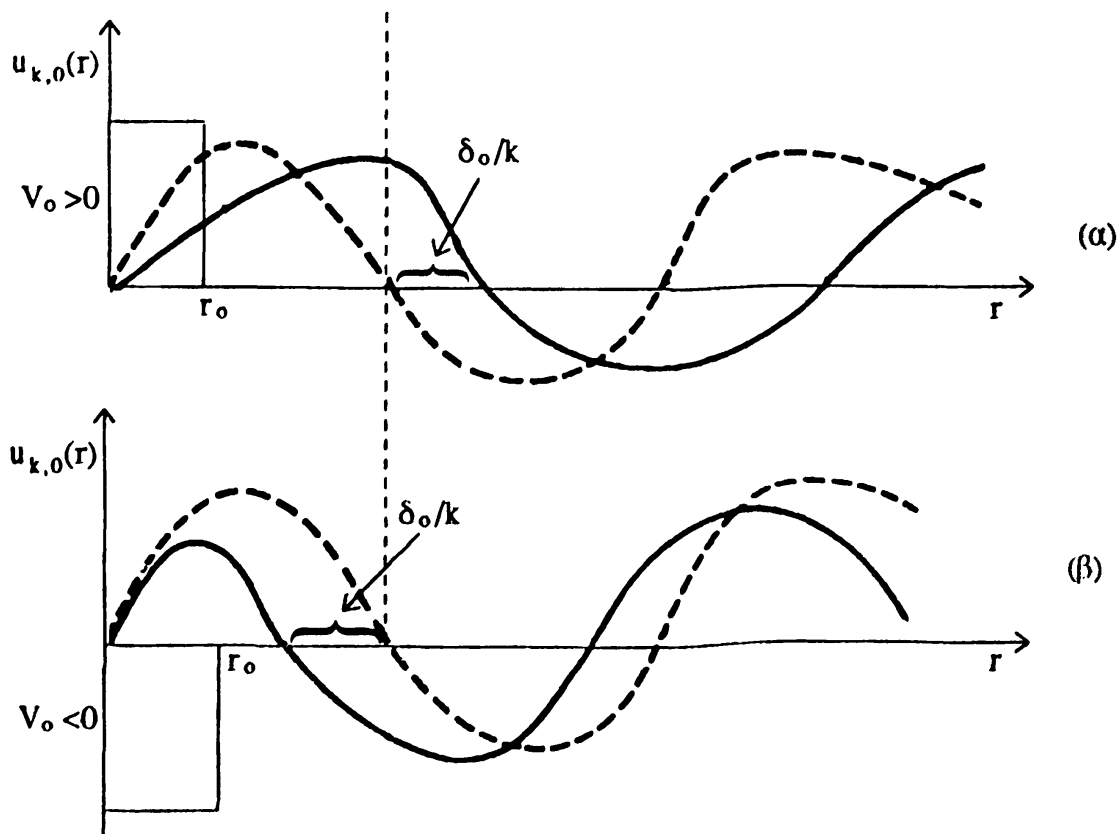
Στις χαμηλές ενέργειες $k \rightarrow 0$ (ακριβέστερα $kr_0 \ll 1$) μόνο η σκέδαση του s -κύματος ($l=0$) είναι σημαντική και από την (11.113) βρίσκουμε ότι

$$\tan \delta_0(k) = \frac{k \tan(Kr_0) - K \tan(kr_0)}{K + k \tan(kr_0) \tan(Kr_0)} \quad (11.114)$$

Συνεπώς, η αντίστοιχη μερική ενεργός διατομή σκέδασης είναι

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) = \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_0(k)} \quad (11.115)$$

Όπως και στην περίπτωση της σκέδασης σε αδιαπέραστη σφαίρα, η φυσική σημασία της μετατόπισης φάσης $\delta_0(k)$ φαίνεται αν σχεδιάσει κανείς τη συνολική ακτινική συνάρτηση $u_{k,0}(r) = r R_{k,0}(r)$ σε σύγκριση με την ελεύθερη ($V_0 = 0$) λύση: η κυματοσυνάρτηση μετατοπίζεται κατά δ_0/k προς τα δεξιά ή αριστερά, ανάλογα με το αν το δυναμικό είναι απωστικό ($V_0 > 0$, $\delta_0 < 0$) ή ελκτικό ($V_0 < 0$, $\delta_0 > 0$), όπως φαίνεται στο σχήμα 11.6 (να σημειωθεί ότι αν $V_0 > E$, όπως μπορεί να συμβεί στην περίπτωση ενός απωστικού δυναμικού, οι συνηθισμένες τριγωνομετρικές κυματοσυναρτήσεις πρέπει ν' αντικατασταθούν με τις αντίστοιχες υπερβολικές).



Σχ. 11.6. Η κυματοσυνάρτηση $u_{k,0}(r)$ του s -κύματος ($l=0$) για ελεύθερο κύμα (διακεκομμένη γραμμή) και για (α) απωστικό δυναμικό $V_0 > 0$, $\delta_0 < 0$ (β) ελκτικό δυναμικό $V_0 < 0$, $\delta_0 > 0$ (συνεχής γραμμή).



Κοντά στο $k = 0$, φαίνεται εύκολα από την (11.114) ότι το $k \cot \delta_0(k)$ μπορεί ν' αναπτυχθεί με τη μορφή

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_{\text{εν}} k^2 + \dots \quad (11.116)$$

όπου a είναι το μήκος σκέδασης, όπως ορίστηκε στην (11.90), και η σταθερά $r_{\text{εν}}$ είναι γνωστή σαν ενεργός εμβέλεια. Τόσο το a , όσο και η $r_{\text{εν}}$, μπορούν να υπολογιστούν συναρτήσει του U_0 και της εμβέλειας r_0 . Πράγματι, για το μήκος σκέδασης a , που μας ενδιαφέρει εδώ περισσότερο, βρίσκουμε ότι για ένα ελκτικό δυναμικό είναι (πάντα $k = 0$)

$$a = \left(1 - \frac{\tan \gamma}{\gamma} \right) r_0, \quad \gamma = |U_0|^{1/2} r_0 \quad (11.117)$$

Για ένα απωστικό δυναμικό θα πρέπει το \tan ν' αντικατασταθεί με \tanh . Έτσι, το μήκος σκέδασης a διαφέρει από την εμβέλεια r_0 και μάλιστα στην περίπτωση του ελκτικού δυναμικού μπορεί να είναι μεγαλύτερο από το r_0 κατά πολλές τάξεις μεγέθους.

Για να δούμε τη φυσική σημασία του a αρκεί να σημειώσουμε ότι για τις χαμηλές ενέργειες που θεωρούμε ($k \approx 0$) και για $r > r_0$, $l = 0$, η εξωτερική ακτινική κυματοσυνάρτηση ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} = 0 \quad (11.118)$$

και, συνεπώς, μπορούμε να γράψουμε την προφανή λύση της ευθείας γραμμής

$$u(r) = \text{σταθ.} (r - a) \quad (11.119)$$

Ότι το a που υπεισέρχεται στη λύση $u(r)$ είναι το μήκος σκέδασης φαίνεται αν πάρουμε τη λογαριθμική παράγωγο

$$\frac{u'}{u} = \frac{1}{r - a} \quad (11.120)$$

και την εξισώσουμε μ' εκείνη από τη λύση (11.67):

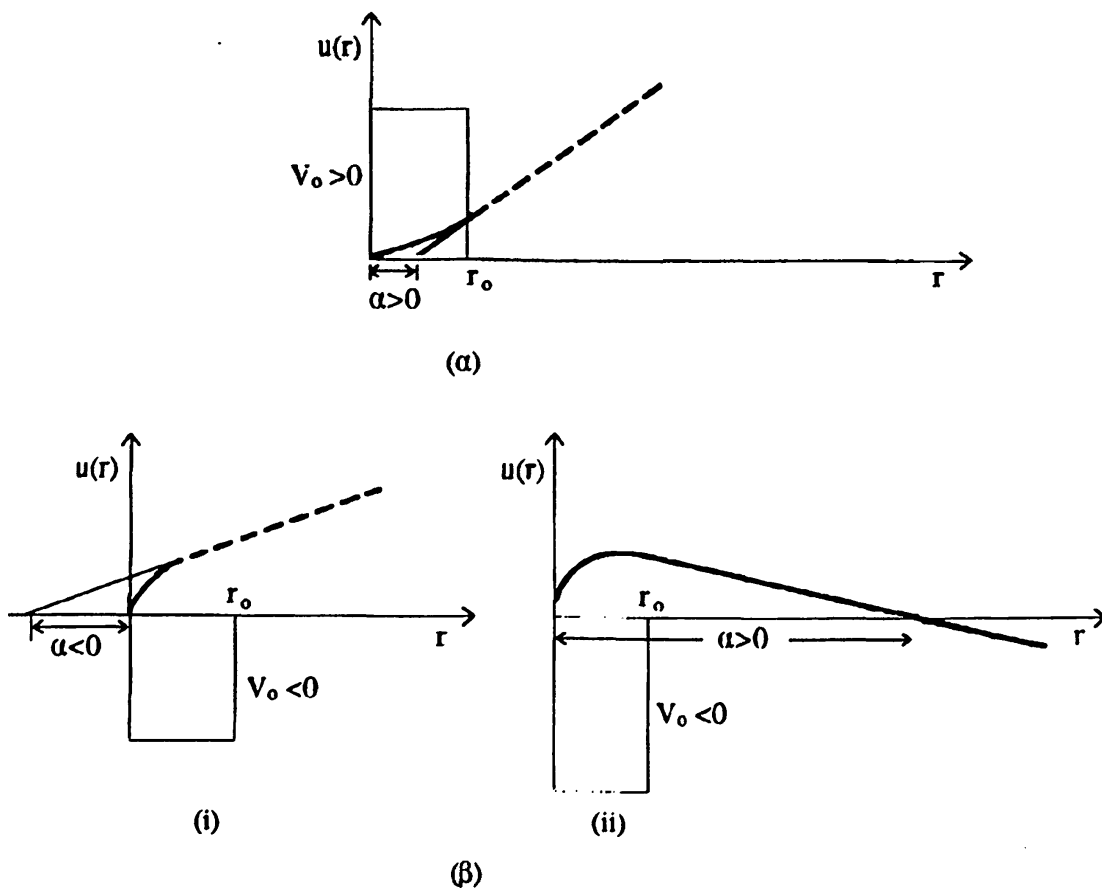
$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot (kr + \delta_0) = \frac{1}{r - a} \quad (11.121)$$

Θέτοντας $r = 0$ (έστω και αν για $r = 0$ η (11.119) δεν είναι η πραγματική κυματοσυνάρτηση) βλέπουμε ότι

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} \quad (11.122)$$



που είναι πράγματι ο ορισμός (11.90) για το μήκος σκέδασης. Η φυσική σημασία του a γίνεται πλέον φανερή: από την (11.119) βλέπουμε ότι το a παριστάνει τη συντεταγμένη ως προς την αρχή του σημείου τομής της εξωτερικής κυματοσυνάρτησης με τον άξονα r . Για ένα απωστικό δυναμικό το μήκος σκέδασης είναι θετικό $a > 0$ και περίπου της τάξης του r_0 . Αντίθετα, για ένα ελκτικό δυναμικό με $\gamma \ll 1$ το a είναι πεπερασμένο και αρνητικό, αλλά όσο αυξάνεται το γ , δηλαδή η έλξη από το ελκτικό δυναμικό, το a μπορεί ν' αλλάξει πρόσημο και να γίνει θετικό και πολύ μεγάλο, όπως προκύπτει από την (11.117). Όλα αυτά φαίνονται παραστατικά στο σχήμα 11.7.



Σχ. 11.7. Η γραφική παράσταση της $u(r)$ για (α) απωστικό και (β) ελκτικό δυναμικό.

Η αλλαγή πρόσημου του a , καθώς η ένταση του ελκτικού δυναμικού αυξάνεται, σχετίζεται με την εμφάνιση μιας δέσμιας κατάστασης. Πράγματι, όταν γίνει $\gamma = \frac{\pi}{2}$, το a απειρίζεται, όπως και το σ_0 , που δίνεται από τη σχέση

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = 4\pi a^2$$

(11.123)



Σ' αυτή την περίπτωση μιλάμε για ένα "συντονισμό μηδενικής ενέργειας" και αυτή η συνθήκη αντιστοιχεί σε μια δέσμια κατάσταση s-κύματος με ενέργεια σύνδεσης απειροστά μικρή. Αν το γ αυξηθεί ακόμη περισσότερο, το a γίνεται πάλι πεπερασμένο (και θετικό) μέχρι το $\gamma = \frac{3\pi}{2}$. Σ' αυτό το σημείο έχουμε πάλι δέσμια κατάσταση (s-κύματος) και η ενεργός διατομή σκέδασης αντιστοιχεί εκ νέου σ' ένα "συντονισμό μηδενικής ενέργειας". Το ίδιο συμβαίνει κάθε φορά που το γ είναι περιττό πολλαπλάσιο του $\frac{\pi}{2}$.

Η ενέργεια σύνδεσης μιας τέτοιας δέσμιας κατάστασης μπορεί να εκτιμηθεί ποσοτικά αν, για a πολύ μεγάλο και θετικό, γράψουμε για την ουσιαστικά επίπεδη κυματοσυνάρτηση (11.119) την ισοδύναμη έκφραση $e^{-\lambda r}$, όπου λ πολύ μικρό. Εξισώνοντας τις λογαριθμικές παραγώγους στο $r = r_0$ παίρνουμε

$$-\frac{\lambda e^{-\lambda r}}{e^{-\lambda r}} \Big|_{r=r_0} = \left(\frac{1}{r-a} \right) \Big|_{r=r_0} \quad (11.124)$$

και για $a \gg r_0$

$$\lambda \approx \frac{1}{a} \quad (11.125)$$

Η ενέργεια σύνδεσης της δέσμιας κατάστασης είναι τότε

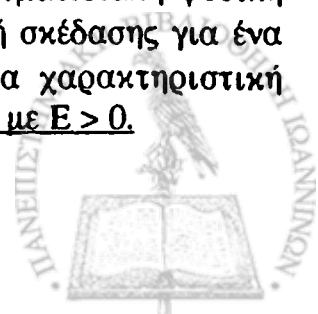
$$E_{\text{συνδ}} = -E_{\text{δέσμιας κατάστασης}} = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (11.126)$$

Η σχέση αυτή ανάμεσα στην ενέργεια δέσμιας κατάστασης και το μήκος σκέδασης είναι ένα αξιοσημείωτο αποτέλεσμα. Μια εφαρμογή αυτής της σχέσης στο σύστημα του δευτερίου (δέσμια κατάσταση πρωτονίου-νετρονίου) περιγράφει το πρόβλημα 11.6.

Αξίζει, επίσης, να σημειώσουμε ότι σε μια άλλη δυνατή διαπραγμάτευση του θέματος που συζητάμε, μια δέσμια κατάσταση εμφανίζεται σαν πόλος της $S_0(k)$ στο μιγαδικό επίπεδο k στο σημείο $k = +i\lambda$ (βλ. πρόβλημα 11.8).

β) Συντονισμοί με $E > 0$

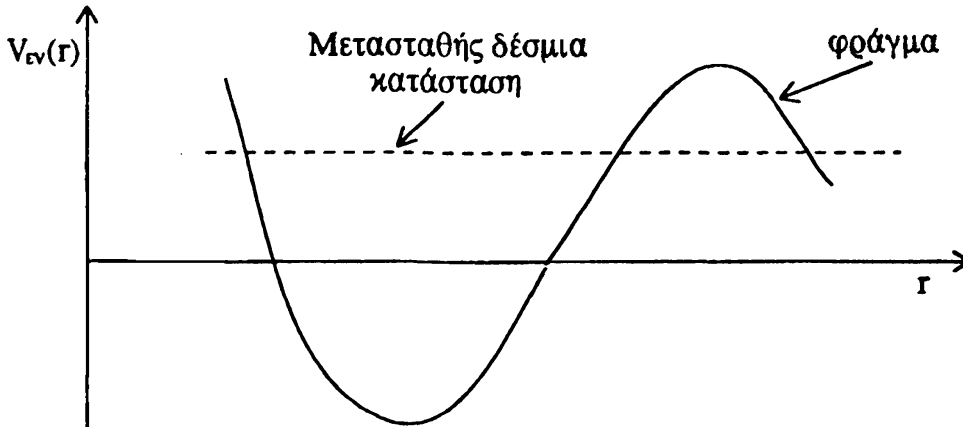
Στα κβαντικά συστήματα σε ατομική, πυρηνική και σωματιδιακή φυσική είναι σύνηθες να έχουμε περιπτώσεις όπου η ενεργός διατομή σκέδασης για ένα μερικό κύμα εμφανίζει, σαν συνάρτηση της ενέργειας, μια χαρακτηριστική κορυφή για ορισμένη τιμή της E . Τότε μιλάμε για συντονισμό με $E > 0$.



Ας θυμηθούμε ότι για ένα ελκτικό δυναμικό $V(r)$ πεπερασμένης εμβέλειας το ενεργό δυναμικό $V_{\text{εν}}(r)$ (6.25) για τη σκέδαση του l μερικού κύματος είναι

$$V_{\text{εν}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (11.127)$$

και φαίνεται παραστατικά στο σχήμα 11.8.



Σχ. 11.8. Το ενεργό δυναμικό $V_{\text{εν}}(r)$ που περιλαμβάνει τον απωστικό φυγόκεντρο όρο $V(l(l+1)\hbar^2/2mr^2)$

Αν το φράγμα είναι άπειρα υψηλό, τότε είναι δυνατόν ένα σωματίδιο να παγιδευτεί μέσα στο ελκτικό δυναμικό και τότε θα μιλάμε για μια γνήσια δέσμια κατάσταση με $E > 0$, που θα είναι ιδιοκατάσταση της χαμιλτονιανής με ορισμένη τιμή ενέργειας και άπειρο χρόνο ζωής.

Σε μια πιο ρεαλιστική περίπτωση, όμως, το φράγμα είναι πεπερασμένο και το σωματίδιο μπορεί μεν να παγιδευτεί μέσα στο ελκτικό δυναμικό, αλλά για πεπερασμένο χρονικό διάστημα, μια και λόγω του κβαντομηχανικού φαινομένου σήραγγας μπορεί να διαφύγει μέσα από το φράγμα. Μια τέτοια κατάσταση είναι γνωστή σαν μετασταθής δέσμια κατάσταση και έχει πεπερασμένο χρόνο ζωής. Ένας συντονισμός μπορεί να θεωρηθεί σαν μια μετασταθής κατάσταση, της οποίας ο χρόνος ζωής τ είναι πολύ μεγαλύτερος από ένα τυπικό χρόνο που διαρκεί η σκέδαση $\left(\sim \frac{\Gamma_0}{v} \right)$.

Η μερική ενεργός διατομή σκέδασης είναι

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_l(k)} \quad (11.128)$$



Η μέγιστη τιμή $4\pi(2l+1)/k^2$ συμβαίνει όταν η $\cot \delta_l(k)$ μηδενίζεται. Αυτό συμβαίνει όταν η αντίστοιχη μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$ αυξάνεται και περνά από την τιμή $N(\pi, 2)$ (ή $\frac{3\pi}{2}, \dots$), καθώς η ενέργεια πρόσπτωσης αυξάνεται και περνά από την τιμή της ενέργειας μιας μετασταθούς δέσμιας κατάστασης:

$$E_{\text{πρόσπτωσης}} \approx E_{\text{μετασταθούς δέσμιας κατάστασης}}$$

Κοντά στο συντονισμό, δεχόμενοι ότι η $\cot \delta_l(k)$ μεταβάλλεται ομαλά εκεί, όταν δηλαδή $E \approx E_R$, μπορούμε ν' αναπτύξουμε την $\cot \delta_l(k)$ σαν

$$\cot \delta_l(k) = \cot \delta_l(k) \Big|_{E=E_R} + c(E - E_R) + \dots = c(E - E_R) + \dots \quad (11.129)$$

Από την (11.76) έχουμε ότι

$$\begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{k \cot \delta_l(k) - ik} = \frac{1}{k} \left[\frac{1}{c(E - E_R) - i} \right] \\ &= - \frac{\Gamma/2}{k \left[(E - E_R) + \frac{i\Gamma}{2} \right]} \end{aligned} \quad (11.130)$$

όπου έχουμε ορίσει το εύρος συντονισμού Γ από τη σχέση

$$\frac{d(\cot \delta_l)}{dE} \Big|_{E=E_R} = c = - \frac{2}{\Gamma} \quad (11.131)$$

Να σημειωθεί ότι, όσο γρηγορότερα μεταβάλλεται με την ενέργεια η $\cot \delta_l(k)$, τόσο το εύρος συντονισμού Γ είναι μικρότερο. Αν ένας απλός συντονισμός κυριαρχεί στη μερική ενεργό διατομή σκέδασης, τότε έχουμε τον τύπο συντονισμού

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (11.132)$$

Ο τύπος αυτός είναι ο γνωστός μας τύπος συντονισμού Breit-Wigner (βλ. § 10.6).

Στην ενέργεια συντονισμού $E \approx E_R$, το πλάτος της κυματοσυνάρτησης μέσα στο φρέαρ δυναμικού είναι πολύ μεγάλο και η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο μέσα στο φρέαρ είναι επίσης μεγάλη. Ο χρόνος ζωής τ της αντίστοιχης μετασταθούς κατάστασης μπορεί να συσχετιστεί με το εύρος συντονισμού Γ με τη σχέση αβεβαιότητας. Για $\Delta t \approx \tau$ και $\Delta E \approx \Gamma$ έχουμε

$$\tau \approx \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (11.133)$$

(βλ. και § 10.6).

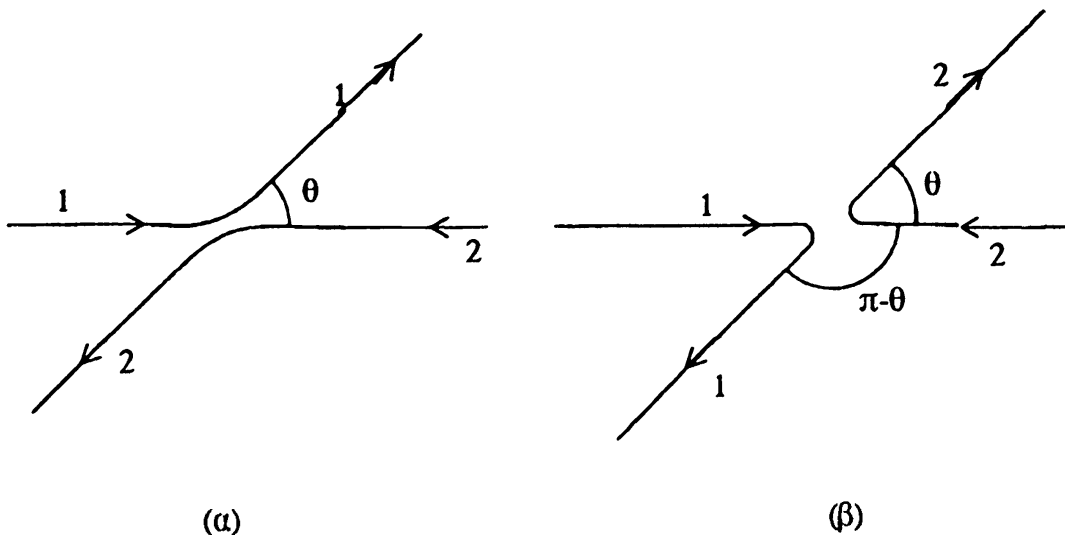


11.8. Όμοια σωματίδια και σκέδαση

Η σκέδαση ανάμεσα σε όμοια σωματίδια είναι ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον παράδειγμα που σκιαγραφεί τόσο τη (σχετική) φάση των πλατών σκέδασης, όσο και τη θεμελιώδη διαφορά κλασικής και κβαντικής μηχανικής.

I. Σκέδαση δύο όμοιων μποζονίων χωρίς σπιν

Ας θεωρήσουμε πρώτα τη σκέδαση δύο όμοιων μποζονίων με σπιν μηδέν και μάζα m . Στο σύστημα κέντρου μάζας η σκέδαση φαίνεται στο σχήμα 11.9.



Σχ. 11.9. Η σκέδαση δύο όμοιων σωματιδίων στο σύστημα κέντρου μάζας.

Γίνεται φανερό ότι, αφού τα δύο σωματίδια είναι όμοια, δεν είναι δυνατόν ν' αποφανθούμε αν το σωματίδιο 1 είναι αυτό που σκεδάστηκε στην κατεύθυνση (θ, φ) (σχ. 11.9 (α)) ή αν το σωματίδιο 2 είναι αυτό που σκεδάστηκε σ' αυτή την κατεύθυνση, οπότε το σωματίδιο 1 θα σκεδάστηκε στην αντίθετη κατεύθυνση $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ (σχ. 11.9 (β)).

Για δύο όμοια μποζόνια χωρίς σπιν η χωρική κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να είναι συμμετρική ως προς την εναλλαγή των χωρικών συντεταγμένων των δύο σωματιδίων. Συνεπώς, η ασυμπτωτική κυματοσυνάρτηση θα πρέπει εδώ να έχει τη μορφή (βλ. (11.17))

$$\Psi_{\Sigma}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + [f(\theta, \varphi) + f(\pi - \theta, \varphi + \pi)] \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \quad (11.134)$$



όπου $r = r_1 - r_2$ η σχετική απόσταση των δύο σωματιδίων. Η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης θα είναι τότε

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta, \varphi) + f(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2 \\ &= |f(\theta, \varphi)|^2 + |f(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2 + 2\text{Re} [f(\theta, \varphi) f^*(\pi - \theta, \varphi + \pi)] \end{aligned} \quad (11.135)$$

Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι ο τύπος αυτός διαφέρει από το κλασικό αποτέλεσμα, που θα ήταν απλά το άθροισμα των δύο πρώτων όρων, με την παρουσία του τρίτου όρου που προκύπτει από τη συμβολή ανάμεσα στα πλάτη σκέδασης $f(\theta, \varphi)$ και $f(\pi - \theta, \varphi + \pi)$.

Για σκέδαση σε κεντρικό δυναμικό, το πλάτος σκέδασης θα είναι ανεξάρτητο από την αζιμουθιακή γωνία φ και θα γράφουμε απλά

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re} [f(\theta) f^*(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (11.136)$$

Έτσι, η σκέδαση θα είναι συμμετρική γύρω από τη γωνία $\theta = \pi/2$, στην οποία θα έχουμε προσθετική συμβολή:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) = 4 \left| f \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) \right|^2 \quad (11.137)$$

Το αποτέλεσμα αυτό είναι τέσσερις φορές μεγαλύτερο από εκείνο που θα είχαμε αν τα σωματίδια ήταν διακρίσιμα και δύο φορές μεγαλύτερο από το κλασικό αποτέλεσμα $2|f(\theta = \pi/2)|^2$. Επίσης, αν θυμηθούμε ότι $P_1[\cos(\pi - \theta)] = (-1)^l P_l(\cos\theta)$, βλέπουμε ότι το ανάπτυγμα σε μερικά κύματα θα περιέχει μόνο άρτιες τιμές της στροφορμής l .

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω στην ενδιαφέρουσα περίπτωση της σκέδασης Coulomb, όπου τα δύο σωματίδια θα είναι επιπλέον φορτισμένα με φορτία q_1, q_2 (π.χ. σκέδαση δύο άλφα σωματιδίων ή δύο πυρήνων ^{12}C). Με βάση το πλάτος σκέδασης (11.61) θα έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_c}{d\Omega} &= \left(\frac{\gamma}{2k} \right)^2 \left| \frac{e^{2i\gamma \ln \sin(\theta/2)}}{\sin^2(\theta/2)} + \frac{e^{2i\gamma \ln \cos(\theta/2)}}{\cos^2(\theta/2)} \right|^2 \\ &= \left(\frac{\gamma}{2k} \right)^2 \left\{ \text{cosec}^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \sec^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2\text{cosec}^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sec^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos \left[2\gamma \ln \tan \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (11.138)$$



Το αποτέλεσμα αυτό είναι γνωστό σαν τύπος Mott για τη σκέδαση δύο όμοιων φορτισμένων μποζονίων με σπιν μηδέν. Εμφανίζει όλα τα χαρακτηριστικά που είπαμε παραπάνω, ενώ ο τύπος του Rutherford (11.59) αντιστοιχεί στον πρώτο όρο της (11.138) και θα ίσχυε για δύο διακρίσιμα σωματίδια.

II. Σκέδαση δύο όμοιων φερμιονίων με σπιν 1/2

Η σκέδαση ανάμεσα σε όμοια φερμιόνια είναι πιο δύσκολο ν' αναλυθεί λόγω του σπιν. Για απλότητα ας θεωρήσουμε την περίπτωση δύο όμοιων φερμιονίων με σπιν 1/2 που αλληλεπιδρούν μέσω κεντρικών δυνάμεων.

Η συνολική κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι αντισυμμετρική ως προς την εναλλαγή των δύο σωματιδίων (βλ. (8.14)). Έτσι, αν $s = s_1 - s_2 = 0$, η χωρική κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να είναι συμμετρική (βλ. (8.15)) και, συνεπώς, για το πλάτος σκέδασης θα γράψουμε

$$f_{s=0}(\theta) = f_{s=0}(\theta) + f_{s=0}(\pi - \theta) \quad (11.139)$$

Αντίθετα, αν $s = s_1 + s_2 = 1$, η χωρική κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να είναι αντισυμμετρική (βλ. (8.17)) και, συνεπώς, για το πλάτος σκέδασης θα έχουμε

$$f_{s=1}(\theta) = f_{s=1}(\theta) - f_{s=1}(\pi - \theta) \quad (11.140)$$

Αν θεωρήσουμε σκέδαση μη πολωμένων σωματιδίων (δηλαδή σωματιδίων που τα σπιν τους έχουν τυχαίο προσανατολισμό πριν τη σκέδαση), η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης θα είναι

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{4} \frac{d\sigma_{s=0}}{d\Omega} + \frac{3}{4} \frac{d\sigma_{s=1}}{d\Omega} \\ &= \frac{1}{4} |f_{s=0}(\theta) + f_{s=0}(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4} |f_{s=1}(\theta) - f_{s=1}(\pi - \theta)|^2 \end{aligned} \quad (11.141)$$

Για την ειδική περίπτωση ενός δυναμικού αλληλεπίδρασης ανεξάρτητου από το σπιν, θα είναι

$$f_{s=0}(\theta) = f_{s=1}(\theta) = f(\theta) \quad (11.142)$$

και, συνεπώς,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re} [f(\theta) f^*(\pi - \theta)] \quad (11.143)$$

Αξίζει να σημειώσουμε ότι στην περίπτωση των φερμιονίων προκύπτει αφαιρετική συμβολή για $\theta = \pi/2$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) = \left| f \left(\theta = \frac{\pi}{2} \right) \right|^2 \quad (11.144)$$



και το αποτέλεσμα αυτό είναι το μισό του κλασικού αποτελέσματος, που αποτελείται από τους δύο πρώτους όρους της έκφρασης (11.143).

Σαν εφαρμογή, ας θεωρήσουμε τη σκέδαση Coulomb δύο όμοιων φορτισμένων φερμιονίων με σπιν 1/2 (π.χ. σκέδαση $e^- - e^-$ ή σκέδαση $p - p$ χαμηλής ενέργειας). Θα έχουμε, τότε, τον τύπο Mott γι' αυτή τη σκέδαση

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \left(\frac{\gamma}{2k}\right)^2 \left\{ \operatorname{cosec}^4\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sec^4\left(\frac{\theta}{2}\right) - \operatorname{cosec}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sec^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left[2\gamma \ln \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)\right] \right\} \quad (11.145)$$

Ο τύπος Mott, τόσο για την περίπτωση μποζονίων (11.138), όσο και για την περίπτωση φερμιονίων (11.145), έχει ελεγχθεί πειραματικά.

Προβλήματα

11.1. Ας θεωρήσουμε τη σκέδαση ανάμεσα σε δύο άτομα A_1 και A_2 κατά την οποία τα άτομα τύπου A_1 μεταβαίνουν σε μια διεγερμένη κατάσταση A_1^* :

$$A_1 + A_2 \rightarrow A_1^* + A_2$$

Αν είναι E_δ η ενέργεια διέγερσης που μεταφέρεται στο A_1 κατά τη σκέδαση, να δειχθεί ότι η σχέση ανάμεσα στη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης στα συστήματα εργαστηρίου (E) και κέντρου μάζας (KM) είναι

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_E = \frac{(1 + 2z \cos\theta_{KM} + z^2)^{3/2}}{|1 + z \cos\theta_{KM}|} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KM}$$

όπου

$$z = \frac{m_1}{m_2} \left(\frac{T_\alpha}{T_\alpha + E_\delta}\right)^{1/2}$$

με T_α την αρχική κινητική ενέργεια στο κέντρο μάζας.

11.2. Να δειχθεί ότι για ένα δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας, για το οποίο $rV(r) \rightarrow 0$ όταν $r \rightarrow \infty$, η κυματοσυνάρτηση σε μια διαδικασία σκέδασης έχει την ασυμπτωτική μορφή (11.17).

11.3. Θεωρούμε ένα δυναμικό της μορφής $V(r) = V_0/r^2$.



i) Να βρεθεί η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης στην προσέγγιση Born. Ναδειχθεί ότι, σε αντίθεση με τη σκέδαση Coulomb, από το αποτέλεσμα δεν μπορεί ν' απομακρυνθεί το \hbar , έτσι το αποτέλεσμα αυτό δεν μπορεί να είναι το ίδιο με το αντίστοιχο κλασικό.

ii) Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των μερικών πλατών σκέδασης, να υπολογιστεί για ένα απωστικό δυναμικό $V_0 > 0$ η μετατόπιση φάσης $\delta_l(k)$ και ναδειχθεί ότι για μεγάλα l είναι

$$\delta_l = - \frac{2\pi m V_0}{\hbar^2 2(2l + 1)}$$

Να συζητηθεί η γωνιακή κατανομή και η ενεργός διατομή σκέδασης στην πρόσθια κατεύθυνση ($\theta = 0$).

Να συζητηθεί, επίσης, το ίδιο θέμα για ένα ελκτικό δυναμικό $V_0 < 0$ και ναδειχθεί ότι η ακτινική εξίσωση (11.15) έχει φυσικά αποδεκτές λύσεις αν $2mV_0/\hbar^2 > -1/4$.

11.4. Θεωρούμε το δυναμικό σφαιρικού φρέατος (11.109). Ναδειχθεί ότι για $kr_0 \ll 1$ και $|V_0| \ll E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ είναι

$$\tan \delta_l(k) = - \frac{2m V_0 r_0^2}{\hbar^2 (2l + 3)} \left[\frac{2^l l!}{(2l + 1)!} \right]^2 (k r_0)^{2l+1}$$

και, συνεπώς, για $l = 0$

$$\sigma_0 = \frac{16\pi m^2 V_0^2 r_0^6}{9\hbar^4}$$

Για ελαφρώς μεγαλύτερη ενέργεια, κρατώντας και τη συνεισφορά του $l = 1$ μερικού κύματος, ναδειχθεί ότι μπορεί να γραφεί

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B \cos\theta$$

και να υπολογιστούν τα A και B συναρτήσει των δ_0, δ_1 .

11.5. Γράφοντας τη διαφορική ενεργό διατομή για τη σκέδαση δύο σωματιδίων με τη μορφή

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B P_1(\cos\theta) + C P_2(\cos\theta) + \dots$$

να εκφραστούν τα A, B και C συναρτήσει των μετατοπίσεων φάσης δ_l .



11.6. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης ενός πρωτονίου και ενός νετρονίου εξαρτάται από το σπιν, αλλά σε καλή προσέγγιση μπορεί να θεωρηθεί συνάρτηση μόνο του ολικού σπιν ($s = 1$ ή 0) και της απόστασης ανάμεσα στα δύο σωματίδια.

i) Η ακτινική κυματοσυνάρτηση του s -κύματος ($l = 0$) $u(r)|_{s=1}$ για την $s = 1$ δέσμια κατάσταση (δευτερίου) και για χαμηλή ενέργεια $k \rightarrow 0$ φαίνεται στο σχήμα 11.7 (β(ii)). Αν δεχτούμε ότι το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι αυτό του σφαιρικού φρέατος (11.109) με $V_0 = -38.5$ MeV και $r_0 = 1.93 \times 10^{-15}$ m, να βρεθεί το μήκος σκέδασης $a_{s=1}$ και η ενεργός διατομή σκέδασης $\sigma_{s=1}$. Επίσης, να βρεθεί η ενέργεια σύνδεσης της δέσμιας κατάστασης και να συγκριθεί με την πειραματική τιμή της ενέργειας σύνδεσης του δευτερίου $E_d = 2.22$ MeV.

ii) Η ακτινική συνάρτηση του s -κύματος ($l = 0$) $u(r)|_{s=0}$ για την $s = 0$ κατάσταση και για χαμηλή ενέργεια $k \rightarrow 0$ φαίνεται στο σχήμα 11.7 (β(i)). Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η αλληλεπίδραση του συστήματος σ' αυτή την περίπτωση είναι ασθενέστερη από εκείνη στην προηγούμενη περίπτωση με $s = 1$, η οποία γι' αυτό είναι αυτή που αντιστοιχεί στη δέσμια κατάσταση του δευτερίου. Αν δεχτούμε ότι και σ' αυτή την περίπτωση το δυναμικό είναι της μορφής (11.109) με $V_0 = -14.3$ MeV και $r_0 = 2.5 \times 10^{-15}$ m, να βρεθεί πάλι το μήκος σκέδασης $a_{s=0}$ και η ενεργός διατομή σκέδασης $\sigma_{s=0}$.

11.7. Να δειχθεί ότι για ένα ελκτικό δυναμικό (11.109) υπάρχουν τιμές των V_0, r_0 για τις οποίες στις χαμηλές ενέργειες η ενεργός διατομή σκέδασης σ_0 είναι μηδέν. Αυτό σημαίνει ότι τα προσπίπτοντα σωματίδια διαπερνούν το δυναμικό χωρίς να σκεδαστούν σημαντικά.

Το σχετικό φαινόμενο είναι γνωστό σαν φαινόμενο Ramsauer - Townsend και έχει παρατηρηθεί πειραματικά σε σκέδαση ηλεκτρονίων πάνω σε σπάνια αέρια, όπως αργόν, ήλιον, κρυπτόν και ξένον.

11.8. Συγκρίνοντας την ακτινική κυματοσυνάρτηση (11.83) για $l = 0$, που είναι ανάλογη του

$$S_{l=0}(k) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}$$

με την κυματοσυνάρτηση μιας δέσμιας κατάστασης σε σφαιρικό φρέαο δυναμικού για μεγάλες αποστάσεις, που είναι ανάλογη του

$$\frac{e^{-\lambda r}}{r}$$



(βλ. § 6.3), να δειχθεί ότι η ύπαρξη μιας δέσμιας κατάστασης σημαίνει ότι η $S_{l=0}(k)$, σαν συνάρτηση της μιγαδικής μεταβλητής k , αναπτύσσει έναν πόλο στο σημείο $k = i\lambda$ (ο πόλος μπορεί να δειχθεί ότι είναι απλός). Επιπλέον, να δειχθεί ότι $S_{l=0}(k) = e^{2i\delta_0(k)} \rightarrow 1$ όταν $k \rightarrow 0$.

Για την απλή εκλογή $S_{l=0}(k) = \frac{-k - i\lambda}{k - i\lambda}$, να επαληθευθεί η σχέση (11.125) ανάμεσα στη δέσμια κατάσταση και το μήκος σκέδασης.

11.9. Στην (πρώτη) προσέγγιση Born να βρεθεί το πλάτος σκέδασης, η διαφορική και η ολική ενεργός διατομή σκέδασης για τα παρακάτω δυναμικά:

α) Εκθετικό $V(r) = V_0 e^{-ar}$

β) Γκαουσιανό $V(r) = V_0 e^{-a^2 r^2}$

γ) "Πολωτικό" $V(r) = V_0/(r^2 + d^2)^{1/2}$

Να επαληθευθεί η σχέση (11.50) σε καθεμιά περίπτωση και να βρεθεί ο συντελεστής A .

11.10. Θεωρούμε τη σκέδαση από ένα απωστικό δυναμικό δ-συνάρτησης

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \gamma \delta(r - r_0), \quad \gamma > 0$$

α) Να βρεθεί η $\tan \delta_0(k)$ για τη μετατόπιση φάσης $\delta_0(k)$ του s -κύματος.

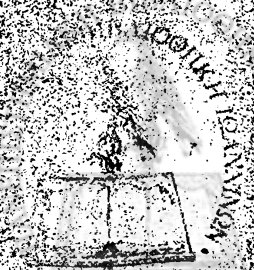
β) Για $\gamma \gg \frac{1}{R}$, k , να βρεθούν προσεγγιστικές εκφράσεις για την ενέργεια συντονισμού E_R και το εύρος συντονισμού Γ από τη μελέτη της $\cot \delta_0(k)$.

11.11. i) Να μελετηθεί ο τύπος Mott για τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης δύο άλφα σωματιδίων που σκεδάζονται ελαστικά στο σύστημα κέντρου μάζας με ενέργεια 1 MeV.

ii) Να γίνει το ίδιο για την ελαστική σκέδαση πρωτονίου-πρωτονίου ενέργειας 25 keV.



[The text in this section is extremely faint and illegible due to heavy noise and low contrast. It appears to be several paragraphs of a document.]



ΚΕΦΑΛΑΙΟ XII

ΑΤΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

Σ' αυτό το κεφάλαιο θα γνωρίσουμε ορισμένα βασικά στοιχεία γύρω από τα ελαφρύτερα άτομα και μόρια. Χρήσιμη αποδεικνύεται εδώ η προσεγγιστική μέθοδος των μεταβολών που είδαμε στο κεφάλαιο IX (βλ. §9.7).

12.1. Άτομα δύο ηλεκτρονίων - Άτομο ηλίου

Μετά την απλούστερη περίπτωση ενός ατόμου (ή ιόντος) μ' ένα ηλεκτρόνιο που γνωρίσαμε ήδη (άτομο υδρογόνου και λοιπά υδρογονοειδή ιόντα), ας έρθουμε στα συστήματα που αποτελούνται από ένα πυρήνα μάζας $M_{\text{πυρ}}$ και φορτίου Ze και δύο ηλεκτρόνια μάζας m_e και φορτίου $-e$. Έτσι, στο άτομο του ηλίου έχουμε $Z = 2$ και για $Z > 2$ έχουμε τα ηλιοειδή ιόντα ($Z = 3$ για το ιόν Li^+ , $Z = 4$ για το ιόν Be^{++} κ.λ.π.).

Όπως είδαμε στην παράγραφο § 8.1, η ολική κυματοσυνάρτηση για τα δύο ηλεκτρόνια θα είναι η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση (8.14) :

$$\psi_A(q_1, q_2) = \phi(r_1, r_2) \chi(1, 2) \quad (12.1)$$

με το συνδυασμό είτε της συμμετρικής κυματοσυνάρτησης θέσης $\phi_S(r_1, r_2)$ (8.15) με την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν $\chi_A(1, 2) = \chi_{0,0}$ (8.16):

$$\psi_A^{(s=0)}(q_1, q_2) = \phi_S(r_1, r_2) \chi_A(1, 2) \quad (12.2)$$

είτε της αντισυμμετρικής κυματοσυνάρτησης θέσης $\phi_A(r_1, r_2)$ (8.17) με την συμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν $\chi_S(1, 2) = \chi_{1,(\pm 1, 0)}$ (8.18):



$$\Psi_A^{(s=1)}(q_1, q_2) = \phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{\Sigma}(1, 2) \quad (12.3)$$

Σε πρώτη προσέγγιση γράφουμε για τη χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (12.4)$$

όπου

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_2} \right) \quad (12.5)$$

η αδιατάρακτη χαμιλτονιανή και

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (12.6)$$

η διαταραχή, που προκύπτει από την ηλεκτροστατική άπωση Coulomb των δύο ηλεκτρονίων. Η αδιατάρακτη ολική ενέργεια είναι

$$E_{n_1 n_2}^{(0)} = E_{n_1}^{(0)}(1) + E_{n_2}^{(0)}(2) = -\frac{Z^2 e^2}{2\alpha_0} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (12.7)$$

Η βασική κατάσταση ενός τέτοιου συστήματος είναι αυτή στην οποία και τα δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στην κατάσταση 1s. Η αδιατάρακτη ενέργεια της βασικής κατάστασης είναι τότε

$$E_{1,1}^{(0)} = E_1^{(0)}(1) + E_1^{(0)}(2) = -\frac{Z^2 e^2}{2\alpha_0} \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} \right) = -\frac{Z^2 e^2}{\alpha_0} \quad (12.8)$$

Επειδή $-\frac{e^2}{2\alpha_0} = -13.6 \text{ eV}$ είναι η ενέργεια της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου, έχουμε εδώ

$$E_{1,1}^{(0)} = -2Z^2 \times 13.6 \text{ eV} \quad (12.9)$$

Στον πίνακα 12.1. φαίνονται οι αντίστοιχες τιμές για τα τρία πρώτα σχετικά συστήματα. Στη βασική κατάσταση η κυματοσυνάρτηση θέσης είναι αναγκαστικά συμμετρική και έχουμε για την κανονικοποιημένη αδιατάρακτη κυματοσυνάρτηση

$$\phi_{(1s)2}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{\alpha_0} \right)^3 e^{-Z(r_1+r_2)/\alpha_0} \quad (12.10)$$

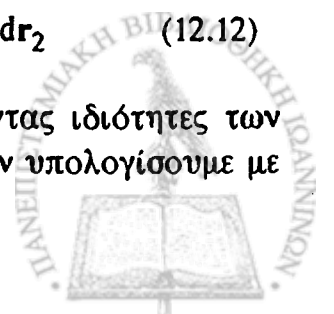
Ας δούμε πρώτα τι δίνει η θεωρία διαταραχών. Έχουμε

$$E_{(1s)2} = E_{1,1}^{(0)} + E_{(1s)2}^{(1)} \quad (12.11)$$

όπου η διόρθωση πρώτης τάξης υπολογίζεται από τη σχέση

$$E_{(1s)2}^{(1)} = \langle \phi_{(1s)2}^{(0)} | \hat{H}' | \phi_{(1s)2}^{(0)} \rangle = \int |\phi_{(1s)2}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (12.12)$$

Η συνεισφορά (12.12) μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας ιδιότητες των πολωνύμων Legendre. Μπορούμε, όμως, απλούστερα να την υπολογίσουμε με



τον ακόλουθο ευρηματικό τρόπο. Παρατηρούμε ότι η συνεισφορά (12.12) παριστάνει την ηλεκτροστατική ενέργεια

$$\int |\psi_{1s}(r_1)|^2 (-e) U(r_1) dr_1 \quad (12.13)$$

της αλληλεπίδρασης του ηλεκτρονίου 1 με το δυναμικό

$$U(r_1) = \int |\psi_{1s}(r_2)|^2 \frac{(-e)}{|r_1 - r_2|} dr_2 \quad (12.14)$$

που δημιουργεί το ηλεκτρόνιο 2. Για να υπολογίσουμε το δυναμικό $U(r_1)$, χωρίζουμε τη συνεισφορά του ολοκληρώματος (12.14) στις περιοχές μέσα στη σφαίρα ακτίνας r_1 (όλο το φορτίο συγκεντρωμένο στην αρχή) και έξω από αυτή. Τότε θα έχουμε

$$\begin{aligned} U(r_1) &= \int_0^{r_1} |\psi_{1s}(r_2)|^2 (-e) \frac{1}{r_1} 4\pi r_2^2 dr_2 \\ &\quad + \int_{r_1}^{\infty} |\psi_{1s}(r_2)|^2 (-e) \frac{1}{r_2} 4\pi r_2^2 dr_2 \\ &= -e \left[\frac{1}{r_1} - \left(\frac{Z}{\alpha_0} + \frac{1}{r_1} \right) e^{-2Zr_1/\alpha_0} \right] \end{aligned} \quad (12.15)$$

Η ηλεκτροστατική ενέργεια είναι τότε

$$\int_0^{\infty} |\psi_{1s}(r_1)|^2 (-e) U(r_1) 4\pi r_1^2 dr_1 = \frac{5}{8} Z \frac{e^2}{\alpha_0} \quad (12.16)$$

Έτσι, το αποτέλεσμα της θεωρίας διαταραχών είναι

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{\alpha_0} + \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{\alpha_0} = \left(-Z^2 + \frac{5}{8} Z \right) \frac{e^2}{\alpha_0} \quad (12.17)$$

και οι αντίστοιχες τιμές φαίνονται στον πίνακα 12.1. Θα δούμε αμέσως ότι στην περίπτωση μας η θεωρία διαταραχών δεν δίνει τόσο καλά αποτελέσματα, όσο η μέθοδος των μεταβολών.

Ας έρθουμε, πράγματι, στη μέθοδο των μεταβολών. Για να λάβουμε υπ' όψη το φαινόμενο της θωράκισης του πυρηνικού φορτίου, που προέρχεται από την επίδραση του ενός ηλεκτρονίου πάνω στο άλλο, διαλέγουμε σαν δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση για τη βασική κατάσταση την

$$\phi(r_1, r_2, \lambda) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\lambda}{\alpha_0} \right)^3 e^{-\lambda(r_1+r_2)/\alpha_0}, \quad (12.18)$$

όπου η παράμετρος λ παίζει εδώ το ρόλο ενός διορθωμένου ("ενεργού") ατομικού αριθμού για τον πυρήνα ($\lambda < Z$). Η μέση τιμή της ενέργειας είναι



$$\begin{aligned}
 E_\lambda(\phi) &= \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \\
 &= \int \phi^*(r_1, r_2, \lambda) \hat{H} \phi(r_1, r_2, \lambda) dr_1 dr_2
 \end{aligned}
 \tag{12.19}$$

Οι επί μέρους συνεισφορές στην (12.19) παριστάνουν την κινητική ενέργεια καθενός ηλεκτρονίου, την αλληλεπίδραση Coulomb καθενός ηλεκτρονίου με τον πυρήνα και την ηλεκτροστατική ενέργεια αλληλεπίδρασης των δύο ηλεκτρονίων, που βρήκαμε προηγουμένως. Προκύπτει, έτσι, εύκολα ότι είναι

$$\begin{aligned}
 E_\lambda &= 2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \right) \int_0^\infty \psi_{1s}(r, \lambda) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \psi_{1s}(r, \lambda) \right) 4\pi r^2 dr \\
 &\quad + 2 \int_0^\infty |\psi_{1s}(r, \lambda)|^2 \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) 4\pi r^2 dr \\
 &\quad + \int |\phi(r_1, r_2, \lambda)|^2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 \\
 &= (\lambda^2 - 2Z\lambda + \frac{5}{8}\lambda) \frac{e^2}{a_0}
 \end{aligned}
 \tag{12.20}$$

Το ελάχιστο της E_λ συμβαίνει όταν

$$\lambda = Z - \frac{5}{16}
 \tag{12.21}$$

και η ελάχιστη ενέργεια είναι

$$E_{\min} = - \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \frac{e^2}{a_0}
 \tag{12.22}$$

Οι τιμές που προκύπτουν από την (12.22) περιλαμβάνονται στον πίνακα 12.1, απ' όπου φαίνεται ότι η μέθοδος των μεταβολών δίνει πιο ακριβή αποτελέσματα από την θεωρία διαταραχών στην περίπτωση συστημάτων με δύο ηλεκτρόνια.

Z	Σύστημα	$E^{(0)}$	$E^{(0)}+E^{(1)}$	E_{\min}	$E_{\text{πειρ}}$
2	He	-108.8	-74.8	-77.5	-79.0
3	Li ⁺	-244.9	-193.9	-196.5	-198.1
4	Be ⁺⁺	-435.4	-367.4	-370.1	-371.7

Πίνακας 12.1. Τιμές της ενέργειας της βασικής κατάστασης συστημάτων δύο ηλεκτρονίων: $E^{(0)}$ αδιατάρακτη τιμή, $E^{(0)}+E^{(1)}$ τιμή θεωρίας διαταραχών, E_{\min} τιμή μεθόδου μεταβολών, $E_{\text{πειρ}}$ πειραματική τιμή.



Ας έλθουμε τώρα ειδικότερα στο άτομο του ηλίου. Κατ' αρχήν, όπως και στις περιπτώσεις των άλλων ατόμων του πίνακα 12.1, για να πάρουμε τις ακριβείς πειραματικές τιμές χρειάζεται να θεωρήσουμε πιο περίπλοκες δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις που θα εξαρτώνται από περισσότερες παραμέτρους (π.χ. αντί για την (12.18) μπορούμε να εξετάσουμε μια κυματοσυνάρτηση από έξι ξεχωριστές μεταβλητές θέσης για τα δύο ηλεκτρόνια). Επιπλέον, μπορούμε να λάβουμε υπ' όψη φαινόμενα για την πεπερασμένη μάζα του πυρήνα, καθώς επίσης σχετικιστικές διορθώσεις και διορθώσεις θεωρίας πεδίου, όπως και στην περίπτωση του ατόμου του υδρογόνου. Βρίσκουμε τότε μια εκπληκτική συμφωνία θεωρίας και πειράματος, ακρίβειας περίπου 10^{-7} . Πράγματι, όπως είναι σύνηθες σε τέτοιες περιπτώσεις, μπορούμε να εκφράσουμε την ενέργεια ιονισμού σε μονάδες κυματαριθμού λ^{-1} . Τότε, η θεωρητική τιμή είναι 198310.7 cm^{-1} σε θαυμαστή συμφωνία με την πειραματική τιμή 198310.8 cm^{-1} (η τιμή που βρήκαμε για το ήλιο στον πίνακα 12.1 αντιστοιχεί σε ενέργεια ιονισμού 198345 cm^{-1} , ήδη σε πολύ καλή συμφωνία με την πειραματική τιμή).

Ας αναφερθούμε τώρα σύντομα στις διαγεγραμμένες καταστάσεις του ηλίου. Αντί για την $(1s)^2$ βασική κατάσταση που είδαμε προηγούμενα, ας θεωρήσουμε την κατάσταση $(1s)(nl)$. Για την ενέργεια της κατάστασης αυτής θα έχουμε

$$E_{(1s)(nl)} = E_{1s}^{(0)}(1) + E_{nlm}^{(0)}(2) + E_{(1s)(nl)}^{(1)} \quad (12.23)$$

όπου σε πρώτη προσέγγιση η διόρθωση $E_{(1s)(nl)}^{(1)}$ προκύπτει από την αναμενόμενη τιμή της \hat{H}' :

$$E_{(1s)(nl)}^{(1)} = \left\langle \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\rangle_{(1s)(nl)} = I \pm J \quad (12.24)$$

με τα ολοκληρώματα I και J να δίνονται από τις σχέσεις

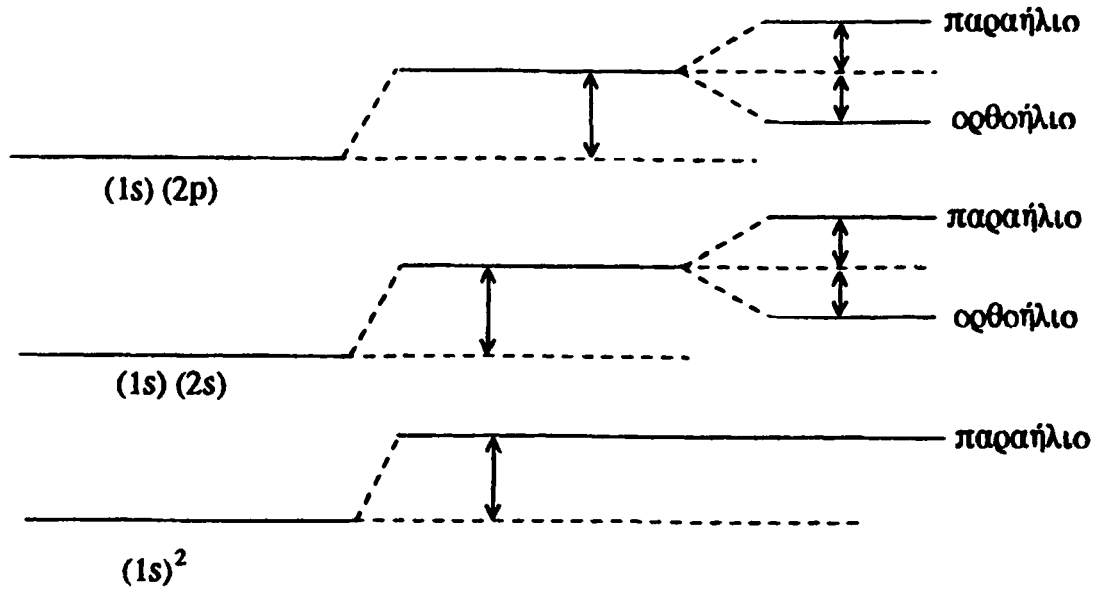
$$I = \int |\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (12.25\alpha)$$

$$J = \int \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (12.25\beta)$$

Στην (12.24) το σήμειο + αντιστοιχεί στην κατάσταση (12.2) με $s = 0$ και το σημείο - στην κατάσταση (12.3) με $s = 1$. Το ολοκλήρωμα I είναι προφανώς θετικό, όπως μπορεί να δειχθεί ότι είναι και το J . Έτσι, το ορθοήλιο ($s = 1$) αντιστοιχεί σε χαμηλότερη ενέργεια από το παραήλιο ($s = 0$). Ο φυσικός λόγος γι' αυτό αναφέρθηκε ήδη στην §8.1. Για τη βασική κατάσταση $(1s)^2$ μόνο το παραήλιο ($s = 0$) είναι δυνατό, λόγω της αρχής του Pauli. Για τις τρεις χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες του ηλίου έχουμε την εικόνα του σχήματος 12.1. Η κατάσταση $(1s)(2p)$



αντιστοιχεί σε υψηλότερη ενέργεια από την κατάσταση (1s) (2s), γιατί η συνεισφορά της στροφορμής ($l=1$) στο ενεργό δυναμικό στην πρώτη περίπτωση μειώνει την κυματοσυνάρτηση $2p$ κοντά στον



Σχ. 12.1. Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων για τις χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες του ατόμου του ηλίου.

πυρήνα (ας θυμηθούμε ότι η ψ_{2p} είναι ανάλογη του r για μικρά r , ενώ η ψ_{2s} είναι μη μηδενική για $r=0$, βλ. (6.89)).

Τα παραπάνω αποτελέσματα μπορούν να επαληθευτούν χρησιμοποιώντας και τη μέθοδο μεταβολών με δοκιμαστικές συναρτήσεις τις

$$\psi_{1s} \propto \exp \{-\lambda_1 r / \alpha_0\}$$

$$\psi_{2s} \propto \left(1 - \frac{\lambda_2 r}{\alpha_0}\right) \exp \{-\lambda_2 r / \alpha_0\} \quad (12.26)$$

για την κατάσταση (1s) (2s) και

$$\psi_{1s} \propto \exp \{-\lambda_1 r / \alpha_0\}$$

$$\psi_{2p} \propto \begin{cases} r e^{-\lambda_2 r / \alpha_0} \cos \theta & m = 0 \\ r e^{-\lambda_2 r / \alpha_0} \sin \theta e^{\pm i\phi} & m = \pm 1 \end{cases} \quad (12.27)$$

για την κατάσταση (1s)(2p).



12.2. Άτομα πολλών ηλεκτρονίων - Άτομο λιθίου

Ας θεωρήσουμε τώρα άτομα (ή ιόντα) που απαρτίζονται από ένα πυρήνα φορτίου Ze και N ηλεκτρόνια. Σε πρώτη προσέγγιση γράφουμε για τη χαμιλτονιανή του συστήματος

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (12.28)$$

όπου

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \quad (12.29)$$

και

$$\hat{H}' = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (12.30)$$

Η ολική κυματοσυνάρτηση $\psi_A(q_1, \dots, q_N)$ για τα N ηλεκτρόνια θα είναι η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση της μορφής της ορίζουσας Slater (8.13) και βέβαια θα είναι λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger

$$\hat{H} \psi_A(q_1, \dots, q_N) = E \psi_A(q_1, \dots, q_N) \quad (12.31)$$

Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο για την περίπτωση των ατόμων με δύο ηλεκτρόνια, μπορούμε να πάρουμε πολύ ακριβή αποτελέσματα για τα ενεργειακά επίπεδα χρησιμοποιώντας τη μέθοδο μεταβολών με περίπλοκες δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις που περιλαμβάνουν ένα μεγάλο αριθμό παραμέτρων. Πράγματι, τέτοιοι υπολογισμοί έχουν γίνει για τα ελαφρύτερα άτομα (όπως το λίθιο που έχει $N = 3$ ηλεκτρόνια), αλλά καθώς ο αριθμός των ηλεκτρονίων αυξάνει η μέθοδος αυτή γίνεται εξαιρετικά επίπονη και γι' αυτό έχουν αναπτυχθεί άλλοι τρόποι υπολογισμού, στους οποίους θ' αναφερθούμε τώρα σε συντομία.

Αφετηρία αποτελεί η λεγόμενη προσέγγιση κεντρικού πεδίου. Σ' αυτή θεωρούμε ότι κάθε ηλεκτρόνιο κινείται μέσα σ' ένα ενεργό κεντρικό δυναμικό $V(r)$, το οποίο παριστάνει συνολικά την έλξη του πυρήνα και τη μέση τιμή των απωστικών δυνάμεων από τα άλλα ηλεκτρόνια. Μπορούμε, τότε, να γράψουμε την χαμιλτονιανή \hat{H} με τη μορφή

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{κεν}} + \hat{H}_1' \quad (12.32)$$

όπου

$$\hat{H}_{\text{κεν}} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + V(r_i) \right) \quad (12.33)$$



η χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στην προσέγγιση κεντρικού πεδίου και

$$\hat{H}_1' = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^N \left(\frac{Ze^2}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (12.34)$$

το υπόλοιπο κομμάτι της ολικής χαμιλτονιανής. Η χαμιλτονιανή (12.33) κεντρικού πεδίου είναι ένα άθροισμα N όμοιων επιμέρους χαμιλτονιανών. Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις θέσης $\psi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i)$ ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger

$$\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + V(r_i) \right) \psi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i) = E_{n_i l_i} \psi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i) \quad (12.35)$$

που συνιστά ένα πρόβλημα κεντρικού δυναμικού, όπως το μελετήσαμε στο κεφάλαιο VI. Η ολική κυματοσυνάρτηση για το ηλεκτρόνιο i θα είναι της μορφής

$$\psi_a(\mathbf{q}_i) = \psi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i) \chi_{(1/2), m_s = \pm(1/2)} \quad (12.36)$$

όπου το a συμβολίζει το σύνολο των αντίστοιχων κβαντικών αριθμών (βλ. §8.1). Κάθε ενεργειακό επίπεδο $E_{n_i l_i}$ είναι προφανώς εκφυλισμένο τάξης $2(2l_i + 1)$. Η ολική ενέργεια $E_{\text{κεν}}$ του ατόμου στην προσέγγιση κεντρικού πεδίου που συζητάμε θα είναι τότε

$$E_{\text{κεν}} = \sum_{i=1}^N E_{n_i l_i} \quad (12.37)$$

Τέλος, η αντίστοιχη ολική κυματοσυνάρτηση $\psi_{\text{κεν}}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ στην προσέγγιση κεντρικού πεδίου θα είναι η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση της οριζουσας Slater (8.13), που κατασκευάζεται από τις κυματοσυναρτήσεις (12.36) των επιμέρους ηλεκτρονίων.

Το πρόβλημα, βέβαια, είναι ο προσδιορισμός του ενεργού κεντρικού δυναμικού $V(r)$, ακριβέστερα του $V(r_i)$, που θα χρησιμοποιήσουμε για τη λύση της εξίσωσης (12.35). Θα πρέπει να τονίσουμε ότι ένα κοινό ενεργό δυναμικό $V(r)$ δεν μπορεί να δώσει το πλήρες φάσμα ενός ατόμου με πολλά ηλεκτρόνια, γιατί ένα τέτοιο δυναμικό πρέπει να εξαρτάται από τις λεπτομέρειες της κατανομής του φορτίου των ηλεκτρονίων. Όμως, σε πρώτη προσέγγιση, αν περιοριστούμε στη βασική και τις πρώτες διεγερμένες καταστάσεις, είναι λογικό να δεχτούμε ότι ένα δοσμένο κεντρικό δυναμικό $V(r)$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Άλλωστε, η σειρά των επιμέρους ενεργειακών επιπέδων $E_{n_i l_i}$ δεν εξαρτάται κατά αποφασιστικό τρόπο από την μορφή του δυναμικού $V(r)$.

Είναι εύκολο να δούμε ότι για μικρά r , όταν ένα ηλεκτρόνιο είναι κοντά στον πυρήνα, θα έχουμε την οριακή μορφή



$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\frac{Ze^2}{r} \quad (12.38)$$

Αντίθετα, για μεγάλα r θα έχουμε την ασυμπτωτική μορφή

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{[Z-(N-1)]e^2}{r} \quad (12.39)$$

Για τις ενδιαμέσες αποστάσεις υπάρχουν διάφορες μέθοδοι για τον προσδιορισμό του $V(r)$. Οι δύο πιο σημαντικές είναι οι μέθοδοι Thomas-Fermi και Hartree-Fock. Η λεπτομερής μελέτη τους ξεφεύγει από τα πλαίσια της συζήτησης μας, αλλά ας πούμε δύο λόγια για τα κύρια χαρακτηριστικά τους.

Η μέθοδος Thomas-Fermi χειρίζεται τα N ηλεκτρόνια του συστήματος σαν ένα αέριο Fermi, που περιορίζεται σε μια περιοχή του χώρου από ένα κεντρικό δυναμικό $V(r)$. Υποθέτουμε ότι το $V(r)$ σβήνει στο άπειρο, ενώ μεταβάλλεται αργά σε αποστάσεις της τάξης των μηκών κύματος de Broglie των ηλεκτρονίων. Έτσι, ουσιαστικά τα ηλεκτρόνια βρίσκονται μέσα σε μια περιοχή όπου το $V(r)$ είναι περίπου σταθερό. Στατιστικές και ημικλασσικές μέθοδοι μπορούν, τότε, να χρησιμοποιηθούν, που οδηγούν σε μια εξίσωση από την αριθμητική λύση της οποίας μπορεί κανείς να πάρει το $V(r)$ (και την πυκνότητα του ηλεκτρονικού φορτίου). Μια πολύ καλύτερη μέθοδος είναι εκείνη των Hartree-Fock, που στηρίζεται στη μέθοδο των μεταβολών. Η δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση για τα N ηλεκτρόνια, που είναι μια οριζουσα Slater, απαρτίζεται από δοκιμαστικές επιμέρους κυματοσυναρτήσεις $\psi_a(q_i)$ για το κάθε ηλεκτρόνιο i . Μεταβάλλοντας την $E(\psi)$ ως προς τις επιμέρους κυματοσυναρτήσεις, βρίσκουμε ένα σύστημα αλληλοεξαρτώμενων εξισώσεων μορφής

$$\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + V(q_i) \right) \psi_a(q_i) = E_a \psi_a(q_i) \quad (12.40)$$

Οι εξισώσεις αυτές είναι γνωστές σαν εξισώσεις Hartree-Fock και το δυναμικό Hartree-Fock $V(q_i)$ παριστάνει το δυναμικό μέσα στο οποίο το ηλεκτρόνιο i κινείται, όταν το άτομο βρίσκεται σε μια ορισμένη κατάσταση. Οι εξισώσεις Hartree-Fock (12.40) δεν είναι γνήσιες εξισώσεις ιδιοτιμών, μια και το δυναμικό Hartree-Fock $V(q_i)$ εξαρτάται από τις $(N-1)$ άλλες κυματοσυναρτήσεις ψ_b , $b \neq a$. Η λύση του συστήματος των Hartree-Fock εξισώσεων γίνεται με διαδοχικές προσεγγίσεις, δηλαδή ξεκινώντας από μια κατά προσέγγιση λύση $\psi_a^{(1)}, \dots, \psi_n^{(1)}$ υπολογίζουμε το αντίστοιχο δυναμικό $V^{(1)}$, το οποίο στη συνέχεια χρησιμοποιούμε για να πάρουμε νέες λύσεις $\psi_a^{(2)}, \dots, \psi_n^{(2)}$, που με τη σειρά τους δίνουν ένα καινούργιο δυναμικό $V^{(2)}$ κ.ο.κ. Η διαδικασία σταματά όταν το δυναμικό $V^{(m)}$ είναι ίδιο σε μια επιθυμητή προσέγγιση με το δυναμικό $V^{(m-1)}$. Το κεντρικό δυναμικό $V(r)$ είναι τότε η μέση έκφραση του δυναμικού Hartree-Fock ως προς τη θέση και τις καταστάσεις του σπιν, από τις οποίες εν γένει εξαρτάται.



Η πρώτη διόρθωση, που μπορούμε να θεωρήσουμε στην προσέγγιση κεντρικού πεδίου, προέρχεται από τον όρο \hat{H}_1' (12.34), ο οποίος παριστάνει την διαφορά ανάμεσα στην πραγματική άπωση Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων και την μέση ηλεκτρονική άπωση μέσα στο κεντρικό δυναμικό $V(r)$. Η διόρθωση αυτή μπορεί να μελετηθεί είτε με τη θεωρία των διαταραχών είτε με τη μέθοδο των μεταβολών.

Μια άλλη σημαντική διόρθωση προέρχεται από τους όρους ζεύξης σπιντροχιάς των ηλεκτρονίων. Όπως μάθαμε στην §9.4 για τη λεπτή υφή του ατόμου του υδρογόνου, η διόρθωση αυτή μπορεί να γραφεί σαν

$$\hat{H}_2' = \sum_{i=1}^N f(r_i) \hat{L}_i \cdot \hat{S}_i \quad (12.41\alpha)$$

όπου

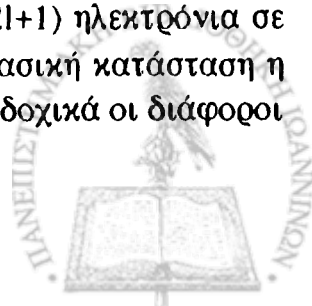
$$f(r_i) = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r_i} \frac{dV(r_i)}{dr_i} \quad (12.41\beta)$$

Οι διορθώσεις από τον όρο \hat{H}_2' μπορούν να υπολογιστούν με βάση τη θεωρία διαταραχών, ξεκινώντας από τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}_{\text{κεν}}$. Η περίπτωση όπου το σχετικό μέγεθος των δύο όρων είναι $|\langle \hat{H}_1' \rangle| \gg |\langle \hat{H}_2' \rangle|$ συμβαίνει σε άτομα μικρού και μέσου Z και ονομάζεται L-S ζεύξη. Αντίθετα, η περίπτωση $|\langle \hat{H}_2' \rangle| \gg |\langle \hat{H}_1' \rangle|$ συμβαίνει σε άτομα μεγάλου Z και είναι γνωστή σαν j-j ζεύξη.

Όπως αναφέραμε ήδη παραπάνω, η σειρά των επιμέρους ενεργειακών επιπέδων $E_{n,l}$ δεν εξαρτάται κατά σημαντικό τρόπο από τη μορφή του δυναμικού $V(r)$. Έτσι, ξεκινώντας από τις ισχυρότερα δεσμευμένες καταστάσεις, αυτή η σειρά βρίσκεται να είναι (με το γνωστό συμβολισμό)

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, (4s, 3d), 4p, (5s, 4d), 5p, (6s, 4f, 5d), \dots$$

όπου οι καταστάσεις σε παρένθεση αντιστοιχούν σε σχεδόν ίδια ενεργειακά επίπεδα, έτσι ώστε μπορεί να διαφέρει η σειρά τους από άτομο σε άτομο. Ηλεκτρόνια που έχουν τον ίδιο κβαντικό αριθμό $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ λέμε ότι ανήκουν στον ίδιο φλοιό, που συμβολίζεται με τα γράμματα K, L, M, N, ..., αντίστοιχα. Ηλεκτρόνια τώρα που έχουν ίδιες τιμές για τα n και l λέμε ότι ανήκουν στον ίδιο υποφλοιό και, λόγω του εκφυλισμού, υπάρχουν το πολύ $2(2l+1)$ ηλεκτρόνια σε κάθε υποφλοιό. Για τα ουδέτερα άτομα ($Z = N$) και για τη βασική κατάσταση η κατανομή των ηλεκτρονίων γίνεται με το να συμπληρωθούν διαδοχικά οι διαφοροί



υποφλοιοί εκτός από τον τελευταίο (που αντιστοιχεί στην υψηλότερη ενέργεια), που συνήθως δεν συμπληρώνεται (εκτός από ειδικές τιμές $Z = 2, 4, 10, 12, \dots$). Τα λιγότερο δεσμευμένα ηλεκτρόνια, που βρίσκονται στον τελευταίο υποφλοιό, είναι τα ηλεκτρόνια σθένους. Υπενθυμίζουμε, τέλος, τον συμβολισμό

$$2S+1L_J$$

που μας πληροφορεί για την συνολική τροχιακή στροφορμή L , το συνολικό σπιν S και την συνολική στροφορμή $J = L+S$.

Μέχρι τώρα έχουμε μελετήσει αναλυτικά το άτομο του υδρογόνου ($Z = 1$) με βασική κατάσταση την $1s$ και συνοπτικότερα το άτομο του ηλίου ($Z = 2$) με βασική κατάσταση την $(1s)^2$, στο οποίο συνεπώς ο φλοιός K είναι συμπληρωμένος. Το αμέσως επόμενο άτομο με $Z = 3$ είναι το άτομο του λιθίου με βασική κατάσταση την $(1s)^2(2s)$, μια και προφανώς μια κατάσταση $(1s)^3$ δεν επιτρέπεται από την αρχή του Pauli. Σε πρώτη προσέγγιση η κυματοσυνάρτηση $\psi_A(q_1, q_2, q_3)$ της βασικής κατάστασης, που είναι της μορφής της ορίζουσας Slater και κατασκευάζεται από τις επιμέρους κυματοσυναρτήσεις $\psi_a(q_i)$, βρίσκουμε εύκολα ότι είναι

$$\begin{aligned} \psi_A(q_1, q_2, q_3) = & \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_{1s}(r_1) \psi_{2s}(r_2) \chi_A(1,2) \psi_{2s}(r_3) \chi(3) \\ & + \psi_{1s}(r_2) \psi_{1s}(r_3) \chi_A(2,3) \psi_{2s}(r_1) \chi(1) \\ & + \psi_{1s}(r_3) \psi_{1s}(r_1) \chi_A(3,1) \psi_{2s}(r_2) \chi(2)] \end{aligned} \quad (12.42)$$

Με βάση τα προηγούμενα, ο πλήρης συμβολισμός της βασικής κατάστασης θα είναι $(1s)^2(2s) {}^2S_{1/2}$. Οι πρώτες διεγερμένες καταστάσεις του λιθίου θα είναι οι $(1s)^2(2s) {}^2P_{1/2,3/2}$ με κυματοσυναρτήσεις σε πρώτη προσέγγιση της μορφής (12.42), όπου η ψ_{2s} θ' αντικατασταθεί από την ψ_{2p} . Η τροχιακή στροφορμή είναι $l = 1$, το σπιν $s = 1/2$ και η ολική στροφορμή $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Όπως είδαμε και στην περίπτωση του ατόμου του ηλίου, η κατάσταση $(1s)^2(2s)$ αντιστοιχεί σε μικρότερη ενέργεια από την κατάσταση $(1s)^2(2p)$. Αξίζει να παρατηρήσουμε εδώ ότι στην κατάσταση $(1s)^2(2p)$ και στις παραπέρα διεγερμένες $(1s)^2(3s)$, $(1s)^2(3p)$, $(1s)^2(3d)$ κ.λ.π. το εξωτερικό ηλεκτρόνιο είναι σαν να βλέπει τον πυρήνα φορτίου $3e$ να περιβάλλεται στενά από δύο $(1s)$ ηλεκτρόνια με φορτίο $-2e$. Έτσι, συνολικά το σύστημα θα μοιάζει σαν ένα άτομο υδρογόνου και η κυματοσυνάρτηση ψ_{2p} , ψ_{3s} κ.λ.π. του εξωτερικού ηλεκτρονίου θα πλησιάζει την αντίστοιχη του ατόμου του υδρογόνου. Πράγματι, η διαφορά στην ενέργεια ανάμεσα στις καταστάσεις $(1s)^2(3d)$ και $(1s)^2(2p)$ αντιστοιχεί σε μήκος κύματος 6104 \AA , λίγο μικρότερο από το μήκος κύματος 6563 \AA για μεταβάσεις μεταξύ των επιπέδων $3d$ και $2p$ του ατόμου του υδρογόνου.



Το γεγονός αυτό είναι χρήσιμο σε προσεγγιστικούς υπολογισμούς, όπως στη λεπτή υφή του ατόμου του λιθίου που θα δούμε τώρα.

Πράγματι, για τον όρο \hat{H}_2' ζεύξης σπιν - τροχιάς των ηλεκτρονίων έχουμε εδώ (μόνο για το ηλεκτρόνιο 2p υπάρχει τροχιακή στροφορμή)

$$\hat{H}_2' = f(r) \hat{L} \cdot \hat{S} \quad (12.43)$$

όπου

$$f(r) = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \quad (12.44)$$

Η διόρθωση στα ενεργειακά επίπεδα θα είναι $\langle \psi_A | \hat{H}_2' | \psi_A \rangle$, όπου ψ_A η κυματοσυνάρτηση (12.42) με την ψ_{2s} να έχει αντικατασταθεί από την ψ_{2p} . Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία, όπως και στον υπολογισμό του αντίστοιχου όρου στην λεπτή υφή του ατόμου του υδρογόνου (βλ. §9.4), παίρνουμε

$$\langle \hat{H}_2' \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 \left(j^2 + j - \frac{11}{4} \right) \langle f(r) \rangle \quad (12.45)$$

όπου

$$\langle f(r) \rangle = \int dr |\psi_{2p}(r)|^2 f(r) \quad (12.46)$$

Μπορούμε τώρα, όπως είπαμε, να χρησιμοποιήσουμε προσεγγιστικά σαν $\psi_{2p}(r)$ την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση του ατόμου του υδρογόνου και να υπολογίσουμε την $\langle f(r) \rangle$ (βλ. σχέση (9.46)) και, κατά συνέπεια, την $\langle \hat{H}_2' \rangle$ για τις καταστάσεις $(1s)^2(2p)^2 P_j$ με $j = \frac{1}{2}$, $j = \frac{3}{2}$. Βρίσκουμε, τότε, την διαφορά λεπτής υφής

$$E_{3/2} - E_{1/2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{32} \quad (12.47)$$

Αριθμητικά, εκφράζοντας την διαφορά λεπτής υφής σε μονάδες κυματαριθμού είναι

$$E_{3/2} - E_{1/2} = 0.36 \text{ cm}^{-1} \quad (12.48)$$

κοντά στην πειραματική τιμή. Συγκριτικά, αναφέρουμε ότι η ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στη βασική κατάσταση $(1s)^2(2s)^2 S_{1/2}$ και τις $(1s)^2(2p)^2 P_j$ είναι 15.000 cm^{-1} .

Μετά το άτομο του λιθίου το επόμενο άτομο είναι εκείνο του βηρυλλίου με $Z=4$. Η βασική του κατάσταση αντιστοιχεί στην ηλεκτρονική κατανομή $(1s)^2(2s)^2 1S_0$. Οι πρώτες διεγερμένες καταστάσεις, με ενέργεια $\sim 2.7 \text{ eV}$ πάνω από εκείνη της βασικής κατάστασης, είναι οι $(1s)^2(2s)(2p)^3 P_{0,1,2}$. Σ' αυτές η κυματοσυνάρτηση του σπιν για τα δύο ηλεκτρόνια $(2s)$, $(2p)$ είναι η συμμετρική χ_S

με $s = 1$. Επειδή $l = 1$, οι τιμές του j είναι $j = 0, 1, 2$. Η επόμενη διεγερμένη κατάσταση, με ενέργεια ~ 5.3 eV πάνω από τη βασική, είναι $(1s)^2(2s)(2p) \ ^1P_1$. Εδώ η κυματοσυνάρτηση σπιν είναι η αντισυμμετρική χ_A με $s = 0$.

Το επόμενο στοιχείο είναι το βόριο με $Z = 5$. Η βασική και η αμέσως επόμενη κατάσταση αντιστοιχούν στην κατανομή των πέντε ηλεκτρονίων $(1s)^2(2s)^2(2p) \ ^2P_{1/2,3/2}$ με διαφορά ενέργειας μεταξύ τους λόγω λεπτής υφής

$$E_{3/2} - E_{1/2} \sim 0.002 \text{ eV} \quad (12.49)$$

Στη συνέχεια, έχουμε τον άνθρακα με $Z = 6$ και κατανομή των έξι ηλεκτρονίων $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Έχουμε ολική τροχιακή στροφορμή $l = 0, 1, 2$, ολικό σπιν $s = 0, 1$ και ολική στροφορμή $j = 0, 1, 2, 3$. Έτσι, η 3P_0 είναι η βασική κατάσταση, στη συνέχεια έχουμε τις 3P_1 και 3P_2 με ενέργεια 0.002 eV και 0.005 eV (λόγω λεπτής υφής) πάνω από τη βασική, μετά τις 1D_2 κατά 1.26 eV πάνω από τη βασική και, τέλος, την 1S_0 ακόμη 1.42 eV υψηλότερα.

Με παρόμοιο τρόπο μπορεί κανείς να μελετήσει την ηλεκτρονική κατανομή όλων των στοιχείων με μεγαλύτερες τιμές του Z . Τα ευγενή αέρια (He, Ne, Ar, Kr, ...) έχουν συμπληρωμένο τον K φλοιό ή τον p υποφλοιό και είναι χημικά αδρανή, επειδή χρειάζεται πολύ μεγάλη ενέργεια για να διαταραχθούν. Τα αλκάλια (Li, Na, K, ...) αντιδρούν εύκολα, γιατί έχουν ένα ηλεκτρόνιο σθένους στον εξωτερικό τους φλοιό που εύκολα απομακρύνεται. Όμοια, τα αλογόνα (F, Cl, Br, I) επίσης αντιδρούν εύκολα, επειδή σ' αυτά λείπει ένα ηλεκτρόνιο για να συμπληρωθεί ο εξωτερικός τους φλοιός και εύκολα συλλαμβάνουν ένα ηλεκτρόνιο από άλλο άτομο. Τα παραπάνω αποτελούν τη χαρακτηριστική ταξινόμηση στοιχείων με όμοιες χημικές ιδιότητες που συναντάμε στο περιοδικό σύστημα, όπως πρώτος έκανε ο Mendeleev το 1869.

12.3. Μόρια - Μόριο υδρογόνου

Γίνεται φανερό ότι η μελέτη της μοριακής δομής είναι σημαντικά πιο δύσκολη από εκείνη των μεμονωμένων ατόμων. Όμως, λόγω της μικρής μάζας των ηλεκτρονίων σε σύγκριση με τη μάζα των πυρήνων, η κίνηση των τελευταίων είναι πολύ πιο αργή από εκείνη των ηλεκτρονίων και, συνεπώς, οι πυρήνες μπορεί να θεωρηθούν ότι καταλαμβάνουν σχεδόν καθορισμένες θέσεις μέσα στο μόριο. Αυτό το γεγονός προσφέρει και τη βάση για την προσεγγιστική μέθοδο μελέτης της μοριακής δομής, που είναι γνωστή σαν προσέγγιση Born - Oppenheimer και ουσιαστικά συνίσταται στην αποσύνδεση των κινήσεων των ηλεκτρονίων από εκείνες των πυρήνων.



Οι δυνάμεις που κρατούν δέσμια τα μόρια προέρχονται, κυρίως, από την ανακατανομή των ηλεκτρονίων σθένους των ατόμων, ενώ τα ηλεκτρόνια των εσωτερικών φλοιών, πιο ισχυρά δεσμευμένα, σχεδόν δεν ανακατανέμονται καθόλου. Ας υποθέσουμε ότι είναι a το μέσο μέγεθος ενός μορίου. Τότε από την αρχή της αβεβαιότητας συμπεραίνουμε ότι το μέγεθος των ορμών των ηλεκτρονίων σθένους είναι της τάξης \hbar/a και, συνεπώς, το χαρακτηριστικό μέγεθος των ηλεκτρονικών ενεργειών θα είναι

$$E_e \approx \frac{\hbar^2}{m_e a^2} \quad (12.50)$$

Δεδομένου ότι είναι $a \approx 1 \text{ \AA}$, βλέπουμε ότι η E_e είναι της τάξης μερικών eV, όπως και στα άτομα.

Όμως, έχουμε και τις κινήσεις των πυρήνων. Αυτές μπορεί να ταξινομηθούν κατά σειρά μεγέθους σε ταλανωτικές κινήσεις γύρω από τις θέσεις ελάχιστης ενέργειας και σε περιστροφικές κινήσεις γύρω από το κέντρο μάζας. Για τον υπολογισμό της τάξης μεγέθους των ενεργειών των ταλαντωτικών κινήσεων των πυρήνων, μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι κινήσεις αυτές είναι κινήσεις σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή και να γράψουμε για την κυκλική συχνότητά τους

$$\omega_N = \left(\frac{k}{M_N} \right)^{1/2} = \left(\frac{m_e}{M_N} \right)^{1/2} \left(\frac{k}{m_e} \right)^{1/2} \approx \left(\frac{m_e}{M_N} \right)^{1/2} \omega_e \quad (12.51)$$

όπου M_N είναι η μάζα του πυρήνα και ω_e είναι η κυκλική συχνότητα των ηλεκτρονικών κινήσεων. Συνεπώς, η ενέργεια $E_{\text{ταλ}}$ των πυρηνικών ταλαντώσεων είναι

$$E_{\text{ταλ}} \approx \left(\frac{m_e}{M_N} \right)^{1/2} E_e \quad (12.52)$$

Δεδομένου ότι $(m_e/M_N) \approx 10^{-3} - 10^{-5}$, η ενέργεια $E_{\text{ταλ}}$ είναι της τάξης ενός δεκάτου του eV: $\sim 0.1 \text{ eV}$. Από την άλλη μεριά, για τον υπολογισμό της ενέργειας των περιστροφικών κινήσεων μπορούμε να θεωρήσουμε την τυπική έκφραση

$$E_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2 I (I+1)}{2I} \quad (12.53)$$

όπου $I \approx M_N a^2$ το τυπικό μέγεθος της ροπής αδράνειας του μορίου. Συνεπώς, η τάξη μεγέθους της ενέργειας $E_{\text{περ}}$ είναι

$$E_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2}{M_N a^2} \approx \frac{m_e}{M_N} E_e \quad (12.54)$$



Έτσι, η $E_{\text{περ}}$ είναι της τάξης ενός χιλιοστού του eV : $\sim 0.001 eV$, αρκετά μικρότερη από την $E_{\text{ταλ}}$ $\sim 0.1 eV$. Συνολικά, βλέπουμε ότι οι ηλεκτρονικές ενέργειες και οι ταλαντωτικές και περιστροφικές μοριακές ενέργειες ακολουθούν την ιεραρχία τάξης μεγέθους

$$E_e : E_{\text{ταλ}} : E_{\text{περ}} \approx 1 : \left(\frac{m_e}{M_N}\right)^{1/2} : \left(\frac{m_e}{M_N}\right) \quad (12.55)$$

Τα μοριακά φάσματα προκύπτουν από μεταβάσεις μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων ενός μοριακού συστήματος, που συνοδεύονται από εκπομπή ή απορρόφηση ακτινοβολίας. Μπορούμε να διακρίνουμε "ηλεκτρονικά" φάσματα (που προέρχονται από αλλαγές τόσο στην ηλεκτρονική, όσο και στην ταλαντωτική και περιστροφική κατάσταση του μορίου και βρίσκονται στην περιοχή του ορατού ή του υπεριώδους), "ταλαντωτικά" - "περιστροφικά" φάσματα (που προέρχονται από αλλαγές στην ταλαντωτική και περιστροφική κατάσταση του μορίου και βρίσκονται στην περιοχή του υπέρυθρου) και, τέλος, καθαρά "περιστροφικά" φάσματα (που προέρχονται από αλλαγές στην περιστροφική κατάσταση του μορίου, το οποίο βρίσκεται σε μια δοσμένη ηλεκτρονική και ταλαντωτική κατάσταση, και βρίσκονται στην περιοχή των μικροκυμάτων). Κάθε μια από τις παραπάνω ενεργειακές στάθμες αποτελεί ένα είδος "λεπτής υφής" για την ιεραρχικά αμέσως ανώτερή της και αυτό βέβαια απεικονίζεται στις μοριακές φασματικές γραμμές.

Εξ αιτίας της ιεραρχίας (12.55) στην τάξη μεγέθους των διαφόρων ενεργειών σ' ένα μόριο, γίνεται φανερό ότι οι περίοδοι των πυρηνικών κινήσεων είναι πολύ μεγαλύτερες από εκείνες των ηλεκτρονικών κινήσεων και, συνεπώς, τα δύο αυτά είδη κινήσεων μπορεί να μελετηθούν ανεξάρτητα. Έτσι, είναι μια καλή προσέγγιση να προσδιορίσουμε πρώτα τις ηλεκτρονικές καταστάσεις για κάθε τιμή της απόστασης των πυρήνων, που τους θεωρούμε σταθερούς. Στη συνέχεια, προσδιορίζουμε τις πυρηνικές καταστάσεις σαν αποτέλεσμα της ηλεκτρονικής κατανομής, που είναι συνάρτηση των πυρηνικών θέσεων από το πρώτο βήμα. Αυτή η αποσύνδεση ηλεκτρονικών και πυρηνικών κινήσεων αποτελεί την προσέγγιση Born-Oppenheimer, την οποίαν τώρα θα σκιαγραφίσουμε πιο ποσοτικά.

Ας ξεκινήσουμε γράφοντας τη συνολική χαμιλτονιανή σαν

$$\hat{H} = \hat{H}_N + \hat{H}_e \quad (12.56)$$

Ο πρώτος όρος είναι η κινητική ενέργεια των πυρήνων

$$\hat{H}_N = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M_{N\alpha}} = \sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{N\alpha}} \nabla_{\mathbf{R}_{\alpha}}^2 \right) \quad (12.57)$$

Ο δεύτερος όρος περιέχει την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων και όλους τους όρους δυναμικής ενέργειας Coulomb (μεταξύ ηλεκτρονίων και πυρήνων) :



$$\begin{aligned}\hat{H}_e &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} + V_{ee}(|r_i - r_j|) + V_{NN}(|R_\alpha - R_\beta|) + V_{eN}(|r_i - R_\alpha|) \\ &= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_i}^2 \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{\alpha>\beta} \frac{Q_{N_\alpha} Q_{N_\beta}}{|R_\alpha - R_\beta|} - \sum_{i,\alpha} \frac{e Q_{N_\alpha}}{|r_i - R_\alpha|}\end{aligned}\quad (12.58)$$

Συμβολίζουμε με r_i τις θέσεις των ηλεκτρονίων και με R_α εκείνες των πυρήνων.

Το πρώτο βήμα στην προσέγγιση Born-Oppenheimer είναι να θεωρήσουμε, όπως εξηγήσαμε παραπάνω ποιοτικά, τις αποστάσεις R_α σταθερές και να λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\hat{H}_e \chi(r_i - r_j, r_i - R_\alpha, \mathbf{R}) = E_e(\mathbf{R}) \chi(r_i - r_j, r_i - R_\alpha, \mathbf{R}) \quad (12.59)$$

όπου η ιδιοτιμή $E_e(\mathbf{R})$ θα είναι συνάρτηση των αποστάσεων $\mathbf{R} = R_\alpha - R_\beta$. Στη συνέχεια, ψάχνουμε μια προσεγγιστική λύση του πλήρους συστήματος

$$\hat{H} \psi(r_i, R_\alpha) = E \psi(r_i, R_\alpha) \quad (12.60)$$

της μορφής

$$\psi(r_i, R_\alpha) = \phi(R_\alpha) \chi(r_i - r_j, r_i - R_\alpha, \mathbf{R}) \quad (12.61)$$

όπου η κυματοσυνάρτηση $\phi(R_\alpha)$ περιγράφει τις πυρηνικές κινήσεις. Ο όρος \hat{H}_N της κινητικής ενέργειας των πυρήνων δρώντας πάνω στην $\psi(r_i, R_\alpha)$ δίνει

$$\hat{H}_N \psi = \chi \hat{H}_N \phi + \phi \hat{H}_N \chi - \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{M_{N_\alpha}} \nabla_{R_\alpha}^2 \phi \nabla_{R_\alpha}^2 \chi \quad (12.62)$$

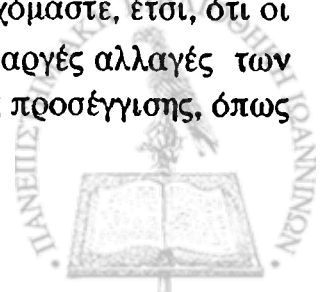
Επειδή ο τελεστής της ορμής είναι ανάλογος με την παράγωγο ως προς τη θέση και οι ορμές των πυρήνων (λόγω της μεγαλύτερης μάζας τους) είναι μεγαλύτερες από τις ορμές των ηλεκτρονίων, βλέπουμε ότι στην προσέγγιση Born-Oppenheimer ο όρος που κυριαρχεί στο δεξιό μέλος της (12.62) είναι ο πρώτος. Κατά συνέπεια, η (12.60) μας δίνει τότε

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_N + \hat{H}_e) \phi \chi = \chi \hat{H}_N \phi + \phi \hat{H}_e \chi = E \psi \quad (12.63)$$

Τέλος, με βάση την (12.59) παίρνουμε την εξίσωση Schrödinger για την κίνηση των πυρήνων

$$[\hat{H}_N + E_e(\mathbf{R})] \phi(\mathbf{R}_\alpha) = E \phi(\mathbf{R}_\alpha) \quad (12.64)$$

Ας συνοψίσουμε, λοιπόν, τώρα την προσέγγιση Born-Oppenheimer: Πρώτα λύνουμε την εξίσωση ιδιοτιμών (12.59) για τις ηλεκτρονικές καταστάσεις $\chi(r_i - r_j, r_i - R_\alpha, \mathbf{R})$ για δοσμένες (σταθερές) θέσεις R_α των πυρήνων. Δεχόμαστε, έτσι, ότι οι ηλεκτρονικές κυματοσυναρτήσεις προσαρμόζονται ομαλά στις αργές αλλαγές των θέσεων των πυρήνων (κάτι που αποτελεί ένα είδος αδιαβατικής προσέγγισης, όπως



στη μελέτη του διπλού αρμονικού ταλαντωτή και στη μέθοδο WKB). Οι ιδιοτιμές $E_e(\mathbf{R})$, που είναι συναρτήσεις των αποστάσεων \mathbf{R} , παριστάνουν την ολική ενέργεια του μορίου για τις δοσμένες (σταθερές) θέσεις των πυρήνων. Στο δεύτερο βήμα, η ενέργεια $E_e(\mathbf{R})$ παίζει το ρόλο ενός όρου δυναμικής ενέργειας στην εξίσωση Schrödinger (12.64) για την κίνηση των πυρήνων. Από τη λύση της βρίσκουμε την ολική ενέργεια E του μορίου. Η αντίστοιχη μοριακή κατάσταση περιγράφεται από την συνολική κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_\alpha) = \phi(\mathbf{R}_\alpha) \chi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R})$.

Το απλούστερο μόριο είναι το μοριακό ιόν του υδρογόνου H_2^+ , που είναι ένα σύστημα αποτελούμενο από δύο πρωτόνια και ένα ηλεκτρόνιο. Μπορεί κανείς να μελετήσει το σύστημα εξετάζοντας την εξίσωση (12.59) με το δυναμικό του διπλού αρμονικού ταλαντωτή (βλ. §4.5). Εμείς θα διερευνήσουμε το σύστημα εφαρμόζοντας τη μέθοδο των μεταβολών που δίνει ακριβέστερα αποτελέσματα. Μπορούμε να καταλάβουμε καλύτερα τις λύσεις της εξίσωσης (12.59), αν εξετάσουμε τις συμμετρίες της χαμιλτονιανής \hat{H}_e . Επειδή η \hat{H}_e είναι συμμετρική κάτω από κατοπτρισμό ως προς το μέσον της απόστασης $\mathbf{R} = \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta$, οι ηλεκτρονικές κυματοσυναρτήσεις χ μπορεί να ταξινομηθούν είτε σαν άρτιες χ_+ είτε σαν περιττές χ_- κάτω από αυτόν τον κατοπτρισμό. Για τις κατώτερες ενεργειακά καταστάσεις, μπορούμε σε πρώτη προσέγγιση να γράψουμε για τις καταστάσεις χ_+ και χ_- τις (δοκιμαστικές) κυματοσυναρτήσεις

$$\chi_{\pm}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_\beta, \mathbf{R}) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_\alpha) \pm \psi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_\beta) \quad (12.65)$$

όπου οι ψ_{1s} έχουν τη μορφή της κυματοσυνάρτησης της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου. Αυτή η προσέγγιση, κατά την οποία ατομικές κυματοσυναρτήσεις συνδυάζονται γραμμικά για να παραστήσουν μοριακές κυματοσυναρτήσεις, είναι μια μέθοδος που εφαρμόζεται και σε πιο πολύπλοκα μόρια. Χρησιμοποιώντας τις συναρτήσεις (12.65) στην έκφραση (9.122) για τη μέση τιμή της ενέργειας στη μέθοδο των μεταβολών, παίρνουμε

$$E_{\pm}(\mathbf{R}) = \frac{\int \chi_{\pm}^* H_e \chi_{\pm} d\mathbf{r}_1}{\int \chi_{\pm}^* \chi_{\pm} d\mathbf{r}_1} \quad (12.66)$$

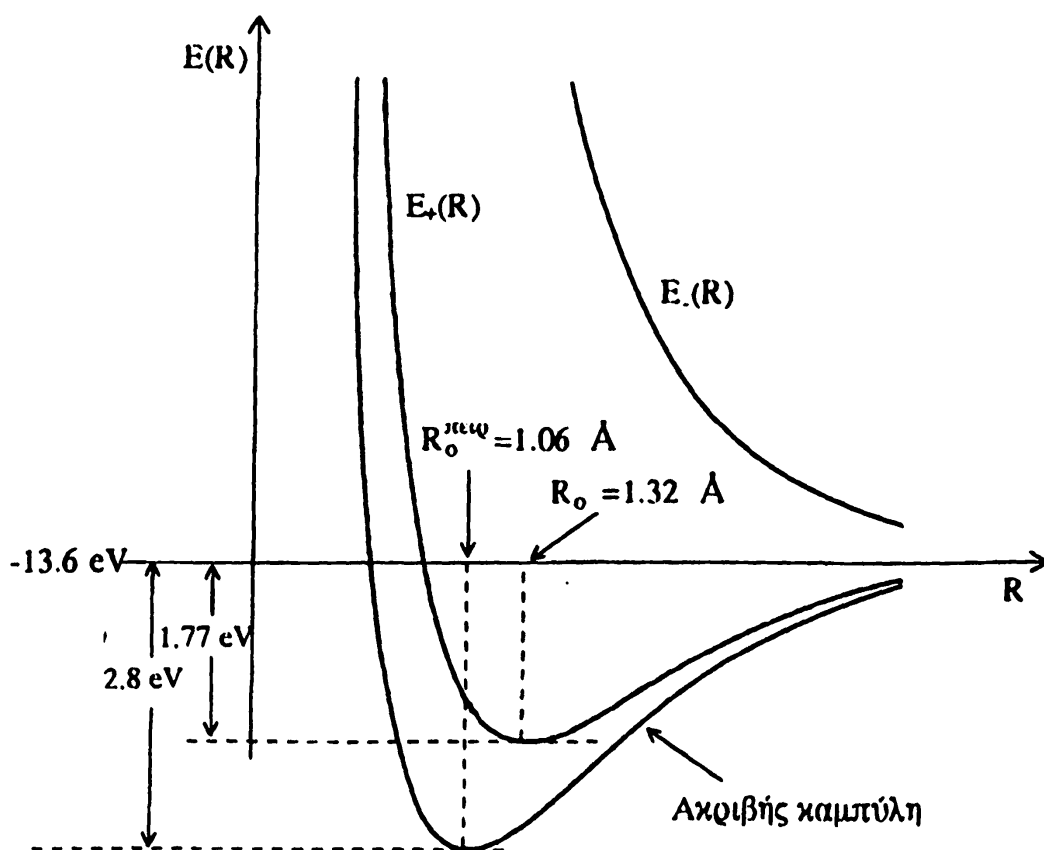
Όπως ξέρουμε (βλ. σχέση (9.131)), οι εκφράσεις αυτές αποτελούν ένα άνω όριο για τις ενέργειες της βασικής κατάστασης για κάθε τιμή του \mathbf{R} . Ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων στις εκφράσεις (12.66) απαιτεί αρκετές πράξεις. Θα περιοριστούμε εδώ να δώσουμε μόνο το αποτέλεσμα. Βρίσκουμε ότι είναι



$$E_{\pm}(R) = E_{1s} + \frac{e^2}{R} \frac{\left(1 + \frac{R}{\alpha_0}\right) e^{-2R/\alpha_0} \pm \left(1 - \frac{2}{3} \frac{R^2}{\alpha_0^2}\right) e^{-R/\alpha_0}}{1 \pm \left(1 + \frac{R}{\alpha_0} + \frac{1}{3} \frac{R^2}{\alpha_0^2}\right) e^{-R/\alpha_0}} \quad (12.67)$$

όπου E_{1s} είναι η ενέργεια της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου, $R = |R_{\alpha} - R_{\beta}|$ και α_0 η ακτίνα του Bohr.

Η γραφική παράσταση για τις καμπύλες $E_{\pm}(R)$ συναρτήσει της απόστασης R φαίνεται στο σχήμα 12.2. Η καμπύλη $E_{+}(R)$, που προκύπτει από



Σχ. 12.2 Το κατώτερο ηλεκτρονικό ενεργειακό επίπεδο για το ιόν του υδρογόνου.

την άρτια κυματοσυνάρτηση χ_{+} , εμφανίζει ένα ελάχιστο στο σημείο $R_0 = 1.32 \text{ \AA}$ και, συνεπώς, παριστάνει τη δέσμια μοριακή βασική κατάσταση του ιόντος του υδρογόνου H_2^{+} με ενέργεια σύνδεσης $E_{+}(R_0) - E_{1s} = -1.77 \text{ eV}$. Σημειώτεον ότι ασυμπτωτικά, όταν $R \rightarrow \infty$, το σύστημα θα τείνει να χωριστεί σ' ένα άτομο υδρογόνου και σ' ένα πρωτόνιο και η ηλεκτρονική ενέργεια του συστήματος θα τείνει στην $E_{1s} = -13.6 \text{ eV}$ της ενέργειας της βασικής κατάστασης του ατόμου του

υδρογόνου. Η πειραματική τιμή για την μοριακή απόσταση των δύο πρωτονίων είναι 1.06Å και για την ενέργεια σύνδεσης -2.8 eV, όπως δείχνεται και στο σχήμα 12.2. Ένας ακριβέστερος υπολογισμός μπορεί να γίνει, βέβαια, βελτιώνοντας την προσέγγισή μας στις πραγματικές τιμές, π.χ. εισάγοντας επιπλέον στη μέθοδο των μεταβολών ένα ενεργό φορτίο για το πρωτόνιο (όπως στο άτομο του ηλίου) και ελαχιστοποιώντας τόσο ως προς αυτό, όσο και ως προς R. Τέλος, σε αντίθεση με την $E_+(R)$, η καμπύλη $E_-(R)$ δεν εμφανίζει ελάχιστο, δεν έχουμε δέσμια κατάσταση και ένα ιόν υδρογόνου στην κατάσταση χ_- θα διασπαστεί αμέσως σ' ένα πρωτόνιο και ένα ηλεκτρόνιο.

Στη συνέχεια, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την $E_+(R)$ στην θέση της $E_e(R)$ στην εξίσωση (12.64) για να μελετήσουμε την κίνηση των πυρήνων του ιόντος H_2^+ (δηλαδή των δύο πρωτονίων). Επειδή η $E_+(R)$ είναι συνάρτηση μόνο του μέτρου R, θα δρα στην εξίσωση (12.64) σαν ένα κεντρικό δυναμικό. Οι λύσεις της (12.64) θα μπορούν, τότε, να γραφούν με την μορφή

$$\phi_+(\mathbf{R}) = \frac{1}{R} u_{\nu l}(R) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (12.68)$$

όπου η ακτινική συνάρτηση $u_{\nu l}(R)$ ικανοποιεί τη γνωστή εξίσωση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\alpha\beta}} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_{\alpha\beta} R^2} + E_+(R) \right] u_{\nu l}(R) = E u_{\nu l}(R) \quad (12.69)$$

με $\mu_{\alpha\beta} = m_p/2$ την ανηγμένη μάζα του συστήματος των δύο πρωτονίων. Επειδή η πυρηνική κίνηση περιορίζεται σε μικρές αποστάσεις γύρω από την $R=R_0$, μπορούμε για την περιστροφική μοριακή ενέργεια να πάρουμε προσεγγιστικά την τιμή

$$E_{\text{περ}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_{\alpha\beta} R_0^2} \quad (12.70)$$

ενώ συγχρόνως ν' αναπτύξουμε την $E_+(R)$ γύρω από την θέση $R=R_0$ και να μείνουμε στην παραβολική προσέγγιση:

$$E_+(R) \approx E_+(R_0) + \frac{1}{2} k(R - R_0)^2 \quad (12.71)$$

όπου $k = [d^2 E_+(R)/dR^2] |_{R=R_0}$. Μ' αυτές τις προσεγγίσεις η (12.69) παίρνει τη μορφή της εξίσωσης ενός αρμονικού ταλαντωτή

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\alpha\beta}} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{2} k(R - R_0)^2 \right] u_{\nu l}(R) = E_{\nu} u_{\nu l}(R) \quad (12.72)$$

όπου η ενέργεια των πυρηνικών ταλαντώσεων θα είναι η $E_{\nu} = E - E_{\text{περ}} - E_+(R_0)$ και θα δίνεται από την έκφραση



$$E_{\tau\alpha\lambda} = \hbar \omega_N \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad (12.73)$$

όπου $\omega_N = (k/\mu_{\alpha\beta})^{1/2}$. Όπως σημειώσαμε ήδη, οι περιστροφικές ενέργειες (12.70) είναι της τάξης του 10^{-3} eV, ενώ οι ταλαντωτικές ενέργειες (12.73) της τάξης του 10^{-1} eV.

Η ίδια μέθοδος μελέτης, που εφαρμόσαμε στο μοριακό ιόν του υδρογόνου H_2^+ , μπορεί να εφαρμοστεί και στο ίδιο το μόριο του υδρογόνου H_2 . Στην περίπτωση αυτή έχουμε δύο ηλεκτρόνια και θα πρέπει να λάβουμε υπ' όψη μας και τις κυματοσυναρτήσεις σπιν. Έτσι, για την βασική κατάσταση θα πάρουμε τώρα τις (δοκιμαστικές) κυματοσυναρτήσεις

$$\chi_{\pm}(r_1 - R_{\alpha}, r_1 - R_{\beta}, r_2 - R_{\alpha}, r_2 - R_{\beta}, \mathbf{R}) = \psi_{1s}(r_1 - R_{\alpha})\psi_{1s}(r_2 - R_{\beta}) \pm \psi_{1s}(r_1 - R_{\beta})\psi_{1s}(r_2 - R_{\alpha}) \quad (12.74)$$

Επειδή η χ_+ είναι άρτια κάτω από την εναλλαγή r_1 και r_2 , θα πρέπει να συνδυαστεί με την αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν $\chi_A(1,2) = \chi_{0,0}$. Αντίθετα, η χ_- θα πρέπει να συνδυαστεί με την συμμετρική κυματοσυνάρτηση σπιν $\chi_S(1,2) = \chi_{1,(\pm 1,0)}$. Η μελέτη μπορεί να προχωρήσει στη συνέχεια με τη μέθοδο των μεταβολών, όπως και στην περίπτωση του ιόντος του υδρογόνου. Για την κατώτερη ενεργειακά κατάσταση χ_+ βρίσκουμε τότε μοριακή απόσταση $R_0 = 0.87 \text{ \AA}$ και ενέργεια σύνδεσης $E_{\text{συνδ}} = -3.14$ eV. Οι πειραματικές τιμές είναι $R_0^{\text{πειρ}} = 0.74 \text{ \AA}$ και $E_{\text{συνδ}}^{\text{πειρ}} = -4.75$ eV. Όπως και στο ιόν του υδρογόνου, μια καλύτερη προσέγγιση στην πειραματική τιμή προκύπτει από μια πιο περίπλοκη εφαρμογή της μεθόδου των μεταβολών (με περισσότερες παραμέτρους στις δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις).

12.4. Δυνάμεις van der Waals

Θα τελειώσουμε αυτό το κεφάλαιο συζητώντας τις γνωστές δυνάμεις van der Waals, που είναι ένα είδος "διαμοριακής" αλληλεπίδρασης μακράς εμβέλειας ανάμεσα σε δύο ουδέτερα άτομα. Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, η μοριακή απόσταση R_0 ανάμεσα στους πυρήνες ενός μορίου είναι $R_0 \geq a_0$ (όπου $a_0 \sim 0.5 \text{ \AA}$ η ακτίνα του Bohr), οι δε μοριακές δυνάμεις προέρχονται από ανακατονομή των ηλεκτρονίων σθένους των ατόμων. Αντίθετα, εδώ ενδιαφερόμαστε για μεγάλες αποστάσεις ανάμεσα στα δύο άτομα $R \gg a_0$ και, όπως θα δούμε, η αλληλεπίδραση van der Waals έχει τη μορφή της αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρικών διπόλων. Σαν αποτέλεσμα, στα μικρά μόρια οι δυνάμεις van der Waals είναι πολύ ασθενείς και δεν παίζουν σημαντικό ρόλο.



Όμως, θα πρέπει να σημειώσουμε ότι σε μεγάλα μόρια μπορεί να γίνουν ισχυρές και να προκαλέσουν ενδιαφέροντα φαινόμενα (π.χ. υγροποίηση αερίων μορίων).

Θα σκιαγραφήσουμε τα παραπάνω για το απλούστερο παράδειγμα δύο ατόμων υδρογόνου στη βασική τους κατάσταση. Στη προσέγγιση που ενδιαφερόμαστε εδώ, θα γράψουμε τη χαμιλτονιανή του συστήματος σαν

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (12.75)$$

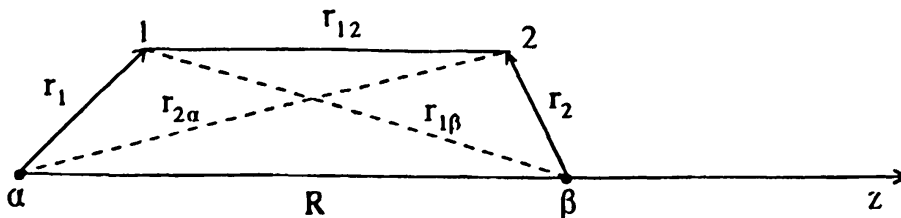
όπου

$$\hat{H}_0 = \left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r_1} \right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r_2} \right) \quad (12.76)$$

η αδιατάρακτη χαμιλτονιανή για τα δύο άτομα υδρογόνου και

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1\beta}} - \frac{e^2}{r_{2\alpha}} \quad (12.77)$$

ο όρος αλληλεπίδρασης, που είναι μικρός και μπορεί να θεωρηθεί σαν διαταραχή. Οι συντεταγμένες του συστήματος που θεωρούμε φαίνονται στο σχήμα 12.3



Σχ. 12.3 Δύο άτομα υδρογόνου των οποίων οι πυρήνες (α, β) απέχουν απόσταση R .

Η αδιατάρακτη κυματοσυνάρτηση του συστήματος, για τη βασική κατάσταση που εξετάζουμε, είναι

$$\psi_0(1,2) = \psi_{1s}(r_1) \psi_{1s}(r_2) \quad (12.78)$$

(λόγω της μεγάλης απόστασης R , αγνοούμε φαινόμενα αντισυμμετρικότητας της κυματοσυνάρτησης).

Το παράδειγμα που συζητάμε προσφέρεται για μια διδακτική εφαρμογή τόσο της διαταρακτικής μεθόδου (με διαταραχή την \hat{H}'), όσο και της μεθόδου των μεταβολών. Με τη θεωρία διαταραχών είναι ευκολότερο να δούμε ότι ο κύριος όρος στην ενέργεια αλληλεπίδρασης van der Waals είναι αντιστρόφως ανάλογος της έκτης δύναμης της απόστασης R ($\sim 1/R^6$). Από την άλλη μεριά, θα δούμε ότι η



θεωρία διαταραχών και η μέθοδος των μεταβολών μπορούν ν' αντιπροσωπεύσουν αντίθετα όρια στον προσδιορισμό του συντελεστή του όρου $1/R^6$.

Μπορούμε αρχικά ν' αναπτύξουμε τον όρο \hat{H}' σε δυνάμεις του $1/R$ και να κρατήσουμε τους κύριους όρους του αναπτύγματος. Βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{e^2}{R} \left\{ 1 + \left[1 + \frac{2(z_2 - z_1)}{R} + \frac{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}{R^2} \right]^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. - \left(1 - \frac{2z_1}{R} + \frac{r_1^2}{R^2} \right)^{-1/2} - \left(1 + \frac{2z_2}{R} + \frac{r_2^2}{R^2} \right)^{-1/2} \right\} \\ &\approx \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) \end{aligned} \quad (12.79)$$

Αυτός ο κύριος όρος στο ανάπτυγμα της \hat{H}' περιγράφει την ενέργεια αλληλεπίδρασης δύο ηλεκτρικών διπόλων, του πρώτου από το πρωτόνιο α και το ηλεκτρόνιο 1 με ηλεκτρική διπολική ροπή $\mathbf{D}_1 = -e\mathbf{r}_1$ και του δεύτερου από το πρωτόνιο β και το ηλεκτρόνιο 2 με ηλεκτρική διπολική ροπή $\mathbf{D}_2 = -e\mathbf{r}_2$. Η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι τότε

$$\hat{H}_{D'} = \frac{1}{R^3} \left[\mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{D}_1 - 3 \frac{(\mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{D}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right] \quad (12.80)$$

που ανάγεται στην (12.79) για την γεωμετρία του σχήματος 12.3. Οι όροι ανώτερης τάξης $1/R^4$ και $1/R^5$, που έχουμε αγνοήσει στην (12.79), αντιστοιχούν σε αλληλεπιδράσεις διπόλου - τετραπόλου και τετραπόλου - τετραπόλου, αντίστοιχα.

Ας δούμε πρώτα τι μας δίνει η θεωρία διαταραχών. Είναι φανερό ότι στην έκφραση για την ολική ενέργεια του συστήματος

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}^{(1)} + \mathbf{E}^{(2)} + \dots \quad (12.81)$$

με $\mathbf{E}_0 = 2\mathbf{E}_{1s}$, η πρώτη τάξης διόρθωση $\mathbf{E}^{(1)}$

$$\mathbf{E}^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_0 \rangle = \int \psi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \hat{H}' \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (12.82)$$

μηδενίζεται, επειδή η \hat{H}' είναι περιττή συνάρτηση ως προς \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 (μπορεί, επίσης, ναδειχθεί ότι και οι όροι ανώτερης τάξης που έχουμε αγνοήσει δίνουν μηδενική συνεισφορά στην $\mathbf{E}^{(1)}$, επειδή αυτοί οι όροι μπορεί να εκφραστούν συναρτήσει των σφαιρικών αρμονικών Y_{lm} με $l \neq 0$). Έτσι, γίνεται φανερό ότι ο κύριος όρος στην ενέργεια αλληλεπίδρασης θα δίνεται από την δεύτερης τάξης διόρθωση στη θεωρία διαταραχών, που είναι σε προφανή συμβολισμό (βλ. σχέση (9.17))



$$E^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_0 \rangle|^2}{E_0 - E_n} \quad (12.83)$$

και, συνεπώς, θα εξαρτάται από την απόσταση σαν $1/R^6$. Επειδή ο παρονομαστής στην (12.83) είναι αρνητικός, η $E^{(2)}$ είναι αρνητική και η αλληλεπίδραση ανάμεσα στα δύο άτομα υδρογόνου θα είναι ελκτική. Το συμπέρασμα αυτό ισχύει και σε γενικότερα συστήματα ζευγών ουδέτερων ατόμων και μπορούμε να γράψουμε γενικά για $R \gg \alpha_0$ ότι

$$E^{(2)}(R) = - \frac{C_W}{R^6} \quad (12.84)$$

Η θετική σταθερά van der Waals C_W είναι διαφορετική βέβαια από σύστημα σε σύστημα.

Ας επιστρέψουμε, όμως, εμείς στο σύστημα των δύο ατόμων υδρογόνου και ας δούμε πως μπορούμε να πάρουμε ένα κάτω όριο για την $E^{(2)}(R)$. Αυτό προκύπτει αν παρατηρήσουμε ότι η (12.83) συνεπάγεται τη σχέση

$$E^{(2)}(R) \geq \frac{1}{E_0 - E_1} \sum_{n \neq 0} |\langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_0 \rangle|^2 \quad (12.85)$$

όπου $E_1 = 2E_{2p}$ η ενέργεια της πρώτης διεγερμένης κατάστασης ($2p$) των ατόμων υδρογόνου. Αλλά

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq 0} |\langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_0 \rangle|^2 &= \sum_{n \neq 0} \langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_0 \rangle - |\langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (12.86)$$

και, συνεπώς,

$$E^{(2)}(R) \geq \frac{\langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle}{E_0 - E_1} \quad (12.87)$$

Για τον υπολογισμό της αναμενόμενης τιμής του \hat{H}'^2 διευκολυνόμαστε αν παρατηρήσουμε ότι χρειαζόμαστε μόνο τους όρους

$$\hat{H}'^2 = \frac{e^4}{R^6} (x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 4z_1^2 z_2^2 + \dots) \quad (12.88)$$

γιατί οι υπόλοιποι μεικτοί όροι αποτελούν περιττές συναρτήσεις και μηδενίζονται κατά την ολοκλήρωση. Χρησιμοποιώντας τώρα το τυπικό ολοκλήρωμα

$$\int x^2 |\psi_{1s}(r)|^2 dr = \frac{1}{3} \int r^2 |\psi_{1s}(r)|^2 dr = \alpha_0^2$$

συμπεραίνουμε ότι



$$\langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle = \frac{6e^4 \alpha_0^4}{R^6} \quad (12.89)$$

Επειδή

$$E_0 - E_1 = 2E_{1s} - 2E_{2p} = - \frac{3e^2}{4\alpha_0} \quad (12.90)$$

παίρνουμε τελικά ότι

$$E^{(2)}(R) \geq - \frac{8e^2 \alpha_0^5}{R^6} \quad (12.91)$$

Η έκφραση αυτή αποτελεί ένα κάτω όριο για την $E^{(2)}(R)$.

Ένα άνω όριο, τώρα, για την $E^{(2)}(R)$ μπορεί να προκύψει, αν χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο των μεταβολών. Για δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την

$$\psi(1,2,\lambda) = \psi_0(1,2) (1 + \lambda \hat{H}') \quad (12.92)$$

μια και από την προηγούμενη πείρα μας με την εφαρμογή της θεωρίας διαταραχών ενδιαφερόμαστε για τον συντελεστή του όρου $1/R^6$. Έχουμε τότε από τις σχέσεις (9.122) και (9.131) ότι

$$E_0 + E^{(2)}(R) \leq \frac{\int \psi_0^*(1,2) (1 + \lambda \hat{H}') (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi_0(1,2) (1 + \lambda \hat{H}') dr_1 dr_2}{\int |\psi_0(1,2)|^2 (1 + \lambda \hat{H}')^2 dr_1 dr_2} \quad (12.93)$$

Για το δεξιό μέλος Δ της προηγούμενης σχέσης έχουμε

$$\Delta = \frac{E_0 + 2\lambda \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle + \lambda^2 \langle \psi_0 | \hat{H}' \hat{H}_0 \hat{H}' | \psi_0 \rangle}{1 + \lambda^2 \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle} \quad (12.94)$$

Επειδή είναι

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{H}' \hat{H}_0 \hat{H}' | \psi_0 \rangle &= \sum_{n,m} \langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{H}_0 | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_0 \rangle \\ &= \sum_n E_n |\langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_n \rangle|^2 < 0 \end{aligned} \quad (12.95)$$

μια και οι ενέργειες E_n είναι αρνητικές, συμπεραίνουμε ότι

$$\Delta \leq \frac{E_0 + 2\lambda \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle}{1 + \lambda^2 \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle} \quad (12.96)$$

Καθώς ενδιαφερόμαστε μόνο για όρους μέχρι τάξης \hat{H}'^2 , αναπτύσσοντας τον παρονομαστή παίρνουμε



$$\frac{E_0 + 2\lambda \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle}{1 + \lambda^2 \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle} = E_0 + (2\lambda - E_0 \lambda^2) \langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle \quad (12.97)$$

Το ελάχιστο συμβαίνει όταν $\lambda = 1/E_0$ και τότε η (12.93) με βάση τις προηγούμενες εκφράσεις δίνει

$$E_0 + E^{(2)}(R) \leq E_0 + \frac{\langle \psi_0 | \hat{H}'^2 | \psi_0 \rangle}{E_0} \quad (12.98)$$

Έτσι, με βάση την (12.89) βρίσκουμε το άνω όριο

$$E^{(2)}(R) \leq - \frac{6e^2 \alpha_0^5}{R^6} \quad (12.99)$$

Μαζί με το κάτω όριο (12.91), μπορούμε να γράψουμε για την ενέργεια αλληλεπίδρασης van der Waals την ανισότητα

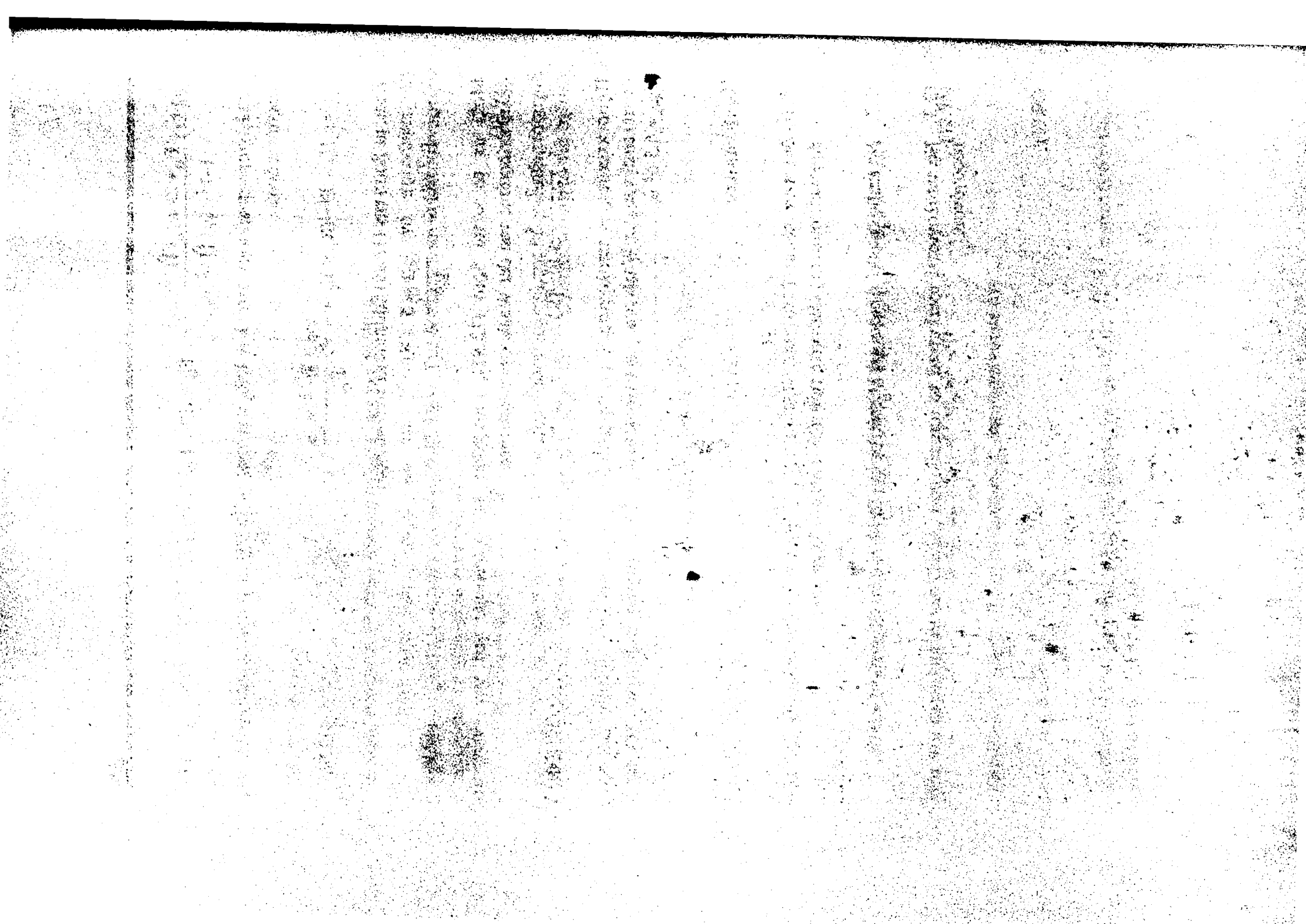
$$- \frac{8e^2 \alpha_0^5}{R^6} \leq E^{(2)}(R) \leq - \frac{6e^2 \alpha_0^5}{R^6} \quad (12.100)$$

Προσεκτικότεροι υπολογισμοί με τη μέθοδο των μεταβολών δίνουν για τον συντελεστή van der Waals και για το σύστημα των δύο ατόμων υδρογόνου την τιμή $C_W \approx 6.5 e^2 \alpha_0^5$.

Προβλήματα

- 12.1. Να επαληθευτεί το αποτέλεσμα (12.16) για την συνεισφορά (12.12) χρησιμοποιώντας ιδιότητες των πολυωνύμων Legendre.
- 12.2. Να επιβεβαιωθεί η διαφορά λεπτής υφής (12.18) για το άτομο του λιθίου.
- 12.3. Να υπολογιστεί αναλυτικά το αποτέλεσμα (12.67) για το μοριακό ιόν του υδρογόνου.





ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ, ΑΣΤΡΟΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΚΟΣΜΟΛΟΓΙΑ

Η στενή σχέση κβαντικής θεωρίας και αστροφυσικής αρχίζει ουσιαστικά πολύ πριν τη διατύπωση της κβαντικής μηχανικής. Ήδη από το 1860, οι Kirchoff και Bunsen είχαν ανακαλύψει τις χαρακτηριστικές φασματικές γραμμές, που αποκαλύπτουν την παρουσία ενός αερίου ανάμεσα σε μια πηγή και σ'ένα φασματογράφο. Έγινε αμέσως αντιληπτό ότι η ανακάλυψη αυτή μπορούσε να μας αποκαλύψει τη σύνθεση ενός αντικειμένου, όσο μακριά και αν αυτό βρίσκεται μέσα στο σύμπαν, και γι'αυτό αποτέλεσε τη βάση της σύγχρονης αστροφυσικής. Το 1881 ο Huggins ανακάλυψε σε αστρικά φάσματα μια πλήρη σειρά δέκα φασματικών γραμμών του ατόμου του υδρογόνου. Ήταν τα πρώτα πειραματικά δεδομένα, που ακολουθούσαν τις εμπειρικές σχέσεις (E.5) και (E.6), που είδαμε στην ιστορική εισαγωγή στην αρχή αυτού του βιβλίου. Εκτός από το υδρογόνο, ένα άλλο στοιχείο, το ήλιο, ανακαλύφθηκε για πρώτη φορά το 1868 στο φάσμα του Ήλιου (απ' όπου και το όνομά του). Μάλιστα εκεί διαπιστώθηκαν για πρώτη φορά οι δύο διαφορετικές μορφές φάσματος του ηλίου, το παραήλιο και το ορθοήλιο, όπου από το φάσμα του τελευταίου απουσιάζει μια γραμμή (βλ. κεφάλαιο VIII).

Έτσι, σήμερα, τόσο με παρατηρήσεις πάνω στη Γη, όσο και με παρατηρήσεις από δορυφόρους, είναι δυνατόν να γνωρίσουμε τη σύνθεση της μεσοαστρικής ύλης, καθώς επίσης και εκείνη των αστέρων. Ακόμη περισσότερο, με βάση την κβαντική θεωρία μπορούμε να μελετήσουμε τα φαινόμενα της σύνθεσης των πυρήνων τόσο κατά τις αρχικές στιγμές της μεγάλης έκρηξης του σύμπαντος, όσο και στο εσωτερικό των αστέρων.



Εμείς εδώ θα περιοριστούμε στο να σκιαγραφήσουμε μερικά απλά, αλλά χαρακτηριστικά φαινόμενα: τον προσδιορισμό του μεγέθους ενός αστέρα, τις ταλαντώσεις των νετρίνων και τη σχέση τους με το πρόβλημα των νετρίνων από τον ήλιο, τα κοσμικά μίξερς και την γραμμή των 21cm και, τέλος, την κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου του σύμπαντος.

Π-Ι.1. Μικροσκοπικά και μακροσκοπικά φαινόμενα: τάξεις μεγέθους

Η μεγάλη πλειοψηφία των φαινομένων, που παρατηρούμε γύρω μας, προέρχεται από δύο είδη αλληλεπιδράσεων, τις ηλεκτρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις (κύρια δυνάμεις Coulomb) μεταξύ φορτισμένων σωματιδίων (ηλεκτρονίων, πυρήνων) και τις δυνάμεις βαρύτητας. Αυτό που θα επιχειρήσουμε πρώτα είναι να δούμε την τάξη μεγεθών, που μας ενδιαφέρουν και που χαρακτηρίζουν την συμπεριφορά της ύλης λόγω δυνάμεων ηλεκτρομαγνητισμού και βαρύτητας. Οι εκφράσεις των μεγεθών αυτών θα δίνονται, βέβαια, συναρτήσει ορισμένων άλλων θεμελιωδών μεγεθών (ή φυσικών σταθερών), που υπεισέρχονται στο πρόβλημα. Τέτοια είναι το φορτίο e του ηλεκτρονίου, η σταθερά \hbar του Planck, η ταχύτητα c του φωτός, η μάζα m_e του ηλεκτρονίου, η μάζα m_p του πρωτονίου και η σταθερά G της βαρύτητας (σταθερά του Newton).

Έχουμε ήδη δει πώς μπορούμε να πάρουμε με βάση την αρχή της αβεβαιότητας την τάξη μεγέθους της ακτίνας και της ενέργειας της βασικής κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου (βλ. §1.4). Διατυπώνοντας διαφορετικά το ίδιο πράγμα, έχουμε για το άτομο του υδρογόνου και για τη μέση τιμή της ενέργειας

$$\langle H \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m_e} \right\rangle - \left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle \quad (\text{Π-Ι.1})$$

Θέτοντας $\frac{1}{r} = \frac{1}{R}$ και $\langle p^2 \rangle \sim \frac{\hbar^2}{R^2}$, πράγμα που αντιστοιχεί σε μήκος κύματος de Broglie $\lambda \sim R$, παίρνουμε

$$\langle H \rangle \sim \left\langle \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \right\rangle - \left\langle \frac{e^2}{R} \right\rangle \quad (\text{Π-Ι.2})$$

Το ελάχιστο αυτής της έκφρασης συναρτήσει του R μας δίνει την τάξη μεγέθους για την ενέργεια της βασικής κατάστασης. Αυτό συμβαίνει για

$$R = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = a_0 \quad (\text{Π-Ι.3})$$

και είναι



$$\langle H \rangle_{\min} = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{\alpha_0} \quad (\text{Π-I.4})$$

Είναι, βέβαια, συμπτωματικό το ότι πήραμε το ακριβές αποτέλεσμα. Μπορεί κανείς να συνεχίσει χρησιμοποιώντας την ίδια διαδικασία αλλά με μήκος κύματος de Broglie $\lambda_n \sim \frac{R}{n}$, $n = 1, 2, \dots$, και να βρει τη σωστή εξάρτηση από τον κβαντικό αριθμό n των ενεργειών των διεγερμένων καταστάσεων.

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα πολυπλοκότερο άτομο, που έχει Z ηλεκτρόνια. Η χαμιλτονιανή του θα είναι

$$H = \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{Π-I.5})$$

Θέτοντας $\langle p_i^2 \rangle = \Delta p^2$ και $\langle \frac{1}{r_i} \rangle = \langle \frac{1}{r_{ij}} \rangle = \frac{1}{R}$ (μια και ενδιαφερόμαστε μόνο για τάξη μεγέθους), έχουμε για τη μέση τιμή της ενέργειας

$$\langle H \rangle \sim Z \frac{\Delta p^2}{2m_e} - \frac{Z^2 e^2}{R} + \frac{Z(Z-1)}{2} \frac{e^2}{R} \sim Z \frac{\Delta p^2}{2m_e} - \frac{Z^2 e^2}{2R} \quad (\text{Π-I.6})$$

Τα ηλεκτρόνια είναι βέβαια φερμιόνια. Γενικά, για έναν αριθμό N όμοιων φερμιονίων, που βρίσκονται μέσα σε όγκο $V \sim R^3$, είναι εύκολο να πεισθούμε με βάση την αρχή του Pauli ότι για καθένα από αυτά διατίθεται "ζωτικός χώρος" με γραμμική διάσταση

$$d \sim \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \quad (\text{Π-I.7})$$

Το μήκος κύματος de Broglie για καθένα φερμιόνιο είναι, συνεπώς,

$$\lambda \sim \frac{R}{N^{1/3}} \quad (\text{Π-I.8})$$

και στην διαδικασία υπολογισμού της τάξης μεγέθους της βασικής κατάστασης η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg θα πρέπει να γραφεί

$$\Delta p \cdot \Delta x \sim \hbar N^{1/3} \quad (\text{Π-I.9})$$

Έτσι, θέτοντας στην έκφραση (Π-I.6)

$$\Delta p \sim \frac{\hbar Z^{1/3}}{R} \quad (\text{Π-I.10})$$

και ελαχιστοποιώντας την προκύπτουσα έκφραση, παίρνουμε



$$R \sim Z^{-1/3} \frac{2\hbar^2}{m_e e^2} \sim Z^{-1/3} \frac{\hbar}{m_e c \alpha} \quad (\text{Π-I.11})$$

$$\langle H \rangle_{\min} \sim - Z^{7/3} \frac{m_e e^4}{8\hbar^2} \sim - Z^{7/3} m_e c^2 \alpha^2, \quad (\text{Π-I.12})$$

όπου τώρα έχουμε εκφράσει τ' αποτελέσματα συναρτήσει της σταθεράς λεπτής υφής $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, θεμελιώδους σταθεράς των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων.

Έχουμε πάρει, έτσι, με πολύ απλό τρόπο την ενέργεια της βασικής κατάστασης ενός ατόμου με Z ηλεκτρόνια (εξάρτηση $Z^{7/3}$) και την μέση απόσταση R (εξάρτηση $Z^{-1/3}$), αποτελέσματα που επαληθεύονται με μεθόδους πολύ πιο αυστηρές (π.χ. προσέγγιση Hartree - Fock, §12.2). Ας θυμηθούμε εδώ ότι οι αντίστοιχες εξαρτήσεις για τα υδρογονοειδή άτομα είναι Z^{-1} για τη μέση απόσταση και Z^2 για την ενέργεια.

Ας δούμε τώρα τι γίνεται με τις δυνάμεις βαρύτητας. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα μεγάλο αριθμό N πυρήνων με μαζικό αριθμό A και, συνεπώς, μάζα $A m_p$, όπου m_p η μάζα του πρωτονίου, και ότι οι πυρήνες περιβάλλονται από ένα σύνολο N ηλεκτρονίων. Επειδή οι πυρήνες είναι πολύ πιο βαρείς από τα ηλεκτρόνια, η κινητική ενέργεια του συστήματος είναι κύρια εκείνη των ηλεκτρονίων. Αντίθετα, η δυναμική ενέργεια του συστήματος κυριαρχείται από τη βαρυτική έλξη μεταξύ των πυρήνων (για μεγάλο αριθμό N η βαρυτική ενέργεια είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια Coulomb). Έτσι, σε πρώτη προσέγγιση η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$H \approx \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_e} - \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \frac{GA^2 m_p^2}{r_{ij}} \quad (\text{Π-I.13})$$

Η μέση τιμή της ενέργειας θα είναι, λοιπόν,

$$\langle H \rangle \sim N \frac{\langle p^2 \rangle}{2m_e} - \frac{N^2}{2} GA^2 m_p^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \quad (\text{Π-I.14})$$

Θέτοντας $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{R}$ και $\langle p^2 \rangle = \Delta p^2 \sim \left(\frac{\hbar N^{1/3}}{R} \right)^2$ (μεταχειριζόμαστε τους πυρήνες σαν φερμιόνια, ανεξάρτητα από το σπιν τους, μια και η κατανομή τους στο χώρο, άρα και η κυματοσυνάρτησή τους, πρέπει να είναι ίδια με των ηλεκτρονίων, λόγω της τοπικής ηλεκτρικής ουδετερότητας της ύλης) και ελαχιστοποιώντας, παίρνουμε τις εκφράσεις

$$R \sim N^{-1/3} \frac{2\hbar^2}{m_e GA^2 m_p^2} \sim N^{-1/3} \frac{\hbar}{m_e c \alpha GA^2} \quad (\text{Π-I.15})$$



$$\langle H \rangle_{\min} \sim -N^{7/3} \frac{m_e G^2 A^4 m_p^4}{8\hbar^2} \sim -N^{7/3} m_e c^2 \alpha_G^2 A^4 \quad (\text{Π-I.16})$$

όπου $\alpha_G = \frac{G m_p^2}{\hbar c} \sim 6 \times 10^{-39}$ η σταθερά των βαρυτικών αλληλεπιδράσεων, αντίστοιχη της σταθεράς α των ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων. Σημειώνουμε εδώ ότι, όπως φαίνεται από τις αριθμητικές τιμές των σταθερών α και α_G , οι ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις είναι πολύ ισχυρότερες από τις δυνάμεις βαρύτητας (βλ. και πρόβλημα 9.5). Παρ' όλα αυτά, επειδή οι δυνάμεις βαρύτητας δρουν πάντα προσθετικά, σε μεγάλες αποστάσεις κυριαρχούν, μια και εκεί η ηλεκτρική ουδετερότητα της ύλης εξαφανίζει τα ηλεκτροστατικά φαινόμενα.

Ας δούμε τώρα τι συμπεράσματα μπορούμε να βγάλουμε συγκρίνοντας τις δυνάμεις βαρύτητας με τις δυνάμεις Coulomb. Ας θεωρήσουμε ένα σύστημα N ατόμων ή μορίων, που συνδέονται μεταξύ τους με δυνάμεις Coulomb. Όσον αφορά στην τάξη μεγέθους, περιμένουμε η ηλεκτροστατική ενέργεια σύνδεσης ενός τέτοιου συστήματος να είναι ανάλογη με τον αριθμό N και έτσι θα έχουμε

$$E_{\eta\lambda} \sim -N m_e c^2 \alpha^2 \quad (\text{Π-I.17})$$

(ενέργεια σύνδεσης ανά άτομο ή μόριο σταθερή). Αντίθετα, η βαρυτική ενέργεια σύνδεσης του συστήματος αυξάνει πολύ γρηγορότερα με τον αριθμό N . Λόγω της αρχής του Pauli, όπως είδαμε προηγούμενα, θα έχουμε

$$E_{\beta\alpha\sigma} \sim -N^{7/3} m_e c^2 \alpha_G^2 A^4 \quad (\text{Π-I.18})$$

Σαν αποτέλεσμα, βλέπουμε ότι πέρα από κάποιο κρίσιμο αριθμό $N_{\kappa\sigma}$ οι δυνάμεις βαρύτητας κυριαρχούν πάνω στις δυνάμεις Coulomb. Αυτό θα γίνει όταν

$$N_{\kappa\sigma} m_e c^2 \alpha^2 = N_{\kappa\sigma}^{7/3} m_e c^2 \alpha_G^2 A^4, \quad (\text{Π-I.19})$$

δηλαδή για

$$N_{\kappa\sigma} \sim \frac{1}{A^3} N_0, \quad N_0 = \left(\frac{\alpha}{\alpha_G} \right)^{3/2} \quad (\text{Π-I.20})$$

Ο αριθμός αυτός αντιστοιχεί σε μάζα

$$M_{\kappa\sigma} = A m_p N_{\kappa\sigma} = \frac{1}{A^2} M_0, \quad M_0 = m_p N_0 \quad (\text{Π-I.21})$$

και σε βαρυτική ακτίνα

$$R_{\kappa\sigma} \sim N_{\kappa\sigma}^{-1/3} \frac{\hbar}{m_e c \alpha_G A^2} = \frac{1}{A} R_0, \quad R_0 = \frac{\hbar}{m_e c \sqrt{\alpha \alpha_G}} \quad (\text{Π-I.22})$$



Η ακτίνα R_0 είναι ο μέσος γεωμετρικός όρος ανάμεσα στην "ηλεκτροστατική" και τη "βαρυτική" ακτίνα Bohr. Αριθμητικά έχουμε

$$N_0 \sim 1.2 \times 10^{54}$$

$$M_0 \sim 2 \times 10^{27} \text{ Kg} \sim 10^{-3} M_{\odot}$$

$$R_0 \sim 6 \times 10^7 \text{ m}$$

όπου $M_{\odot} \sim 10^{30} \text{ kg}$ η μάζα του ήλιου. Είναι ενδεικτικό να συγκρίνουμε τις τιμές M_{κ_0} και R_{κ_0} που αποτελούν τάξη μεγέθους, με τιμές που αντιστοιχούν σε ουράνια σώματα του ηλιακού μας συστήματος. Έτσι, ο πλατίνης Δίας συντίθεται κύρια από υδρογόνο ($A = 1$) και η μάζα και η ακτίνα του είναι $M_{\Delta} = 2 \times 10^{27} \text{ kg}$, $R_{\Delta} = 7 \times 10^7 \text{ m}$. Για τη Γη και τον Άρη είναι $A \sim 50$ και $M_{\kappa_0} = \frac{1}{A^2} M_0 \sim 8 \times 10^{23} \text{ kg}$, $R = \frac{1}{A} R_0 \sim 1.2 \times 10^6 \text{ m}$. Οι τιμές αυτές πρέπει να συγκριθούν με τις πραγματικές τιμές

$$M_{\Gamma} = 6 \times 10^{24} \text{ kg} , \quad R_{\Gamma} = 6 \times 10^6 \text{ m}$$

$$M_A = 6 \times 10^{23} \text{ kg} , \quad R_A = 3 \times 10^6 \text{ m}$$

Οι βαρυτικές δυνάμεις παίζουν τον κύριο ρόλο στη συνοχή των πλανητών (που έχουν σχήμα σχεδόν σφαιρικό), ενώ οι δυνάμεις Coulomb εξακολουθούν να παίζουν βασικό ρόλο στη δομή της ύλης τόσο στο περίβλημα, όσο και στο εσωτερικό των πλανητών.

Το τελευταίο θέμα, που θα συζητήσουμε εδώ στο ίδιο πνεύμα, είναι η ελάχιστη μάζα που μπορεί να έχει ένας αστέρας για να "καίει". Ας υποθέσουμε ότι ένας αστέρας συντίθεται από έναν αριθμό N_a πρωτονίων. Η συνολική δυναμική ενέργεια, λόγω των βαρυτικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των πρωτονίων, είναι κατά προσέγγιση

$$-N_a^2 \frac{Gm_p^2}{R_a} \quad (\text{Π-1.23})$$

Από την άλλη μεριά, καθένα από τα N_a ηλεκτρόνια του αστέρα περιορίζεται σε μια περιοχή με διάσταση

$$d_a \sim \frac{R_a}{N_a^{1/3}} \quad (\text{Π-1.24})$$

και έχει μια ελάχιστη ενέργεια



$$\frac{\hbar^2}{2m_e d_\alpha^2} \quad (\text{Π-I.25})$$

Έχουμε ισορροπία όσο ισχύει η σχέση

$$N_\alpha^2 \frac{Gm_p^2}{R_\alpha} \sim \frac{N_\alpha \hbar^2}{2m_e d_\alpha^2} \quad (\text{Π-I.26})$$

Από τη σχέση αυτή παίρνουμε

$$\frac{1}{d_\alpha} \sim \alpha_G N_\alpha^{2/3} \frac{m_e c}{\hbar} \quad (\text{Π-I.27})$$

Μια άλλη σχέση, που πρέπει να ισχύει, είναι αυτή που εξισώνει την δυναμική βαρυτική ενέργεια με την κινητική ενέργεια των πρωτονίων, εκφρασμένη συναρτήσει της θερμοκρασίας T που επικρατεί στο εσωτερικό του αστέρα:

$$N_\alpha^2 \frac{Gm_p^2}{R_\alpha} \sim N_\alpha k T \quad (\text{Π-I.28})$$

όπου k η σταθερά Boltzmann. Έχουμε, συνεπώς,

$$k T \sim \alpha_G^2 N_\alpha^{4/3} m_e c^2 \quad (\text{Π-I.29})$$

Η τελευταία σχέση μπορεί να μας δώσει ένα όριο για την ελάχιστη μάζα του αστέρα, μια και η θερμοκρασία T πρέπει να είναι αρκετή για να μπορούν να συμβαίνουν θερμοπυρηνικές αντιδράσεις στο εσωτερικό του αστέρα. Έτσι, θέτοντας $T \sim 10^7 \text{ } ^\circ\text{K}$, βρίσκουμε ότι ο αριθμός N_α των πρωτονίων, που πρέπει να έχει ένας αστέρας για να "καίει", είναι

$$N_\alpha \geq 10^{56} \text{ πρωτόνια} \quad (\text{Π-I.30})$$

και, συνεπώς, η μάζα του πρέπει να είναι

$$M_\alpha \geq 10^{56} m_p \sim 2 \times 10^{29} \text{ kg} \quad (\text{Π-I.31})$$

Το απλό αυτό αποτέλεσμα είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τις παρατηρήσεις. Παραδείγματος χάρη, για τον ήλιο έχουμε $N_\odot \sim 10^{57}$ πρωτόνια, και $M_\odot \sim 2 \times 10^{30} \text{ kg}$.

Π-I.2. Αέριο Fermi και βαρυτική κατάρρευση αστέρων

Το αέριο Fermi, που γνωρίσαμε στην §8.2, έχει εφαρμογή σ' ένα σπουδαίο ζήτημα της αστροφυσικής, το τελικό στάδιο της εξέλιξης των αστέρων. Το θέμα έχει ως εξής: Η βαρύτητα παίζει το βασικό ρόλο στην εξέλιξη ενός αστέρα. Αυτή



προκαλεί αρχικά την συμπύκνωση διαστρικής ύλης για να σχηματισθεί ένας αστέρας και στη συνέχεια συντελεί στη βαθμιαία αύξηση της θερμοκρασίας του, μέχρι του σημείου όπου στο εσωτερικό του θ' αρχίσουν να πυροδοτούνται οι θερμοπυρηνικές αντιδράσεις. Σ' αυτή τη φάση ο αστέρας λάμπει. Μπορεί να θεωρηθεί ότι βρίσκεται σ' ένα είδος υδροστατικής ισορροπίας, όπου η βαρυντική πίεση εξουδετερώνεται από την πίεση, που προέρχεται από την θερμική κίνηση των συστατικών του και την ακτινοβολία. Λέμε τότε ότι ο αστέρας βρίσκεται στο στάδιο της κύριας ακολουθίας. Είναι το στάδιο της ωριμότητας του αστέρα. Μετά πάροδο μερικών δισεκατομμυρίων ετών, οι θερμοπυρηνικές αντιδράσεις θα σταματήσουν με το σχηματισμό σιδήρου, του οποίου ο πυρήνας είναι ο σταθερότερος γνωστός πυρήνας με τη μεγαλύτερη ενέργεια σύνδεσης ανά νουκλεόνιο. Καθώς τα πυρηνικά καύσιμα του αστέρα εξαντλούνται, στο εσωτερικό του η θερμοκρασία και η πίεση πέφτουν, ενώ ο αστέρας αρχίζει να συρρικνώνεται λόγω του βάρους των υπερκείμενων φλοιών. Σ' αυτό το τελικό στάδιο της εξέλιξής του, το ερώτημα είναι αν υπάρχει άλλος φυσικός μηχανισμός, που θα εξουδετερώσει την πίεση της βαρύτητας και θα δημιουργήσει μια νέα κατάσταση ισορροπίας, αποτρέποντας την πλήρη βαρυντική κατάρρευση. Η απάντηση σ' αυτό το ερώτημα είναι ναι: ο μηχανισμός αυτός είναι η πίεση του εκφυλισμένου αερίου Fermi που θα σχηματιστεί στο εσωτερικό του αστέρα. Το τι ακριβώς θα συμβεί σε ένα τέτοιο νεκρό αστέρα θα εξαρτηθεί αποκλειστικά και μόνο από τη μάζα που τού έμεινε στο τελικό στάδιο.

Ας θεωρήσουμε πρώτα την περίπτωση των λεικών νάνων. Αστέρες, που η μάζα τους είναι συγκρίσιμη με τη μάζα του ήλιου M_{\odot} , καταλήγουν σε λευκούς νάνους με ακτίνα της τάξης των 10000 Km (συγκρίσιμη με την ακτίνα της Γης). Η πυκνότητά τους είναι της τάξης του $10^6 \text{ gr}\cdot\text{cm}^{-3}$. Στις πυκνότητες αυτές η ύλη είναι απόλυτα ιονισμένη και η κύρια πηγή, που εξουδετερώνει την πίεση της βαρύτητας, είναι η πίεση του εκφυλισμένου αερίου των ηλεκτρονίων. Η θερμοκρασία ενός λευκού νάνου είναι της τάξης του $10^6 \text{ }^\circ\text{K}$ και για τυπικές θερμοκρασίες και πυκνότητες έχουμε $kT < E_F$. Συνεπώς, οι θερμικές κινητικές ενέργειες των ηλεκτρονίων και των ιόντων μπορούν ν' αγνοηθούν και η ολική κινητική ενέργεια του συστήματος θα είναι $E_{\text{κιν}} = \frac{3}{5} NE_F$, όπου N ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων. Σ' αυτή την προσέγγιση, η ολική ενέργεια του αστέρα θα είναι το άθροισμα της κινητικής ενέργειας $E_{\text{κιν}}$ των ηλεκτρονίων και της δυναμικής ενέργειας λόγω βαρύτητας. Έχουμε δηλαδή

$$E = \frac{3}{5} NE_F - \frac{3}{5} \frac{GM_a^2}{R_a}$$

όπου M_a και R_a η ακτίνα του αστέρα. Συνεπώς, παίρνουμε

(Π-1.32)



$$E = \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} - \frac{3}{5} \frac{GM_\alpha^2}{R_\alpha} \quad (\text{Π-I.33})$$

Επειδή ο αριθμός N των ηλεκτρονίων είναι ίσος με τον αριθμό των πρωτονίων και αυτός περίπου ίσος με τον αριθμό των νετρονίων του αστέρα (στους νεκρούς αστέρες, που εξετάζουμε, το τελευταίο ισχύει σχεδόν πάντα για τα βαρύτερα στοιχεία που προκύπτουν, παραδείγματος χάρη για το σίδηρο), θα έχουμε

$$N \approx \frac{M_\alpha}{2m_p} \quad (\text{Π-I.34})$$

Αντικαθιστώντας την (Π-I.34) στην (Π-I.33) και χρησιμοποιώντας τον τύπο

$$V = \frac{4}{3}\pi R_\alpha^3, \text{ βρίσκουμε}$$

$$E = \frac{3}{5} \left(\frac{A}{R_\alpha^2} - \frac{GM_\alpha^2}{R_\alpha} \right) \quad (\text{Π-I.35})$$

όπου

$$A = \left(\frac{3}{2} \right)^{4/3} \pi^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{M_\alpha}{2m_p} \right)^{5/3} \quad (\text{Π-I.36})$$

Στην κατάσταση ισορροπίας, για δοσμένη μάζα M_α η ενέργεια E πρέπει να είναι ελάχιστη σαν συνάρτηση του R_α . Έτσι, η συνθήκη $dE/dR_\alpha = 0$ θα δώσει τη σχέση ανάμεσα στην ακτίνα και τη μάζα του αστέρα:

$$R_\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{9\pi}{8} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{Gm_e m_p^{5/3}} M_\alpha^{-1/3} \quad (\text{Π-I.37})$$

Από την (Π-I.37) για $M_\alpha \approx M_\odot$ βρίσκουμε $R_\alpha \approx 6500$ km, περίπου όσο και οι διαστάσεις της Γης. Λευκός νάνος με μάζα της τάξης μεγέθους της μάζας του ήλιου και ακτίνα της τάξης μεγέθους της ακτίνας της Γης είναι, παραδείγματος χάρη, ο συνοδός του Σείριου.

Η σχέση (Π-I.37) ακτίνας - μάζας ενός λευκού νάνου ισχύει στο μη σχετικιστικό όριο. Είναι ενδιαφέρον να δούμε τι συμβαίνει σε μεγαλύτερες πυκνότητες, όταν οι ταχύτητες των ηλεκτρονίων γίνονται συγκρίσιμες με την ταχύτητα του φωτός και πρέπει να χρησιμοποιήσουμε σχετικιστικές εκφράσεις. Πράγματι, σ' αυτή την περίπτωση θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση $E = cp = c\hbar k \sim \frac{c\hbar N^{1/3}}{R_\alpha}$ και τώρα η ολική κινητική ενέργεια $NE \sim \frac{c\hbar N^{4/3}}{R_\alpha}$ μεταβάλλεται σαν

$\frac{1}{R_\alpha}$ και όχι σαν $\frac{1}{R_\alpha^2}$, όπως στη μη σχετικιστική περίπτωση. Έτσι, περιμένουμε ότι

πάνω από κάποια οριακή μάζα M_c η βαρυτική ενέργεια $-\frac{3}{5} \frac{GM_\alpha^2}{R_\alpha}$ θα υπερισχύσει



και ο αστέρας θα συντρίβει. Ας βρούμε μια πρώτη προσέγγιση αυτού του ορίου. Χρησιμοποιώντας τη σχετικιστική έκφραση $E = cp = c\hbar k$ στη θεωρία του αερίου Fermi (§8.2), βρίσκουμε αμέσως τις καινούργιες εκφράσεις

$$N(E) = \frac{V}{3\pi^2 c^3 \hbar^3} E^3 \quad (\text{Π-I.38})$$

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{\pi^2 c^3 \hbar^3} E^2 \quad (\text{Π-I.39})$$

$$E_F = c\hbar k_F = c\hbar (3\pi^2 \rho)^{1/3}, \quad \rho = \frac{N}{V} \quad (\text{Π-I.40})$$

$$E_{ολ} = \int_0^{E_F} E \rho(E) dE = \frac{3}{4} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{c\hbar N^{4/3}}{R_\alpha} = \frac{3}{4} N E_F \quad (\text{Π-I.41})$$

$$\bar{E} = \frac{E_{ολ}}{N} = \frac{3}{4} E_F \quad (\text{Π-I.42})$$

Συνεπώς, για τον αστέρα θα έχουμε τώρα

$$\begin{aligned} E &= \frac{3}{4} N E_F - \frac{3}{5} \frac{G M_\alpha^2}{R_\alpha} \\ &= \frac{B}{R_\alpha} - \frac{3}{5} \frac{G M_\alpha^2}{R_\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{Π-I.43})$$

όπου

$$B = \frac{3}{4} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} c\hbar N^{4/3} = \frac{3}{4} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} c\hbar \left(\frac{M_\alpha}{2m_p}\right)^{4/3}$$

Για να είναι ο αστέρας σε ισορροπία πρέπει $E \geq 0$ και από τη συνθήκη αυτή παίρνουμε την οριακή μάζα

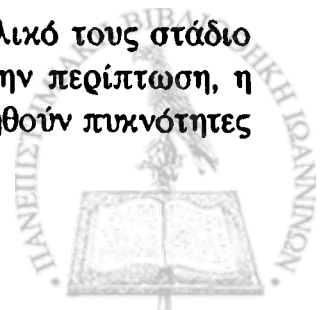
$$M_c = \frac{15\sqrt{5}\pi}{64} \left(\frac{c\hbar}{G m_p^{4/3}}\right)^{3/2} \quad (\text{Π-I.44})$$

Αριθμητικά η τιμή (Π-I.44) είναι $1.7 M_\odot$ και πέφτει πολύ κοντά στην ακριβέστερη τιμή

$$M_c = 1.4 M_\odot \quad (\text{Π-I.45})$$

που είναι γνωστή σαν όριο Chandrasekhar και καθορίζει τη μέγιστη δυνατή μάζα των λευκών νάνων. Όλοι οι γνωστοί λευκοί νάνοι έχουν μάζες μικρότερες από το όριο Chandrasekhar.

Ας έλθουμε, τώρα, στην περίπτωση αστέρων, που στο τελικό τους στάδιο έχουν μάζα μεγαλύτερη από το όριο Chandrasekhar. Σ' αυτή την περίπτωση, η συρρίκνωση του αστέρα συνεχίζεται με αποτέλεσμα να δημιουργηθούν πυκνότητες



πολύ μεγαλύτερες από εκείνες των λευκών νάνων. Σε μια τέτοια κατάσταση ύλης, τα ηλεκτρόνια ωθούνται μέσα στους πυρήνες, αντιδρούν με τα πρωτόνια και σχηματίζουν νετρόνια και νετρίνα: $e^- + p^+ \rightarrow n + \nu_e$ (αντίστροφη ακτινοβολία βήτα). Τα νετρίνα διαφεύγουν εύκολα από τον αστέρα, μια και αντιδρούν μόνο με ασθενείς αλληλεπιδράσεις, και έτσι η μάζα του αστέρα αποτελείται κύρια από νετρόνια, απ' όπου και η ονομασία αστέρες νετρονίων. Η πυκνότητά τους είναι της τάξης του $10^{15} \text{ gr cm}^{-3}$ και η ακτίνα τους της τάξης των 10 km. Εδώ, η κύρια πηγή, που εξουδετερώνει την πίεση της βαρύτητας, είναι η πίεση του εκφυλισμένου αερίου των νετρονίων. Η αντίστοιχη θεωρία είναι όμοια με αυτή που αναπτύξαμε για τους λευκούς νάνους, με τη διαφορά ότι τώρα έχουμε να κάνουμε με αέριο Fermi από νετρόνια και όχι ηλεκτρόνια. Έτσι, αντί της (Π-I.37), θα έχουμε τώρα για τη σχέση ακτίνας - μάζας ενός αστέρα νετρονίων την έκφραση

$$R_\alpha = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{Gm_p^{8/3}} M_\alpha^{-1/3}, \quad (\text{Π-I.46})$$

που προκύπτει όπως η (Π-I.37) με την αντικατάσταση $m_e \rightarrow m_n \approx m_p$ και όπου τώρα $N \approx \frac{M_\alpha}{m_n} \approx \frac{M_\alpha}{m_p}$. Για μάζα M_α ίση με το όριο Chandrasekhar $1.4 M_\odot$, η αντίστοιχη ακτίνα R_α είναι περίπου 5 km.

Για να βρούμε για έναν αστέρα νετρονίων μια οριακή μάζα, αντίστοιχη με το όριο Chandrasekhar, θα πρέπει να θεωρήσουμε ταχύτητες νετρονίων που βρίσκονται στη σχετικιστική περιοχή, όπως κάναμε και με τους λευκούς νάνους. Έτσι, αντί για την (Π-I.44), θα έχουμε τώρα

$$M_c = \frac{15\sqrt{5}\pi}{16} \left(\frac{c\hbar}{Gm_p^{4/3}} \right)^{3/2}. \quad (\text{Π-I.47})$$

Αριθμητικά η τιμή αυτή είναι $6.8 M_\odot$. Όμως, η τιμή αυτή πέφτει κάπως μακριά από την ακριβέστερη τιμή της αντίστοιχης προς το όριο Chandrasekhar οριακής μάζας ενός αστέρα νετρονίων, που είναι (όριο Landau - Oppenheimer - Volkov)

$$M_c \approx 2.5 - 3 M_\odot \quad (\text{Π-I.48})$$

Οι ακριβείς τιμές των οριακών μαζών προκύπτουν, αν λάβει κανείς υπ' όψη του και άλλα δεδομένα, όπως τη μεταβολή της πυκνότητας του αστέρα από το κέντρο προς την περιφέρεια, σχετικιστικές διορθώσεις κλπ. Οι αστέρες πάλαρας, αστέρες που εκπέμπουν περιοδικά με πολύ σταθερό τρόπο ραδιοσήματα με περιόδους γύρω στο 1 sec, είναι περιστρεφόμενοι αστέρες νετρονίων.

Για μάζες μεγαλύτερες και από την τιμή (Π-I.48), δεν υπάρχει κανένας άλλος γνωστός μέχρι σήμερα μηχανισμός που θα μπορούσε να συγκρατήσει τη



βαρύτητα. Για έναν τέτοιο αστέρα η βαρυτική κατάρρευση είναι αναπόφευκτη με τελικό αποτέλεσμα το σχηματισμό μιας μαύρης οπής. Για έναν αστέρα μάζας M_α υπάρχει μια ακτίνα, γνωστή σαν ακτίνα Schwarzschild R_{sch} , για την οποία η

ταχύτητα διαφυγής $\sqrt{\frac{2GM_\alpha}{R}}$ είναι ίση με την ταχύτητα c του φωτός:

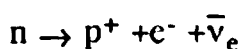
$$R_{sch} = \frac{2GM_\alpha}{c^2} \quad (\text{Π-1.49})$$

Κατά τη βαρυτική κατάρρευση του αστέρα, όταν οι διαστάσεις του γίνουν μικρότερες από την ακτίνα Schwarzschild, δεν διαφεύγει πλέον ούτε το φως (φωτόνια) με αποτέλεσμα το σχηματισμό της μαύρης οπής.

Αν θέλουμε να συνοψίσουμε, θα λέγαμε ότι ο κύκλος ζωής των αστέρων καθορίζεται αποκλειστικά από τη βαρύτητα. Οι δυνάμεις βαρύτητας δημιουργούν τους αστέρες και η άμυνα εναντίον της βαρύτητας καθορίζει τη ζωή τους. Η πρώτη γραμμή άμυνας είναι οι θερμοπυρηνικές αντιδράσεις (αστέρες στην κύρια ακολουθία). Η πίεση των ηλεκτρονίων αποτελεί τη δεύτερη γραμμή άμυνας για αστέρες με μάζα μικρότερη από το όριο Chandrasekhar $1.4 M_\odot$ (λευκοί νάνοι). Η πίεση των νετρονίων είναι η τρίτη γραμμή άμυνας για αστέρες με μάζα μέχρι $2.5 - 3 M_\odot$ (αστέρες νετρονίων). Ένα ενδιάμεσο στάδιο, το στάδιο του ερυθρού γίγαντα, μεταξύ της κύριας ακολουθίας και του τελικού σταδίου της ζωής των αστέρων, είναι μια περίοδος προσωρινής υπερνίκησης της βαρύτητας. Οι εκρήξεις των υπερκαινοφανών αστέρων (σουπερνόβα) αποτελούν την τελευταία γραμμή άμυνας των πολύ πιο μαζικών αστέρων. Αν αυτοί, εκτοξεύοντας ύλη στο διάστημα, μείνουν με μάζα μικρότερη των $2.5 - 3 M_\odot$, θα πεθάνουν σαν λευκοί νάνοι ή αστέρες νετρονίων. Αν μετά την έκρηξη ενός υπερκαινοφανούς αστέρα η εναπομένουσα μάζα είναι μεγαλύτερη από $2.5 - 3 M_\odot$, ο σχηματισμός μιας μαύρης οπής φαίνεται αναπόφευκτος.

Π-1.3. Ταλαντώσεις νετρίνων και ηλιακά νετρίνα

Το νετρίνο είναι το στοιχειώδες σωματίδιο, που πρότεινε ο Pauli το 1931 για να εξηγήσει τη φαινομενική μη διατήρηση της ενέργειας κατά την ακτινοβολία βήτα:



Σήμερα υπάρχουν τριών ειδών νετρίνα, τα ν_e, ν_μ, ν_τ , που διακρίνονται με τον τρόπο που αλληλεπιδρούν και αντιστοιχούν στα τρία είδη λεπτονίων e, μ, τ . Υπάρχουν, επίσης, τα αντισωματίδια τους $\bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_\tau$. Έτσι, μια δέσμη νετρίνων, που προέρχεται από έναν επιταχυντή, μπορεί να αλληλεπιδράσει με τα νετρώνια ενός πυρήνα σύμφωνα με τις αντιδράσεις



$$\begin{aligned} \nu_e + n &\rightarrow p^+ + e^- \\ \nu_\mu + n &\rightarrow p^+ + \mu^- \end{aligned} \quad (\text{Π-I.50})$$

(όχι όμως $\nu_e + n \rightarrow p + \mu$ ή $\nu_\mu + n \rightarrow p + e$). Εξ άλλου, νετρίνα μπορούν να παραχθούν από τις διασπάσεις, παραδείγματος χάρη, π μεσονίων

$$\begin{aligned} \pi^\pm &\rightarrow \mu^\pm + \nu_\mu (\bar{\nu}_\mu) \text{ (κύρια διάσπαση)} \\ \pi^\pm &\rightarrow e^\pm + \nu_e (\bar{\nu}_e) \end{aligned} \quad (\text{Π-I.51})$$

(όχι όμως $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_e$ ή $\pi^+ \rightarrow e^+ + \nu_\mu$) και αυτός είναι ο κύριος τρόπος που μπορούμε να πάρουμε νετρίνα, μια και είναι εύκολο να έχουμε π μεσόνια. Τα ν_τ παράγονται κατά τη διάσπαση των λεπτονίων τ.

Το πρόβλημα της μάζας των νετρίνων τέθηκε ήδη από τον Fermi στην πρώτη εργασία για την ακτινοβολία βήτα το 1932. Μέχρι σήμερα, τα πειραματικά όρια για τις μάζες των νετρίνων είναι συμβιβαστά με μηδενικές τιμές. Παρ' όλα αυτά, κάποιες πειραματικές ενδείξεις κατά καιρούς, αλλά και ορισμένα θεωρητικά επιχειρήματα, δείχνουν ότι θα μπορούσαν να είναι μη μηδενικές ($m_\nu \neq 0$), αλλά πάντως αρκετά μικρές για να μπορεί να μετρηθούν με άμεσες κινηματικές μεθόδους. Ένας έμμεσος τρόπος για ν' ανιχνεύσουμε τέτοιες μικρές μάζες (ακριβέστερα διαφορές μαζών) είναι μέσω μιας καθαρά κβαντομηχανικής διαδικασίας, γνωστής σαν ταλαντώσεις νετρίνων, κατά την οποία νετρίνα ενός είδους μετασχηματίζονται σε νετρίνα άλλου είδους, παραδείγματος χάρη ν_e σε ν_μ ή ν_τ .

Χαρακτηριστικό όλων των θεωριών μη μηδενικής μάζας για τα νετρίνα είναι η μείξη τους. Έτσι, το ν_e περιμένουμε να είναι ο κβαντομηχανικός γραμμικός συνδυασμός

$$|\nu_e\rangle = U_{e1} |\nu_1\rangle + U_{e2} |\nu_2\rangle + U_{e3} |\nu_3\rangle \quad (\text{Π-I.52})$$

με ανάλογες εκφράσεις για τα ν_μ και ν_τ , όπου $|\nu_i\rangle$, $i = 1, 2, 3$, είναι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας με συγκεκριμένες ιδιοτιμές μάζας m_i . Στις περισσότερες θεωρίες, ο συντελεστής U_{e1} είναι κοντά στη μονάδα, έτσι που το ν_e να είναι κύρια η ιδιοκατάσταση με τη μικρότερη μάζα. Όμως, περιμένουμε μια σημαντική μείξη της δεύτερης ιδιοκατάστασης ν_2 (τυπική τιμή $U_{e2} \approx 0.2$) και μια μικρότερη της βαρύτερης τρίτης ιδιοκατάστασης ν_3 . Σαν αποτέλεσμα της μείξης (Π-I.52) υπάρχει η δυνατότητα ταλαντώσεων των νετρίνων, κατά τις οποίες μια καθαρή δέσμη ν_e μετασχηματίζεται μερικά σε ν_μ ή ν_τ καθώς διαδίδεται στον κενό χώρο. Ας δούμε το σχετικό φαινόμενο πιο κοντά, περιοριζόμενοι για απλότητα σε δύο τύπους νετρίνων.

Υποθέτουμε, λοιπόν, ότι έχουμε τους γραμμικούς συνδυασμούς



$$\begin{aligned} |v_e\rangle &= \cos\theta |v_1\rangle + \sin\theta |v_2\rangle \\ |v_\mu\rangle &= -\sin\theta |v_1\rangle + \cos\theta |v_2\rangle \end{aligned} \quad (\text{Π-I.53})$$

όπου η παράμετρος θ είναι μια γωνία μείξης. Συναρτήσει του χρόνου (ή της διανυόμενης από το νεutrino απόστασης), η κατάσταση που είναι $|v_e\rangle$ τη χρονική στιγμή $t = 0$ γίνεται μετά από χρόνο t

$$|v_e(t)\rangle = \cos\theta e^{-iE_1 t/\hbar} |v_1\rangle + \sin\theta e^{-iE_2 t/\hbar} |v_2\rangle \quad (\text{Π-I.54})$$

Επειδή η μάζα των νεutrino, αν είναι μη μηδενική, θα είναι πολύ μικρή, το νεutrino κινείται σχεδόν με την ταχύτητα του φωτός και για την ενέργειά του θα έχουμε

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_\nu^2 c^4} \approx pc + \frac{m_\nu^2 c^4}{2pc} \quad (\text{Π-I.55})$$

Έτσι, για τις ιδιοκαταστάσεις και τις ιδιοτιμές της ενέργειας για τα νεutrino γράφουμε

$$\begin{aligned} \hat{H} |v_1\rangle &= E_1 |v_1\rangle, & E_1 &= pc + \frac{m_1^2 c^4}{2pc} \\ \hat{H} |v_2\rangle &= E_2 |v_2\rangle, & E_2 &= pc + \frac{m_2^2 c^4}{2pc}, \end{aligned} \quad (\text{Π-I.56})$$

όπου m_1, m_2 οι ιδιοτιμές της μάζας και υποθέτουμε $m_1 \neq m_2, m_2 > m_1$. Κατά συνέπεια, η πιθανότητα που υπάρχει ν' ανιχνεύσουμε τη χρονική στιγμή t το νεutrino σαν v_μ δίνεται από την έκφραση

$$\begin{aligned} P &= |\langle v_\mu | v_e(t) \rangle|^2 = |-\sin\theta \cos\theta e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin\theta \cos\theta e^{-iE_2 t/\hbar}|^2 = \\ &= \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{(E_2 - E_1)t}{2\hbar}, \end{aligned} \quad (\text{Π-I.57})$$

όπου

$$E_2 - E_1 = \frac{(m_2^2 - m_1^2)c^4}{2pc} = \frac{\Delta m^2 c^4}{2pc} \quad (\text{Π-I.58})$$

Αν είναι $l = t c$ η απόσταση που διάνυσε το νεutrino από τη χρονική στιγμή $t=0$ που παράχθηκε μέχρι τη χρονική στιγμή t που ανιχνεύτηκε, παίρνουμε τελικά

$$P = \sin^2 2\theta \sin^2 \left(\frac{\pi l}{l_\nu} \right), \quad (\text{Π-I.59})$$

όπου η ποσότητα



$$l_V = \frac{4\pi\hbar c \cdot pc}{\Delta m^2 c^4} \quad (\text{Π-I.60})$$

είναι γνωστή σαν μήκος ταλάντωσης.

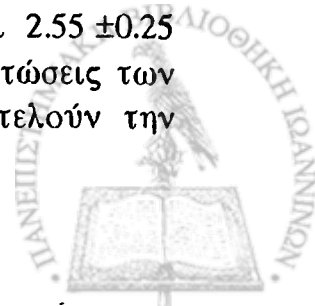
Αριθμητικά, για νεutrίνα ορμής $pc \sim 1 \text{ MeV}$ και για διαφορές μαζών $\Delta m^2 c^4 \sim 1 \text{ eV}^2$, το μήκος ταλάντωσης είναι $l_V \sim 2.5 \text{ m}$, ενώ για $pc \sim 1 \text{ GeV}$ είναι $l_V \sim 2.5 \text{ km}$. Για γωνία μέγιστης μείξης $\theta = \frac{\pi}{4}$, ο μέγιστος αριθμός νεutrίνων διαφορετικού είδους ανιχνεύεται σε απόσταση $l = \frac{l_V}{2} \sim 1.25 \text{ m}$ ή 1.25 km για ορμές της τάξης του 1 MeV ή 1 GeV , αντίστοιχα. Στην πράξη, στα πειράματα επιταχυντών νεutrίνα ενέργειας μερικών GeV ανιχνεύονται σε απόσταση 1 km από το σημείο παραγωγής τους. Αντίθετα, σε πειράματα αντιδραστήρων έχουμε ενέργειες μερικών MeV και αποστάσεις μέχρι 50 m . Και στους δύο τύπους πειραμάτων τα άνω όρια στις διαφορές μαζών που μπορεί να ελεγχθούν (δεχόμενοι μια λογική τιμή για τη γωνία μείξης) είναι της τάξης του 1 eV^2 .

Για να βελτιώσουμε αυτά τα όρια πρέπει να μελετήσουμε ταλαντώσεις σε πολύ μεγαλύτερες αποστάσεις. Ο ήλιος είναι μια μοναδική πηγή νεutrίνων για μια τέτοια μελέτη. Πράγματι, ο ήλιος είναι μια μεγάλη πηγή παραγωγής νεutrίνων. Περίπου το 2% της εκπεμπόμενης ενέργειάς του πιστεύεται ότι εκπέμπεται υπό μορφή νεutrίνων, σαν αποτέλεσμα των θερμοπυρηνικών αντιδράσεων στο εσωτερικό του. Τα ν_e είναι το είδος των νεutrίνων που περιμένουμε από τον ήλιο.

Το πρόβλημα με τα ηλιακά νεutrίνα είναι ότι ο αριθμός των νεutrίνων που ανιχνεύουμε, εμφανίζεται να είναι μικρότερος από αυτόν που περιμένουμε, με βάση το καθιερωμένο θεωρητικό πρότυπο για τον ήλιο. Αν δεχθούμε ότι η θεωρία μας για τη λειτουργία του ήλιου είναι σωστή, τότε θα πρέπει τα ν_e που παράγονται στον ήλιο να μετασχηματίζονται καθ' οδόν προς τη Γη π.χ. σε ν_μ ή ν_τ , και έτσι να διαφεύγουν από την ανίχνευση. Τα ηλιακά νεutrίνα ανιχνεύονται είτε με διαδικασίες αντίστροφης ακτινοβολίας βήτα, όπως



είτε με ειδικούς ανιχνευτές Cerenkov ευαίσθητους στα ηλιακά νεutrίνα που προέρχονται από το B^8 κατά την αλυσίδα των πυρηνικών αντιδράσεων στον ήλιο. Και στους δύο τύπους πειραμάτων βρίσκουμε μια διαφορά της τάξης του 3 ανάμεσα στον αριθμό των νεutrίνων που ανιχνεύουμε (R. Davis κ.ά.) και στον αριθμό που θεωρητικά περιμένουμε (J. Bahcall κ.ά.). Παραδείγματος χάρη, για την αντίδραση (Π-I.61), συναρτήσε της λεγόμενης μονάδας ηλιακών νεutrίνων: 1 SNU (Solar Neutrino Unit) = 10^{-36} ανιχνεύσεις /άτομο /sec, η πειραματική τιμή είναι $2.55 \pm 0.25 \text{ SNU}$, ενώ η θεωρητική πρόβλεψη είναι $8.0 \pm 1.0 \text{ SNU}$. Οι ταλαντώσεις των νεutrίνων, των οποίων την αρχή περιγράψαμε παραπάνω, αποτελούν την



πιθανότερη ερμηνεία του προβλήματος των ηλιακών νετρίνων. Το μοντέλο των ταλαντώσεων που περιγράψαμε, γνωστό σαν "ταλαντώσεις κενού", μπορεί να εξηγήσει το πρόβλημα με τα ηλιακά νετρίνα για τιμές $\sin^2 2\theta \geq 0.7$ και $\Delta m^2 c^4 = 10^{-10} \text{ eV}^2$. Σε πολλά θεωρητικά μοντέλα, όμως, τέτοιες μεγάλες τιμές μείξης δεν είναι πιθανές. Μια διαφορετική πιθανότερη εξήγηση, που δεν χρειάζεται μεγάλες τιμές μείξης, προσφέρει η δυνατότητα ο μετασχηματισμός του ν_e σε ν_μ ή ν_τ να συμβαίνει, όχι στο κενό όπως πριν, αλλά καθώς το νετρίνο διαδίδεται από την πηγή του στο κέντρο του ήλιου μέχρι την επιφάνεια του ήλιου. Η βασική ιδέα είναι ότι οι ταλαντώσεις των νετρίνων τροποποιούνται μέσα στην ύλη και μιλάμε τότε για "ταλαντώσεις ύλης", σε αντιδιαστολή με τις "ταλαντώσεις κενού". Το πρόβλημα με τα ηλιακά νετρίνα εξηγείται τότε για τιμές $\sin^2 2\theta \geq 10^{-3}$ και $\Delta m^2 c^4 \approx 10^{-5} \text{ eV}^2$.

Π-1.4. Η γραμμή των 21cm και τα κοσμικά μείζερς

Μέσα στους γαλαξίες η ύλη βρίσκεται σε τρεις μορφές. Πρώτα σε συμπυκνωμένη μορφή, άμεσα ορατή, όταν σχηματίζει τους αστέρες στα διάφορα στάδια εξέλιξής τους και τους πλανήτες. Έπειτα, εμφανίζεται υπό τη μορφή των κοσμικών ακτίνων, που συνίστανται κύρια από πρωτόνια με ενέργειες που μπορεί να φθάσουν μέχρι 10^{21} eV . Τέλος, υπάρχει η μεσοαστρική ύλη, ελάχιστα πυκνή ($1-20$ σωματίδια ανά cm^3), θερμοκρασίας $50-100 \text{ }^\circ\text{K}$, που συνίσταται κύρια ($\sim 75\%$) από ατομικό υδρογόνο (αλλά περιέχει και άλλα μόρια σκόνης).

Στις παραπάνω θερμοκρασίες, της τάξης $kT \sim 10^{-2} \text{ eV}$, το ατομικό υδρογόνο δεν μπορεί να διεγερθεί σε ανώτερες ενεργειακές καταστάσεις που θα εξέλειπαν στο ορατό φάσμα. Αντίθετα, μεταβάσεις μεταξύ των δύο καταστάσεων $F=1$ και $F=0$ της υπέρλεπτης υφής της βασικής κατάστασης (βλ. §9.5) μπορούν εύκολα να γίνουν, αν λάβουμε υπ' όψη και τις κρούσεις μέσα στο αέριο της μεσοαστρικής ύλης. Όπως είδαμε κατά τη μελέτη της υπέρλεπτης υφής, η εκπομπή της ακτινοβολίας $\lambda \sim 21\text{cm}$ αντιστοιχεί στην αυθόρμητη μετάβαση από την κατάσταση $F=1$ στην κατάσταση $F=0$. Η μετάβαση αυτή έχει πολύ μικρή πιθανότητα και, όπως σημειώσαμε ήδη, ο χρόνος ζωής της κατάστασης $F=1$ είναι πολύ μεγάλος, της τάξης $\tau \sim 10^{14} \text{ sec} \sim 10^7$ έτη. Υπενθυμίζουμε σχετικά (βλ. §10.4) ότι υπάρχει κατ' αρχήν ο κανόνας επιλογής (10.60), που εμποδίζει μεταβάσεις στις οποίες δεν υπάρχει μεταβολή της τροχιακής στροφορμής (οι καταστάσεις $F=1$ και $F=0$ έχουν και οι δύο $l=0$). Αν λάβει, επίσης, κανείς υπ' όψη του ότι η πιθανότητα μιας τέτοιας αυθόρμητης μετάβασης είναι ανάλογη με τον κύβο της αντίστοιχης ενεργειακής διαφοράς (βλ. εξισώσεις (10.61) και (10.71)), που εδώ είναι 10^{-6} eV , και ότι μεταβάσεις που οφείλονται σε μαγνητικά φαινόμενα είναι ασθενέστερες από μεταβάσεις που οφείλονται σε ηλεκτρικά φαινόμενα κατά ένα παράγοντα $\sim \alpha^2 \sim 10^{-4}$, καταλήγει στο συμπέρασμα ότι ο χρόνος ζωής της μετάβασης $F=1 \rightarrow F$



$=0$ είναι πράγματι $\tau \sim (10^{+6})^3 10^{+4} \tau_{\text{ατομική μετάβαση}} \sim 10^{22} 10^{-8} \text{ sec} \sim 10^{14} \text{ sec}$ (η πειραματική τιμή είναι εννέα εκατομμύρια χρόνια). Γι' αυτό το λόγο χρειάζεται μια σημαντικά μεγάλη ποσότητα υδρογόνου για να φθάσει μέχρι τη Γη ένα σήμα ικανό να μετρηθεί. Υπολογίζεται ότι, πράγματι, η ποσότητα του υδρογόνου της μεσοαστρικής ύλης που μας ενδιαφέρει είναι αρκετή για να δώσει ένα μετρήσιμο σήμα, όπως ανιχνεύεται στην ραδιοαστρονομία. Η παρατήρηση της γραμμής των 21cm έχει συμβάλει κατά πολύ στην κατανόησή μας για τον ενδοαστρικό χώρο. Η έντασή της μας επιτρέπει να έχουμε ένα μέτρο της ποσότητας και της κατανομής του υδρογόνου στον ενδοαστρικό χώρο και, γενικότερα, της δομής των διαστρικών νεφελωμάτων. Η μετατόπιση στη συχνότητα (φαινόμενο Doppler) μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε την ταχύτητα αυτών των νεφελωμάτων. Η μεγάλη διαφάνεια της διαστρικής ύλης στο μήκος κύματος $\lambda \sim 21 \text{ cm}$ μας επιτρέπει να μελετήσουμε το γαλαξία μας (που είναι δύσκολο να τον παρατηρήσουμε διαφορετικά, γιατί στην πράξη τον βλέπουμε σαν λεπτή φέτα) και να διαπιστώσουμε ότι είναι ένας σπειροειδής γαλαξίας, από το κέντρο του οποίου απέχουμε περίπου 30.000 έτη φωτός. Επί πλέον, ακριβής γνώση της κατανομής του υδρογόνου μέσα στο γαλαξία παρέχει μια νέα ακριβή μέθοδο μέτρησης της απόστασης ουρανίων αντικειμένων, όπως οι αστέρες πάλλσαρς. Εξ άλλου, το φαινόμενο Zeeman της υπέρλεπτης υψής, όπου η γραμμή των 21 cm σπάει σε τρεις (βλ. §9.5) με διαφορετική πόλωση, μας επιτρέπει να μετρήσουμε το μαγνητικό πεδίο που υπάρχει στα διαστρικά νεφελώματα (βρίσκουμε, π.χ., μαγνητικά πεδία της τάξης $\sim 10^{-6} \text{ Gauss} \sim 10^{-10} \text{ T}$, περιοχή ασθενών πεδίων).

Βέβαια, ο γαλαξίας μας δεν είναι ο μόνος, που εκπέμπει την γραμμή των 21 cm. Η σύγχρονη πρόοδος της ραδιοαστρονομίας έχει επιτρέψει τη λεπτομερή μελέτη της κατανομής και κίνησης του ατομικού υδρογόνου και σε άλλους γαλαξίες.

Τέλος, η γραμμή των 21 cm, προερχόμενη από τη βασική κατάσταση του πιο απλού και πιο άφθονου στοιχείου στο σύμπαν, είναι φυσικό να μπορεί ν' αποτελέσει ένα κλειδί επικοινωνίας ανάμεσα σε νοήμονα όντα στο σύμπαν μας. Και δεν αποτελεί έκπληξη ότι αυτή η πληροφορία έχει περιληφθεί, μαζί με άλλα στοιχεία, στα κωδικοποιημένα σήματα, που έχουν εκτοξευθεί από διαστημόπλοια της NASA στο σύμπαν.

Εκτός από το υδρογόνο, το βαρύτερο ισότοπό του, το δευτέριο (πυρήνας από ένα πρωτόνιο και ένα νετρόνιο), παρουσιάζει ανάλογη υπέρλεπτη υψή στη βασική του κατάσταση (το ολικό σπιν του πυρήνα είναι τώρα $S_N = 1$). Σε απουσία μαγνητικού πεδίου, η ενεργειακή διαφορά αντιστοιχεί εδώ σε συχνότητα εκπομπής 337 MHz ή μήκος κύματος 92 cm. Αν και το δευτέριο είναι το τρίτο σε αφθονία στοιχείο στο σύμπαν (μετά το υδρογόνο και το ήλιο), η παρατήρηση της παραπάνω γραμμής είναι αμφίβολη.



Ας έρθουμε τώρα στο θέμα των κοσμικών μείζερς. Ήδη από το 1966 είχε υποδειχθεί ότι ορισμένες έντονες ακτινοβολίες που παρατηρούνται θα έπρεπε να είναι το αποτέλεσμα μιας ενίσχυσης σύμφωνα με το φαινόμενο μείζερ. Ας υποθέσουμε ότι η ένταση I μιας ακτινοβολίας μεταβάλλεται με την απόσταση x από την πηγή της ακτινοβολίας καθ' οδόν προς τη Γη (περιοριζόμαστε σε μια διάσταση) σύμφωνα με τη σχέση

$$\frac{dI}{dx} = -\beta I + \alpha \quad (\text{Π-I.62})$$

όπου οι συντελεστές β, α είναι συντελεστές απορρόφησης και εκπομπής, αντίστοιχα. Μπορεί πράγματι να δειχθεί ότι οι β, α δίνονται μέσω των συντελεστών B, A του Einstein (βλ. §10.4) για την εξαναγκασμένη και την αυθόρμητη εκπομπή από τις σχέσεις

$$\beta = \frac{\hbar\nu}{2\Delta\nu} (n_1 - n_2) B, \quad \alpha = \frac{\hbar\nu}{2\Delta\nu} n_2 A \quad (\text{Π-I.63})$$

όπου n_1, n_2 είναι οι πυκνότητες του πληθυσμού ενός μορίου σε μια περιοχή για τα δύο ενεργειακά επίπεδα E_1 (κατώτερο) και E_2 (ανώτερο). Η συχνότητα και το εύρος της υπό παρατήρηση γραμμής είναι ν και $\Delta\nu$. Υποθέτοντας ότι οι β, α είναι σταθεροί στην υπό μελέτη περιοχή, η λύση της διαφορικής εξίσωσης (Π-I.63) είναι:

$$I(x) = I(0) e^{-\beta x} + \frac{\alpha}{\beta} (1 - e^{-\beta x}) \quad (\text{Π-I.64})$$

Αν $n_2 > n_1$, ο β είναι αρνητικός και παρατηρούμε μια εκθετική αύξηση του σήματος, αντίθετα απ' ό τι περιμένουμε για απορρόφηση. Είναι το βασικό στάδιο του φαινομένου μείζερ.

Πράγματι, μια τέτοια αναστροφή πληθυσμών για τα ενεργειακά επίπεδα της υπέρλεπτης υφής της βασικής κατάστασης ορισμένων μορίων μας επιτρέπει να κατανοήσουμε τις παρατηρήσεις της ραδιοαστρονομίας (οι συχνότητες και τα τα μήκη κύματος, που αντιστοιχούν στις ενεργειακές διαφορές υπέρλεπτης υφής, πέφτουν ακριβώς στην περιοχή των ραδιοκυμάτων που συζητάμε). Για την πραγματοποίηση ενός κοσμικού μείζερ, ορισμένες φυσικές συνθήκες είναι αναγκαίες:

i) Πρέπει η περιοχή να είναι κατάλληλα πυκνή, ώστε να μην έχουμε πάρα πολλές κρούσεις (άρα πρέπει να είναι μακριά από θερμοδυναμική ισορροπία), αλλά όμως να μπορεί να πραγματοποιηθεί το φαινόμενο της ενίσχυσης μείζερ.

ii) Πρέπει να υπάρχει μια εξωτερική πηγή ενέργειας (σχετικά μονοενεργειακή) για να προκαλέσει την άντληση.



Οι παραπάνω συνθήκες πραγματοποιούνται σε δύο τύπους περιοχών:

- i) Στις διαστρικές περιοχές κοντά στους τόπους σχηματισμού νέων αστέρων (πρώτα στάδια της ζωής τους).
- ii) Στα περιβλήματα ψυχρών αστέρων, που μόλις εκτοξεύθηκαν στο διαστρικό χώρο (τελευταία στάδια της ζωής τους).

Το πρώτο κοσμικό μείζερ, που παρατηρήθηκε, ήταν του μορίου του υδροξυλίου OH, του οποίου η υπέρλεπτη υφή της βασικής κατάστασης χαρακτηρίζεται από την εκπομπή τεσσάρων συχνοτήτων: 1667 MHz και 1665 MHz (κύριες γραμμές), καθώς επίσης 1612 MHz και 1720 MHz (πολύ ασθενείς). Πράγματι, στην περιοχή των 18 cm διαπιστώθηκε η παρουσία OH στο μεσοαστρικό διάστημα σε συμφωνία με τις θεωρητικές προβλέψεις. Όμως, σε πολλές περιπτώσεις μόνο η γραμμή 1612 MHz ήταν έντονη. Έτσι, κοντά σε ερυθρούς αστέρες (που είναι ψυχροί αστέρες) παρατηρήθηκε η γραμμή 1612 MHz πολύ έντονη, ενώ οι υπόλοιπες ήταν ή απύσες ή ασθενείς. Το μείζερ OH είναι το καλύτερα κατανοητό κοσμικό μείζερ μέχρι σήμερα. Άλλα μόρια, που μπορούν να δημιουργήσουν ένα κοσμικό μείζερ και έχουν παρατηρηθεί, είναι τα μόρια υδρατμών H_2O , μονοξειδίου του πυριτίου SiO και, σε πολύ μικρότερο βαθμό, CH_3OH , CH , H_2CO και HC_5N .

Χάρη στις ιδιότητές τους τα κοσμικά μείζερς μας επιτρέπουν να γνωρίσουμε τα σημεία σχηματισμού αστέρων, ν' αναγνωρίσουμε τις ενεργειακές πηγές που προκαλούν την άντληση και να εκτιμήσουμε τη σπουδαιότητα μαγνητικών πεδίων στα σημεία εκπομπής (φαινόμενο Zeeman). Τα σημεία εκπομπής μείζερς είναι εξαιρετικά εντοπισμένα. Κατά συνέπεια, με τη χρήση πολλών ραδιοτηλεσκοπίων, τοποθετημένων σε διαφορετικές ηπείρους του πλανήτη, είναι δυνατόν ν' αναγνωρίσουμε αντικείμενα που βρίσκονται σε διαφορετικούς γαλαξίες και να μελετήσουμε την απόσταση γαλαξιών με τη μέθοδο της παράλλαξης. Η γνώση της απόστασης των γαλαξιών (σημείο διχογνωμίας ακόμη και σήμερα μεταξύ των αστροφυσικών) αποτελεί μια βασική παράμετρο για τη γνώση της ηλικίας και των διαστάσεων του σύμπαντος σύμφωνα με τον νόμο του Hubble.

Π-Ι.5. Η κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου του σύμπαντος

Όπως είδαμε στην ιστορική εισαγωγή και θα συνάγουμε, επίσης, στο παράρτημα II (§Π-II.7), ο νόμος του Planck για την ακτινοβολία του μελανού



σώματος εκφράζεται μέσω της πυκνότητας ενέργειας $u(\nu, T) d\nu$ σ' ένα διάστημα συχνοτήτων $d\nu$ από τον τύπο

$$u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} d\nu \quad (\text{Π-I.65})$$

ή, ισοδύναμα, μέσω της πυκνότητας ενέργειας $u(\lambda, T) d\lambda$ σ' ένα διάστημα μηκών κύματος $d\lambda$

$$u(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/k\lambda T}-1} d\lambda \quad (\text{Π-I.66})$$

Η καμπύλη του Planck φθάνει στο μέγιστο για μήκος κύματος $\lambda = \frac{c}{\nu} = 0.2 \left(\frac{hc}{kT} \right)$ και πέφτει απότομα για μικρότερα μήκη κύματος. Η ολική πυκνότητα ενέργειας στην ακτινοβολία ενός μελανού σώματος είναι

$$\begin{aligned} u_{\text{ολ}} &= \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT}-1} = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h} \right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x-1} \\ &= \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h} \right)^4 \frac{\pi^4}{15} = \frac{8\pi^5}{15} \frac{(kT)^4}{(hc)^3} \end{aligned} \quad (\text{Π-I.67})$$

σύμφωνα με το γνωστό από τα μαθηματικά ολοκλήρωμα

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{\omega-1} dx}{e^x-1} = \Gamma(\omega)\zeta(\omega) \quad (\omega > 1) \quad (\text{Π-I.68})$$

όπου $\Gamma(\omega)$ είναι η γάμμα συνάρτηση $\Gamma(\omega) = \int_0^{\infty} x^{\omega-1} e^{-x} dx$ και $\zeta(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\omega}$ η ζήτα

συνάρτηση του Riemann, οπότε $\Gamma(4)\zeta(4) = 6 \frac{\pi^4}{90}$. Αριθμητικά, είναι

$$u_{\text{ολ}} = 7.56 \times 10^{-15} \text{ erg cm}^{-3} [T(^{\circ}\text{K})]^4 \quad (\text{Π-I.69})$$

και αυτός είναι βέβαια ο νόμος Stefan-Boltzmann. Εξ άλλου, ο αριθμός $N(\nu, T) d\nu$ των φωτονίων ανά μονάδα όγκου μέσα στο διάστημα συχνοτήτων $d\nu$ είναι

$$\begin{aligned} N(\nu, T) d\nu &= \frac{u(\nu, T) d\nu}{E} = \frac{u(\nu, T) d\nu}{h\nu} \\ &= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu/kT}-1} \end{aligned} \quad (\text{Π-I.70})$$

Συνεπώς, ο συνολικός αριθμός των φωτονίων ανά μονάδα όγκου είναι



$$\begin{aligned}
 N_{\text{ολ}} &= \frac{8\pi}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{v^2 dv}{e^{hv/kT} - 1} = \frac{8\pi}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} \\
 &= \frac{8\pi}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \Gamma(3) \zeta(3), \quad (\text{Π-I.71})
 \end{aligned}$$

Αριθμητικά, είναι

$$N_{\text{ολ}} = 60.42 \left(\frac{kT}{hc}\right)^3 = (20.28 \text{ φωτόνια/cm}^3) [T(^{\circ}\text{K})]^3 \quad (\text{Π-I.72})$$

Η μέση τιμή της ενέργειας των φωτονίων είναι

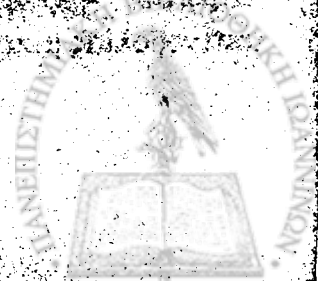
$$\bar{E} = \frac{u_{\text{ολ}}}{N_{\text{ολ}}} = 3.73 \times 10^{-16} \text{ erg } [T(^{\circ}\text{K})] \quad (\text{Π-I.73})$$

Το σημαντικό με το νόμο του Planck είναι ότι οι φυσικά ενδιαφέρουσες εκφράσεις (Π-I.69), (Π-I.72) και (Π-I.73) καθορίζονται μόνο από τη θερμοκρασία T .

Η ακτινοβολία του μελανού σώματος βρίσκει εφαρμογή στην παρατήρηση της λεγόμενης κοσμικής ακτινοβολίας μικροκυμάτων υποβάθρου του σύμπαντος, η οποία είχε και έχει καθοριστική επίδραση στην κοσμολογία. Η σχετική παρατήρηση έγινε το 1964 από τους δύο Αμερικανούς ραδιοαστρονόμους A. Penzias και R. Wilson, οι οποίοι σχεδίαζαν να μετρήσουν ραδιοσήματα από το Γαλαξία. Ο εξαιρετικά ευαίσθητος δέκτης τους ήταν κατάλληλος για να συλλαμβάνει ραδιοκύματα, που θα παρουσίαζαν ομοιόμορφη κατανομή προς όλες τις κατευθύνσεις του ουρανού. Όταν εξέτασαν την ακτινοβολία που ερχόταν μακριά από το επίπεδο του Γαλαξία, παρατήρησαν μια μόνιμη πηγή θορύβου, ανεξάρτητα από κατεύθυνση, που δεν μπορούσαν ν' αναγνωρίσουν, αλλά ούτε και να εξουδετερώσουν. Αμέσως μετά την ανακάλυψή τους, έγινε γενικά αποδεκτό ότι αυτή η ακτινοβολία υποβάθρου έπρεπε να ερμηνευτεί σαν απόηχος της μεγάλης έκρηξης (big bang), από την οποία πιστεύεται ότι ξεκίνησε η διαστολή του σύμπαντος. Η κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων υποβάθρου αποτελεί πράγματι μια ισχυρή ένδειξη για την αλήθεια της θεωρίας της μεγάλης έκρηξης. Η μέτρηση των Penzias και Wilson έγινε σε μήκος κύματος 7.35cm. Μετέπειτα μετρήσεις της κοσμικής ακτινοβολίας μικροκυμάτων υποβάθρου σε διάφορα μήκη κύματος, ιδιαίτερα από τους δορυφόρους COBE (COsmic Background Explorer) και HST (Hubble Space Telescope), κατέδειξαν ότι πρόκειται σε εξαιρετική προσέγγιση για μια ακτινοβολία μελανού σώματος θερμοκρασίας 2.728 $^{\circ}\text{K}$. Το μέγιστο συμβαίνει για $0.2 \left(\frac{hc}{2.728k}\right)$ ή περίπου 1mm, ο δε αριθμός των φωτονίων ανά μονάδα όγκου είναι περίπου 400 φωτόνια/cm³. Η μελέτη των χαρακτηριστικών της κοσμικής ακτινοβολίας μικροκυμάτων παίζει σημαντικό ρόλο στη σύγχρονη κοσμολογία.



[The main body of the document contains several paragraphs of text that are extremely faint and illegible due to the quality of the scan. The text appears to be a formal letter or report, but the specific words and sentences cannot be discerned.]



ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ II

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

Κρίνουμε σκόπιμο να παραθέσουμε σύντομα τα βασικότερα σημεία της κβαντικής στατιστικής μηχανικής. Ας δούμε πρώτα τι εννοούμε μ' αυτό τον όρο. Τα κβαντικά συστήματα, που μελετήσαμε μέχρις εδώ, περιγράφονταν από μια μοναδική κυματοσυνάρτηση (καταστατικό διάνυσμα). Τέτοια συστήματα λέμε ότι βρίσκονται σε μια καθαρή κατάσταση. Όπως είδαμε και στο κεφάλαιο II, αυτά τα συστήματα έχουν προετοιμαστεί, αφού έχουμε μετρήσει και ξέρουμε όλες τις ιδιοτιμές ενός πλήρους συνόλου συμβιβαστών φυσικών μεγεθών. Αν αυτό δεν έχει συμβεί, τότε τα συστήματα θα βρίσκονται σε μια όχι πλήρως γνωστή κατάσταση. Λέμε τότε ότι βρίσκονται σε μια μεικτή κατάσταση. Αντί για μια μοναδική κυματοσυνάρτηση, η δυναμική κατάσταση των συστημάτων αυτών θα πρέπει να περιγράφεται από ένα στατιστικό μείγμα κυματοσυναρτήσεων. Τέτοια συστήματα αποτελούν το αντικείμενο μελέτης της κβαντικής στατιστικής μηχανικής. Ουσιαστικά, η έννοια της στατιστικής εισέρχεται εδώ από δύο πλευρές: μέσω της στατιστικής ερμηνείας της κυματοσυνάρτησης (κβαντική πλευρά) και μέσω του στατιστικού μείγματος κυματοσυναρτήσεων (στατιστική πλευρά). Με άλλα λόγια, η στατιστική κατανομή έχει δύο συνεισφορές, μια εγγενή μέσω του καταστατικού διανύσματος και μια άλλη, που προέρχεται από το πρακτικό γεγονός της αβεβαιότητας για το ποιο είναι το καταστατικό διάνυσμα.

Στην κβαντική στατιστική μηχανική, η περιγραφή της δυναμικής κατάστασης ενός συστήματος γίνεται μέσω του πίνακα πυκνότητας και της συνάρτησης επιμερισμού. Η γνώση τους μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τη μέση τιμή μιας οποιασδήποτε ποσότητας που αφορά στο σύστημα, καθώς και τις πιθανότητες των διαφόρων τιμών αυτών των ποσοτήτων. Γι' αυτό, ας ξεκινήσουμε



με το φορμαλισμό του πίνακα πυκνότητας, που είναι απαραίτητος για την περιγραφή συστημάτων που βρίσκονται σε μεικτή κατάσταση.

Π-II.1. Πίνακας πυκνότητας

Ας θεωρήσουμε ένα σύστημα, που αποτελείται από ένα σύνολο k όμοιων υποσυστημάτων ($\alpha = 1, 2, \dots, k$). Κάθ' ένα από τα k υποσυστήματα βρίσκεται σε μια (καθαρή) κατάσταση $|\psi^{(\alpha)}\rangle$. Τα (κανονικοποιημένα) καταστατικά διανύσματα $|\psi^{(\alpha)}\rangle$, που δεν είναι αναγκαστικά ορθογώνια μεταξύ τους, μπορούν ν' αναπτυχθούν συναρτήσει ενός πλήρους συνόλου (καθαρών) ιδιοκαταστάσεων $|\psi_n\rangle$

$$|\psi^{(\alpha)}\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} |\psi_n\rangle = \sum_n \langle \psi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle |\psi_n\rangle \quad (\text{Π-II.1})$$

Επειδή τα $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ είναι κανονικοποιημένα, θα ισχύει

$$\sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2 = \sum_n |\langle \psi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle|^2 = 1 \quad (\text{Π-II.2})$$

Η μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους \hat{A} ως προς την κατάσταση $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ θα είναι

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_\alpha &= \langle \psi^{(\alpha)} | \hat{A} | \psi^{(\alpha)} \rangle = \sum_{n,m} c_n^{(\alpha)*} c_m^{(\alpha)} \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^{(\alpha)*} c_m^{(\alpha)} A_{nm} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.3})$$

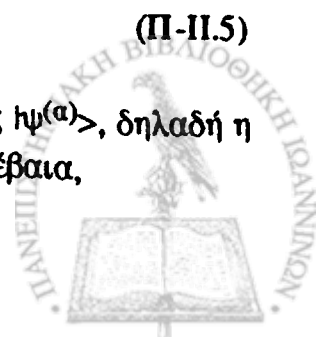
Περνώντας από τη μέση τιμή ως προς την καθαρή κατάσταση $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ στη μέση τιμή ως προς τη μεικτή κατάσταση

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^k c^{(\alpha)} |\psi^{(\alpha)}\rangle, \quad (\text{Π-II.4})$$

έχουμε

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^k |c^{(\alpha)}|^2 \langle \psi^{(\alpha)} | \hat{A} | \psi^{(\alpha)} \rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^k w_\alpha \langle \hat{A} \rangle_\alpha \end{aligned} \quad (\text{Π-II.5})$$

όπου το w_α είναι το στατιστικό βάρος της καθαρής κατάστασης $|\psi^{(\alpha)}\rangle$, δηλαδή η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση αυτή. Είναι βέβαια,



$$0 \leq w_\alpha \leq 1, \quad \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_\alpha = 1 \quad (\text{Π-II.6})$$

Παίρνουμε, λοιπόν, από τις (Π-II.3) και (Π-II.5)

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{n,m} \left(\sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_\alpha c_n^{(\alpha)*} c_m^{(\alpha)} \right) A_{nm} \\ &= \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.7})$$

όπου τα στοιχεία πίνακα

$$\rho_{mn} = \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_\alpha c_n^{(\alpha)*} c_m^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_\alpha \langle \psi_m | \psi^{(\alpha)} \rangle \langle \psi^{(\alpha)} | \psi_n \rangle \quad (\text{Π-II.8})$$

είναι γνωστά σαν στοιχεία του πίνακα πυκνότητας ρ . Ο αντίστοιχος τελεστής πυκνότητας $\hat{\rho}$ είναι

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_\alpha |\psi^{(\alpha)}\rangle \langle \psi^{(\alpha)}| \quad (\text{Π-II.9})$$

και, βέβαια, μπορούμε να θεωρήσουμε διάφορες αναπαραστάσεις του, οπότε ο πίνακας πυκνότητας θα έχει διαφορετική μορφή σε διαφορετική αναπαράσταση. Επιστρέφοντας στη μέση τιμή (Π-II.7), έχουμε

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm} = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{A}) \quad (\text{Π-II.10})$$

Έτσι, η γνώση του πίνακα πυκνότητας ρ μας επιτρέπει να βρίσκουμε τις μέσες τιμές σ'ένα σύστημα, που βρίσκεται σε μεικτή κατάσταση. Από φυσική άποψη, μπορούμε να πούμε ότι η γνώση του πίνακα πυκνότητας εξαντλεί οτιδήποτε μπορούμε να βρούμε για μια κβαντική κατάσταση. Σχηματικά, η μετάβαση από μια καθαρή κατάσταση σε μια μεικτή αντιστοιχεί στην αντικατάσταση

$$c_n^{(\alpha)*} c_m^{(\alpha)} \rightarrow \rho_{mn} \quad (\text{Π-II.11})$$

Σημειωτέον ότι, επειδή το ίχνος ενός τελεστή είναι ανεξάρτητο από την αναπαράσταση (βλ. §2.7), η έκφραση (Π-II.10) μας επιτρέπει να κάνουμε τον υπολογισμό της μέσης τιμής ως προς οποιαδήποτε αναπαράσταση.

Ας δούμε μερικές ιδιότητες του πίνακα πυκνότητας :

1. Ισχύει

$$\text{Tr} \rho = 1$$

(Π-II.12)



Αυτό προκύπτει από την (Π-II.10), αν θέσουμε $A=I$. Στο πνεύμα της αντιστοιχίας (Π-II.11), έχουμε προφανώς εδώ

$$\sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2 = 1 \rightarrow \text{Tr } \rho = 1 \quad (\text{Π-II.13})$$

2. Φαίνεται αμέσως από τον ορισμό (Π-II.8) ότι είναι

$$\rho_{mn} = \rho_{nm}^* \quad (\text{Π-II.14})$$

δηλαδή ο πίνακας πυκνότητας είναι ερμιτιανός και, συνεπώς, μπορεί να διαγωνιοποιηθεί μ'ένα μοναδιακό μετασχηματισμό.

3. Τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας είναι

$$\rho_{nn} = \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_{\alpha} |c_n^{(\alpha)}|^2 \quad (\text{Π-II.15})$$

και, όπως φαίνεται αμέσως, ισχύει

$$0 \leq \rho_{nn} \leq 1 \quad (\text{Π-II.16})$$

Το τελευταίο είναι συμβιβαστό με την προφανή φυσική ερμηνεία των διαγώνιων στοιχείων ρ_{nn} : η πιθανότητα να βρούμε το σύστημα μας στην κατάσταση $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ είναι w_{α} και η πιθανότητα η $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ να βρεθεί στην κατάσταση $|\psi_n\rangle$ είναι $|c_n^{(\alpha)}|^2$. Συνεπώς, τα διαγώνια στοιχεία ρ_{nn} εκφράζουν την πιθανότητα που υπάρχει να βρούμε ένα μέλος του συστήματος μας στην ιδιοκατάσταση $|\psi_n\rangle$.

4. Χρησιμοποιώντας τη διαγώνια αναπαράσταση συμπεραίνουμε αμέσως ότι

$$\text{Tr}(\rho^2) \leq \text{Tr} \rho = 1, \quad (\text{Π-II.17})$$

μια σχέση που θα ισχύει σε κάθε αναπαράσταση, μια και το ίχνος ενός πίνακα παραμένει αναλλοίωτο κάτω από ένα μοναδιακό μετασχηματισμό.

Ας υποθέσουμε, τώρα, ότι έχουμε την ειδική περίπτωση, που το σύστημά μας βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση $|\psi^{(k)}\rangle$. Τότε, προφανώς, είναι $w_{\alpha} = \delta_{\alpha k}$ και

$$\rho^{(k)} = |\psi^{(k)}\rangle \langle \psi^{(k)}| \quad (\text{Π-II.18})$$

Ο $\rho^{(k)}$ είναι σ' αυτή την περίπτωση ένας προβολικός τελεστής

$$(\rho^{(k)})^2 = \rho^{(k)} \quad (\text{Π-II.19})$$

και έχουμε

$$\text{Tr}(\rho^{(k)})^2 = \text{Tr} \rho^{(k)} = 1 \quad (\text{Π-II.20})$$



Συνεπώς, η εξίσωση $\text{Tr}(\hat{\rho}^{(k)})^2 = 1$ αποτελεί ένα κριτήριο για το αν το σύστημά μας βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση ή όχι. Λόγω της παρουσίας του ίχνους, η εξίσωση αυτή είναι αναλλοίωτη κάτω από μοναδιακούς μετασχηματισμούς. Πηγαίνοντας στη διαγώνια αναπαράσταση για τον $\hat{\rho}^{(k)}$, θα έχουμε από την (Π-II.19)

$$\hat{\rho}^{(k)}(\hat{\rho}^{(k)} - I) = 0 \quad (\text{Π-II.21})$$

Από τις (Π-II.20) και (Π-II.21) συμπεραίνουμε ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{\rho}^{(k)}$ θα είναι όλες μηδέν πλην μιας, που θα είναι ίση με την μονάδα. Αυτή η τελευταία ιδιότητα αποτελεί ένα χαρακτηριστικό γνώρισμα ενός πίνακα πυκνότητας, που αντιστοιχεί σε μια καθαρή κατάσταση.

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω σ' ένα σύστημα φερμιονίων με σπιν $\frac{1}{2}$ (π.χ. ένα σύστημα ηλεκτρονίων). Ο πίνακας πυκνότητας ρ , που περιγράφει ένα τέτοιο σύστημα, θα είναι ένα πίνακας 2×2 . Ο μοναδιαίος πίνακας 2×2 και οι πίνακες Pauli σ_i αποτελούν ένα πλήρες σύνολο 2×2 πινάκων (βλ. §5.6) και, συνεπώς, έχουμε

$$\rho = c_0 I + c_i \sigma_i = c_0 I + \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{Π-II.22})$$

Από τις συνθήκες $\text{Tr} \rho = 1$ και $\text{Tr} \sigma_i = 0$ βρίσκουμε ότι

$$c_0 = \frac{1}{2} \quad (\text{Π-II.23})$$

Βάσει της (Π-II.10) θα είναι

$$\langle \sigma_i \rangle = \text{Tr}(\rho \sigma_i) \quad (\text{Π-II.24})$$

Από τη σχέση $\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}$ παίρνουμε

$$\langle \sigma_i \rangle = 2c_i \quad (\text{Π-II.25})$$

Έτσι, ο πίνακας πυκνότητας μπορεί να γραφεί

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (\text{Π-II.26})$$

όπου το άνυσμα

$$\mathbf{P} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad (\text{Π-II.27})$$

είναι γνωστό σαν άνυσμα πόλωσης. Συναρτήσει των διαφόρων συνιστωσών, έχουμε

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1-P_z \end{pmatrix} \quad (\text{Π-II.28})$$



Μια απλή φυσική εικόνα για το μέγεθος της πόλωσης και τον σχετικό πίνακα πυκνότητας παίρνουμε, όταν θεωρήσουμε τη διαγώνια αναπαράσταση. Τότε, θα είναι

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix} \quad (\text{Π-II.29})$$

όπου $P = \pm \sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}$. Βλέπουμε από την (Π-II.28) ότι στη διαγώνια αναπαράσταση θα πρέπει να έχουμε $P_x = P_y = 0$, οπότε $P = P_z$, πράγμα που σημαίνει ότι το άνυσμα πόλωσης \mathbf{P} θα είναι παράλληλο προς τον άξονα Oz. Από την (Π-II.26) φαίνεται, τότε, ότι ο πίνακας $\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ θα είναι διαγώνιος και μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} |+\rangle &= P |+\rangle \\ \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} |-\rangle &= -P |-\rangle \end{aligned} \quad (\text{Π-II.30})$$

Με βάση την ιδιότητα 3., μπορούμε να ερμηνεύσουμε τις ποσότητες $\frac{1+P}{2}$ και $\frac{1-P}{2}$ σαν τις πιθανότητες να βρούμε ένα μέλος του συστήματος στις καταστάσεις $|+\rangle$ και $|-\rangle$, αντίστοιχα. Οι πιθανότητες αυτές μπορεί να εκφραστούν, επίσης, συναρτήσει των αριθμών N_+ και N_- , που παριστάνουν τους αριθμούς των σωματιδίων με τιμές του σπιν $+\hbar/2$ και $-\hbar/2$ κατά μήκος του άξονα Oz:

$$\frac{1+P}{2} = \frac{N_+}{N_+ + N_-}, \quad \frac{1-P}{2} = \frac{N_-}{N_+ + N_-} \quad (\text{Π-II.31})$$

και, συνεπώς,

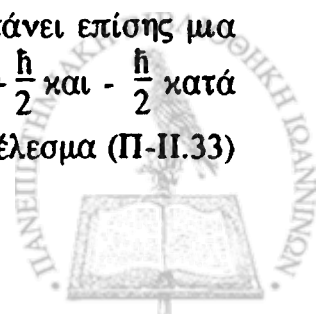
$$P = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} \quad (\text{Π-II.32})$$

Το P αποτελεί ένα μέτρο της πόλωσης του συστήματος.

Έτσι, όταν είναι $P = 0$, σημαίνει ότι έχουμε ένα πλήρως μη πολωμένο σύστημα (σύστημα σε τελείως τυχαία κατάσταση). Ο πίνακας πυκνότητας είναι τότε

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{Π-II.33})$$

και έχουμε $\text{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2} < \text{Tr} \rho = 1, \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \text{Tr}(\rho \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \text{Tr} \boldsymbol{\sigma} = 0$. Είναι χρήσιμο, εδώ, αφ' ενός μεν να παρατηρήσουμε ότι η έκφραση (Π-II.33) παριστάνει επίσης μια μεικτή κατάσταση με ίσες πιθανότητες να βρούμε τιμές του σπιν $+\frac{\hbar}{2}$ και $-\frac{\hbar}{2}$ κατά μήκος π.χ. του άξονα x, αφ' ετέρου δε να επεκτείνουμε το αποτέλεσμα (Π-II.33)



σ' ένα σύστημα, που έχει ένα πεπερασμένο αριθμό Γ καταστάσεων. Ο πίνακας πυκνότητας για μια τελείως τυχαία κατάσταση θα είναι, τότε,

$$\rho = \frac{1}{\Gamma} I \quad (\text{Π-II.34})$$

Αντίθετα, αν το αρχικό σύστημά μας βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση, μπορούμε να δούμε ότι $P = \pm 1$. Πράγματι, επειδή πρέπει να είναι $\rho^2 = \rho$ (βλ. Π-II.19), σ' αυτή την περίπτωση έχουμε (με βάση το πρόβλημα 5.7)

$$\frac{1}{4} [I + 2P \cdot \sigma + (P \cdot \sigma)^2] = \frac{1}{4} (I + 2P \cdot \sigma + P^2) = \frac{1}{2} (I + P \cdot \sigma) \quad (\text{Π-II.35})$$

και, συνεπώς, $P^2=1$ και $P=\pm 1$. Βρίσκουμε, λοιπόν, τους δύο πίνακες πυκνότητας

$$P = +1, \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P = -1, \rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{Π-II.36})$$

Βλέπουμε ότι $\text{Tr}(\rho^2) = \text{Tr}\rho = 1$ και ότι η μια ιδιοτιμή είναι ίση με τη μονάδα, ενώ η άλλη ίση με μηδέν, όπως αναμένεται. Επαληθεύουμε, επίσης, ότι $\langle \sigma_z \rangle = \text{Tr}(\rho \sigma_z) = \pm 1$, $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$. Η τιμή $P=+1$ αντιστοιχεί στην κατάσταση $|+\rangle$ και σε σύστημα πλήρως πολωμένο με τα σπιν να έχουν την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ κατά μήκος του άξονα Oz . Αντίστοιχα, η τιμή $P=-1$ αντιστοιχεί στην κατάσταση $|-\rangle$ και σε σύστημα πλήρως πολωμένο με τα σπιν να έχουν την τιμή $-\frac{\hbar}{2}$ κατά μήκος του άξονα Oz . Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι ο πίνακας πυκνότητας (Π-II.33) ενός πλήρως μη πολωμένου συστήματος μπορεί να γραφεί σαν ένα ίσο μείγμα των δύο πινάκων πυκνότητας (Π-II.36), που αντιστοιχούν σε δύο πλήρως πολωμένα συστήματα:

$$\rho_{P=0} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \rho_{P=1} + \frac{1}{2} \rho_{P=-1} \quad (\text{Π-II.37})$$

Πάντως μια τέτοια ανάλυση ενός πίνακα πυκνότητας δεν είναι μοναδική και μπορεί να γίνει με άπειρους τρόπους.

Οι περιπτώσεις που είδαμε αντιστοιχούν σε $P=0$ ή $|P|=1$ και σε συστήματα πλήρως μη πολωμένα και πλήρως πολωμένα, αντίστοιχα. Για ενδιάμεσες τιμές $0 < |P| < 1$, το σύστημά μας θα είναι μερικά πολωμένο. Έχουμε, τότε, τις ενδιάμεσες τιμές $\frac{1}{2} < \text{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2} (1+P^2) < 1$. Ο πίνακας πυκνότητας (Π-II.29) μπορεί να γραφεί με τη μορφή



$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + (1-P) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{Π-II.38})$$

δηλαδή να γραφεί σαν ένα μείγμα του πίνακα πυκνότητας ενός πλήρως πολωμένου συστήματος και του πίνακα πυκνότητας ενός πλήρως μη πολωμένου συστήματος, με λόγο στο μείγμα $\frac{P}{1-P}$.

Συνοψίζοντας, μπορούμε να πούμε ότι ο πίνακας πυκνότητας αποτελεί μια πιο γενική περιγραφή ενός συστήματος στην κβαντική μηχανική. Με βάση αυτόν, μπορούμε να προσδιορίσουμε τις μέσες τιμές των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών του συστήματος (βλ. Π-II.10). Μπορούμε, επίσης, να μελετήσουμε άλλες φυσικές διαδικασίες, π.χ. τη σκέδαση σωματιδίων, κάτι όμως με το οποίο δεν θα ασχοληθούμε εμείς εδώ.

Π-II.2. Εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας

Θα διατυπώσουμε σ' αυτή την παράγραφο την εξίσωση κίνησης για τον πίνακα πυκνότητας. Για μια αρχική χρονική στιγμή t_0 έχουμε από την (Π-II.9)

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_{\alpha=1}^{\kappa} w_{\alpha} |\psi^{(\alpha)}(t_0)\rangle \langle \psi^{(\alpha)}(t_0)| \quad (\text{Π-II.39})$$

Η εξέλιξη με το χρόνο γίνεται μέσω του τελεστή χρονικής εξέλιξης (βλ. §2.8-2.9)

$\hat{U}(t, t_0)$

$$|\psi^{(\alpha)}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi^{(\alpha)}(t_0)\rangle \quad (\text{Π-II.40})$$

Συνεπώς παίρνουμε (υποθέτουμε σταθερά στατιστικά βάρη w_{α})

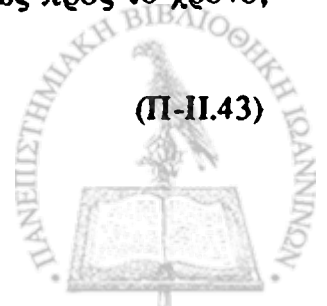
$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t, t_0) \quad (\text{Π-II.41})$$

Αν η χαμιλτονιανή \hat{H} είναι ανεξάρτητη από το χρόνο, ξέρουμε ότι

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \quad (\text{Π-II.42})$$

Θεωρούμε, βέβαια, ένα σύνολο κ όμοιων υποσυστημάτων, που περιγράφονται από την ίδια χαμιλτονιανή \hat{H} . Έτσι, διαφορίζοντας την (Π-II.41) ως προς το χρόνο, βρίσκουμε την εξίσωση κίνησης

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \quad (\text{Π-II.43})$$



Η εξίσωση αυτή είναι γνωστή σαν εξίσωση Liouville. Μοιάζει με την εξίσωση κίνησης του Heisenberg, αλλά έχει διαφορετικό σημείο από εκείνη στο δεύτερο μέλος. Ας σημειωθεί, επίσης, ότι οι τελεστές που εμφανίζονται στην εξίσωση (Π-II.43) είναι στην εικόνα Schrödinger. Στην εικόνα Heisenberg θα έχουμε

$$\hat{\rho}_H = \hat{U}^\dagger \hat{\rho}_S \hat{U} = \hat{\rho}(t_0) \quad (\text{Π-II.44})$$

και άρα ο $\hat{\rho}_H$ δεν μεταβάλλεται με το χρόνο. Αξίζει, τέλος, να παρατηρήσουμε ότι η εξίσωση κίνησης (Π-II.43) αφήνει τόσο το $\text{Tr} \rho$, όσο και το $\text{Tr} \rho^2$ αμετάβλητα στο χρόνο (όπως φαίνεται αμέσως από την (Π-II.41)) και, έτσι, μια καθαρή κατάσταση δεν μπορεί να μετατραπεί σε μια μεικτή κατάσταση ή αντίστροφα (θα επανέλθουμε σ' αυτό το σημείο στο επόμενο κεφάλαιο Π-III).

Από την εξίσωση Liouville (Π-II.43) μπορούμε εύκολα να βρούμε την εξίσωση κίνησης για τη μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους. Έχουμε για ένα τελεστή \hat{A} , που δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από το χρόνο,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}(\hat{A} [\hat{H}, \hat{\rho}]) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{A}, \hat{H}] \hat{\rho}), \end{aligned} \quad (\text{Π-II.45})$$

όπου, βέβαια, έχουμε χρησιμοποιήσει το γεγονός ότι το ίχνος του γινομένου δύο πινάκων δεν εξαρτάται από τη σειρά των παραγόντων.

Στα παραπάνω, θεωρήσαμε ένα σύνολο όμοιων υποσυστημάτων για να εισάγουμε την έννοια του πίνακα πυκνότητας. Είδαμε ότι οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών προσδιορίζονται από τον πίνακα πυκνότητας και σ' αυτό συνεισφέρουν τόσο η κβαντομηχανική μέση τιμή, όσο και η στατιστική φύση του συνόλου. Στη συνέχεια, θα εξετάσουμε συστήματα που βρίσκονται σε ισορροπία και στα οποία οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών είναι σταθερές. Αυτό σημαίνει ότι

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = 0 \quad (\text{Π-II.46})$$

και, συνεπώς, $[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0$ και ο $\hat{\rho}$ μπορεί να εκφραστεί σαν συνάρτηση της \hat{H} :

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}(\hat{H}) \quad (\text{Π-II.47})$$

Οι παραπάνω σχέσεις αποτελούν το κβαντομηχανικό ανάλογο του θεωρήματος Liouville της κλασικής στατιστικής μηχανικής για τη σταθερότητα των κατανομών πιθανοτήτων. Ο πίνακας Π-II.1 συνοψίζει την αντιστοιχία ανάμεσα στην κλασική



και την κβαντική στατιστική μηχανική στο φορμαλισμό που περιγράψαμε παραπάνω.

	Κλασική στατιστική μηχανική	Κβαντική στατιστική μηχανική
Καθαρή κατάσταση	Σημείο χώρου φάσεων (q,p)	Καταστατικό διάνυσμα $ \psi\rangle$
Γενική (μεικτή) κατάσταση	Πυκνότητα πιθανότητας $\rho(q,p)$ $\int \rho(q,p) dq dp = 1$	Τελεστής (πίνακας) πυκνότητας $\hat{\rho}$ $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$
Συνθήκη καθαρής κατάστασης	$\rho = \delta$ -συνάρτηση	$\rho = \psi\rangle\langle\psi $ $\text{Tr } \hat{\rho}^2 = \text{Tr } \hat{\rho} = 1$ (ένα μόνο μη μηδενικό στοιχείο του πίνακα ρ ίσο με 1)
Εξίσωση κίνησης (Liouville)	$\frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]_{\text{κλασ}}$	$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$
Παρατηρήσιμο μέγεθος	Συνάρτηση $A(q,p)$	Ερμιτιανός τελεστής \hat{A}
Μέση τιμή	$\langle A \rangle = \int A \rho dq dp$	$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr } (\hat{\rho} \hat{A})$

Πίνακας Π-II.1. Αντιστοιχία κλασικής και κβαντικής στατιστικής μηχανικής.

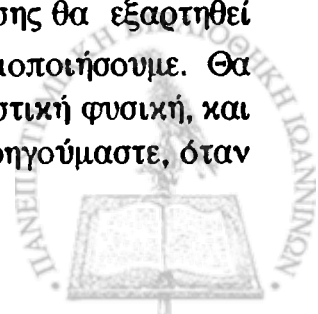
Ειδικότερα, αν θεωρήσουμε σαν βάση τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας:

$$|\psi_n\rangle \equiv |E_n\rangle, \quad (\text{Π-II.48})$$

τότε σ' αυτή την αναπαράσταση και η \hat{H} και ο $\hat{\rho}$ έχουν διαγώνια μορφή

$$\begin{aligned} H_{nm} &= E_n \delta_{nm} \\ \rho_{nm} &= \rho_{nn}(E_n) \delta_{nm} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.49})$$

Ξέρουμε ότι τα διαγώνια στοιχεία ρ_{nn} παριστάνουν την πιθανότητα να βρούμε ένα τυχαίο μέλος του συστήματος μας στην ιδιοκατάσταση E_n . Η πιθανότητα αυτή είναι συνάρτηση του E_n . Η ακριβής μορφή αυτής της συνάρτησης θα εξαρτηθεί από το είδος του στατιστικού συνόλου - συλλογής που θα χρησιμοποιήσουμε. Θα δούμε τα διάφορα είδη συλλογών, που είναι χρήσιμα στη στατιστική φυσική, και θα διαπιστώσουμε σε πόσο βαθιά διαφορετική συμπεριφορά οδηγούμαστε, όταν



έχουμε να κάνουμε με συστήματα όμοιων σωματιδίων που η ολική τους κυματοσυνάρτηση είναι είτε συμμετρική (μποζόνια) είτε αντισυμμετρική (φερμιόνια). Πάντως, πολύ γενικά, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι ο λογάριθμος του ϱ_{nn} θα πρέπει να είναι της μορφής

$$\log \varrho_{nn} = -\alpha - \beta E_n + \gamma N_n \quad (\text{Π-II.50})$$

όπου α , β και γ σταθερές και N_n ο αριθμός των σωματιδίων του συστήματος (τα σημεία συν ή πλην μπαίνουν απλά για λόγους ταυτοποίησης στον μετέπειτα συμβολισμό). Ο λόγος είναι ο ίδιος, όπως και στην κλασική στατιστική. Μια συνάρτηση κατανομής πιθανότητας για ένα σύνολο είναι ίση με το γινόμενο των αντίστοιχων συναρτήσεων κατανομής των μελών του συνόλου και, συνεπώς, ο λογάριθμος της θα είναι μια προσθετική ποσότητα. Έτσι, ο λογάριθμος μιας συνάρτησης κατανομής πιθανότητας πρέπει να είναι όχι μόνο μια σταθερά της κίνησης, όπως είδαμε προηγούμενα, αλλά και μια προσθετική ποσότητα. Αν η ενέργεια και ο αριθμός των σωματιδίων είναι οι μόνες προσθετικές σταθερές του συνόλου, τότε ο μόνος προσθετικός συνδυασμός είναι αυτός της μορφής (Π-II.50).

Π-II.3. Η μικροκανονική συλλογή

Στη μικροκανονική συλλογή δεχόμαστε ότι καθένα από τα όμοια υποσυστήματα, που απαρτίζουν το στατιστικό σύνολο, χαρακτηρίζεται από ένα σταθερό αριθμό N σωματιδίων, που περιέχονται μέσα σ' ένα όγκο V , και, επί πλέον, έχει ενέργεια, που βρίσκεται μέσα σ' ένα μικρό διάστημα ενεργειών $E_0 \leq E \leq E_0 + \Delta E$, όπου $\Delta E \ll E_0$. Δεχόμαστε, δηλαδή, ότι τα υποσυστήματα του συνόλου είναι απομονωμένα μεταξύ τους και έχουν, έτσι, την ίδια περίπου ενέργεια μέσα σε μια στενή ενεργειακή περιοχή.

Αν ο αριθμός των διάκριτων κβαντικών καταστάσεων στις οποίες μπορεί να βρεθεί ένα μέλος της συλλογής είναι $\Delta\Gamma(E_0, \Delta E, N, V)$, τότε από την (Π-II.34) συμπεραίνουμε ότι

$$\varrho_{nn} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\Gamma} & E_0 \leq E \leq E_0 + \Delta E \\ 0 & \text{για όλες τις άλλες τιμές της } E \end{cases} \quad (\text{Π-II.51})$$

Μπορούμε, εδώ, να ορίσουμε την εντροπία του συστήματος από την γνωστή έκφραση

$$S = k \log \Delta\Gamma = -k \log \varrho_{nn} \quad (\text{Π-II.52})$$

όπου όμως, τώρα, το $\Delta\Gamma$ θα πρέπει να υπολογιστεί κβαντομηχανικά. Αν $\Gamma(E)$ είναι ο αριθμός των διάκριτων κβαντικών καταστάσεων, στις οποίες ένα



υποσύστημα με ενέργεια μέχρι E μπορεί να βρεθεί, τότε ο αριθμός των διάκριτων κβαντικών καταστάσεων, που αντιστοιχούν στο ενεργειακό διάστημα ΔE , θα είναι

$$\Delta\Gamma = \frac{d\Gamma(E)}{dE} \Delta E \quad (\text{Π-II.53})$$

Η σχέση ανάμεσα στο $\Delta\Gamma$ και το διάστημα $\Delta p \Delta q$ στον 6-διάστατο χώρο των φάσεων είναι, ως γνωστόν, $\Delta\Gamma = \Delta p_3 \Delta q_3 / h^3 = \Delta p_3 \Delta q_3 / (2\pi\hbar)^3$. Αυτό το έχουμε δει στην περίπτωση ενός συστήματος μέσα σε κουτί (βλ. §3.7), αλλά προκύπτει εύκολα και από τη συνθήκη κβάντωσης των Bohr-Sommerfeld-Wilson $\oint p dx = (n + \frac{1}{2}) h = (n + \frac{1}{2}) 2\pi\hbar$ (βλ. §9.6). Γενικεύοντας, αν έχουμε s βαθμούς ελευθερίας, μπορούμε να πούμε ότι κάθε κβαντική κατάσταση αντιστοιχεί σ' ένα στοιχείο όγκου $(2\pi\hbar)^s$ στον αντίστοιχο χώρο των φάσεων και, συνεπώς, ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων $\Delta\Gamma$ θα είναι (στο όριο της κλασικής θεωρίας)

$$\Delta\Gamma = \frac{\Delta p_s \Delta q_s}{(2\pi\hbar)^s} \quad (\text{Π-II.54})$$

Για N όμοια σωματίδια σε κάθε υποσύστημα, θα υπάρχει ένας επί πλέον όρος $\frac{1}{N!}$ στην αντίστοιχη έκφραση για το $\Delta\Gamma$, λόγω της μη διακρισιμότητας των σωματιδίων, οπότε γράφουμε γενικά

$$\Delta\Gamma = \frac{\Delta p_s N \Delta q_s N}{N! (2\pi\hbar)^{sN}} \quad (\text{Π-II.55})$$

Ο ορισμός (Π-II.52) για την εντροπία συνεπάγεται τις γνωστές ιδιότητες:

1. Η εντροπία είναι μια προσθετική ποσότητα:

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_1 \cdot \Delta\Gamma_2 \dots = \prod_i \Delta\Gamma_i, \quad S = k \log \Delta\Gamma = \sum_i k \log \Delta\Gamma_i = \sum_i S_i \quad (\text{Π-II.56})$$

2. Η εντροπία ενός κλειστού συστήματος έχει τη μέγιστη τιμή της στην κατάσταση της θερμοδυναμικής ισορροπίας (νόμος αύξησης της εντροπίας).

3. Η θερμοκρασία T του συστήματος μπορεί να οριστεί από την σχέση

$$T^{-1} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{N,V} \quad (\text{Π-II.57})$$

Αν και όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες και ιδιότητες ενός κλειστού συστήματος μπορεί να περιγραφούν με βάση τη μικροκανονική συλλογή, στην πράξη είναι δύσκολο να τη χρησιμοποιήσουμε (περιγραφή απομονωμένων συστημάτων, τυπικός ορισμός της θερμοκρασίας κλπ.). Για το λόγο αυτό



εισάγουμε δύο άλλους τύπους συλλογών, την κανονική και τη μεγαλοκανονική συλλογή, που προτάθηκαν για πρώτη φορά από τον Gibbs.

Π-II.4. Η κανονική συλλογή

Στη μικροκανονική συλλογή όλα τα υποσυστήματα είναι απομονωμένα μεταξύ τους και έχουν, ουσιαστικά, την ίδια ενέργεια (μέσα σε μια στενή ενεργειακή περιοχή). Στην κανονική συλλογή δεχόμαστε ότι τα υποσυστήματα μπορούν ν' αλληλεπιδράσουν θερμικά μ' ένα πολύ μεγαλύτερο σύστημα, γνωστό σαν λουτρό θερμότητας. Για ένα μεγάλο αριθμό $k \rightarrow \infty$ υποσυστημάτων, το λουτρό θερμότητας, με το οποίο αλληλεπιδρά ένα υποσύστημα, μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από όλα τα υπόλοιπα υποσυστήματα. Το σύνολο υποσύστημα + λουτρό θερμότητας θεωρείται κλειστό και οι ιδιότητές του περιγράφονται από τη μικροκανονική συλλογή. Εξακολουθούμε να υποθέτουμε ότι το υποσύστημα συνίσταται από ένα σταθερό αριθμό N σωματιδίων μέσα σε όγκο V , αλλά μεταξύ υποσυστήματος και λουτρού θερμότητας ανταλλάσσεται ενέργεια. Υποθέτουμε, όμως, ότι η αλληλεπίδραση του υποσυστήματος με το λουτρό θερμότητας είναι ασθενής, έτσι ώστε σε μια δεδομένη χρονική στιγμή να μπορεί να θεωρηθεί ότι αυτά βρίσκονται σε συγκεκριμένες ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας με ιδιοτιμές E και E' , αντίστοιχα. Λόγω διατήρησης της ενέργειας, θα έχουμε

$$E_{ολ} = E + E' \quad (\text{Π-II.58})$$

όπου $E_{ολ}$ η ολική ενέργεια του συνόλου υποσύστημα + λουτρό θερμότητας. Επειδή το σύνολο αυτό περιγράφεται από τη μικροκανονική συλλογή, η $E_{ολ}$ θα περιορίζεται σε μια στενή ενεργειακή περιοχή $E_0 \leq E_{ολ} \leq E_0 + \Delta E$, $\Delta E \leq E_0$. Στη θερμοδυναμική ισορροπία, το σύνολο θα χαρακτηρίζεται από μια θερμοκρασία T . Το πρόβλημά μας είναι να προσδιορίσουμε την πιθανότητα που έχει το υποσύστημά μας σε μια δοσμένη θερμοκρασία T να βρεθεί σε μια ορισμένη ιδιοκατάσταση της ενέργειας με ιδιοτιμή E .

Ας ονομάσουμε $d\Gamma(E_{ολ})$ τον αριθμό των διάκριτων κβαντικών καταστάσεων του συνόλου υποσύστημα + λουτρό θερμότητας με ενέργειες στην ενεργειακή περιοχή $(E_{ολ}, E_{ολ} + dE)$. Η πιθανότητα να βρούμε το σύνολο με ενέργεια στην παραπάνω ενεργειακή περιοχή μπορεί να γραφεί

$$dP = \begin{cases} C d\Gamma(E_{ολ}) & E_0 \leq E_{ολ} \leq E_0 + \Delta E \\ 0 & \text{για όλες τις άλλες τιμές της } E_{ολ} \end{cases} \quad (\text{Π-II.59})$$

όπου C σταθερά. Αν $d\Gamma(E)$ και $d\Gamma(E')$ είναι οι αντίστοιχοι αριθμοί για το υποσύστημα και το λουτρό θερμότητας, θα έχουμε



$$dP = Cd\Gamma(E) d\Gamma(E') \delta(E_{ολ}-E-E') \quad (\text{Π-II.60})$$

Η πιθανότητα dP_n για να είναι το υποσύστημα σε μια ορισμένη ενεργειακή κατάσταση E_n , ανεξάρτητα από την ενεργειακή κατάσταση του λουτρού θερμοότητας, θα είναι

$$\begin{aligned} dP_n &= Cd\Gamma(E_n) \int \delta(E_{ολ}-E_n-E') d\Gamma(E') \\ &= Cd\Gamma(E_n) \Delta\Gamma(E_{ολ}-E_n), \end{aligned} \quad (\text{Π-II.61})$$

όπου $\Delta\Gamma(E_{ολ}-E_n)$ είναι ο ολικός αριθμός των καταστάσεων του λουτρού θερμοότητας, με τον περιορισμό πάντα της διατήρησης της ενέργειας $E_{ολ}-E_n=E'$. Μπορούμε να εκφράσουμε αυτό τον αριθμό μέσω της εντροπίας του λουτρού θερμοότητας:

$$\begin{aligned} S_\lambda(E') &= k \log \Delta\Gamma(E'), \\ \Delta\Gamma(E') &= e^{S_\lambda(E')/k} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.62})$$

Επειδή $E_n \ll E_{ολ}$, μια και το υποσύστημα είναι μικρό σε σχέση με το σύνολο, θα είναι

$$\begin{aligned} S_\lambda(E') &= S_\lambda(E_{ολ}-E_n) \approx S_\lambda(E_{ολ}) - \frac{\partial S_\lambda}{\partial E_{ολ}} E_n \\ &= S_\lambda(E_{ολ}) - \frac{E_n}{T} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.63})$$

Παίρνουμε, λοιπόν,

$$dP_n = C e^{S_\lambda(E_{ολ})/k} e^{-E_n/kT} d\Gamma(E_n) \quad (\text{Π-II.64})$$

Συνεπώς, ο πίνακας πυκνότητας στην αναπαράσταση ενέργειας (Π-II.48)-(Π-II.49) θα έχει τη μορφή

$$\rho_{nm} = A e^{-E_n/kT} \delta_{nm} \quad (\text{Π-II.65})$$

όπου

$$A = C e^{S_\lambda(E_{ολ})/k} \quad (\text{Π-II.66})$$

είναι μια σταθερά κανονικοποίησης, που μπορεί να υπολογιστεί από τη συνθήκη

$\text{Tr} \rho = 1$, δηλαδή $\sum_n \rho_{nn} = 1$. Βρίσκουμε λοιπόν

$$A^{-1} = \sum_n e^{-E_n/kT} \equiv Z(T) \quad (\text{Π-II.67})$$

Θέτοντας

$$\beta = 1/kT,$$

(Π-II.68)



συνοψίζουμε τ' αποτελέσματα που βρήκαμε:

$$Q_{nm} = A e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z(T)} e^{-\beta E_n} \quad (\text{Π-II.69})$$

$$Z(T) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \quad (\text{Π-II.70})$$

Η σχέση (Π-II.69) αποτελεί έναν από τους πιο σπουδαίους τύπους της στατιστικής φυσικής και ονομάζεται κανονική κατανομή (ή κατανομή Gibbs). Η συνάρτηση $Z(T)$ είναι γνωστή σαν συνάρτηση επιμερισμού της κανονικής κατανομής και θα πρέπει να τονιστεί ότι το άθροισμα πάνω στα n αφορά σε όλες τις διάκριτες καταστάσεις (γι' αυτό και η συνάρτηση επιμερισμού λέγεται, καμιά φορά, άθροισμα πάνω στις καταστάσεις). Η ελεύθερη ενέργεια στην κανονική κατανομή δίνεται από τη σχέση

$$F(T, N, V) = -\frac{1}{\beta} \log Z(T), \quad (\text{Π-II.71})$$

οπότε η κανονική κατανομή γράφεται, συχνά, σαν

$$Q_{nm} = e^{\beta(F - E_n)} \quad (\text{Π-II.72})$$

Ο τελεστής του πίνακα πυκνότητας είναι

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(T)} e^{-\beta \hat{H}} \quad (\text{Π-II.73})$$

και η μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους \hat{A} θα είναι

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{A}) = \frac{1}{Z(T)} \text{Tr} (e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}) \\ &= \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}} \hat{A})}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.74})$$

Ειδικά, για τη μέση τιμή της ενέργειας έχουμε

$$\begin{aligned} \bar{E} = \langle \hat{H} \rangle &= \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}} \hat{H})}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \end{aligned} \quad (\text{Π-II.75})$$

Ας δούμε μερικές εφαρμογές της κανονικής κατανομής. Πρώτα, ας θεωρήσουμε ένα σύνολο μοναδιάστατων αρμονικών ταλαντωτών. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ και κάθε διάκριτη κατάσταση προσδιορίζεται από τον κβαντικό αριθμό n . Η συνάρτηση επιμερισμού είναι, λοιπόν,



$$\begin{aligned}
 Z(T) &= \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+(1/2))\hbar\omega} \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}
 \end{aligned} \tag{Π-II.76}$$

Συνεπώς, η μέση τιμή της ενέργειας είναι

$$\bar{E} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = \frac{\hbar\omega}{Z} + \hbar\omega \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \tag{Π-II.77}$$

Στο κλασικό όριο $\hbar\omega \rightarrow 0$ και

$$\bar{E} \xrightarrow{\hbar\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} = kT, \tag{Π-II.78}$$

σε συμφωνία με την κλασική αρχή της ισοκατανομής της ενέργειας.

Ας πάρουμε, τώρα, ένα σύνολο σωματιδίων μέσα σ' ένα κουτί, που υποθέτουμε ότι είναι αρκετά μεγάλο. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι, όπως ξέρουμε,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \tag{Π-II.79}$$

Κάθε διάκριτη κατάσταση προσδιορίζεται, εδώ, από τους τρεις θετικούς ακέραιους αριθμούς n_1, n_2, n_3 . Έτσι, η συνάρτηση επιμερισμού θα είναι

$$Z(T) = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-\beta E_n} \tag{Π-II.80}$$

Επειδή υποθέσαμε ότι το κουτί είναι μεγάλο, τα ενεργειακά επίπεδα απέχουν πολύ λίγο μεταξύ τους και αντικαθιστούμε τα αθροίσματα με ολοκληρώματα

$$Z(T) = \int_0^{\infty} dn_1 \int_0^{\infty} dn_2 \int_0^{\infty} dn_3 e^{-\beta' (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)} \tag{Π-II.81}$$

όπου $\beta' = \beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$. Χρησιμοποιώντας το ολοκλήρωμα

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta' x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta'}} ,$$

βρίσκουμε

(Π-II.82)



$$Z(T) = L^3 \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \quad (\text{Π-II.83})$$

Συνεπώς, η μέση τιμή της ενέργειας είναι

$$\bar{E} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2} kT, \quad (\text{Π-II.84})$$

πάλι σε συμφωνία με την κλασική αρχή της ισοκατανομής της ενέργειας.

Και ένα τελευταίο παράδειγμα εφαρμογής της κανονικής κατανομής. Ας θεωρήσουμε ένα σύνολο σωματιδίων με σπιν $\frac{1}{2}$ μέσα σ'ένα μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} \parallel \mathbf{Oz}$.

Η χαμιλτονιακή είναι

$$\begin{aligned} H &= -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = g\mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \cdot \mathbf{B} \\ &= g\mu_B B \frac{\sigma_z}{2} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.85})$$

Ο πίνακας πυκνότητας είναι συνεπώς ένας πίνακας 2×2 :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{Z} e^{-\beta H} = \frac{1}{\text{Tr} e^{-\beta H}} e^{-\beta H} \\ &= \frac{1}{e^{-\beta g\mu_B B/2} + e^{\beta g\mu_B B/2}} \begin{pmatrix} e^{-\beta g\mu_B B/2} & 0 \\ 0 & e^{\beta g\mu_B B/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.86})$$

Έτσι, η μέση τιμή του $S_z = \hbar\sigma_z/2$ σε θερμοκρασία T είναι

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \text{Tr} (\rho \sigma_z) = \frac{\hbar}{2} \frac{e^{-\beta g\mu_B B/2} - e^{\beta g\mu_B B/2}}{e^{-\beta g\mu_B B/2} + e^{\beta g\mu_B B/2}} \\ &= -\frac{\hbar}{2} \tanh (\beta g\mu_B B/2) \end{aligned} \quad (\text{Π-II.87})$$

Π-II.5. Η μεγαλοκανονική συλλογή

Τόσο στη μικροκανονική συλλογή, στην οποία η ενέργεια ενός υποσυστήματος είναι σταθερή, όσο και στην κανονική συλλογή, στην οποία μπορεί ν'ανταλλάσσεται ενέργεια ανάμεσα στο υποσύστημα και σ'ένα λουτρό θερμοτήτας έτσι ώστε η ενέργεια του υποσυστήματος να κυμαίνεται γύρω από τη μέση τιμή της, ο αριθμός των σωματιδίων N του υποσυστήματος είναι σταθερός. Στη μεγαλοκανονική συλλογή αυτό που επιτρέπεται, επιπλέον, είναι ν' ανταλλάσσονται σωματίδια ανάμεσα στα υποσυστήματα. Έτσι, ανάμεσα στο υποσύστημα και το λουτρό θερμοτήτας της κανονικής συλλογής επιτρέπεται, τώρα, να γίνεται ανταλλαγή σωματιδίων, έτσι ώστε ο αριθμός N των σωματιδίων του υποσυστήματος να κυμαίνεται γύρω από τη μέση τιμή του. Ο ολικός αριθμός $N_{\text{ολ}}$ του συνόλου υποσύστημα+λουτρό θερμοτήτας παραμένει, βέβαια, σταθερός



$$N_{ολ} = N + N' \quad (\text{Π-II.88})$$

Με τη μεγαλοκανονική συλλογή είναι πολλές φορές πιο εύκολο να υπολογίσουμε τη συνάρτηση επιμερισμού και τις μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών. Πάντως, επειδή για ένα μεγάλο υποσύστημα οι διακυμάνσεις των E και N γύρω από τις μέσες τιμές τους είναι μικρές, τα φυσικά αποτελέσματα που παίρνουμε χρησιμοποιώντας τις διάφορες συλλογές είναι όμοια.

Η διαπραγμάτευση της μεγαλοκανονικής συλλογής είναι όμοια μ' εκείνη της κανονικής, με τη διαφορά ότι αντί για την (Π-II.63) θα έχουμε τώρα

$$\begin{aligned} S_{\lambda}(E', N') &= S_{\lambda}(E_{ολ} - E, N_{ολ} - N) \\ &= S_{\lambda}(E_{ολ}, N_{ολ}) - \frac{\partial S_{\lambda}}{\partial E_{ολ}} E_n(N) - \frac{\partial S_{\lambda}}{\partial N_{ολ}} N, \end{aligned} \quad (\text{Π-II.89})$$

όπου έχουμε σημειώσει την εξάρτηση της E_n από τον αριθμό N . Έτσι, ο πίνακας πυκνότητας θα είναι τώρα

$$\varrho_{nm} = A' e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)} \delta_{nm} \quad (\text{Π-II.90})$$

όπου A' σταθερά κανονικοποίησης και $\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N_{ολ}} \right)_{E, V}$. Το μ είναι γνωστό σαν χημικό δυναμικό και από φυσική άποψη εκφράζει την ενέργεια που χρειάστηκε για να μετακινηθεί ένα σωματίδιο από το υποσύστημα στο λουτρό θερμότητας. Παραδείγματος χάρη, για τα ηλεκτρόνια ενός μετάλλου το μ είναι το έργο εξόδου του μετάλλου. Η σταθερά κανονικοποίησης A' προκύπτει από τη συνθήκη $\text{Tr} \varrho = 1$,

δηλαδή $\sum_{N, n} \varrho_{nm} = 1$, και είναι

$$A'^{-1} = \sum_{N, n} e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)} \equiv Z(\mu, T) \quad (\text{Π-II.91})$$

Έχουμε, λοιπόν, τις εκφράσεις

$$\varrho_{nn} = \frac{1}{Z(\mu, T)} e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)} \quad (\text{Π-II.92})$$

$$Z(\mu, T) = \sum_{N, n} e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)} = \text{Tr} e^{-\beta(H(N) - \mu N)} \quad (\text{Π-II.93})$$

Η (Π-II.92) είναι η μεγαλοκανονική κατανομή και η συνάρτηση (Π-II.93) είναι γνωστή σαν μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού (συνάρτηση επιμερισμού της μεγαλοκανονικής κατανομής). Το θερμοδυναμικό δυναμικό (ή μεγάλο δυναμικό) ορίζεται από τη σχέση



$$\Omega(T, \mu, V) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\mu, T) \quad (\text{Π-II.94})$$

οπότε η μεγαλοκανονική κατανομή μπορεί να γραφεί και σαν

$$\rho_{nn} = e^{\beta(\Omega + \mu N - E_n(N))} \quad (\text{Π-II.95})$$

Ο τελεστής του πίνακα πυκνότητας παίρνει, έτσι, τη μορφή

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(\mu, T)} e^{-\beta(\hat{H}(N) - \mu \hat{N})} = e^{\beta(\Omega + \mu \hat{N} - \hat{H}(N))} \quad (\text{Π-II.96})$$

ενώ η μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού μπορεί να γραφεί σαν

$$\begin{aligned} Z(\mu, T) &= \sum_N \sum_n e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)} \\ &= \sum_N \left[\sum_n e^{-\beta E_n(N)} \right] (e^{\beta \mu})^N \\ &= \sum_N Z_N(T) (e^{\beta \mu})^N \end{aligned} \quad (\text{Π-II.97})$$

όπου $Z_N(T)$ η συνάρτηση επιμερισμού για ένα σύστημα N σωματιδίων.

Θα πρέπει να σημειώσουμε ότι τόσο η κανονική (Π-II.72), όσο και η μεγαλοκανονική (Π-II.95) κατανομή, έχουν τη μορφή (Π-II.50), που είχαμε προβλέψει. Στην κανονική κατανομή είναι $\alpha = -\beta F$, ενώ στη μεγαλοκανονική κατανομή είναι $\alpha = -\beta \Omega$ και έχει προστεθεί ένας όρος γN , $\gamma = \beta \mu$, μια και ο αριθμός των σωματιδίων αποτελεί μια επί πλέον προσθετική σταθερά.

Π-II.6. Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων - Κατανομές Maxwell - Boltzmann, Bose - Einstein και Fermi - Dirac

Μια από τις πιο σπουδαίες εξιδανικεύσεις της στατιστικής φυσικής είναι αυτή του ιδανικού αερίου. Με αυτό εννοούμε ένα σύστημα, που περιέχει ένα μεγάλο αριθμό μη αλληλεπιδρώντων όμοιων σωματιδίων (οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα σωματίδια του αερίου είναι τόσο ασθενείς που μπορεί ν' αγνοηθούν). Η απουσία αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα σωματίδια του αερίου μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε τα ενεργειακά επίπεδα E_n του αερίου συναρτήσει των ενεργειακών επιπέδων ϵ_j των σωματιδίων που το απαρτίζουν, γράφοντας



$$E_n = \sum_i n_i \varepsilon_i \quad (\text{Π-II.98})$$

όπου το άθροισμα είναι πάνω σε όλες τις ιδιοτιμές της ενέργειας ενός σωματιδίου και n_i είναι ο αριθμός των σωματιδίων με ενέργεια ε_i . Ο ολικός αριθμός των σωματιδίων είναι

$$N = \sum_i n_i \quad (\text{Π-II.99})$$

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τις τρεις δυνατές περιπτώσεις: την κλασική στατιστική Maxwell-Boltzmann και τις κβαντικές στατιστικές Bose-Einstein και Fermi-Dirac. Όπως θα δούμε, και όπως περιμένουμε, οι κβαντικές κατανομές δίνουν σαν ειδική περίπτωση (στο κλασικό όριο) την κλασική κατανομή.

α) Κατανομή Maxwell-Boltzmann

Ας ξεκινήσουμε με το κλασικό ιδανικό αέριο, δηλαδή με το σύστημα εκείνο, στο οποίο ο αριθμός των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας, που είναι διαθέσιμες για τα σωματίδια, είναι πολύ μεγαλύτερος από τον αριθμό των σωματιδίων (ας θυμηθούμε ότι στο κλασικό όριο το φάσμα τείνει στο συνεχές). Αυτό σημαίνει ότι θα έχουμε για τις μέσες τιμές των αριθμών n_i

$$\langle n_i \rangle \ll 1 \quad (\text{Π-II.100})$$

Θα δούμε αργότερα ένα κριτήριο, το οποίο διασφαλίζει τη συνθήκη (Π-II.100). Για ένα τέτοιο σύστημα, η ολική κυματοσυνάρτηση είναι απλά το γινόμενο των κυματοσυνάρτησεων των N σωματιδίων. Λόγω της μη διακρισιμότητας των σωματιδίων, το άθροισμα πάνω στις διάκριτες καταστάσεις στη συνάρτηση επιμερισμού (Π-II.70) δίνει (συμβολίζουμε με $\{n_i\}$ κάθε δυνατό σύνολο αριθμών n_i συμβιβαστό με την (Π-II.99))

$$\begin{aligned} Z_{\text{MB}}(T) &= \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{\prod_i (n_i!)} e^{-\beta \sum_i n_i \varepsilon_i} \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\{n_i\}} \frac{N!}{\prod_i (n_i!)} e^{-\beta \sum_i n_i \varepsilon_i} \\ &= \frac{1}{N!} \left[\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} \right]^N \end{aligned} \quad (\text{Π-II.101})$$

Για τη μέση τιμή της ενέργειας έχουμε, με βάση την (Π-II.75), ότι



$$\begin{aligned} \langle E_{MB} \rangle &= \sum_i \varepsilon_i \langle n_i \rangle_{MB} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_{MB}(T) \\ &= \sum_i \varepsilon_i \frac{N e^{-\beta \varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.102})$$

Συνεπώς, η μέση τιμή $\langle n_i \rangle$ του αριθμού n_i των σωματιδίων με ενέργεια ε_i είναι

$$\langle n_i \rangle_{MB} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}} e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (\text{Π-II.103})$$

Ισοδύναμα, η ίδια έκφραση μπορεί να προκύψει, με βάση την (Π-II.74), από τη σχέση

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle_{MB} &= \frac{1}{Z_{MB}(T)} \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{\prod_i (n_i!)} e^{-\beta \sum_i n_i \varepsilon_i} n_i \\ &= - \frac{\partial}{\partial (\beta \varepsilon_i)} \log Z_{MB}(T) \end{aligned} \quad (\text{Π-II.104})$$

Η (Π-II.101) είναι η συνάρτηση επιμερισμού για το κλασικό ιδανικό αέριο και η κατανομή (Π-II.103) είναι η κατανομή Maxwell-Boltzmann (ο παράγοντας $e^{-\beta \varepsilon_i}$ είναι γνωστός σαν παράγοντας Boltzmann).

Μπορούμε να έχουμε αμέσως μια πρώτη εκδήλωση για τα κριτήρια ισχύος της συνθήκης (Π-II.100). Για ένα ιδανικό αέριο σωματιδίων μέσα σ' ένα κυβικό κουτί, από την (Π-II.83) έχουμε

$$\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} = V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} = V \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (\text{Π-II.105})$$

Έτσι, είναι

$$\langle n_i \rangle_{MB} = \frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT} \right)^{3/2} e^{-\varepsilon_i/kT} \quad (\text{Π-II.106})$$

Για να ισχύει, λοιπόν, η συνθήκη (Π-II.100) θα πρέπει να έχουμε ή χαμηλές πυκνότητες $\frac{N}{V}$ ή υψηλές θερμοκρασίες T ή και τα δύο. Πάντως, σε κανονικές συνθήκες θερμοκρασίες και πίεσης, ισχύει το πρώτο κριτήριο, που πρακτικά ικανοποιείται για όλα τα μοριακά ή ατομικά αέρια. Θα επανέλθουμε σ' αυτό το θέμα αργότερα.



Η σταθερά $N (\sum_i e^{-\beta \epsilon_i})^{-1}$ μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει του χημικού δυναμικού του αερίου των σωματιδίων, αν χρησιμοποιήσουμε τη μεγαλοκανονική κατανομή για το σύνολο των σωματιδίων, που βρίσκονται σε μια ορισμένη ενεργειακή κατάσταση ϵ_i . Με βάση την (Π-II.95), γράφουμε για την κατανομή πιθανότητας

$$Q_{n_i} = e^{\beta[\Omega_i + n_i(\mu - \epsilon_i)]} \quad (\text{Π-II.107})$$

Ειδικότερα, $Q_0 = e^{\beta \Omega_i}$ είναι η πιθανότητα να μην υπάρχει κανένα σωματίδιο στην ενεργειακή κατάσταση που συζητάμε. Για το κλασικό ιδανικό αέριο είναι $\langle n_i \rangle \ll 1$ και, κατά συνέπεια, η πιθανότητα Q_0 είναι σχεδόν μονάδα: $e^{\beta \Omega_i} \approx 1$. Έτσι, είναι $Q_1 = e^{\beta[\Omega_i + (\mu - \epsilon_i)]} \approx e^{\beta(\mu - \epsilon_i)}$ στην προσέγγιση που συζητάμε και, ακόμη, μπορούμε να θέσουμε $Q_{n_i} \approx 0$ για $n_i > 1$ στην ίδια προσέγγιση. Έχουμε λοιπόν

$$\langle n_i \rangle = \sum_i Q_{n_i} n_i \approx Q_1 \cdot 1 = e^{\beta(\mu - \epsilon_i)} \quad (\text{Π-II.108})$$

Η κατανομή Maxwell - Boltzmann γράφεται, συνεπώς,

$$\langle n_i \rangle_{\text{MB}} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta \epsilon_i}} e^{-\beta \epsilon_i} = e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \quad (\text{Π-II.109})$$

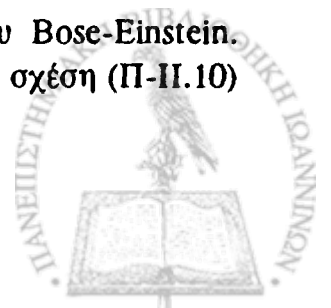
όπου για το χημικό δυναμικό έχουμε

$$\mu = \frac{1}{\beta} \log \frac{N}{\sum_i e^{-\beta \epsilon_i}} \quad (\text{Π-II.110})$$

β) Κατανομή Bose- Einstein

Τη μεγαλοκανονική κατανομή χρησιμοποιούμε και για τις κβαντικές στατιστικές Bose-Einstein και Fermi-Dirac, προκειμένου να βρούμε τ' αθροίσματα της συνάρτησης επιμερισμού. Βέβαια, υπάρχει μόνο μία πλήρως συμμετρική και μία πλήρως αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση, που μπορεί να κατασκευαστεί από τις κυματοσυναρτήσεις των N σωματιδίων (βλ. κεφάλαιο VIII). Η διαφορά ανάμεσα στις περιπτώσεις Bose-Einstein και Fermi-Dirac έγκειται στο γεγονός ότι στην πρώτη περίπτωση μπορούμε να έχουμε οποιοδήποτε αριθμό n_i σωματιδίων με ενέργεια ϵ_i , ενώ στη δεύτερη οι μόνες επιτρεπτές τιμές είναι $n_i = 0, 1$.

Ας θεωρήσουμε πρώτα την περίπτωση του ιδανικού αερίου Bose-Einstein. Έχουμε με βάση τη μεγαλοκανονική κατανομή (Π-II.92) και τη σχέση (Π-II.10) ότι



$$\langle n_i \rangle_{BE} = \frac{1}{Z_{BE}(\mu, T)} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} e^{-\beta \sum_j n_j (\epsilon_j - \mu)} n_i \quad (\text{Π-II.111})$$

όπου

$$\begin{aligned} Z_{BE}(\mu, T) &= \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} e^{-\beta \sum_j n_j (\epsilon_j - \mu)} \\ &= \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \prod_j e^{-\beta n_j (\epsilon_j - \mu)} \\ &= \prod_j \sum_{n_j = 0}^{\infty} e^{-\beta n_j (\epsilon_j - \mu)} \\ &= \prod_j \frac{1}{1 - e^{-\beta (\epsilon_j - \mu)}} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.112})$$

Συνεπώς παίρνουμε

$$\langle n_i \rangle_{BE} = - \frac{\partial}{\partial (\beta \epsilon_i)} \log Z_{BE}(\mu, T) = \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_i - \mu)} - 1} \quad (\text{Π-II.113})$$

Η (Π-II.112) είναι η συνάρτηση επιμερισμού για ένα ιδανικό αέριο Bose-Einstein και η κατανομή (Π-II.113) είναι η κατανομή Bose-Einstein. Η μέση τιμή της ενέργειας είναι

$$\langle E \rangle_{BE} = \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle_{BE} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_{BE} \quad (\text{Π-II.114})$$

και ο ολικός αριθμός των σωματιδίων κυμαίνεται γύρω από τη μέση τιμή

$$\langle N \rangle_{BE} = \sum_i \langle n_i \rangle_{BE} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_i - \mu)} - 1} \quad (\text{Π-II.115})$$

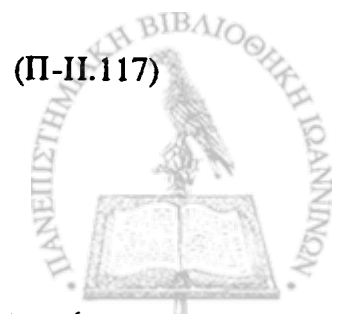
Είναι, τέλος, σημαντικό να σημειώσουμε ότι, επειδή είναι $\langle n_i \rangle_{BE} \geq 0$, θα πρέπει το χημικό δυναμικό να είναι αρνητικό για ένα ιδανικό αέριο Bose-Einstein

$$\mu \leq 0 \quad (\text{Π-II.116})$$

γ) Κατανομή Fermi-Dirac

Ας θεωρήσουμε, τώρα, την περίπτωση ενός ιδανικού αερίου Fermi-Dirac. Έχουμε, εδώ,

$$\langle n_i \rangle_{FD} = \frac{1}{Z_{FD}(\mu, T)} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^1 e^{-\beta \sum_j n_j (\epsilon_j - \mu)} n_i \quad (\text{Π-II.117})$$



όπου

$$\begin{aligned}
 Z_{\text{FD}}(\mu, T) &= \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^1 e^{-\beta \sum_j n_j (\epsilon_j - \mu)} \\
 &= \prod_j \sum_{n_j=0}^1 e^{-\beta n_j (\epsilon_j - \mu)} \\
 &= \prod_j [1 + e^{-\beta (\epsilon_j - \mu)}] \quad (\text{Π-II.118})
 \end{aligned}$$

Συνεπώς παίρνουμε

$$\langle n_i \rangle_{\text{FD}} = - \frac{\partial}{\partial (\beta \epsilon_i)} \log Z_{\text{FD}}(\mu, T) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \quad (\text{Π-II.119})$$

Η (Π-II.118) είναι η συνάρτηση επιμερισμού για ένα ιδανικό αέριο Fermi-Dirac και η κατανομή (Π-II.119) είναι η κατανομή Fermi-Dirac. Η μέση τιμή της ενέργειας δίνεται, πάντα, από τη σχέση

$$\langle E \rangle_{\text{FD}} = \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle_{\text{FD}} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_{\text{FD}} \quad (\text{Π-II.120})$$

και ο ολικός αριθμός των σωματιδίων κυμαίνεται γύρω από τη μέση τιμή

$$\langle N \rangle_{\text{FD}} = \sum_i \langle n_i \rangle_{\text{FD}} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \quad (\text{Π-II.121})$$

Όπως παρατηρούμε από την έκφραση (Π-II.119) είναι

$$\langle n_i \rangle_{\text{FD}} < 1, \quad (\text{Π-II.122})$$

όπως πρέπει, μια και οι δυνατές τιμές του n_i είναι 0 και 1. Τέλος, όπως θα δούμε στην επόμενη παράγραφο, σ' ένα ιδανικό αέριο Fermi-Dirac είναι

$$\mu \approx \epsilon_F \quad (\text{Π-II.123})$$

όπου ϵ_F η ενέργεια Fermi (βλ. §8.2).

Παρατηρούμε ότι και οι τρεις κατανομές, που εξετάσαμε, μπορούν να γραφούν υπό μια ενιαία μορφή σαν

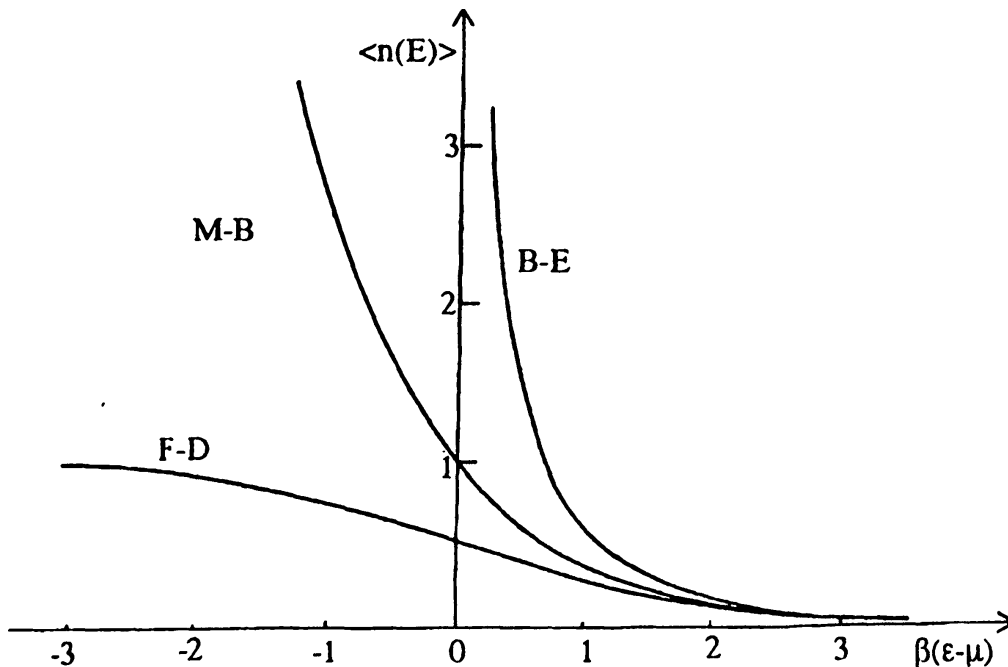
$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + \delta}$$



όπου

$$\delta = \begin{cases} 0 & \text{Κατανομή Maxwell-Boltzmann} \\ -1 & \text{Κατανομή Bose-Einstein} \\ +1 & \text{Κατανομή Fermi-Dirac} \end{cases} \quad (\text{Π-II.125})$$

Η γραφική παράσταση των κατανομών (Π-II.124) φαίνεται στο σχήμα Π-II.1, όπου σχεδιάζονται οι τρεις κατανομές $\langle n(\epsilon) \rangle$ συναρτήσει της ποσότητας $\beta(\epsilon - \mu)$.



Σχ. Π-II.1. Ο μέσος αριθμός $\langle n(\epsilon) \rangle$ κατάληψης των ενεργειακών καταστάσεων σ' ένα ιδανικό αέριο για τις στατιστικές Maxwell-Boltzmann (M-B), Bose-Einstein (B-E) και Fermi-Dirac (F-D).

Όπως βλέπουμε και από την παραπάνω γραφική παράσταση, το κλασικό όριο της κβαντικής στατιστικής συμβαίνει όταν $\langle n_i \rangle \ll 1$, οπότε οι τρεις κατανομές συμπίπτουν:

$$\langle n_i \rangle \ll 1 \Rightarrow \langle n_i \rangle_{\text{MB}} \approx \langle n_i \rangle_{\text{BE}} \approx \langle n_i \rangle_{\text{FD}} = e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \quad (\text{Π-II.126})$$

Έτσι, η κλασική στατιστική Maxwell-Boltzmann αποτελεί, πράγματι, ειδική περίπτωση της κβαντικής στατιστικής (Bose-Einstein ή Fermi-Dirac). Παρατηρούμε, επίσης, ότι για ένα ιδανικό αέριο Bose-Einstein, καθώς $\beta(\epsilon - \mu) \rightarrow 0$, είναι $\langle n(\epsilon) \rangle \rightarrow \infty$, ένα φαινόμενο γνωστό σαν συμπύκνωση Bose-Einstein, που θα συζητήσουμε στην επόμενη παράγραφο.



Π-II.7. Εφαρμογές: Νόμος του Planck - Ιδανικά αέρια μποζονίων, φερμιονίων, υπερρευστότητα.

α) Νόμος του Planck

Σαν πρώτη εφαρμογή, ας δούμε πως προκύπτει ο νόμος του Planck (E.3) για την ακτινοβολία του μελανού σώματος. Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία βρίσκεται σε θερμική ισορροπία μέσα σε μια κοιλότητα όγκου V , που μια και το σχήμα της δεν έχει σημασία θα την θεωρήσουμε σαν ένα κυβικό κουτί όγκου $V = L^3$. Έχουμε να κάνουμε εδώ μ' ένα ιδανικό αέριο φωτονίων, που είναι μποζόνια με μάζα μηδέν και με δύο καταστάσεις πόλωσης. Επειδή μπορεί φωτόνια ν' απορροφώνται και να εκπέμπονται από τα τοιχώματα της κοιλότητας, ο αριθμός των φωτονίων δεν είναι σταθερός, η (Π-II.88) δεν ισχύει και η εντροπία του λουτρού θερμότητας, όπως εκφράζεται στην (Π-II.89), είναι ανεξάρτητη από τον αριθμό των φωτονίων. Συνεπώς, το χημικό δυναμικό του αερίου των φωτονίων είναι μηδέν. Ο μέσος αριθμός των φωτονίων είναι, λοιπόν,

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_i} - 1} \quad (\text{Π-II.127})$$

Για ένα μεγάλο όγκο V , τα ενεργειακά επίπεδα απέχουν ελάχιστα και θεωρούμε την E_i σαν μια συνεχή μεταβλητή E .

Έτσι, ο αριθμός των φωτονίων στο διάστημα συχνοτήτων $(\nu, \nu + d\nu)$ είναι

$$N(\nu, T) d\nu = \rho(\nu) \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu, \quad (\text{Π-II.128})$$

όπου η ενέργεια μπορεί να εκφραστεί σαν

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \hbar c k \quad (\text{Π-II.129})$$

και $\rho(\nu) d\nu$ είναι ο αριθμός των φωτονικών καταστάσεων στο παραπάνω διάστημα $(\nu, \nu + d\nu)$. Η πυκνότητα ενέργειας στο ίδιο διάστημα είναι, συνεπώς,

$$\begin{aligned} u(\nu, T) d\nu &= \frac{E}{V} N(\nu, T) d\nu \\ &= \frac{h\nu}{V} \rho(\nu) \frac{d\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.130})$$

Για τον υπολογισμό του $\rho(\nu)$ θεωρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση του φωτονίου είναι

$$\psi(x, y, z) = e^{i(k_1 x + k_2 y + k_3 z)}, \quad (\text{Π-II.131})$$

όπου για περιοδικές συνοριακές συνθήκες έχουμε



$$k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1, \quad k_2 = \frac{2\pi}{L} n_2, \quad k_3 = \frac{2\pi}{L} n_3, \quad (\text{Π-II.132})$$

Από εδώ προκύπτει, κατά τα γνωστά, ότι ο αριθμός των φωτονικών καταστάσεων μέχρι μια ορισμένη συχνότητα ν είναι (βλ. §3.7)

$$n(\nu) = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{4\pi}{3} k^3 = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2\pi\nu}{c} \right)^3 \quad (\text{Π-II.133})$$

όπου ο αριθμός 2 εκφράζει τις δύο καταστάσεις πόλωσης κάθε φωτονίου. Έτσι είναι

$$\rho(\nu) = \frac{dn(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V \quad (\text{Π-II.134})$$

Έχουμε, συνεπώς, για την μονοχρωματική πυκνότητα ενέργειας $u(\nu, T)$ την έκφραση

$$\begin{aligned} u(\nu, T) &= \frac{h\nu}{V} \frac{8\pi\nu^2 V}{c^3} \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} \\ &= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \end{aligned} \quad (\text{Π-II.135})$$

που αποτελεί το νόμο του Planck (βλ. και εισαγωγή, εξίσωση (E.3)).

β) *Ιδανικά αέρια μποζονίων, φερμιονίων.*

Στη συνέχεια, ας θεωρήσουμε γενικά ένα ιδανικό αέριο από σωματίδια με σπιν s και μάζα m , που βρίσκονται μέσα σ' ένα κυβικό κουτί όγκου $V=L^3$ σε ορισμένη πεπερασμένη θερμοκρασία T (η περίπτωση ενός ιδανικού αερίου φερμιονίων-αέριο Fermi- σε θερμοκρασία $T=0$ εξετάστηκε στην §8.2). Ο αριθμός των σωματιδίων στο ενεργειακό διάστημα $(E, E+dE)$ είναι, ανάλογα με τη στατιστική,

$$N(E) dE = \rho(E) \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + \delta} dE, \quad (\text{Π-II.136})$$

όπου $\rho(E)$ ο αριθμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ανά μονάδα ενεργειακού διαστήματος. Για σωματίδια με σπιν s υπάρχουν $(2s+1)$ καταστάσεις του σπιν και αντί για την (8.25) εδώ θα έχουμε

$$\rho(E) = (2s+1) \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (\text{Π-II.137})$$

Αντικαθιστώντας στην (Π-II.136) βρίσκουμε για τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου στο ενεργειακό διάστημα $(E, E+dE)$

$$\frac{N(E)dE}{V} = \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{E^{1/2}}{e^{\beta(E-\mu)} + \delta} dE \quad (\text{Π-II.138})$$



Ολοκληρώνοντας ως προς E , παίρνουμε για την πυκνότητα του αριθμού των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων ανά μονάδα όγκου) την έκφραση

$$\rho = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} N(E) dE = \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2}}{e^{\beta(E-\mu)+\delta}} dE \quad (\text{Π-II.139})$$

Όπως είδαμε από τη σχέση (Π-II.106), η συνθήκη (Π-II.100) ισχύος της κατανομής ενός κλασικού ιδανικού αερίου πραγματοποιείται είτε σε χαμηλές πυκνότητες είτε σε υψηλές θερμοκρασίες. Η έκφραση (Π-II.139) για τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου μας προσφέρει τη δυνατότητα να έχουμε μια διαφορετική διατύπωση του κριτηρίου ισχύος της κατανομής Maxwell-Boltzmann. Βλέπουμε ότι αν $-\beta\mu \gg 1$, δηλαδή αν $e^{-\beta\mu} \gg 1$, η πυκνότητα ρ είναι μικρή. Επειδή τότε $e^{\beta(E-\mu)} \gg \delta$, οι τρεις κατανομές θα δώσουν το ίδιο αποτέλεσμα (βλ. και τη σχέση (Π-II.126)). Κάτω απ' αυτές τις περιστάσεις, το ολοκλήρωμα στην (Π-II.139) δίνει τη γνωστή από τα μαθηματικά γάμμα συνάρτηση και έχουμε

$$\rho = \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\beta\mu} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\beta^{3/2}} \quad (\text{Π-II.140})$$

Επειδή $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$, βρίσκουμε ότι

$$e^{-\beta\mu} = \frac{(2s+1)}{\rho} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (kT)^{3/2} \quad (\text{Π-II.141})$$

Από την (Π-II.141) βλέπουμε ότι $e^{-\beta\mu} \gg 1$ είτε όταν η πυκνότητα ρ είναι μικρή είτε όταν η θερμοκρασία T είναι μεγάλη. Πάντως, επαληθεύεται ότι για κανονικές συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης είναι πράγματι $e^{-\beta\mu} \gg 1$ για όλα τα αέρια, πράγμα που εξηγεί την επιτυχία της κλασικής στατιστικής στα αέρια υπό συνήθεις συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης.

Ας έλθουμε, τώρα, σ' ένα ιδανικό αέριο Bose-Einstein. Όπως σημειώσαμε στη σχέση (Π-II.116), θα πρέπει να είναι $\mu \leq 0$. Από τη σχέση (Π-II.139) βλέπουμε ότι για μικρά $-\beta\mu$ έχουμε μεγάλες πυκνότητες ρ και αυτό αντιστοιχεί σε μικρές θερμοκρασίες T . Σ' αυτή την περίπτωση, βλέπουμε από την έκφραση (Π-II.136) ότι σχεδόν όλα τα σωματίδια θα βρεθούν στην κατάσταση με την ελάχιστη ενέργεια. Αυτό είναι το φαινόμενο της συμπύκνωσης Bose-Einstein, που το είδαμε και στη γραφική παράσταση του σχήματος Π-II.1. Ας δούμε κάτω από ποια κρίσιμη θερμοκρασία T_c τα σωματίδια θα τείνουν να συμπυκνωθούν στη βασική κατάσταση. Κατ' αρχήν, στο όριο μεγάλων πυκνοτήτων - μικρών θερμοκρασιών που συζητάμε, θα πρέπει να τροποποιήσουμε την (Π-II.137), γιατί αυτή προβλέπει $\rho(0) = 0$, ενώ στην πραγματικότητα θα υπάρχει μεγάλος αριθμός σωματιδίων στην



κατάσταση ελάχιστης ενέργειας $E=0$. Αντικαθιστούμε, λοιπόν, την (Π-II.137) με την

$$\rho'(E) = \rho(E) + \delta(E) \quad (\text{Π-II.142})$$

όπου $\delta(E)$ η συνάρτηση του Dirac. Τότε, αντί για την (Π-II.139), θα έχουμε

$$\rho = \rho_0 + \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2}}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} dE \quad (\text{Π-II.143})$$

όπου ρ_0 η πυκνότητα του αριθμού των σωματιδίων στη βασική κατάσταση $E=0$. Για $T=0$ είναι $\rho=\rho_0$. Ένα μέτρο για το πότε τα σωματίδια θα τείνουν να συμπυκνωθούν στη βασική κατάσταση μπορεί ν' αποτελέσει η σχέση

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho} < 1 \quad (\text{Π-II.144})$$

όπου $(\rho - \rho_0)/\rho$ παριστάνει το κλάσμα των σωματιδίων, που βρίσκονται σε καταστάσεις άλλες εκτός της βασικής. Από την (Π-II.143) βρίσκουμε (θέτουμε $x = \beta E$)

$$\rho - \rho_0 = \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2mkT}{\hbar^2}\right)^{3/2} f_{1/2}(-\beta\mu) \quad (\text{Π-II.145})$$

όπου

$$f_{1/2}(-\beta\mu) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x-\beta\mu} - 1} \quad (\text{Π-II.146})$$

Επειδή $-\beta\mu \geq 0$, η μέγιστη τιμή του $f_{1/2}(-\beta\mu)$ συμβαίνει για $-\beta\mu=0$, οπότε αριθμητικά προκύπτει με βάση το γνωστό ολοκλήρωμα (Π-I.68) ότι είναι $f_{1/2}(-\beta\mu) \approx f_{1/2}(0) =$

$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} 2.612 \approx 2.32$. Από την (Π-II.144) προκύπτει, τότε, ότι

συμπύκνωση Bose-Einstein θ' αρχίσει να συμβαίνει για θερμοκρασίες T μικρότερες από μια κρίσιμη θερμοκρασία T_c , όπου

$$T < T_c, \quad T_c = \frac{\hbar^2}{2mk} \left(\frac{4\pi^2 \rho}{2.32(2s+1)}\right)^{2/3} \quad (\text{Π-II.147})$$

Επειδή ένα μποζονικό αέριο τείνει να συμπυκνωθεί στη βασική κατάσταση $E=0$, έπεται ότι δεν θ' ασκεί καμιά πίεση και λέμε, τότε, ότι αποτελεί ένα "εκφυλισμένο" αέριο.

Τέλος, ας θεωρήσουμε ένα ιδανικό αέριο Fermi-Dirac. Εδώ η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας $E=0$ μπορεί να καταλαμβάνεται από ένα το πολύ φερμιόνιο (για κάθε κατάσταση του σπιν). Για ένα σύστημα μεγάλου αριθμού σωματιδίων, η



ποσότητα αυτή είναι αμελητέα. Έτσι, δεν χρειάζεται καμιά διόρθωση στην έκφραση για την πυκνότητα του αριθμού των σωματιδίων και έχουμε

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \\ &= \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \xi_{1/2}(-\beta\mu), \end{aligned} \quad (\text{Π-II.148})$$

όπου

$$\xi_{1/2}(-\beta\mu) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x-\beta\mu} + 1} \quad (\text{Π-II.149})$$

Για $\frac{\rho}{T^{3/2}}$ μεγάλο (όπου το αέριο Fermi-Dirac διαφοροποιείται από ένα κλασικό αέριο), θα πρέπει το $-\beta\mu$ να είναι αρνητικό και μεγάλο κατ' απόλυτη τιμή και, τότε, μπορεί ναδειχθεί ότι το παραπάνω ολοκλήρωμα δίνει

$$\xi_{1/2}(-\beta\mu) \approx \frac{2}{3} (\beta\mu)^{3/2} \quad (\text{Π-II.150})$$

Είναι, συνεπώς,

$$\rho = \frac{(2s+1)}{4\pi^2} \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{3} (\beta\mu)^{3/2}, \quad (\text{Π-II.151})$$

απ' όπου προκύπτει ότι το χημικό δυναμικό είναι

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2}{2s+1} \right) (3\pi^2 \rho)^{2/3} \equiv E_F \quad (\text{Π-II.152})$$

Η έκφραση αυτή είναι γνωστή σαν ενέργεια Fermi E_F και για σωματίδια με spin $s = \frac{1}{2}$ συμπίπτει με τις εκφράσεις (8.28) και (8.39), που είδαμε στην §8.2.

Μπορούμε, λοιπόν, να γράψουμε για την κατανομή Fermi-Dirac

$$\langle n(E) \rangle_{FD} = \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1} \quad (\text{Π-II.153})$$

Παρατηρούμε ότι για $T=0$ έχουμε

$$\langle n(E) \rangle_{FD} = \begin{cases} 1 & E \leq E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad (\text{Π-II.154})$$

δηλαδή όλες οι ενεργειακές καταστάσεις μέχρι την ενέργεια Fermi είναι κατειλημμένες. Για $T < T_F = \frac{E_F}{k}$ (θερμοκρασία Fermi), οι περισσότερες από τις ενεργειακά χαμηλότερες καταστάσεις παραμένουν κατειλημμένες. Η αντίστοιχη συνάρτηση κατανομής $\rho(E) \langle n(E) \rangle_{FD}$ είναι αυτή που πραγματικά απεικονίζεται στο σχήμα 8.4. Για θερμοκρασίες $0 \leq T \leq T_F$ λέμε ότι το αέριο Fermi είναι



"εκφυλισμένο" και αυτό συμβαίνει, συνήθως, τόσο στα μέταλλα, όσο και σε αστέρες με μεγάλες πυκνότητες, όπως σημειώσαμε ήδη στο Παράρτημα Ι. Σ' αυτή την περίπτωση, ακόμη και για $T=0$, ένα αέριο Fermi, σε αντίθεση μ' ένα αέριο Bose, εξασκεί πίεση, αφού, εκτός από $(2s+1)$ σωματίδια στην κατάσταση $E=0$, όλα τα υπόλοιπα θα βρίσκονται σε κίνηση. Το φαινόμενο αυτό είδαμε να εφαρμόζεται στην εξήγηση των τελικών σταδίων στην εξέλιξη των αστέρων (βλ. Παράρτημα Ι, §Π-Ι.2).

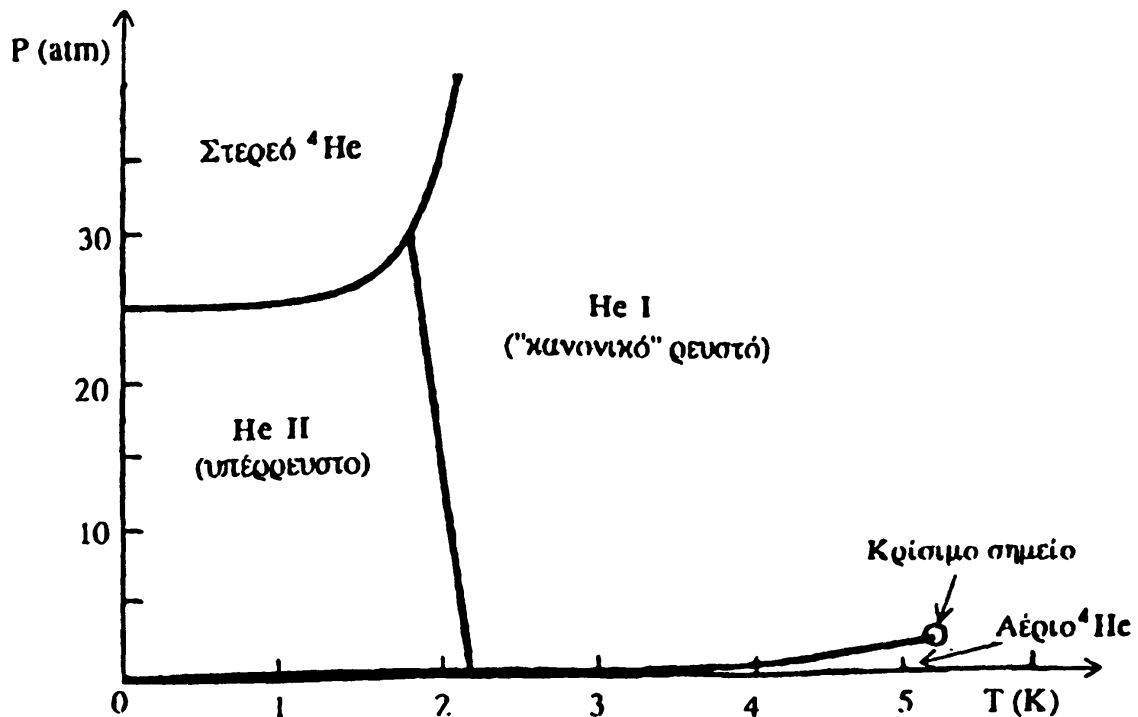
γ) Υπερρευστότητα

Ένα κβαντικό σύστημα, το οποίο βρίσκεται σε θερμοκρασία T μικρότερη από την κρίσιμη θερμοκρασία T_c (Π-ΙΙ.147) της συμπύκνωσης Bose - Einstein, έχει τις ιδιότητες ενός ρευστού και χαρακτηρίζεται σαν κβαντικό ρευστό. Συνήθως, όλα τα γνωστά στοιχεία (και ενώσεις) "παγώνουν" σε θερμοκρασίες είτε αρκετά πάνω είτε κοντά στην θερμοκρασία T_c . Η μόνη εξαίρεση αφορά στο ήλιο, το οποίο λόγω της μικρής ατομικής του μάζας και των ασθενών διατομικών δυνάμεων παραμένει ρευστό σε θερμοκρασίες μέχρι κοντά στο απόλυτο μηδέν. Πράγματι, για το υγρό ^4He προκύπτει από την έκφραση (Π-ΙΙ.147) ότι είναι $T_c \approx 3^\circ\text{K}$. Το γεγονός ότι η τιμή αυτή είναι κοντά στην πειραματική τιμή $T_c = 2.19^\circ\text{K}$, στην οποία αρχίζει η φάση της υπερρευστότητας του ^4He , μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι αυτή σχετίζεται με την συμπύκνωση Bose - Einstein. Το φαινόμενο της υπερρευστότητας εμφανίζεται, έτσι, ανάλογο μ' εκείνο της υπεραγωγιμότητας, όπως ήδη αναφέραμε στην §8.4.

Το διάγραμμα φάσης του ^4He φαίνεται στο σχήμα Π-ΙΙ.2, όπου το υπέρρευστο ^4He (γνωστό σαν He II) κατέχει την γωνία χαμηλών θερμοκρασιών ($T \leq 2.19^\circ\text{K}$) - χαμηλών πιέσεων ($p \leq 25 \text{ atm}$).

Οι εντυπωσιακές ιδιότητες του υπέρρευστου ^4He σχετίζονται με την συμπύκνωση Bose - Einstein των ατόμων ^4He που είναι μποζόνια (ένα άτομο ^4He έχει δύο πρωτόνια, δύο νετρόνια και δύο ηλεκτρόνια και σπιν μηδέν). Κάτω από την (εξαρτώμενη από την πίεση) κρίσιμη θερμοκρασία T_c (που είναι γνωστή εδώ σαν T_λ , επειδή το διάγραμμα της ειδικής θερμότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας έχει εκεί τη μορφή του ελληνικού γράμματος λ), το εξαρτώμενο από τη θερμοκρασία κλάσμα ατόμων, που συμπυκνώνονται στη φάση του κβαντικού ρευστού, περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση





Σχ. Π-Π.2. Το διάγραμμα φάσης του ${}^4\text{He}$.

$$\Psi = |\Psi| e^{i\theta} \quad (\text{Π-Π.155})$$

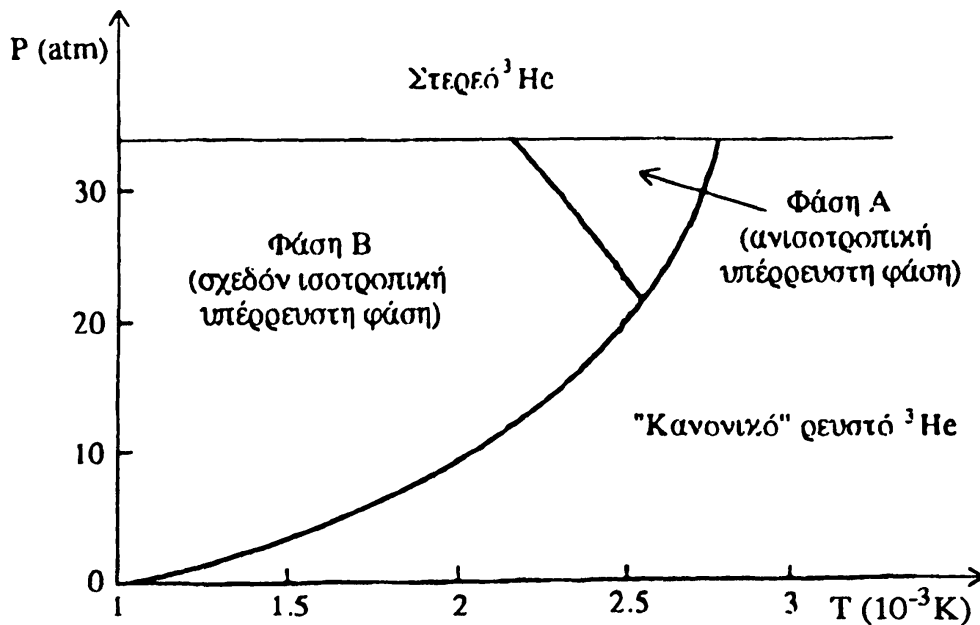
της οποίας η φάση θ είναι υπεύθυνη για τις ιδιότητες του υπέρρευστου ${}^4\text{He}$. Μερικές από αυτές μπορεί να κατανοηθούν αν δεχτούμε ότι η Ψ υπακούει σε μια εξίσωση Schrödinger της μορφής

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \mu \Psi \quad (\text{Π-Π.156})$$

όπου m η μάζα του ατόμου του ${}^4\text{He}$ και μ το χημικό δυναμικό. Η εξίσωση για την υπέρρευστη ροή μπορεί να υπολογιστεί από την παραπάνω εξίσωση υπολογίζοντας τον ρυθμό μεταβολής του $|\Psi|^2$, που είναι η πυκνότητα πιθανότητας για το υπέρρευστο ${}^4\text{He}$ (π.χ. έχουμε για την ταχύτητα της υπέρρευστης φάσης την απλή σχέση $v = \hbar \nabla \theta / m$).

Το 1972 ανακλύφθηκε ένα ακόμη πιο εντυπωσιακό φαινόμενο, εκείνο της υπερρευστότητας του ${}^3\text{He}$. Τα άτομα του ελαφρύτερου ισότοπου ${}^3\text{He}$ είναι, βέβαια, φερμιόνια (ένα άτομο ${}^3\text{He}$ έχει δύο πρωτόνια, ένα νετρόνιο και δύο ηλεκτρόνια και σπιν $\frac{1}{2}$). Όμως, μέσω ενός μηχανισμού ανάλογου μ' εκείνον της υπεραγωγιμότητας, αναπτύσσονται σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες ελκτικές δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ ατόμων ${}^3\text{He}$ κοντά στην ενέργεια Fermi, με αποτέλεσμα τη δημιουργία ζευγών από δύο άτομα ${}^3\text{He}$ και συνακόλουθη συμπύκνωση Bose - Einstein. Η κρίσιμη θερμοκρασία είναι πειραματικά σ' αυτή την περίπτωση $T_c \approx 2.7 \times 10^{-3} \text{ }^\circ\text{K}$ (σε $p \approx 34 \text{ atm}$). Υπάρχει, όμως, μια σημαντική διαφορά στην



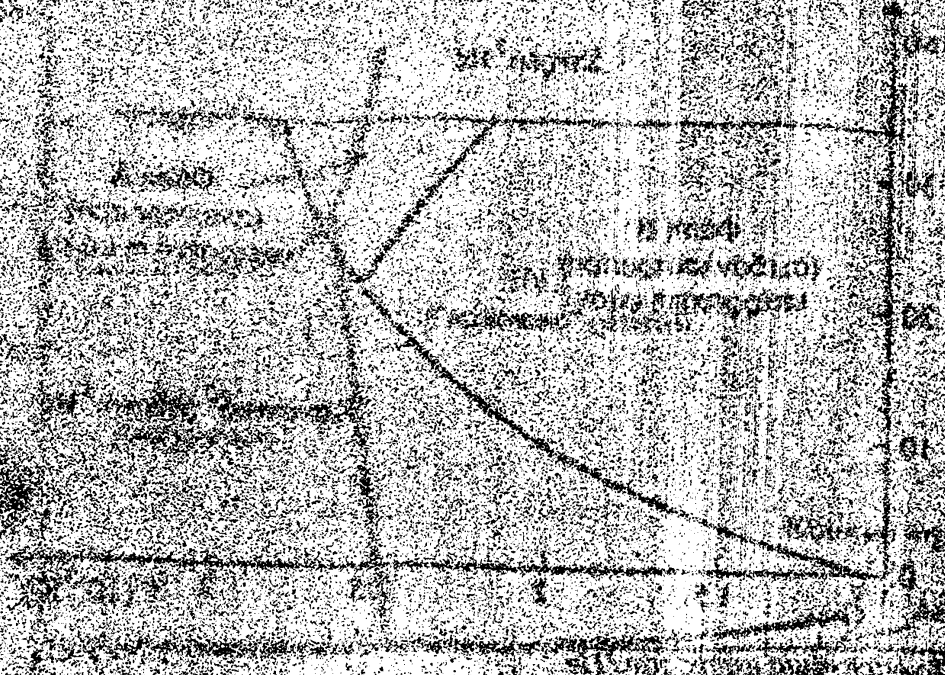


Σχ. Π-Π.3. Το διάγραμμα φάσης του ${}^3\text{He}$.

περίπτωση της υπερρευστότητας του ${}^3\text{He}$. Τ' αντίστοιχα ζεύγη έχουν πρόσθετους βαθμούς ελευθερίας που σχετίζονται με μη μηδενική τιμή του σπιν ($s=1$) και με τροχιακή στροφορμή γύρω από το κέντρο μάζας τους. Αποτέλεσμα είναι να εμφανίζει το υπέρρευστο ${}^3\text{He}$ ανισοτροπική συμπεριφορά. Πράγματι, στο διάγραμμα φάσης του ${}^3\text{He}$, όπως αυτό απεικονίζεται στο σχήμα Π-Π.3, παριστάνεται η σχεδόν ισοτροπική φάση υπερρευστότητας, γνωστή σαν φάση Β, όπως επίσης και η ανισοτροπική φάση υπερρευστότητας, γνωστή σαν φάση Α.

Τελειώνοντας, θ' άξιζε ν' αναφέρουμε ότι δεν είναι ασύνηθες το φαινόμενο της ύπαρξης ανισοτροπικών ιδιοτήτων σε ορισμένα ρευστά. Οι πολύ γνωστοί υγροί κρύσταλλοι, που βρίσκονται στη βάση της κατασκευής οθονών ακόμη και μικρών υπολογιστικών συσκευών, παρουσιάζουν παρόμοια ανισοτροπική συμπεριφορά. Τέλος, πιστεύεται ότι στο "εξωτικό" σύστημα των νετρονίων ενός αστέρα νετρονίων (βλ. §Π-Ι.2) μπορεί ν' αναπτυχθεί, για ορισμένη περιοχή πυκνοτήτων, φαινόμενο ανισότροπης υπέρρευστης κατάστασης, ανάλογης μ' εκείνη του υπέρρευστου ${}^3\text{He}$. Λόγω των πολύ μεγάλων πυκνοτήτων, η θερμοκρασία "εκφυλισμού" θα πρέπει να είναι σ' αυτή την περίπτωση τεράστια ($\sim 10^{10}$ °K).





The following text is extremely faint and largely illegible due to the quality of the scan. It appears to be a series of paragraphs or a list of items, possibly related to a technical report or a set of instructions. Some words are barely discernible, but the overall content cannot be accurately transcribed.

11 JAN 1954

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ

**ΘΕΩΡΙΑ ΜΕΤΡΗΣΗΣ - ΕΝΝΟΙΟΛΟΓΙΚΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ
ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ**

Φθάνοντας στο τέλος αυτού του βιβλίου, ο αναγνώστης θα πρέπει να έχει πειστεί γι' αυτό που είπαμε ξεκινώντας: η κβαντική μηχανική έχει αγκαλιάσει όλους σχεδόν τους τομείς της φυσικής και η αριθμητική συμφωνία των προβλέψεών της με τ' αποτελέσματα των διαφόρων μετρήσεων είναι από εντυπωσιακή μέχρι εκπληκτική. Η περιγραφή για το πως η θεωρία συνδέεται με τ' αποτελέσματα των διαδικασιών μέτρησης μπορεί να διατυπωθεί σε λίγες γραμμές. Το κάναμε ήδη αυτό, κυρίως στην αρχή του κεφαλαίου ΙΙ, και θα το ξανασυζητήσουμε στην §Π-ΙΙΙ.1. Αν και δεν υπάρχει αμφισβήτηση ως προς τα παραπάνω, ορισμένες συνέπειες είναι πράγματι τόσο "παράξενες", ώστε φυσικοί όπως ο Einstein, ο Schrödinger, ο Wigner και άλλοι μέχρι τις μέρες μας έχουν επιχειρηματολογήσει ότι η κβαντική μηχανική, έτσι όπως διατυπώνεται μέχρι σήμερα, δεν μπορεί να είναι μια πλήρης από φυσική άποψη θεωρία. Αυτές οι "παράξενες" συνέπειες εμφανίζονται μέσω των λεγόμενων "παράδοξων" της κβαντικής μηχανικής και οδηγούν σε ορισμένα ερμηνευτικά προβλήματα, που προκύπτουν ακριβώς κατά την διαδικασία των κβαντικών μετρήσεων. Αυτά θα τα συζητήσουμε στην §Π-ΙΙΙ.2. Αξίζει μια προσεκτική παρακολούθηση αυτών των φαινομένων, γιατί είναι ένας τρόπος να οξύνουμε την κατανόηση μας γύρω από τις φυσικές και λογικές συνέπειες της κβαντικής εικόνας.

Τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα, αλλά και τα όρια θεωριών, που προσπαθούν να γενικεύσουν την κβαντική μηχανική, μπορούν να κριθούν μέσα από τις φημισμένες ανισότητες του Bell, η πειραματική παραβίαση των οποίων δείχνει



ότι η απλούστερη ερμηνεία των κβαντικών φαινομένων που προκύπτει από την καθιερωμένη κβαντική μηχανική είναι και η σωστή. Αυτά θα τα συζητήσουμε στην §Π-III.3.

Όμως, είναι αλήθεια ότι η απλή, έστω και θεαματική, συμφωνία μιας θεωρίας με το πείραμα δεν αποτελεί από μόνη της ένα πλήρες κριτήριο για μια καλή θεωρία. Κάτι τέτοιο έχει βέβαια μεγάλη πρακτική σημασία, αλλά δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον σ' ένα πιο θεμελιώδες επίπεδο. Μια φυσικά ενδιαφέρουσα θεωρία θα πρέπει να οδηγεί σε προβλέψεις και ερμηνείες, που ξεπερνούν κατά πολύ τ' απλά δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της. Αν και είναι δίκαιο να πούμε ότι η κβαντική θεωρία κατάφερε κάτι τέτοιο σε βαθμό που καμία άλλη θεωρία δεν το πέτυχε μέχρι τώρα, ζητήματα που προκύπτουν από μερικές πράγματι "παράξενες" προβλέψεις κρατάνε μέχρι σήμερα ανοικτό το διάλογο γύρω από καιρία ερμηνευτικά και εννοιολογικά προβλήματα σχετιζόμενα με την κβαντική μηχανική. Πολλά, πάντως, από τα ερωτήματα που εγείρονται καταλήγουν πολλές φορές να είναι ζητήματα "γνώμης" και γι' αυτό παίρνουν χαρακτήρα φιλοσοφικής συζήτησης. Ανεξάρτητα, όμως, από αυτό, οι εννοιολογικές βάσεις της κβαντικής μηχανικής φαίνεται να είναι τόσο θεμελιώδεις σε σχέση με την όλη αντίληψη μας για τον κόσμο, ώστε οφείλει να είναι κανείς ενήμερος και, τουλάχιστον, να κατανοήσει τη φύση των σχετικών προβλημάτων. Μια σύντομη τέτοια συζήτηση θα επιχειρήσουμε στην §Π-III.4.

Π-III.1. Κβαντική θεωρία μέτρησης

Η διαδικασία της μέτρησης στην κβαντική μηχανική παρουσιάζει μια σημαντική διαφορά σε σχέση με την κλασική μηχανική. Στη βάση αυτής της διαφοράς είναι βέβαια η αρχή της συμπληρωματικότητας, η ύπαρξη δηλαδή συμπληρωματικών μεγεθών (όπως η θέση και η ορμή) που μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως μόνο μέσα στα όρια που καθορίζουν οι σχέσεις αβεβαιότητας.

Κατ' αρχήν, μπορεί να θεωρήσει κανείς μετρήσεις που οδηγούν στην προετοιμασία μιας κατάστασης για ένα κβαντικό σύστημα και οι οποίες, συνεπώς, μπορεί να επαναληφθούν αμέσως μετά. Έτσι, αν είναι $|\psi\rangle$ η αρχική κατάσταση του συστήματος, η μέτρηση ενός μεγέθους A με πλήρες σύνολο ιδιοκαταστάσεων $|\phi_n\rangle$ και ιδιοτιμές α_n κάνει το σύστημα να μεταπέσει σε μια συγκεκριμένη κατάσταση $|\phi_n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \xrightarrow[\text{με αποτέλεσμα } \alpha_n]{\text{μέτρηση } A} |\phi_n\rangle \quad (\text{Π-III.1})$$

Παραδείγματος χάρη, για τη μέτρηση μέσω μιας συσκευής Stern-Gerlach της z συνιστώσας S_z του σπιν ενός σωματιδίου με ιδιοτιμές $\pm \frac{\hbar}{2}$ και ιδιοκαταστάσεις



$|\psi_{z\pm}\rangle$, όταν η αρχική κατάσταση του σωματιδίου είναι ας πούμε η $|\psi_{x+}\rangle$, θα έχουμε (βλ. (5.110))

$$|\psi_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle) \begin{cases} \xrightarrow[\text{με αποτέλεσμα } +(\hbar/2)]{\text{μέτρηση } S_z} & |\psi_{z+}\rangle \\ \xrightarrow[\text{με αποτέλεσμα } -(\hbar/2)]{\text{μέτρηση } S_z} & |\psi_{z-}\rangle \end{cases} \quad (\text{Π-III.2})$$

Η πρώτη αυτή μέτρηση μπορεί να επαναληφθεί αμέσως μετά, περνώντας π.χ. τα σωματίδια στην κατάσταση με $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ μέσα από μια δεύτερη συσκευή Stern - Gerlach προσανατολισμένη και αυτή στη z κατεύθυνση, οπότε όλα τα σωματίδια θα εξέλθουν πάλι με $S_z = +\frac{\hbar}{2}$. Έχουμε, έτσι, προετοιμάσει τα σωματίδια να βρίσκονται σε μια συγκεκριμένη κατάσταση. Όμως, αυτού του είδους οι μετρήσεις, που μπορεί να επαναληφθούν, δεν ανιχνεύουν πραγματικά ένα σωματίδιο. Για να γίνει κάτι τέτοιο, θα πρέπει ν' αλληλεπιδράσει το σωματίδιο μ' ένα άλλο σωματίδιο, π.χ. ένα φωτόνιο, και μια τέτοια διαδικασία δεν είναι επαναλήψιμη. Αυτό φαίνεται και από το γεγονός ότι, αν τα σωματίδια στις δύο δυνατές καταστάσεις (Π-III.2) διοχετευθούν αμέσως μετά την πρώτη συσκευή Stern - Gerlach σ' ένα κοινό δρόμο μέσα από μια δεύτερη συσκευή Stern - Gerlach προσανατολισμένη στη x κατεύθυνση, χωρίς να καταγραφεί πριν η z συνιστώσα του σπιν τους, η δεύτερη αυτή διαδικασία θα επαναφέρει το σύστημα στην κατάσταση $|\psi_{x+}\rangle$. Έτσι, καμιά πληροφορία δεν αποκτήθηκε σε ότι αφορά την τιμή της S_z . Για να κάνουμε μια πραγματική μέτρηση της S_z χρειάζεται μια συσκευή ανίχνευσης, που θα καταγράψει μια συγκεκριμένη τιμή σαν αποτέλεσμα μιας αλληλεπίδρασης.

Συνεπώς, στην κβαντική μηχανική οι πραγματικές μετρήσεις περιλαμβάνουν την ανίχνευση και τον προσδιορισμό των ιδιοτήτων ενός αντικειμένου μέσω μιας συσκευής ανίχνευσης και αυτή η διαδικασία είναι αναγκαστικά μη αντιστρεπτή. Είναι η παρουσία μιας συσκευής ανίχνευσης που προκαλεί την λεγόμενη "κατάρρευση (ή αναγωγή) της κυματοσυνάρτησης" από μια αρχική σε μια τελική μορφή, όπως αυτή περιγράφεται στις σχέσεις (Π-III.1)-(Π-III.2). Όμως αυτό ακριβώς το σημείο της "κατάρρευσης της κυματοσυνάρτησης" είναι που δημιουργεί τα προβλήματα στην κβαντική θεωρία μέτρησης.

Ας θεωρήσουμε, πράγματι, το συνδυασμένο φυσικό σύστημα "κβαντικό σύστημα + συσκευή ανίχνευσης". Πριν από μια μέτρηση το συνδυασμένο φυσικό σύστημα θα περιγράφεται από ένα καταστατικό διάνυσμα

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\Phi_0\rangle = \left(\sum_n c_n |\phi_n\rangle \right) \otimes |\Phi_0\rangle$$

(Π-III.3)



όπου $|\psi\rangle$ η κατάσταση του κβαντικού συστήματος και $|\Phi_0\rangle$ η αρχική κατάσταση της συσκευής ανίχνευσης (αφού θα πρέπει να δεχτούμε ότι ο φορμαλισμός της κβαντικής μηχανικής σαν γενικής θεωρίας μπορεί να περιγράψει τόσο το μικροσκοπικό, όσο και το μακροσκοπικό κομμάτι του φυσικού συστήματος). Το καταστατικό διάνυσμα $|\Psi\rangle$ θα ικανοποιεί μια χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger και θα εξελίσσεται με το χρόνο, έτσι ώστε μετά την μέτρηση θα είναι

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \otimes |\Phi_n\rangle \quad (\text{Π-III.4})$$

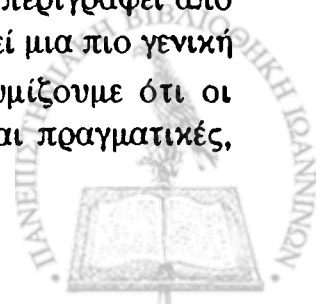
όπου $|\Phi_n\rangle$ το καταστατικό διάνυσμα της συσκευής που έχει καταγράψει την ιδιοτιμή α_n (με πιθανότητα $|c_n|^2$). Στο προηγούμενο παράδειγμά μας, θα γράφαμε

$$\text{πριν την μέτρηση: } |\Psi_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle) \otimes |\Phi_0\rangle \quad (\text{Π-III.5})$$

$$\text{μετά την μέτρηση: } |\Psi'_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{z+}\rangle \otimes |\Phi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle \otimes |\Phi_{z-}\rangle) \quad (\text{Π-III.6})$$

Έτσι, χρησιμοποιώντας το συνδυασμένο φυσικό σύστημα δεν φαίνεται να υπάρχει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης", η οποία θα συνεπαγόταν ότι μετά από μια μέτρηση η κατάσταση του συστήματός μας θα ήταν είτε η $|\psi_{z+}\rangle \otimes |\Phi_{z+}\rangle$ είτε η $|\psi_{z-}\rangle \otimes |\Phi_{z-}\rangle$. Μια κβαντομηχανική επαλληλία, όπως η (Π-III.6), φαίνεται βέβαια να είναι αντίθετη με την εμπειρία μας σε ότι αφορά μακροσκοπικά αντικείμενα (όπως η συσκευή ανίχνευσης). Για να υπάρξει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" και ν' αναχθεί η κατάσταση του συστήματός μας στην $|\psi_{z+}\rangle \otimes |\Phi_{z+}\rangle$ ή στην $|\psi_{z-}\rangle \otimes |\Phi_{z-}\rangle$, θα χρειαστεί μια νέα συσκευή ανίχνευσης, που θα είναι μέρος ενός ευρύτερου συστήματος. Αλλά τα ίδια επιχειρήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν και για το νέο ευρύτερο σύστημα, οπότε γίνεται φανερό ότι η διαδικασία αυτή θα πρέπει να επαναληφθεί ένα αυθαίρετο αριθμό φορών. Το ερώτημα, συνεπώς, είναι: πότε συμβαίνει και τι προκαλεί την "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης";

Όμως, αντί να θεωρήσουμε το συνδυασμένο φυσικό σύστημα "κβαντικό σύστημα + συσκευή ανίχνευσης", ας δούμε τι συμβαίνει αν εργαστούμε μόνο με το καταστατικό διάνυσμα του κβαντικού συστήματος. Πριν από την μέτρηση το σύστημα περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$. Μέσα από ένα μεγάλο αριθμό μετρήσεων, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το κβαντικό σύστημα περιγράφεται από μια μεικτή κατάσταση μ' ένα κλάσμα $|c_1|^2$ της κατάστασης του συστήματος να βρίσκεται στην καθαρή κατάσταση $|\phi_1\rangle$, ένα κλάσμα $|c_2|^2$ να βρίσκεται στην $|\phi_2\rangle$ κ.ο.κ.. Η μεικτή αυτή κατάσταση μπορεί να περιγραφεί από ένα πίνακα πυκνότητας ρ_{nm} , που όπως είδαμε στην §Π-II.1 αποτελεί μια πιο γενική περιγραφή ενός συστήματος στην κβαντική μηχανική. Υπενθυμίζουμε ότι οι ιδιοτιμές του ρ παριστάνουν πιθανότητες και έτσι πρέπει να είναι πραγματικές,



θετικές ή μηδέν, και ν' αθροίζονται στη μονάδα ($\text{Tr} \rho = 1$). Στη βάση $|\phi_n\rangle$ ο πίνακας πυκνότητας θα είναι διαγώνιος και θα δίνεται από τη σχέση

$$\rho_{nm} = |\rho_n|^2 \delta_{nm} \quad (\text{Π-III.7})$$

Η μετάβαση από την μεικτή κατάσταση $|\psi\rangle$ σε μια καθαρή κατάσταση $|\phi_n\rangle$ συνιστά ένα παράδειγμα "κατάρρευσης της κυματοσυνάρτησης" σαν αποτέλεσμα μιας μέτρησης. Θα πρέπει να τονίσουμε ότι η γραμμική ομογενής εξίσωση Schrödinger, που καθορίζει αιτιοκρατικά την χρονική εξέλιξη του καταστατικού διανύσματος, δεν μπορεί να μετατρέψει μια καθαρή κατάσταση σε μια μεικτή κατάσταση ή αντίστροφα. Ο μη αιτιοκρατικός χαρακτήρας της κβαντικής μηχανικής υπεισέρχεται ακριβώς κατά την διαδικασία της μέτρησης. Ισοδύναμα, αυτό το είδαμε και σαν αποτέλεσμα της εξίσωσης Liouville (Π-II.43), η οποία δεν επιτρέπει την μετατροπή μιας καθαρής κατάστασης σε μια μεικτή κατάσταση ή αντίστροφα. Για να επιτραπεί κάτι τέτοιο θα πρέπει να τροποποιηθούν οι εξισώσεις κίνησης.

Μπορεί τώρα κανείς να δει ότι τ' αποτελέσματα που παίρνει είναι τα ίδια είτε χρησιμοποιήσει την περιγραφή του κβαντικού συστήματος μόνου στη μεικτή κατάσταση του πίνακα πυκνότητας (Π-III.7), οπότε υπάρχει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" σαν αποτέλεσμα μιας μέτρησης, είτε χρησιμοποιήσει την περιγραφή του συνδυασμένου συστήματος (κβαντικό σύστημα + συσκευή ανίχνευσης) στην καθαρή κατάσταση (Π-III.4), οπότε δεν υπάρχει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης". Έτσι, ας θεωρήσουμε ένα νέο φυσικό μέγεθος \hat{Q} . Η αναμενόμενη τιμή του \hat{Q} για την περιγραφή της μεικτής κατάστασης (Π-III.7) είναι (βλ. (Π-II.10))

$$\langle \hat{Q} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{Q}) = \sum_n |\rho_n|^2 \langle \phi_n | \hat{Q} | \phi_n \rangle \quad (\text{Π-III.8})$$

Εξ άλλου, για την περιγραφή της καθαρής κατάστασης (Π-III.4) έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle &= \langle \Psi' | \hat{Q} | \Psi' \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle \phi_m | \otimes \langle \Phi_m | \hat{Q} | \phi_n \rangle \otimes | \Phi_n \rangle \end{aligned} \quad (\text{Π-III.9})$$

Τα στοιχεία πίνακα $\langle \phi_m | \otimes \langle \Phi_m | \hat{Q} | \phi_n \rangle \otimes | \Phi_n \rangle$ περιλαμβάνουν μεταβάσεις, στις οποίες η συσκευή ανίχνευσης κατέγραψε αρχικά τις τιμές α_n και α_m . Όμως, η καταγραφή αυτή, όντας μια μη αντιστρεπτή διαδικασία, δεν μπορεί ν' αλλάξει σε μια μέτρηση του νέου φυσικού μεγέθους \hat{Q} . Συνεπώς, ο τελεστής \hat{Q} δεν αλλάζει το $|\Phi_n\rangle$ και τα στοιχεία του πίνακα του \hat{Q} πρέπει να είναι διαγώνια ως προς n. Έτσι, η έκφραση (Π-III.9) ανάγεται στην (Π-III.8) και μπορούμε να διαλέξουμε οποιαδήποτε περιγραφή θέλουμε.

Βλέπουμε, λοιπόν, ότι η περιγραφή στην οποία υπάρχει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" σαν αποτέλεσμα μιας μέτρησης μας επιτρέπει να



περιγράψουμε ένα απομονωμένο κβαντικό σύστημα χωρίς να είμαστε αναγκασμένοι να λάβουμε υπόψη άλλα συστήματα με τα οποία το κβαντικό σύστημα αλληλεπίδρασε κατά μη αντιστεπτό τρόπο στο παρελθόν. Ο Bohr φαινόταν, πράγματι, να πιστεύει ότι η μακροσκοπική συσκευή ανίχνευσης είναι κλασική και η λεπτομερής περιγραφή της δεν χρειάζεται, με τις μετρήσεις να συνιστούν μη αντιστρεπτές διαδικασίες. Θα επανέλθουμε σ' αυτό το σημείο στην §Π-III.4.

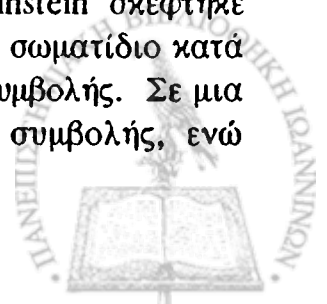
Π-III.2. "Παράδοξα" κβαντικής θεωρίας μέτρησης

α) Πειράματα δύο οπών

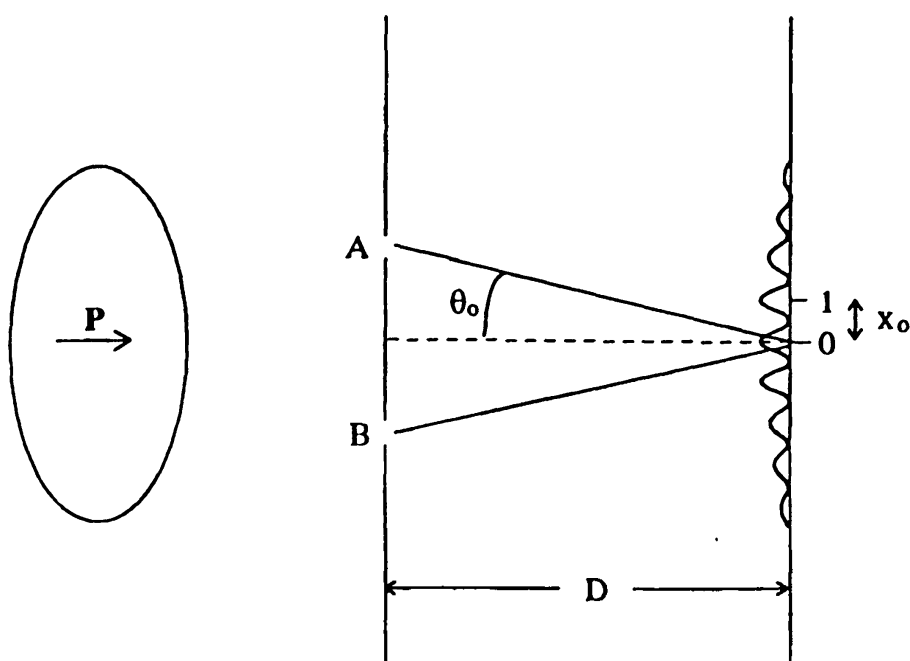
Δεν υπάρχει αμφιβολία ότι όλο το "μυστήριο" της κβαντικής μηχανικής περικλείεται στο πείραμα των δύο οπών, με το οποίο ξεκινήσαμε αυτό το βιβλίο και το οποίο γι' αυτόν ακριβώς το λόγο τοποθετείται στην αφιερωσία οποιασδήποτε συζήτησης για τη φύση της κβαντικής θεωρίας. Είναι χαρακτηριστικό αυτό που γράφει ο Feynman στο βιβλίο του "Ο χαρακτήρας του φυσικού νόμου": <<Οποιαδήποτε άλλη περίπτωση στην κβαντική μηχανική καταλήγει πάντα να μπορεί να εξηγηθεί λέγοντας, "θυμάστε την περίπτωση του πειράματος των δύο οπών;" Είναι το ίδιο πράγμα>>.

Όπως αναφέραμε στην περιγραφή του πειράματος των δύο οπών, στη βάση του φαινομένου είναι η αρχή της συμπληρωματικότητας: τα σωματίδια (φωτόνια, ηλεκτρόνια κλπ.) "αναχωρούν και φθάνουν (ανιχνεύονται) σαν σωματίδια, αλλά ταξιδεύουν σαν κύμα". Η έννοια-κλειδί είναι και εδώ η "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης": η πράξη της παρατήρησης (διαδικασία μέτρησης) είναι αυτή που κάνει ένα κύμα να "καταρρέει" και να γίνεται σωματίδιο. Σε όλες τις περιπτώσεις που έγιναν πειράματα δύο οπών (βλ. §1.2) επαληθεύεται αυτή η εικόνα.

Στην ίδια βάση βρίσκεται ισοδύναμα και η αρχή της αβεβαιότητας. Αυτό φαίνεται σ' ένα παράδειγμα μιας φημισμένης σειράς συζητήσεων - διαξιφισμών που είχαν ο Bohr και ο Einstein στα τέλη της δεκαετίας του 1920 και στις αρχές εκείνης του 1930 πάνω στη φυσική και λογική συνέπεια της κβαντικής θεωρίας. Ο Einstein πρότεινε πράγματι ιδιοφυή "διανοητικά" ("ιδεατά") πειράματα, τα οποία φαίνονταν να δείχνουν την παραδοξότητα της κβαντικής εικόνας, και ο Bohr επεξεργαζόταν απαντήσεις σύμφωνα με τις αρχές της συμπληρωματικότητας και της αβεβαιότητας. Στο πείραμα των δύο οπών που συζητάμε, ο Einstein σκέφτηκε ότι θα μπορούσε κανείς να προσδιορίσει από ποιά οπή πέρασε το σωματίδιο κατά τέτοιο τρόπο που δεν θα φαινόταν ότι επηρέαζε το διάγραμμα συμβολής. Σε μια τέτοια περίπτωση θα μπορούσαμε να δούμε το διάγραμμα συμβολής, ενώ



συγχρόνως θα ξέραμε από ποιά οπή πέρασε το σωματίδιο. Αλλά, τότε, το ερώτημα θα ήταν πώς μπορούσε το σωματίδιο να "ξέρει" ότι υπάρχει μια δεύτερη οπή, η οποία θα προκαλούσε το διάγραμμα συμβολής πάνω στην οθόνη ανίχνευσης. Αυτό που φαντάστηκε ο Einstein ήταν το εξής: ας υποθέσουμε ότι το σωματίδιο περνάει από την πάνω οπή και φθάνει στο κεντρικό σημείο της οθόνης ανίχνευσης. Αυτό σημαίνει ότι στο σωματίδιο μεταφέρθηκε ορμή $\sim p \sin \theta_0$ με κατεύθυνση προς τα κάτω, όπου p η ορμή του προσπίπτοντος σωματιδίου και θ_0 η γωνία εκτροπής (βλ. σχήμα Π-III.1). Αν πάλι το σωματίδιο πέρασε από την κάτω οπή και έφτασε στο κεντρικό σημείο της οθόνης ανίχνευσης, αυτό θα σήμαινε ότι στο σωματίδιο μεταφέρθηκε ορμή $\sim p \sin \theta_0$ με κατεύθυνση προς τα πάνω.



Σχ. Π-III.1. Διάταξη πειράματος δύο οπών.

Λόγω διατήρησης της ορμής, το παραπάνω ποσό της ορμής θα πρέπει να μεταφέρθηκε στο σωματίδιο από την οθόνη των οπών. Κατά συνέπεια, θα μπορούσαμε να ξέρουμε από ποιά οπή πέρασε το σωματίδιο, αν μπορούσαμε να μετρήσουμε την μεταβολή στην κατακόρυφη συνιστώσα της ορμής της οθόνης των οπών με αρκετή ακρίβεια. Δεν θα χρειαζόνταν να μετρήσουμε την ορμή της οθόνης των οπών παρά μετά που το σωματίδιο θα είχε ανιχνευθεί, έτσι που αυτή η μέτρηση της ορμής δεν θα μπορούσε να έχει κανένα αποτέλεσμα πάνω στην κατανομή πιθανότητας στη θέση του σωματιδίου πάνω στην οθόνη ανίχνευσης (διάγραμμα συμβολής).

Η απάντηση του Bohr ήταν ότι η αρχή της αβεβαιότητας εμποδίζει κάτι τέτοιο να συμβεί. Για να μετρήσουμε μια παρόμοια μεταφορά ορμής, θα πρέπει να



Ξέρουμε την αρχική ορμή της οθόνης των οπών με ορισμένη ακρίβεια και αυτό θα σήμαινε μια αβεβαιότητα στην κατακόρυφη θέση των οπών (με βάση τις σχέσεις αβεβαιότητας θέσης - ορμής) που θα έσβηνε το διάγραμμα συμβολής. Ας το δούμε αυτό από πιο κοντά.

Ας υποθέσουμε ότι είναι 0 και 1 οι δύο διαδοχικοί κροσσοί συμβολής με μέγιστη πιθανότητα (προσθετική συμβολή). Για τον κροσσό συμβολής 1, η διαφορά των δύο δρόμων που θ' ακολουθούσε το σωματίδιο μέσα από τις δύο οπές A και B θα είναι

$$\lambda = D \left(\frac{1}{\cos \theta_B} - \frac{1}{\cos \theta_A} \right) \quad (\text{Π-III.10})$$

όπου έχουμε ($\delta\theta \ll \theta_0$)

$$\begin{aligned} \theta_B &= \theta_0 + \delta\theta \\ \theta_A &= \theta_0 - \delta\theta \end{aligned} \quad (\text{Π-III.11})$$

για τις αντίστοιχες γωνίες εκτροπής. Η διαφορά αυτή πρέπει να είναι ίση με το μήκος κύματος de Broglie h/p , οπότε σε πρώτη προσέγγιση παίρνουμε ότι

$$\lambda \sim 2D \sin \theta_0 \delta\theta / \cos^2 \theta_0 \sim h/p \quad (\text{Π-III.12})$$

Η διαφορά στην ορμή του σωματιδίου μεταξύ των δύο περιπτώσεων που εκτρέπεται προς τα κάτω και προς τα πάνω είναι

$$\delta p \sim 2p \sin \theta_0 \quad (\text{Π-III.13})$$

Τέλος, για την απόσταση x_0 των δύο διαδοχικών κροσσών συμβολής, διαφορίζοντας την κατακόρυφη απόσταση $x_B \sim D \sin \theta_B$, βρίσκουμε

$$x_0 \sim D \delta\theta / \cos^2 \theta_0 \quad (\text{Π-III.14α})$$

Για να μετρήσουμε τη μεταφορά ορμής δp , θα πρέπει να ξέρουμε την αρχική ορμή της οθόνης των δύο οπών με μια αβεβαιότητα δP μικρότερη από τη μεταφορά ορμής από το σωματίδιο στην οθόνη, δηλαδή $\delta P < \delta p$. Με βάση την αρχή της αβεβαιότητας, αυτό θα σήμαινε αβεβαιότητα στην κατακόρυφη θέση της οθόνης τουλάχιστον κατά

$$\delta X \geq h/\delta P > h/\delta p \quad (\text{Π-III.14β})$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (Π-III.12) - (Π-III.14) βλέπουμε ότι η παραπάνω έκφραση μεταφράζεται σε

$$\delta X > x_0 \quad (\text{Π-III.15})$$

Όμως, αυτό ακριβώς θα σήμαινε ότι η αβεβαιότητα στην κατακόρυφη θέση των δύο οπών θα είναι μεγαλύτερη από την απόσταση μεταξύ των δύο κροσσών με



αποτέλεσμα να σκιαστεί το διάγραμμα συμβολής. Συνεπώς, οι αρχές της αβεβαιότητας και της συμπληρωματικότητας, που βρίσκονται στη βάση του "παράδοξου" του πειράματος των δύο οπών, δεν επιτρέπουν απώλεια του διαγράμματος συμβολής.

Το πείραμα των δύο οπών ξεκίνησε σαν "ιδεατό" πείραμα και μόνο πολύ αργότερα στάθηκε δυνατόν να πραγματοποιηθεί. Το ίδιο συμβαίνει με πολλά "ιδεατά" πειράματα. Μια εξαιρετικά ενδιαφέρουσα παραλλαγή του πειράματος των δύο οπών, όπως το εκθέσαμε παραπάνω, αποτελεί η πρόταση του J.A. Wheeler που έγινε στα τέλη της δεκαετίας του 1970. Ο Wheeler υπέδειξε ότι θα ήταν δυνατόν, κατ' αρχήν, να τοποθετηθούν ειδικοί ανιχνευτές σε μια ενδιάμεση απόσταση ανάμεσα στην οθόνη των δύο οπών και στην οθόνη ανίχνευσης. Ενεργοποιώντας τους ανιχνευτές, θα μπορούσε να καταγραφεί ο δρόμος που ακολούθησαν τα σωματίδια μετά που πέρασαν από τις δύο οπές, αλλά πριν φθάσουν στην οθόνη ανίχνευσης. Κάτι τέτοιο θα έπρεπε να εξαφανίσει το διάγραμμα συμβολής. Αντίθετα, απενεργοποιώντας τους ανιχνευτές θα έπρεπε ν' αποκατασταθεί το διάγραμμα συμβολής. Έτσι, η συμπεριφορά των σωματιδίων στις δύο οπές θα μπορούσε να προσδιοριστεί μετά την διόδό τους μέσα από αυτές ("πείραμα καθυστερημένης επιλογής"). Πράγματι, ένα τέτοιο πείραμα στάθηκε δυνατόν να γίνει στα μέσα της δεκαετίας του 1980 από δύο ομάδες, που εργάζονταν ανεξάρτητα στα πανεπιστήμια Maryland και Μονάχου. Χρησιμοποίησαν μια δέσμη λέιζερ, η οποία διαχωρίστηκε σε δύο μέσω ενός κατάλληλου κατόπτρου. Η μια από τις δύο δέσμες διοχετεύθηκε μέσα από μια συσκευή, η οποία της προκάλεσε μια μετατόπιση φάσης σε σχέση με την άλλη. Έπειτα, οι δύο δέσμες επανενώθηκαν για να δημιουργήσουν το διάγραμμα συμβολής. Ειδικοί ανιχνευτές τοποθετήθηκαν σε κάθε μια από τις δύο δέσμες για να καταγράψουν το πέρασμα των φωτονίων. Τόσο η μια, όσο και η άλλη ομάδα βρήκαν αποτελέσματα σε συμφωνία με την κβαντική θεωρία. Όταν οι ανιχνευτές ενεργοποιούνταν και κατέγραφαν το πέρασμα των φωτονίων από τη μια ή την άλλη δέσμη, κανένα διάγραμμα συμβολής δεν εμφανιζόταν. Αντίθετα, όταν οι ανιχνευτές ήταν κλειστοί και τα φωτόνια φαινόταν ν' ακολουθούν και τους δύο δρόμους, το διάγραμμα συμβολής παρουσιαζόταν. Έτσι, καταδείχτηκε ότι η συμπεριφορά των φωτονίων στο σημείο διαχωρισμού της αρχικής δέσμης λέιζερ καθοριζόταν ανάλογα με το πως θ' αποφασίζαμε να τα παρατηρήσουμε μετά που θα είχαν διαχωριστεί!

Μια ακόμη πιο εντυπωσιακή παραλλαγή του πειράματος των δύο οπών φαντάστηκε ο Wheeler στις αρχές της δεκαετίας του 1980. Το αστροφυσικό φαινόμενο των "βαρυτικών φακών" θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σαν μια κοσμική εκδοχή του πειράματος των δύο οπών, καλύτερα θα λέγαμε εδώ του πειράματος των δύο δρόμων. Είναι γνωστό με βάση τη γενική θεωρία της

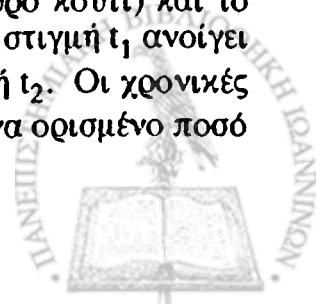


σχετικότητας του Einstein ότι ακτίνες φωτός μπορούν να εκτραπούν από την πορεία τους, λόγω της βαρυτικής έλξης από μαζικά ουράνια σώματα, δημιουργώντας φαινόμενα βαρυτικών φακών. Έτσι, το φως από έναν μακρινό κβάζαρ εκτρέπεται από ένα γαλαξία που παρεμβάλλεται στην ίδια γραμμή οράσεως από τη Γη, με αποτέλεσμα τα φωτόνια από τον κβάζαρ, που μπορούν να περάσουν από δύο διαφορετικούς δρόμους γύρω από το γαλαξία, να σχηματίζουν δύο εικόνες του κβάζαρ εκατέρωθεν εκείνης του γαλαξία. Πράγματι, το πρώτο παρόμοιο παράδειγμα βαρυτικού φακού ανακαλύφθηκε το 1979, όταν στάθηκε δυνατό να βεβαιωθεί ότι δύο τέτοιες εικόνες αντιστοιχούσαν πράγματι σ' ένα και τον αυτό κβάζαρ. Έκτοτε, αρκετά παραδείγματα πολλαπλών εικόνων κβάζαρ έγιναν γνωστά και ο κατάλογος εξακολουθεί ν' αυξάνεται. Κατ' αρχήν, σε ό,τι μας αφορά εδώ θα μπορούσε να συνδυαστεί το φως από τις δύο εικόνες για να μελετηθεί ένα διάγραμμα συμβολής πάνω στη Γη σύμφωνα με αυτά που περιγράψαμε παραπάνω, έστω και αν τα φωτόνια σ' αυτή την περίπτωση ξεκίνησαν δισεκατομμύρια έτη φωτός πριν από την ανίχνευση! Όμως, χωρίς να υπεισέλθουμε σε λεπτομέρειες, η φυσική του προβλήματος είναι τέτοια, που φαίνεται τεχνικά αδύνατο να πραγματοποιηθεί κάτι παρόμοιο. Πιο πιθανή, ίσως, καθώς θα βελτιώνονται οι παρατηρήσεις και οι τεχνικές των τηλεσκοπίων, φαίνεται να είναι η πραγματοποίηση ενός τέτοιου εγχειρήματος μ' ένα άλλο είδος βαρυτικών φακών, εκείνων που δημιουργούνται από μαζικά αντικείμενα στη στεφάνη του γαλαξία μας και τα οποία παρεμβάλλονται και εκτρέπουν το φως από αστέρες άλλου γαλαξία, όπως π.χ. από εκείνους του Μεγάλου Νέφους του Μαγγελάνου. Τέτοιοι "βαρυτικοί μικροφακοί" παρατηρήθηκαν πράγματι για πρώτη φορά το 1993.

β) Σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου

Είναι διδακτικό σ' αυτό το σημείο να παραθέσουμε ένα άλλο "ιδεατό" πείραμα στη σειρά των συζητήσεων Einstein - Bohr, που προτάθηκε από τον Einstein σε μια απόπειρα να δείξει ότι θα μπορούσαν να προσδιοριστούν οι φυσικές μεταβλητές με μεγαλύτερη ακρίβεια απ' ότι θα επέτρεπε η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου αυτή τη φορά.

Το "ιδεατό" πείραμα που παρουσίασε ο Einstein ήταν το εξής. Ένα ρολόι τοποθετείται σ' ένα κουτί με τέλεια ανακλώντα τοιχώματα (μαύρο κουτί) και το οποίο περιέχει κάποια ενέργεια. Σε μια προκαθορισμένη χρονική στιγμή t_1 ανοίγει ένα διάφραγμα, το οποίο ξανακλείνει σε μια άλλη χρονική στιγμή t_2 . Οι χρονικές στιγμές t_1 και t_2 μπορούν να καθοριστούν με μεγάλη ακρίβεια. Ένα ορισμένο ποσό



ενέργειας με μορφή ακτινοβολίας διαφεύγει, όταν το διάφραγμα είναι ανοικτό. Ζυγίζοντας προσεκτικά το κουτί πριν και μετά, μπορεί κανείς να μετρήσει με αρκετά μεγάλη ακρίβεια το ποσό της ενέργειας που διέφυγε, χρησιμοποιώντας τη σχέση $E = mc^2$. Θα μπορούσε, έτσι, να οδηγήσει σε αποτυχία τη σχέση $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$.

Ο Bohr απάντησε ως εξής. Το να ζυγίσουμε το κουτί σημαίνει να παρατηρήσουμε τη δύναμη F που εξασκείται πάνω του μέσα στο πεδίο βαρύτητας, πράγμα που σημαίνει να μετρήσουμε το ρυθμό μεταβολής της ορμής του μέσα σ' αυτό. Ας υποθέσουμε ότι το κουτί επιταχύνεται κάτω από το πεδίο βαρύτητας για χρόνο t και μετρούμε την ορμή που αποκτήθηκε με ακρίβεια Δp . Τότε, ξέρουμε τη δύναμη F πάνω στο κουτί μέσα στο πεδίο βαρύτητας με ακρίβεια $\Delta F = \Delta p/t$. Υπάρχει, συνεπώς, μια αβεβαιότητα στη μάζα του κουτιού $\Delta m = \Delta F/g = \Delta p/tg$ και μια αβεβαιότητα στην ενέργεια $\Delta E = \Delta mc^2 = \Delta p \cdot c^2/tg$. Από την άλλη μεριά, υπάρχει μια αβεβαιότητα στη θέση του κουτιού Δz , που συνδέεται με την αβεβαιότητα στην ορμή Δp με τη γνωστή σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής. Αλλά επειδή το ρολόι βρίσκεται μέσα στο πεδίο βαρύτητας, θα υπάρχει μια αβεβαιότητα στο χρόνο ανοίγματος του διαφράγματος (σε σχέση μ' έναν εξωτερικό παρατηρητή), που σύμφωνα με τη γενική θεωρία της σχετικότητας (βαρυτική μετατόπιση προς το ερυθρό) θα είναι $\Delta t = t g \Delta z/c^2$. Έχουμε, λοιπόν, συνολικά

$$\Delta E \cdot \Delta t = \frac{\Delta p c^2}{t g} \cdot \frac{t g \Delta z}{c^2} = \Delta z \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (\text{Π-III.16})$$

και η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου δεν μπορεί να παραβιαστεί.

Το εκπληκτικό στον παραπάνω συλλογισμό έγκειται στον τρόπο που η γενική θεωρία της σχετικότητας υπεισέρχεται για να συμφιλιώσει ό,τι διαφορετικά θα ήταν "παράδοξο", αν εφαρμόζαμε τη σχέση $E=mc^2$ της ειδικής σχετικότητας στις σχέσεις αβεβαιότητας. Στη σχέση κβαντικής μηχανικής και σχετικότητας θα επανέλθουμε στην §Π-III.4.

γ) Η γάτα του Schrödinger και ο φίλος του Wigner

Το πείραμα των δύο οπών φαίνεται να μας οδηγεί στο να δεχτούμε ότι ένα σωματίδιο μπορεί να βρίσκεται σε δύο θέσεις την ίδια στιγμή και μόνο μια διαδικασία μέτρησης οδηγεί στην "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" και στον εντοπισμό του (μέσα στα όρια των σχέσεων αβεβαιότητας). Εξ άλλου, όπως είδαμε στην §Π-III.1, αν θέλουμε η κβαντική μηχανική ν' αποτελεί μια γενική θεωρία που περιγράφει τόσο τα μικροσκοπικά, όσο και τα μακροσκοπικά μέρη ενός φυσικού συστήματος, θα πρέπει το φυσικό σύστημα να μπορεί να περιγραφεί μ' ένα ενιαίο καταστατικό διάνυσμα. Ότι οι παραπάνω διαπιστώσεις μπορεί να οδηγήσουν σε "παράδοξες" καταστάσεις αντίθετες με την εμπειρία μας φαίνεται μέσα από δύο



παραδείγματα "ιδεατών" πειραμάτων, που υπέδειξαν πρώτα ο Schrödinger το 1935 και στη συνέχεια ο Wigner σε μια παραλλαγή του πρώτου.

Ο Schrödinger φαντάστηκε ένα κουτί μέσα στο οποίο κλείνουμε ένα ασταθή πυρήνα, μια συσκευή από την οποία μπορεί να εκλυθεί ένα δηλητηριώδες αέριο σαν αποτέλεσμα της διάσπασης του πυρήνα, και μια γάτα. Το κουτί πρόκειται ν' ανοιχθεί σε μια μετέπειτα χρονική στιγμή για να διαπιστωθεί αν η γάτα είναι ζωντανή ή νεκρή (σαν αποτέλεσμα της διάσπασης ή μη του ασταθούς πυρήνα). Σύμφωνα με την κβαντική μηχανική, το καταστατικό διάνυσμα του όλου συστήματος του κουτιού θα είναι

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{\text{αδιάσπαστος}}^{\text{πυρήνας}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{ζωντανή}}^{\text{γάτα}}\rangle + |\psi_{\text{διασπασμένος}}^{\text{πυρήνας}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{νεκρή}}^{\text{γάτα}}\rangle \right) \quad (\text{Π-III.17})$$

Όμως, αυτό συνεπάγεται ότι πριν ανοίξουμε το κουτί για να εξετάσουμε την κατάσταση της γάτας (ζωντανή ή νεκρή) και να μπορέσουμε, έτσι, ν' αποφανθούμε αν ο πυρήνας διασπάστηκε ή όχι, θα πρέπει να δεχθούμε ότι η γάτα δεν είναι ούτε ζωντανή ούτε νεκρή ή, διαφορετικά, έχει πιθανότητα 50% να είναι ζωντανή και 50% νεκρή! Κάτι τέτοιο είναι βέβαια εξαιρετικά "παράδοξο" και το ερώτημα που προκύπτει είναι πότε συμβαίνει η "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" για να βεβαιώσουμε ότι η γάτα είναι ζωντανή ή νεκρή. Όπως αναπτύχθηκε στην §Π-III.1, η γάτα θα μπορούσε να θεωρηθεί σαν συσκευή ανίχνευσης, η οποία με την κατάστασή της "ζωντανή ή νεκρή" έχει απλώς καταγράψει κατά μη αντιστρεπτό τρόπο το αν ο ασταθής πυρήνας διασπάστηκε ή όχι.

Μια παραλλαγή του "ιδεατού" πειράματος της γάτας του Schrödinger υπέδειξε ο Wigner. Σ' αυτήν η γάτα αντικαθίσταται από έναν παρατηρητή ("φίλος του Wigner"), ο οποίος τοποθετείται εκεί για να καταγράψει κάποιο κβαντικό γεγονός. Έπειτα, ανοίγεται το κουτί και κάνουμε μια "μέτρηση" ρωτώντας τον παρατηρητή για το τί αυτός μέτρησε. Ακολουθώντας τον συμβολισμό της §Π-III.1, μπορούμε να πούμε ότι αρχικά πριν ο παρατηρητής καταγράψει ένα αποτέλεσμα για το κβαντικό σύστημα που μπορεί να είναι + ή - (π.χ. μέτρηση ιδιοτιμών $\pm \frac{\hbar}{2}$ για το S_z), το καταστατικό διάνυσμα θα είναι

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_+^{\text{σύστημα}}\rangle \otimes |\Phi_0^{\text{παρατηρητής}}\rangle + |\psi_-^{\text{σύστημα}}\rangle \otimes |\Phi_0^{\text{παρατηρητής}}\rangle \right) \quad (\text{Π-III.18})$$

Μετά που ο παρατηρητής θα έχει καταγράψει το ένα ή το άλλο αποτέλεσμα, θα έχουμε για το καταστατικό διάνυσμα

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_+^{\text{σύστημα}}\rangle \otimes |\Phi_+^{\text{παρατηρητής}}\rangle + |\psi_-^{\text{σύστημα}}\rangle \otimes |\Phi_-^{\text{παρατηρητής}}\rangle \right) \quad (\text{Π-III.19})$$



Έτσι, πριν ανοίξουμε το κουτί και ρωτήσουμε τον παρατηρητή, θα πρέπει να δεχτούμε ότι αυτός βρίσκεται σε μια επαλληλία δύο καταστάσεων, ασφαλώς μια "παράδοξη" κατάσταση για ένα μακροσκοπικό έμψυχο ον! Βέβαια, ο παρατηρητής ξέρει στα σίγουρα αν το αποτέλεσμα που κατέγραψε είναι + ή -. Η ίδια κατάσταση προκύπτει αν φανταστούμε την ακολουθία όπου ο παρατηρητής, μετά που ανοίξαμε το κουτί του "ιδεατού" πειράματος της γάτας του Schrödinger, εισέρχεται σ' αυτό, καταγράφει το αν η γάτα είναι ζωντανή ή νεκρή και στη συνέχεια τον ρωτάμε για το τί συνέβη. Πριν τον ρωτήσουμε, θα έχουμε για το καταστατικό διάνυσμα του συνόλου την έκφραση

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{\text{αδιάσπαστος}}^{\text{πυρήνας}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{ζωντανή}}^{\text{γάτα}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{χαρούμενος}}^{\text{παρατηρητής}}\rangle + |\psi_{\text{διασπασμένος}}^{\text{πυρήνας}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{νεκρή}}^{\text{γάτα}}\rangle \otimes |\Phi_{\text{λυπημένος}}^{\text{παρατηρητής}}\rangle \right) \quad (\text{Π-III.20})$$

Ίδια "παράδοξότητα"! Τα ερωτήματα που διατυπώσαμε προηγούμενα στην §Π-III.1 εφαρμόζονται και εδώ (θα επανέλθουμε στην §Π-III.4).

δ) Το "παράδοξο" Einstein - Podolsky - Rosen

Το πιο περίτεχνο "παράδοξο" για την πληρότητα ή μη της κβαντικής μηχανικής είναι χωρίς αμφιβολία το παράδειγμα ενός κβαντομηχανικού συστήματος που περιέγραψαν το 1935 οι Einstein, Podolsky και Rosen και φέρει έκτοτε (το ίδιο ή παραλλαγές του) τ' αρχικά τους: "παράδοξο EPR".

Στη δημοσίευση των Einstein - Podolsky - Rosen υπάρχει ένας ορισμός της φυσικής πραγματικότητας: <<μια ικανή συνθήκη για την πραγματικότητα μιας φυσικής ποσότητας είναι η δυνατότητα πρόβλεψής της με βεβαιότητα, χωρίς να διαταράσσεται το σύστημα>>. Δίνουν μετά ένα παράδειγμα που δείχνει ότι κάτι τέτοιο δεν συμβαίνει στα παρατηρήσιμα μεγέθη της κβαντικής φυσικής και συμπεραίνουν, έτσι, ότι αυτή δεν είναι μια πλήρης θεωρία. Ένα απλούστερο μεταγενέστερο παράδειγμα, που καθιερώθηκε στη συνέχεια, είναι αυτό που εισήγαγε ο D. Bohm.

Ας θεωρήσουμε δύο σωματίδια με σπιν $\frac{1}{2}$, τα οποία προέρχονται από ένα σύστημα με συνολική στροφορμή μηδέν. Παραδείγματος χάρη, ένα ηλεκτρόνιο και ένα ποζιτρόνιο που παράγονται από την διάσπαση ενός συστήματος με συνολική στροφορμή μηδέν. Υποθέτουμε ότι τα δύο αυτά σωματίδια απομακρύνονται στη συνέχεια αρκετά μακριά το ένα από το άλλο με μηδενική τροχιακή στροφορμή. Επειδή η συνολική στροφορμή είναι μηδέν, τα δύο σωματίδια θα έχουν συνολικό



σπιν μηδέν και το καταστατικό τους διάνυσμα θα είναι σύμφωνα με την κβαντική μηχανική (βλ. (5.154))

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (\text{Π-III.21})$$

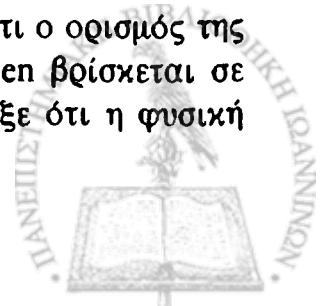
όπου οι ιδιοτιμές της z συνιστώσας του σπιν για τα δύο σωματίδια είναι $+\frac{\hbar}{2}$, $-\frac{\hbar}{2}$ για το πρώτο καταστατικό διάνυσμα $|+-\rangle$ και $-\frac{\hbar}{2}$, $+\frac{\hbar}{2}$, αντίστοιχα, για το δεύτερο καταστατικό διάνυσμα $|-+\rangle$ (βλ. (5.100)).

Όταν τα δύο σωματίδια βρεθούν αρκετά μακριά το ένα από το άλλο, ας υποθέσουμε ότι μετράμε την z συνιστώσα του σπιν του ηλεκτρονίου και βρίσκουμε την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$. Τότε, χωρίς να διαταράξουμε το ποζιτρόνιο, θα ξέρουμε ότι μια μέτρηση της z συνιστώσας του σπιν του θα δώσει την τιμή $-\frac{\hbar}{2}$. Αλλά θα μπορούσαμε εξίσου καλά να είχαμε αποφασίσει να μετρήσουμε την x συνιστώσα του σπιν του ηλεκτρονίου και, αν βρίσκαμε την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$, θα συμπεραίναμε όμοια ότι η x συνιστώσα του σπιν του ποζιτρονίου θα είχε την καθορισμένη τιμή $-\frac{\hbar}{2}$. Επειδή δεν υπάρχει κανένας τρόπος να "ξέρει" το ποζιτρόνιο ποιά συνιστώσα του σπιν του ηλεκτρονίου αποφασίσαμε να μετρήσουμε (αν δεχτούμε ότι δεν υπάρχει δράση εξ αποστάσεως), ο ορισμός περί φυσικής πραγματικότητας των Einstein - Podolsky - Rosen υπαγορεύει ότι τόσο η z , όσο και η x συνιστώσα του σπιν του ποζιτρονίου υπάρχουν και έχουν καθορισμένη τιμή. Όμως, κάτι τέτοιο δεν προβλέπεται στην κβαντική μηχανική: αν το ποζιτρόνιο έχει καθορισμένη τιμή για την x συνιστώσα του, όπως εδώ η $-\frac{\hbar}{2}$, τότε το καταστατικό του διάνυσμα θα είναι (βλ. (5.110))

$$|\psi\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) \quad (\text{Π-III.22})$$

και η γραμμική αυτή επαλληλία δεν έχει καθορισμένη τιμή για την z συνιστώσα (50% για την τιμή $+\frac{\hbar}{2}$ και 50% για την τιμή $-\frac{\hbar}{2}$). Από αυτό οι Einstein - Podolsky - Rosen συμπεραίνουν ότι η κβαντική μηχανική δεν είναι μια πλήρης θεωρία, μια και δεν ικανοποιεί το κριτήριο που εισήγαγαν για την φυσική πραγματικότητα.

Η απάντηση του Bohr στο παραπάνω "παράδοξο" ήταν ότι ο ορισμός της φυσικής πραγματικότητας από τους Einstein - Podolsky - Rosen βρίσκεται σε σύγκρουση με την αρχή της συμπληρωματικότητας. Υποστήριξε ότι η φυσική



πραγματικότητα στον ορισμό Einstein - Podolsky - Rosen αναφέρεται μόνο σε περιπτώσεις όπου η πειραματική διαδικασία προσδιορίζεται πλήρως και κάτι τέτοιο δεν συμβαίνει εδώ, γιατί το σύστημα διαταράσσεται εξ αρχής με την απόφασή μας να μετρήσουμε την x ή την z συνιστώσα του σπιν του ηλεκτρονίου. Έτσι, η αρχή της συμπληρωματικότητας δεν επιτρέπει την ύπαρξη ενός "στοιχείου πραγματικότητας" για την x συνιστώσα του σπιν του ποζιτρονίου πριν από την απόφασή μας να την μετρήσουμε είτε άμεσα, είτε έμμεσα, όπως εδώ, μετρώντας μια ιδιαίτερη συνιστώσα του σπιν του ηλεκτρονίου. Μια άλλη εφαρμογή της αρχής της συμπληρωματικότητας είδαμε στο πείραμα των δύο οπών, όπου μπορούμε ν' αποκαλύψουμε είτε την σωματιδιακή είτε την κυματική φύση της ύλης, αλλά όχι και τις δύο μαζί.

Θα πρέπει να υπογραμμίσουμε ότι σύμφυτη με τις προηγούμενες θεωρήσεις είναι η έννοια της τοπικότητας ή μη μιας θεωρίας. Με την έννοια "τοπικότητα" εννοούμε ότι δεν υπάρχει δράση εξ αποστάσεως και, βέβαια, αυτό υπαγορεύεται από την ειδική σχετικότητα. Όμως, τόσο τα πειράματα των δύο οπών, όσο και τα παραδείγματα του "παράδοξου EPR" δείχνουν ότι η κβαντική μηχανική είναι μια μη τοπική θεωρία: η συμπεριφορά ενός κβαντικού συστήματος σ' ένα σημείο επηρεάζεται από μετρήσεις που γίνονται σ' ένα άλλο σημείο (πειράματα δύο οπών), ενώ η μέτρηση μιας ποσότητας μέρους ενός συστήματος σ' ένα σημείο επηρεάζει το αποτέλεσμα που θα πάρουμε για μια αντίστοιχη ποσότητα άλλου τμήματος του ίδιου συστήματος σε άλλο σημείο ("παράδοξο EPR"). Ο επηρεασμός αυτός γίνεται στιγμιαία ανεξάρτητα από το πόσο μακριά βρίσκονται τα δύο σημεία. Είναι σαν διαφορετικά μέρη του συστήματος να παραμένουν συνδεδεμένα και να γίνονται ενήμερα στιγμιαία του όλου πειράματος! Αυτή η ιδιότητα είναι γνωστή σαν κβαντικός μη διαχωρισμός (entanglement: εναγκαλισμός).

Όμως, προσοχή! Η μη τοπικότητα της κβαντικής μηχανικής δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να στείλουμε μηνύματα με ταχύτητες μεγαλύτερες από την ταχύτητα του φωτός. Έτσι, στο παράδειγμα του "παράδοξου EPR" ο κβαντικός συσχετισμός για τις συνιστώσες του σπιν των δύο σωματιδίων γίνεται στιγμιαία, αλλά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να μεταδοθεί πληροφορία με ταχύτητες μεγαλύτερες από εκείνη του φωτός. Αντίθετα, η πληροφορία για το οποιοδήποτε συγκεκριμένο αποτέλεσμα μιας μέτρησης θα μεταδίδεται πάντα με τους συνηθισμένους τρόπους και τα κλασικά κανάλια και αυτό θα υπόκειται στους περιορισμούς της ειδικής σχετικότητας. Πάντως, δεν είναι φανερό ότι οι απαιτήσεις της σχετικότητας εξαντλούνται μόνο με τον περιορισμό να μην έχουμε ταχύτητες μεγαλύτερες από την ταχύτητα του φωτός. Θα επανέλθουμε σ' αυτό το σημείο στην §Π-III.4.

Θα πρέπει να τονίσουμε, εν κατακλείδι, ότι το "παράδοξο EPR", χωρίς να καταδειχνει την μη πληρότητα της κβαντικής μηχανικής όπως αρχικά επιχειρήθηκε,

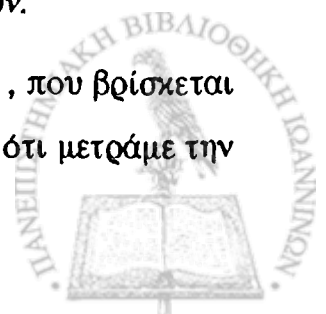


υπογράμμισε τα δύο βασικά χαρακτηριστικά της, την μη τοπικότητα και τον κβαντικό μη διαχωρισμό. Σ' αυτά ακριβώς τα χαρακτηριστικά βασίζεται και η λεγόμενη κβαντική τηλεμεταφορά, που είναι μια τεχνική μέσω της οποίας η κβαντική κατάσταση ενός συστήματος μπορεί να μεταφερθεί σε απομακρυσμένο σημείο με την χρήση μετάδοσης κλασικής μόνο πληροφορίας. Έτσι, τα τελευταία χρόνια καταδείχθηκε η κβαντική τηλεμεταφορά ιδιοτήτων φωτονίων σε μικρή απόσταση. Μ' αυτόν τον τρόπο, όπως θα δούμε και στη συνέχεια, τα πειράματα αποδεικνύουν ότι κβαντικά μη διαχωρισμένα, απομακρυσμένα συστήματα υπάρχουν και ότι μη τοπικά φαινόμενα ενσωματώνονται στην κβαντική θεωρία.

Π-III.3 Κρυμμένες μεταβλητές και το θεώρημα Bell

Η μη τοπικότητα που εκδηλώνεται στις κβαντικές μετρήσεις (αυτές άλλωστε οδηγούν και στην "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης") αποτελεί ένα βασικό χαρακτηριστικό της κβαντικής μηχανικής. Από την άλλη μεριά, το ότι η φυσική συμπεριφορά φαίνεται να εξαρτάται από τις μετρήσεις που αποφασίζουμε να κάνουμε, μαζί με τον πιθανοκρατικό (στατιστικό) χαρακτήρα των προβλέψεων της κβαντικής μηχανικής, είναι κάτι που εξακολουθεί να προβληματίζει (και να ενοχλεί πολλούς). Οπότε γεννάται το ερώτημα: θα μπορούσε να υπάρχει μια βαθύτερη (τοπική, μη στατιστικού χαρακτήρα) θεωρία, που ν' αναπαράγει τ' αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής; Ίσως, μπορεί να υπάρχουν "κρυμμένες μεταβλητές" σ' αυτή τη βαθύτερη θεωρία, η τιμή των οποίων να προσδιορίζει μονοσήμαντα τ' αποτελέσματα όλων των δυνατών μετρήσεων σ' ένα σύστημα, έτσι που τα διαφορετικά αποτελέσματα που φαίνεται να παίρνουμε να οφείλονται στις διαφορετικές τιμές των κρυμμένων μεταβλητών. Μια πλήρως αιτιοκρατική (ντετερμινιστική) θεωρία κρυμμένων μεταβλητών θα μπορούσε να γίνει ισοδύναμη με την κβαντική μηχανική, αν κανονίζαμε την κατανομή των τιμών των κρυμμένων μεταβλητών, έτσι ώστε να κάναμε την κατανομή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων να συμφωνεί με την πιθανοκρατική κατανομή της κβαντικής μηχανικής. Χρειάστηκε η διορατική ικανότητα του J.S. Bell για να δείξει για πρώτη φορά το 1965, μέσα από τις φημισμένες ανισότητες που φέρουν το όνομά του, ότι μια τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών δεν μπορεί ν' αναπαράγει τ' αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής (θεώρημα Bell). Μια σειρά πειραμάτων στη δεκαετία του 1980 επιβεβαίωσε, μέσα από την παραβίαση των ανισοτήτων του Bell, την κβαντική μηχανική, δηλαδή την μη τοπικότητα των κβαντικών μετρήσεων, αποκλείοντας την ύπαρξη τοπικών θεωριών κρυμμένων μεταβλητών.

Ας θεωρήσουμε πάλι ένα σύστημα δύο σωματιδίων σπιν $\frac{1}{2}$, που βρίσκεται στην κατάσταση (Π-III.21) συνολικού σπιν μηδέν. Ας υποθέσουμε ότι μετράμε την



συνιστώσα του σπιν του σωματιδίου 1 κατά μήκος της κατεύθυνσης του μοναδιαίου διανύσματος \hat{a} , η οποία είναι $S_{\hat{a}}(1) = \frac{\hbar}{2} \sigma(1) \cdot \hat{a}$ (βλ. και πρόβλημα 5.9). Επαληθεύουμε ότι η μέση τιμή $\langle \psi | S_{\hat{a}}(1) | \psi \rangle$ είναι μηδέν, όπως πράγματι αναμένεται. Όμοια, σε μια μέτρηση της συνιστώσας του σπιν του σωματιδίου 2 κατά μήκος της κατεύθυνσης του μοναδιαίου διανύσματος \hat{b} θα έχουμε $S_{\hat{b}}(2) = \frac{\hbar}{2} \sigma(2) \cdot \hat{b}$ και $\langle \psi | S_{\hat{b}}(2) | \psi \rangle = 0$. Σε μια κοινή τώρα μέτρηση των $S_{\hat{a}}(1)$ και $S_{\hat{b}}(2)$, θα έχουμε να κάνουμε με τη μέση τιμή $\langle \psi | S_{\hat{a}}(1) \cdot S_{\hat{b}}(2) | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \langle \psi | \sigma(1) \cdot \hat{a} \sigma(2) \cdot \hat{b} | \psi \rangle$. Θ' αναφερόμαστε στη συνέχεια για απλότητα στον συντελεστή συσχετισμού $C(\hat{a}, \hat{b})$, που ορίζεται από τη μέση τιμή $C(\hat{a}, \hat{b}) = \langle \psi | \sigma(1) \cdot \hat{a} \sigma(2) \cdot \hat{b} | \psi \rangle$. Βρίσκουμε, έτσι, ότι στην κβαντική μηχανική ο συντελεστής συσχετισμού είναι

$$C(\hat{a}, \hat{b}) = \langle \psi | \sigma(1) \cdot \hat{a} \sigma(2) \cdot \hat{b} | \psi \rangle = -\hat{a} \cdot \hat{b} = -\cos \phi \quad (\text{Π-III.23})$$

όπου ϕ η γωνία μεταξύ των \hat{a} και \hat{b} . Παραδείγματος χάρη, αν τα \hat{a} και \hat{b} είναι στην ίδια κατεύθυνση, ο συντελεστής συσχετισμού $C(\hat{a}, \hat{b})$ είναι -1 , πράγμα που σημαίνει ότι οι δύο συνιστώσες του σπιν έχουν μέτρο $\frac{\hbar}{2}$ και αντίθετα σημεία, όπως αναμένεται για το σύστημά μας.

Ας έρθουμε τώρα σε μια τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών. Σε μια τέτοια θεωρία θα πρέπει να υπάρχουν κρυμμένες μεταβλητές, τις οποίες συμβολίζουμε συλλογικά με λ , και οι οποίες περιγράφουν την κατάσταση του συστήματος πλήρως και καθορίζουν αιτιοκρατικά τις τιμές των κβαντικών μεταβλητών που θα πάρουμε σε μια μέτρηση. Σ' ένα μεγάλο αριθμό όμοια προετοιμασμένων συστημάτων, ας θεωρήσουμε την ποσότητα $p(\lambda)$ που προσδιορίζει το κλάσμα εκείνο των συστημάτων που έχουν τιμές των κρυμμένων μεταβλητών μεταξύ λ και $\lambda+d\lambda$ (πιθανότητα κατανομής των τιμών των κρυμμένων μεταβλητών). Δεχόμαστε ότι η ποσότητα $p(\lambda)$ είναι κανονικοποιημένη, έτσι ώστε

$$\int p(\lambda) d\lambda = 1, \quad p(\lambda) \geq 0 \quad (\text{Π-I.24})$$

Έτσι, ας συμβολίσουμε το αποτέλεσμα της μέτρησης της συνιστώσας $S_{\hat{a}}(1)$ του σπιν του σωματιδίου 1 στην κατεύθυνση \hat{a} με $A(\hat{a}, \lambda) \hbar/2$ και εκείνο της μέτρησης της συνιστώσας $S_{\hat{b}}(2)$ του σπιν του σωματιδίου 2 στην κατεύθυνση \hat{b} με $B(\hat{b}, \lambda) \hbar/2$. Οι ποσότητες $A(\hat{a}, \lambda)$ και $B(\hat{b}, \lambda)$ μπορούν, προφανώς, να πάρουν μόνο τις τιμές ± 1 . Γράφοντας τις ποσότητες $A(\hat{a}, \lambda)$ και $B(\hat{b}, \lambda)$ με αυτόν τον τρόπο, έχουμε δεχθεί ότι η θεωρία είναι τοπική, γιατί το αποτέλεσμα της μέτρησης που γίνεται σε κάποιο σημείο για τον προσδιορισμό της συνιστώσας του σπιν του ενός σωματιδίου είναι ανεξάρτητο από την κατεύθυνση που έχουμε διαλέξει για τη μέτρηση της



συνιστώσας του σπιν του άλλου σωματιδίου σε κάποιο άλλο σημείο αρκετά μακριά από το πρώτο. Σε μια σειρά κοινών μετρήσεων, θα ενδιαφεροθούμε για την μέση τιμή $\frac{\hbar^2}{4} C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$, όπου τώρα ο συντελεστής συσχετισμού είναι

$$C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \int A(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) B(\hat{\mathbf{b}}, \lambda) p(\lambda) d\lambda \quad (\text{Π-III.25})$$

Να σημειώσουμε ότι στην περίπτωση που $\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{b}}$, έχουμε

$$A(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) = -B(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) \quad (\text{Π-III.26})$$

γιατί το συνολικό σπιν είναι μηδέν και, συνεπώς,

$$C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}) = C(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}) = -1 \quad (\text{Π-III.27})$$

Γενικότερα, το πρόβλημα του προσδιορισμού των ιδιοτήτων του συντελεστή συσχετισμού $C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ ανάγεται σε μια απλή μαθηματική άσκηση.

Ας θεωρήσουμε, πράγματι, μια κοινή μέτρηση της συνιστώσας του σπιν του σωματιδίου 1 κατά μήκος του $\hat{\mathbf{a}}$ και εκείνης του 2 κατά μήκος του $\hat{\mathbf{e}}$, όπου το $\hat{\mathbf{e}}$ παριστάνει διαφορετική κατεύθυνση από το $\hat{\mathbf{b}}$. Τότε, βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) - C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{e}}) &= \int [A(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) B(\hat{\mathbf{b}}, \lambda) - A(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) B(\hat{\mathbf{e}}, \lambda)] p(\lambda) d\lambda \\ &= - \int A(\hat{\mathbf{a}}, \lambda) A(\hat{\mathbf{b}}, \lambda) [1 + A(\hat{\mathbf{b}}, \lambda) B(\hat{\mathbf{e}}, \lambda)] p(\lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (\text{Π-III.28})$$

Από αυτήν παίρνουμε ότι

$$|C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) - C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{e}})| \leq \int [1 + A(\hat{\mathbf{b}}, \lambda) B(\hat{\mathbf{e}}, \lambda)] p(\lambda) d\lambda \quad (\text{Π-III.29})$$

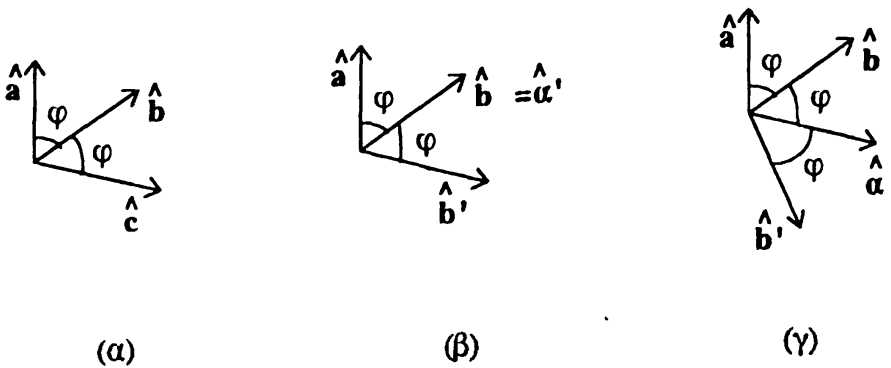
η οποία συνεπάγεται ότι

$$|C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) - C'(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{e}})| - C'(\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{e}}) \leq 1 \quad (\text{Π-III.30})$$

Η σχέση αυτή είναι ένα παράδειγμα από μια οικογένεια ανισοτήτων του Bell, που πρέπει να ικανοποιούνται από οποιαδήποτε τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών.

Στις ανισότητες Bell (όπως η Π-III.30, βλ. και παρακάτω) καταλήγουμε χωρίς να κάνουμε ουσιαστικά καμιά χρήση της κβαντικής μηχανικής, αλλά μόνο μερικές απλές παραδοχές, κυρίως την παραδοχή της τοπικότητας. Έτσι, δεν είναι προφανές αν η κβαντική μηχανική είναι συμβιβαστή ή όχι με αυτές. Δεν είναι, όμως, δύσκολο να ελέγξουμε την ανισότητα (Π-III.30) χρησιμοποιώντας τον κβαντομηχανικό συντελεστή συσχετισμού (Π-III.23) για επιλεγμένες κατευθύνσεις $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{b}}$ και $\hat{\mathbf{e}}$. Διαλέγουμε τις κατευθύνσεις $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{b}}$ και $\hat{\mathbf{e}}$ να είναι ομοεπίπεδες, όπως στο σχήμα Π-III.2(α). Τότε, για τον κβαντομηχανικό συντελεστή $C(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ (Π-III.23) η ανισότητα Bell (Π-III.30) ανάγεται στην





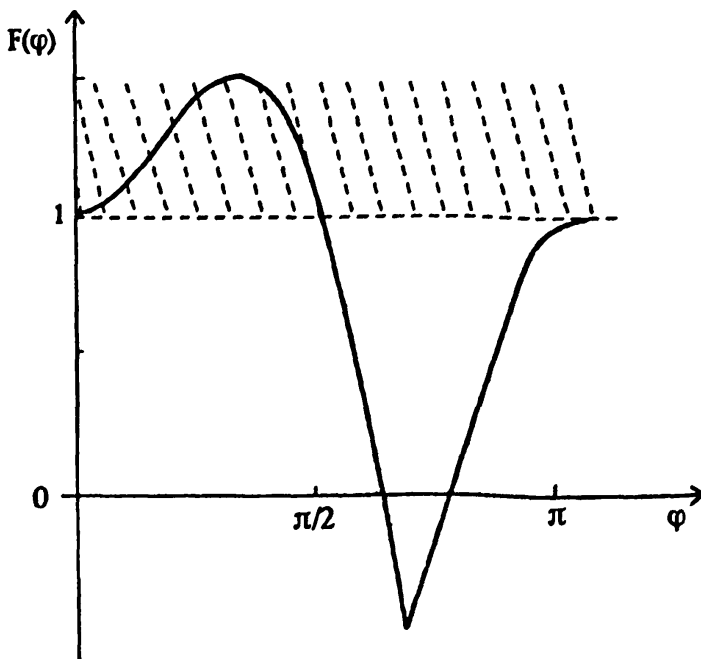
Σχ. Π-III.2. Ομοεπίπεδες κατευθύνσεις του σπιν για να ελεγχθούν οι ανισότητες Bell.

$$|C(\hat{a}, \hat{b}) - C(\hat{a}, \hat{e})| - C'(\hat{b}, \hat{e}) \leq 1 \quad (\text{Π-III.31})$$

ή

$$|- \cos \phi + \cos 2\phi| + \cos \phi \leq 1 \quad (\text{Π-III.32})$$

Η γραφική παράσταση της έκφρασης $F(\phi) = |- \cos \phi + \cos 2\phi| + \cos \phi$ συναρτήσει της γωνίας ϕ φαίνεται στο σχήμα Π-III.3. Είναι φανερό ότι η παραπάνω ανισότητα παραβιάζεται για ολόκληρη την περιοχή $0 \leq \phi \leq \pi/2$, με την μέγιστη παραβίαση να συμβαίνει για $\phi = \pi/3$, όπου το αριστερό μέλος της ανισότητας γίνεται $3/2$. Πρέπει να συμπεράνουμε, λοιπόν, ότι μια τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών δεν αναπαράγει τ' αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής, η οποία κατά συνέπεια θα πρέπει να βρίσκεται σε σύγκρουση με τουλάχιστον μία από τις παραδοχές που χρησιμοποιήθηκαν για να οδηγήσουν στις ανισότητες Bell.



Σχ. Π-III.3. Γραφική παράσταση για τον έλεγχο της ανισότητας Bell στην κβαντική μηχανική. Η ανισότητα παραβιάζεται για $0 \leq \phi \leq \pi/2$.

Βέβαια, το βασικό ερώτημα είναι αν οι συσχετισμοί που παρατηρούνται πειραματικά παραβιάζουν πράγματι τις ανισότητες του Bell για τις τοπικές θεωρίες κρυμμένων μεταβλητών. Τέτοια πειράματα, που κατέδειξαν πειστικά την παραβίαση των ανισοτήτων Bell, έγιναν πρώτα το 1982 από τον A. Aspect και τους συνεργάτες του. Αντί να χρησιμοποιήσουν σωματίδια με σπιν $1/2$, τα πειράματα μέτρησαν τις καταστάσεις πόλωσης ενός συστήματος δύο φωτονίων, στο οποίο τα φωτόνια διαδίδονται σε αντίθετες κατευθύνσεις. Όμοια επιχειρήματα με αυτά που εξετάσαμε ήδη ισχύουν και εδώ. Το αποτέλεσμα της μέτρησης της κατάστασης πόλωσης του ενός φωτονίου από έναν αναλυτή παράλληλο προς την κατεύθυνση \hat{a} συμβολίζεται πάλι με $A(\hat{a}, \lambda)$, ενώ $B(\hat{b}, \lambda)$ είναι η αντίστοιχη ποσότητα για το δεύτερο φωτόνιο, του οποίου η κατάσταση πόλωσης μετριέται από έναν δεύτερο αναλυτή παράλληλο προς την κατεύθυνση \hat{b} . Ο συντελεστής συσχετισμού δίνεται πάντα από την (Π-III.25) και οι τιμές που μπορεί να πάρουν τα $A(\hat{a}, \lambda)$, $B(\hat{b}, \lambda)$ είναι ± 1 . Από τις ανισότητες Bell, εκείνη που επιλέχθηκε να ελεγχθεί από την ομάδα του A. Aspect είναι αυτή που προκύπτει θεωρώντας δύο διαφορετικές κατευθύνσεις \hat{a} , \hat{a}' για το πρώτο όργανο και \hat{b} , \hat{b}' για το δεύτερο. Έχουμε, τότε, γενικά ότι

$$\begin{aligned} C'(\hat{a}, \hat{b}) - C'(\hat{a}, \hat{b}') &= \int [A(\hat{a}, \lambda) B(\hat{b}, \lambda) - A(\hat{a}, \lambda) B(\hat{b}', \lambda)] p(\lambda) d\lambda \\ &= \int A(\hat{a}, \lambda) B(\hat{b}, \lambda) [1 \pm A(\hat{a}', \lambda) B(\hat{b}', \lambda)] p(\lambda) d\lambda \\ &\quad - \int A(\hat{a}, \lambda) B(\hat{b}', \lambda) [1 \pm A(\hat{a}', \lambda) B(\hat{b}, \lambda)] p(\lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (\text{Π-III.33})$$

Συνεπώς, παίρνουμε

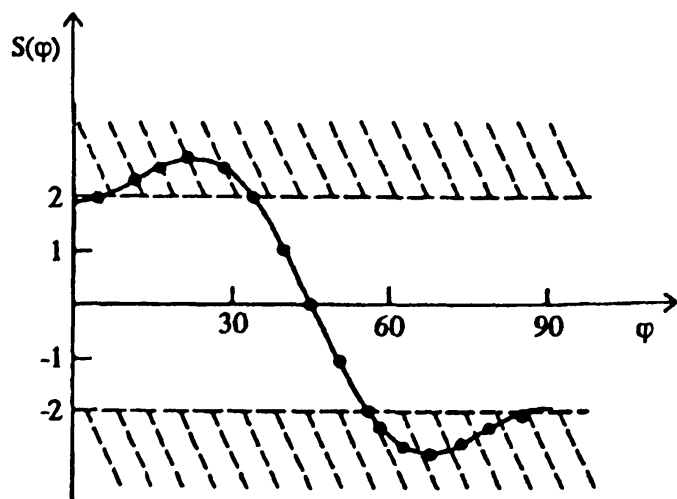
$$\begin{aligned} |C'(\hat{a}, \hat{b}) - C'(\hat{a}, \hat{b}')| &\leq \int [1 \pm A(\hat{a}', \lambda) B(\hat{b}', \lambda)] p(\lambda) d\lambda \\ &\quad + \int [1 \pm A(\hat{a}', \lambda) B(\hat{b}, \lambda)] p(\lambda) d\lambda \\ &= 2 \pm [C'(\hat{a}', \hat{b}') + C'(\hat{a}', \hat{b})] \end{aligned} \quad (\text{Π-III.34})$$

και από αυτήν συνάγουμε ότι

$$|C'(\hat{a}, \hat{b}) - C'(\hat{a}, \hat{b}')| + |C'(\hat{a}', \hat{b}') + C'(\hat{a}', \hat{b})| \leq 2 \quad (\text{Π-III.35})$$

Αυτή είναι η ανισότητα Bell που ελέγχθηκε από τον A. Aspect και την ομάδα του. Θα πρέπει ν' αναφέρουμε ότι χρησιμοποιώντας τον κβαντομηχανικό συντελεστή συσχετισμού (Π-III.23) για το σύστημα των δύο σωματιδίων με σπιν $\frac{1}{2}$ και τις κατευθύνσεις του σχήματος Π-III.2(β), προκύπτει από την ανισότητα (Π-III.35) η σχέση $|1 + 2\cos\phi - \cos 2\phi| \leq 2$, που έχει όμοια





Σχ. Π-III.4. Πειραματικά δεδομένα από την ομάδα A. Aspect για την συνάρτηση συσχετισμού $S(\phi)$, που δείχνουν την παραβίαση της ανισότητας του Bell.

γραφική παράσταση με εκείνη του σχήματος Π-III.3 και παραβιάζεται για $0 \leq \phi \leq \pi/2$. Στην περίπτωση του πειράματος με τα δύο φωτόνια, η ομάδα του A. Aspect επέλεξε τις κατευθύνσεις του σχήματος Π-III.2(γ) και οι πειραματικές τιμές που πήραν για το αριστερό μέλος $S(\phi)$ της σχέσης (Π-III.35) για γωνίες ϕ από 0 έως $\pi/2$ φαίνονται στο σχήμα Π-III.4. Στο ίδιο σχήμα φαίνεται η συνεχής γραμμή που παριστάνει την πρόβλεψη της κβαντικής μηχανικής για το αριστερό μέλος $S(\phi)$ της σχέσης (Π-III.35) συναρτήσει της γωνίας ϕ . Τα πειραματικά αποτελέσματα πράγματι παρουσιάζουν τις ανισότητες του Bell και βρίσκονται σε εξαιρετική συμφωνία με την κβαντική μηχανική. Μετέπειτα πειράματα, κυρίως το 1985 από τον W. Perrie και τους συνεργάτες του, έδειξαν επίσης ότι οι ανισότητες του Bell παραβιάζονται.

Συνοψίζοντας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι μια τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών είναι λανθασμένη και μια τέτοια θεωρία δεν μπορεί να βρῖσκει πίσω από την κβαντική μηχανική. Η βασική παραδοχή είναι η έννοια της τοπικότητας. Τα πειράματα διαψεύδουν παρόμοιες τοπικές "ρεαλιστικές" θεωρίες του τύπου των κρυμμένων μεταβλητών και επιβεβαιώνουν την μη τοπικότητα της κβαντικής μηχανικής. Βέβαια, θα μπορούσε παρ' όλα αυτά να υπάρχει μια μη τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών, όπου αυτές θα είχαν σχέση με την εκλογή της μέτρησης που θα κάναμε (βλ. και επόμενη παράγραφο §Π-III.4), αλλά κάτι τέτοιο οδηγεί σε άσκοπες περιπλοκές. Η απλούστερη ερμηνεία είναι ότι δεν κρύβεται μια παρόμοια, μη στατιστικού χαρακτήρα θεωρία πίσω από την κβαντική μηχανική, η μη τοπικότητα της οποίας επαληθεύεται από τα πειράματα παραβίασης των ανισοτήτων του Bell.



Π-III.4 Εννοιολογικά - ερμηνευτικά προβλήματα κβαντικής μηχανικής

Ας έρθουμε τώρα να κάνουμε μια σύντομη συνολική αποτίμηση των διαφόρων ερμηνειών - απαντήσεων που έχουν προταθεί στα ερωτήματα που θέτει η κβαντική μηχανική σε ότι αφορά τον φυσικό κόσμο. Δύο πράγματα πρέπει να τονίσουμε ευθύς εξ αρχής. Πρώτον, μια ερμηνεία της κβαντικής μηχανικής είναι ουσιαστικά απάντηση στο βασικό ερώτημα "τί πράγματι σημαίνει το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$;" . Δεύτερον, οι διάφορες ερμηνείες δεν μπορεί να διακριθούν μεταξύ τους με βάση επιστημονικά δεδομένα, τουλάχιστον μέχρι να προταθούν και να πραγματοποιηθούν σχετικοί πειραματικοί έλεγχοι. Όταν αυτό γίνει και θα έχουμε διαφορετικές πειραματικές συνέπειες, θα μπορούμε τότε να μιλήσουμε για διαφορετικές θεωρίες. Μέχρι τότε, οι διάφορες ερμηνείες μπορεί να συγκριθούν μόνο με βάση ορισμένα γενικά χαρακτηριστικά ως προς τη λογική συνέπεια των εξηγήσεων που δίνουν, έτσι ώστε αυτές να μπορούν ν' αποτελέσουν ικανοποιητικές απαντήσεις στα προβλήματα που εγείρονται. Μια τέτοια αντιμετώπιση, όμως, αναγκαστικά εισάγει μια φιλοσοφική θεώρηση στα ζητήματα που προκύπτουν. Έτσι, μεταξύ φυσικών και φιλοσόφων βρίσκει κανείς διάφορες στάσεις απέναντι στην καθιερωμένη θεωρία (που είναι συχνά γνωστή σαν "ερμηνεία της Κοπεγχάγης") και σε παραλλαγές πάνω σ' αυτήν.

Ας υπενθυμίσουμε το κεντρικό πρόβλημα στην κβαντική θεωρία μέτρησης σύμφωνα με την καθιερωμένη ερμηνεία. Οι Landau-Lifshitz στο βιβλίο τους "Quantum Mechanics" της γνωστής σειράς θεωρητικής φυσικής παρατηρούν: <<Σαν μέτρηση στην κβαντική μηχανική καταλαβαίνουμε μια οποιαδήποτε διαδικασία αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε κλασικά και κβαντικά αντικείμενα, που συμβαίνει ξέχωρα και ανεξάρτητα από οποιοδήποτε παρατηρητή. Τη σημασία της έννοιας της μέτρησης στην κβαντική μηχανική επεξεργάστηκε ο N. Bohr>>. Κατά την διάρκεια μιας τέτοιας αλληλεπίδρασης συμβαίνει μια ασυνεχής μεταβολή της κυματοσυνάρτησης, που περιγράφει το κβαντικό σύστημα, από μια αρχική σε μια τελική μορφή. Η τελική κατάσταση είναι μια ιδιοκατάσταση του φυσικού μεγέθους που μετρήθηκε, η ιδιοτιμή του οποίου αποτελεί ένα οριστικό γεγονός που καταγράφηκε κατά μη αντιστρεπτό τρόπο. Όπως πάλι παρατηρούν οι Landau-Lifshitz: <<Έτσι, η ακριβής φύση της διαδικασίας μέτρησης περιλαμβάνει μια αρχή μη αντιστρεψιμότητας που οδηγεί μακριά... αναγκάζει τις δύο κατευθύνσεις του χρόνου να είναι φυσικά μη ισοδύναμες, δηλαδή δημιουργεί μια διαφορά ανάμεσα στο μέλλον και το παρελθόν>>. Η ασυνεχής αυτή μεταβολή αναφέρεται με τον, μάλλον δραματικό, όρο "κατάρρευση (ή αναγωγή) της κυματοσυνάρτησης". Κάτι τέτοιο οδηγεί σε απώλεια, όπως λέμε, της "κβαντικής συνοχής" (δηλαδή της κβαντικής γραμμικής επαλληλίας) και εμπεριέχει την μη τοπικότητα των



"κβαντικών αλμάτων". Η απώλεια της κβαντικής συνοχής (decoherence) συμβαίνει, έτσι, σαν αποτέλεσμα των μη αντιτρεπτών διαδικασιών των κβαντικών μετρήσεων, δηλαδή των διαδικασιών αλληλεπίδρασης των κβαντικών αντικειμένων με τα κλασικά (περιβάλλον).

Μια πρώτη στάση απέναντι στην καθιερωμένη ερμηνεία της κβαντικής μηχανικής θα ήταν ν' αποδεχθεί κανείς τους κανόνες της για πρακτικούς σκοπούς, χωρίς να νοιάζεται για την απώτερη ερμηνεία. Άλλωστε, η εφαρμογή αυτών των κανόνων έχει οδηγήσει σε εξαιρετικά επιτυχείς πειραματικές προβλέψεις σ' ένα εντυπωσιακά θεαματικό εύρος περιοχών της φυσικής. Γι' αυτό αυτή η στάση είναι η πιο κοινή στην εργασία των φυσικών και έχει κανείς πολλούς λόγους να την συστήσει. Θα μπορούσαμε να την ονομάσουμε *πραγματιστική*, μια και αποτελεί ενσυνείδητα ή ασυνείδητα, σε κάποιο βαθμό, την εργασιακή φιλοσοφία για όλους όσους δουλεύουν με την κβαντική θεωρία. Παρ' όλα αυτά, είναι δίκαιο ν' αναγνωρίσουμε ότι το πρόβλημα του τί ακριβώς συνιστά μια κβαντική μέτρηση παραμένει ανοικτό. Έτσι, διατυπώθηκαν διάφορες απόψεις πάνω στη κβαντική μηχανική που φθάνουν από παραλλαγές - επανεκτιμήσεις μέχρι τροποποιήσεις. Ας δούμε τις κύριες τάσεις προς αυτές τις κατευθύνσεις.

A. Ερμηνευτικές παραλλαγές

α) Είναι αλήθεια ότι η κβαντική μηχανική απαιτεί για την διατύπωσή της "κλασικές έννοιες", έναν κλασικό κόσμο που επεμβαίνει στα κβαντικά συστήματα και στον οποίο λαμβάνουν χώρα οι πειραματικές διαδικασίες. Χρησιμοποιώντας πάλι τα λόγια των Landau - Lifshitz: <<Είναι κατ' αρχήν αδύνατο να διατυπώσουμε τις βασικές έννοιες της κβαντικής μηχανικής χωρίς να χρησιμοποιήσουμε την κλασική μηχανική... Έτσι, η κβαντική μηχανική κατέχει μια πολύ ασυνήθιστη θέση μεταξύ των φυσικών θεωριών: περιέχει την κλασική μηχανική σαν οριακή περίπτωση, όμως την ίδια στιγμή χρειάζεται αυτή την οριακή περίπτωση για την δική της διατύπωση>>.

Αυτό οδήγησε στην άποψη ότι το πρόβλημα της κβαντικής θεωρίας μέτρησης μπορεί να λυθεί αν δεχτούμε την τελείως διαφορετική υπόθεση ότι η κλασική μηχανική δεν είναι απλά μια οριακή περίπτωση της κβαντικής μηχανικής, αλλά μια ξεχωριστή ανεξάρτητη θεωρία, στην οποία τ' αποτελέσματα των μετρήσεων είναι πάντα οριστικά και αναμφίβολα ("κλασικές μετρήσεις"). Έτσι, τα κλασικά αντικείμενα (η συσκευή αντίχνευσης, η γάτα του Schrödinger, ο φίλος του Wigner κλπ.) υπακούουν σε διαφορετικούς φυσικούς νόμους από εκείνους που ακολουθούν τα κβαντικά αντικείμενα (μικροσκοπικά σωματίδια). Η "κατάρρευση ή αναγωγή της κυματοσυνάρτησης" αφορά στα τελευταία και συμβαίνει όταν αυτά αλληλεπιδρούν



με τα μακροσκοπικά αντικείμενα. Επειδή αυτή η αλληλεπίδραση δεν μπορεί ποτέ να περιγραφεί κβαντομηχανικά, τα προβλήματα που συζητήσαμε δεν ανακύπτουν.

Το κύριο μειονέκτημα μιας τέτοιας άποψης έχει να κάνει με το γεγονός ότι έτσι είμαστε αναγκασμένοι να δεχτούμε δύο διαφορετικές θεωρίες για την περιγραφή των υλικών αντικειμένων, ανάλογα με το μέγεθός τους. Μένουμε με αυτόν τον τρόπο προσκολλημένοι σε μια παλιά, δυϊστική άποψη για τον κόσμο. Έπειτα, υπάρχει η δυσκολία να διακρίνουμε πού ακριβώς υπάρχει η λεπτή διαχωριστική γραμμή ανάμεσα σε μακροσκοπικά και κβαντικά αντικείμενα.

Έχουμε, ήδη, συναντήσει φαινόμενα όπου η κβαντική συμπεριφορά σχετίζεται με τη συλλογική κίνηση σε τουλάχιστον μεσοσκοπικά συστήματα. Τέτοια είναι το κβαντικό φαινόμενο Hall (βλ. § 7.6) και η υπεραγωγιμότητα (βλ. § 8.4). Το φαινόμενο της υπεραγωγιμής κβαντικής συμβολής σε συσκευές SQUID με επαφές Josephson δείχνει ότι η κβαντική μηχανική εφαρμόζεται πράγματι σ' ένα μεσοσκοπικό σύστημα. Τα τελευταία χρόνια έχουν αναπτυχθεί παρόμοιου τύπου θεωρητικές και πειραματικές μελέτες, αλλά οριστικοί έλεγχοι μένει ακόμη να πραγματοποιηθούν, δεδομένων των τεχνικών δυσκολιών.

β) Αναφέραμε ήδη ότι μια μέτρηση στην κβαντική μηχανική αποτελεί μια διαδικασία αλληλεπίδρασης μεταξύ κλασικών και κβαντικών αντικειμένων <<πολλοί συμβαίνει ξέχωρα και ανεξάρτητα από οποιοδήποτε παρατηρητή>>. Αναφέρουν πάλι οι Landau-Lifshitz σε άλλο σημείο: <<Για μια ακόμη φορά τονίζουμε ότι, μιλώντας για την "εκτέλεση ενός πειράματος", αναφερόμαστε στην αλληλεπίδραση ενός ηλεκτρονίου με μια κλασική συσκευή, η οποία με κανένα τρόπο δεν προϋποθέτει την παρουσία ενός εξωτερικού παρατηρητή>>.

Όμως, μια άποψη που θέλει τον παρατηρητή αναπόσπαστο μέρος μιας διαδικασίας μέτρησης και που μπορεί, έτσι, να παρακάμψει τις δυσκολίες που σχετίζονται με αυτήν υποδείχθηκε πρώτα από τον Wigner και είναι γνωστή σαν "υποκειμενική ερμηνεία". Υποστηρίζει ότι όλα όσα ξέρουμε για τον φυσικό κόσμο είναι πληροφορίες που φθάνουν στον εγκέφαλό μας μέσα από τις αισθήσεις και καταγράφονται στη συνείδησή μας. Κατά συνέπεια, δέχεται ότι η "κατάρρευση ή αναγωγή της κυματοσυνάρτησης" συμβαίνει όταν η αντίστοιχη πληροφορία εισέρχεται και γίνεται κτήμα της συνείδησης ενός παρατηρητή. Έτσι, κυματοσυναρτήσεις όπως οι (Π-III.17), (Π-III.19), (Π-III.20) περιγράφουν τις αντίστοιχες καταστάσεις, μέχρις ότου κάποιος ανοίξει το κουτί και η πληροφορία για το τί συμβαίνει εκεί μεταφερθεί και καταγραφεί στη συνείδησή του. Τότε μόνο συμβαίνει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης".

Αυτή η ερμηνεία μπορεί να γίνει συνεπής με τα παρατηρούμενα γεγονότα και για κάποιους φυσικούς επιστήμονες και φιλοσόφους μπορεί ν' αποτελέσει την μόνη ικανοποιητική εξήγηση. Όμως, γενικά θεωρείται σαν μη ικανοποιητική για



μια σειρά από λόγους. Πρώτα, ξεχωρίζει την ανθρώπινη συνείδηση από τον υπόλοιπο φυσικό υλικό κόσμο (συμπεριλαμβανομένου του εγκεφάλου μας). Αν και ορισμένοι δέχονται κάτι τέτοιο (θα επανέλθουμε παρακάτω), φαίνεται δύσκολο να πιστέψουμε ότι η όλη ύπαρξη του φυσικού κόσμου εξαρτάται από υποκειμενικούς όρους. Θα πρέπει να είναι δυνατόν να περιγράψουμε τον φυσικό κόσμο με αντικειμενικό τρόπο ανεξάρτητα από την ύπαρξή μας ή την αλληλεπίδρασή μας με τη φύση. Ακριβώς επειδή μεταθέτει το πρόβλημα σε μια απρόσιτη ακόμη περιοχή (εκείνη της ανθρώπινης συνείδησης), η όλη φυσική επιστήμη φαίνεται να χάνει οποιαδήποτε αντικειμενική σημασία. Έπειτα, αν δεν δεχτούμε την ύπαρξη ενός αντικειμενικού φυσικού κόσμου, είναι δύσκολο να εξηγήσει κανείς με ποιο τρόπο διαφορετικές "συνειδήσεις" φθάνουν γενικά στα ίδια συμπεράσματα σε ότι αφορά τ' αποτελέσματα των φυσικών διαδικασιών (κβαντικής και κλασικής φυσικής).

γ) Είδαμε ότι κεντρική ιδέα στις κβαντικές μετρήσεις είναι η μη αντιστρεψιμότητα των αλλαγών που επιφέρουν. Η ερμηνεία που δόθηκε για πρώτη φορά από τον H. Everett το 1957 υποστηρίζει ότι υπάρχει μια συνολική κυματοσυνάρτηση που περιγράφει τόσο τα μακροσκοπικά συστήματα (παρατηρητές), όσο και τα μικροσκοπικά συστήματα (κβαντικά αντικείμενα) ενός συνολικού κόσμου. Μια μέτρηση είναι μια αλληλεπίδραση ανάμεσα σε διαφορετικά μέρη του κόσμου και η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να προβλέπει τί "βλέπει" ένα μέρος του κόσμου όταν παρατηρεί κάποιο άλλο. Κατά συνέπεια, δεν υπάρχει "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης" σ' αυτή την εικόνα, παρά μόνο ομαλή ντετερμινιστική εξέλιξη που περιγράφεται από την εξίσωση Schrödinger. Όλα τ' αποτελέσματα μιας μέτρησης συμβαίνουν με τον ίδιο ντετερμινιστικό τρόπο, απλά η μέτρηση αναγκάζει την ιστορία του κόσμου ν' αποκλίνει ή να διαιρείται σ' ένα μεγάλο αριθμό "αντιγράφων" του, σε καθένα από τα οποία αντιστοιχεί ένα απ' όλα τα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης και τα οποία "αντίγραφα" δεν αλληλεπιδρούν ή επικοινωνούν μεταξύ τους. Γι' αυτό, αυτή η εικόνα ονομάστηκε "ερμηνεία πολλών κόσμων".

Η "ερμηνεία πολλών κόσμων" φαίνεται ν' αντιμετωπίζει τα προβλήματα της κβαντικής θεωρίας μέτρησης, αλλά αυτό το κάνει μ' ένα φανερά μη οικονομικό τρόπο. Παραβιάζει, έτσι, ένα βασικό επιστημονικό αξίωμα με βάση το οποίο μια θεωρία δεν πρέπει να περιέχει περισσότερες υποθέσεις από αυτές που είναι αναγκαίες για να εξηγήσει τα δεδομένα. Η ιδέα ενός μεγάλου (άπειρου) αριθμού κόσμων δεν μπορεί ποτέ ν' αποδειχθεί, μια και αυτοί δεν επικοινωνούν μεταξύ τους.

Σε κάθε περίπτωση, πάντως, το ερώτημα παραμένει: πώς μπορεί κανείς να εξηγήσει τους κανόνες της κβαντικής μηχανικής για τον υπολογισμό των πιθανοτήτων γι' αυτές τις διαφορετικές "ιστορίες" του κόσμου, ξεκινώντας από έναν κόσμο που διέπεται από την πλήρως αιτιοκρατική εξίσωση Schrödinger;



Μια εικόνα που προτάθηκε είναι ο συνδυασμός της "ερμηνείας πολλών κόσμων" με την "υποκειμενική ερμηνεία". Σύμφωνα με αυτήν, εμείς οι παρατηρητές αποκτούμε συνείδηση μόνον ενός αποτελέσματος από μια διαδικασία μέτρησης και, αν και τ' άλλα υπάρχουν, δεν αποκτούμε ποτέ γνώση τους. Πέρα από τ' άλλα, το πρόσθετο πρόβλημα της "υποκειμενικής ερμηνείας", το πως δηλαδή διαφορετικοί παρατηρητές αποκτούν πάντα συνείδηση των ίδιων αποτελεσμάτων, υπάρχει και εδώ (εκτός εάν υποθέσουμε την παρουσία μιας "παγκόσμιας συνείδησης", που συνδέει τις ατομικές συνειδήσεις).

Τα τελευταία χρόνια η "ερμηνεία πολλών κόσμων" προσήλκυσε το ενδιαφέρον αυτών που ασχολούνται με την λεγόμενη "κβαντική κοσμολογία", την εφαρμογή της κβαντικής μηχανικής σε ολόκληρο το σύμπαν. Όπως η κβαντική μηχανική, έτσι και η κβαντική κοσμολογία προσπαθεί να περιγράψει ένα σύστημα κατά θεμελιώδη τρόπο συναρτήσει της κυματοσυνάρτησής του. Μπορεί κανείς να βρει την κυματοσυνάρτηση του σύμπαντος λύνοντας την λεγόμενη εξίσωση Wheeler- De Witt, που είναι το κοσμολογικό ανάλογο της (ανεξάρτητης από το χρόνο) εξίσωσης Schrödinger. Στις πιο απλές περιπτώσεις, η χωρική διάσταση του σύμπαντος είναι το ανάλογο της θέσης και ο ρυθμός διαστολής του σύμπαντος παριστάνει την ορμή. Χρειάζονται κάποιες αρχικές συνθήκες για να επιλέξει κανείς την κυματοσυνάρτηση του σύμπαντος από τις πολλές λύσεις της εξίσωσης Wheeler- De Witt. Πάντως, σε κάθε πρόταση για την επιλογή της μοναδικής κυματοσυνάρτησης του σύμπαντος, υπάρχουν τεχνικές δυσκολίες που ρίχνουν αμφιβολία στον τρόπο υπολογισμού. Ακόμη, είναι εξαιρετικά δύσκολο (αν όχι αδύνατο) να επαληθεύσουμε τις προτάσεις της κβαντικής κοσμολογίας σε ότι αφορά την παρατήρηση κάποιου φαινομένου το οποίο να παρήχθη στις αρχές του σύμπαντος. Το μεγάλο πρόβλημα, βέβαια, παραμένει για το πώς να ερμηνεύσουμε μια τέτοια κυματοσυνάρτηση για ολόκληρο το σύμπαν.

Η "ερμηνεία πολλών κόσμων" της κβαντικής μηχανικής παραμένει δημοφιλής και σε όσους ασχολούνται με την σύγχρονη επαναστατική τεχνολογική πρόταση των κλάδων της "νανοτεχνολογίας" και των "κβαντικών υπολογιστών". Η νανοτεχνολογία φιλοδοξεί να χειριστεί μεμονωμένα κβαντικά αντικείμενα ("κβαντικές τελείες"), τα οποία θα μπορεί ν' αναγκάζει (π.χ. με λέιζερ) να μεταπίπτουν από μια αρχική ενεργειακή κατάσταση σ' ένα μεγάλο αριθμό "παράλληλων" ενεργειακών καταστάσεων την ίδια χρονική στιγμή. Από την άλλη μεριά, ενώ ένας συνήθης υπολογιστής χρησιμοποιεί σαν ενδεχόμενα μόνο το μηδέν και το ένα, αντίθετα εάν θα μπορούσε να κατασκευαστεί ένας κβαντικός υπολογιστής που θα υπολόγιζε κάνοντας χρήση του ενδεχομένου ενός μεγάλου αριθμού "παράλληλων" συνυπαρχουσών ενεργειακών καταστάσεων, είναι φανερό ότι θα ήταν ένας απίστευτα δυνατός υπολογιστής. Βέβαια, για πολλούς λόγους υπάρχει σκεπτικισμός αν μια τέτοια θεωρητική σύλληψη μπορεί να υλοποιηθεί.



Πάντως η έρευνα πάνω στην κβαντική υπολογιστική και πληροφορική θεωρία είναι εξαιρετικά ενδιαφέροντα και επίκαιρα.

Σε μια άλλη κατεύθυνση, φαίνεται να υπάρχουν ενδείξεις ότι ο εγκέφαλος μας, μέσω ορισμένων μικροσωλήνων που φτιάχνουν το κυτταροσκελετικό πλέγμα ενός κυττάρου του, λειτουργεί μ' έναν παρόμοιο τρόπο (ανοίγοντας έτσι ένα παράθυρο για το πως μπορεί να "δημιουργείται" η ανθρώπινη συνείδηση, της οποίας άλλωστε γίνεται επίκληση στην "υποκειμενική ερμηνεία" της κβαντικής μηχανικής!).

Β. Τροποποιήσεις.

Όλες οι παραπάνω εικόνες προσπαθούν να ερμηνεύσουν παρά να τροποποιήσουν την κβαντική μηχανική. Όμως, έχουν διατυπωθεί και εξακολουθούν να διατυπώνονται προτάσεις που επιδιώκουν είτε να τροποποιήσουν την κβαντική μηχανική κατά έναν οιονδήποτε τρόπο, είτε να εισάγουν επιπρόσθετες θεωρήσεις.

α) Τα πειράματα που είδαμε στην § Π- Π.3 αποκλείουν τοπικές θεωρίες κρυμμένων μεταβλητών, αλλά δεν εξαιρούν μη τοπικές θεωρίες κρυμμένων μεταβλητών, όπως σημειώσαμε. Η πιο συζητημένη θεωρία είναι αυτή που είναι γνωστή σαν "εικόνα κύματος- πιλότου". Οφείλεται αρχικά στον de Broglie, αλλά παρουσιάστηκε συστηματικά από τον D.Bohm μετά το 1952. Ουσιαστικά, το ερώτημα "σωματίδιο" ή "κύμα" που ενυπάρχει στην αρχή της συμπληρωματικότητας, αντικαθίσταται από την απάντηση "σωματίδιο" και "κύμα", που φαίνεται να χρησιμοποιείται ούτως ή άλλως και από την αρχή της συμπληρωματικότητας. Όμως, σ' αυτή την εικόνα η κίνηση ενός σωματιδίου, που περνάει παραδείγματος χάρη μέσα από την μία οπή στο πείραμα δύο οπών, επηρεάζεται από κύματα που διαδίδονται μέσα και από τις δύο οπές. Το σωματίδιο κατέχει μια πραγματική θέση και ταχύτητα, αλλά ένα υλικό κύμα επίσης υπάρχει και δρα σαν οδηγός στην κίνηση του σωματιδίου με τέτοιο τρόπο που οι στατιστικές ιδιότητες είναι ακριβώς εκείνες που προβλέπονται από την κβαντική μηχανική. Μια τέτοια μη τοπική θεωρία κρυμμένων μεταβλητών (η κρυμμένη μεταβλητή παίρνει τον χαρακτήρα ενός "κβαντικού δυναμικού" σ' αυτή την περίπτωση) μπορεί και αναπαράγει τ' αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής σε πολλές περιπτώσεις (βλ. π.χ. το βιβλίο "The undivided universe: An ontological interpretation of quantum mechanics" των D.Bohm- B.J.Hiley), αλλά αυτό γίνεται μ' ένα καταφανώς περίπλοκο, μη οικονομικό τρόπο, που παραβιάζει το ήδη αναφερθέν επιστημονικό αξίωμα ότι μια θεωρία δεν πρέπει να περιέχει υποθέσεις πέρα από αυτές που είναι αναγκαίες για την εξήγηση των πειραματικών δεδομένων.

β) Είδαμε ότι μια κβαντική μέτρηση εισάγει μια μη αντιστρεψιμότητα, δηλαδή ένα μικροσκοπικό "βέλος του χρόνου" που δημιουργεί μια διαφορά ανάμεσα στο



μέλλον και το παρελθόν, με συνέπεια την "κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης". Μια αντίρρηση σ' αυτή την εικόνα της μη αντιστρεψιμότητας συνίσταται στο γεγονός ότι αποτελεί ένα στατιστικό μόνο αποτέλεσμα, που δεν μας λέει τίποτα για το σε ποιά κατάσταση πράγματι θα βρεθεί το κβαντικό σύστημα, χωρίς κάποια πρόσθετη παραδοχή. Μια πρόταση που επιχειρεί να δώσει απάντηση στο πρόβλημα της αντιστρεψιμότητας προτάθηκε από τον I. Prigogine και τους συνεργάτες του. Ο Prigogine έχει αναπτύξει μαθηματικά μοντέλα για κβαντικά στατιστικά συστήματα εκτός ισορροπίας. Το έργο του έχει μεταξύ άλλων απ' ευθείας σχέση όχι μόνο με το πρόβλημα της κβαντικής μέτρησης, αλλά και με την προέλευση και εξέλιξη της ζωής. Υποδεικνύει ότι η μη αντιστρεψιμότητα ("βέλος του χρόνου") πρέπει να ενσωματωθεί στους θεμελιώδεις φυσικούς νόμους μέσα από την χαοτική συμπεριφορά οποιουδήποτε ρεαλιστικού πολύπλοκου συστήματος. Τέτοια συστήματα χαρακτηρίζονται σαν "μη ολοκληρώσιμα", ενώ οι συνήθεις νόμοι κλασικής και κβαντικής μηχανικής αποτελούν προσεγγίσεις κατάλληλες για ένα μικρό αριθμό σωματιδίων απομονωμένων από το υπόλοιπο σύμπαν. Η "μη ολοκληρωσιμότητα" κάνει τις πιθανότητες αντιστρεπτών μεταβολών μηδενικές και, έτσι, αποδίδει στο χρόνο ένα "βέλος" (σχετιζόμενο με την αύξηση της εντροπίας). Για να γίνει πάντως αποδεκτή μια τέτοια ιδέα, θα πρέπει να προταθούν και να πραγματοποιηθούν κάποιοι απ' ευθείας πειραματικοί έλεγχοί της.

Γ. Κβαντική μηχανική και σχετικότητα.

Όπως σημειώσαμε κατά την συζήτηση του "παράδοξου" των Einstein-Podolsky-Rosen, η μη τοπικότητα της κβαντικής μηχανικής δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να σταλούν μηνύματα με ταχύτητες μεγαλύτερες από την ταχύτητα του φωτός. Όμως, αυτό δεν φαίνεται να εξαντλεί τις απαιτήσεις της ειδικής σχετικότητας. Στην πραγματικότητα, ποια μέτρηση θα γίνει πρώτα και τί εικόνα της φυσικής πραγματικότητας θα πάρουμε εξαρτάται από τον παρατηρητή. Έτσι, φαίνεται να υπάρχει μια ουσιαστική σύγκρουση ανάμεσα στη χωροχρονική εικόνα της φυσικής πραγματικότητας, όπως αυτή εκδηλώνεται στη μη τοπικότητα της κβαντικής φυσικής, και την ειδική σχετικότητα. Η σχετικιστική κβαντική μηχανική δεν είναι ο σωστός δρόμος αντιμετώπισης κβαντικής μηχανικής και ειδικής σχετικότητας. Άλλωστε, μόνο οι ιδιότητες του σπιν και της πόλωσης χρησιμοποιούνται σε διατάξεις συζήτησης του "παράδοξου EPR" και της παραβίασης των ανισοτήτων του Bell και αυτές είναι ουσιαστικά ταυτόσημες τόσο στην μη σχετικιστική, όσο και στη σχετικιστική κβαντική μηχανική. Ο σωστός δρόμος ενοποίησης είναι στο πλαίσιο μιας κβαντικής θεωρίας πεδίου. Μια κβαντική θεωρία πεδίου είναι μια θεωρία στην οποία τα θεμελιώδη συστατικά είναι τα κβαντικά πεδία, τα οποία, αν και σε απουσία αλληλεπιδράσεων, υπακούουν σε σχετικιστικές κυματικές εξισώσεις, δεν είναι κυματοσυναρτήσεις και

δεν έχουν απ' ευθείας πιθανοκρατική ερμηνεία. Είναι απλά συστατικά μιας δυναμικής θεωρίας που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των στοιχείων του πίνακα S (βλ. κεφάλαιο XI, §11.6) και αυτά είναι που έχουν πράγματι πιθανοκρατική ερμηνεία. Σε μια κβαντική θεωρία πεδίου, τα σωματίδια είναι "πακέτα" ενέργειας και ορμής των πεδίων και, μ' αυτό τον τρόπο, έχει κανείς μια πιο ενοποιημένη εικόνα της φύσης από την παλιά δυϊστική αντίληψη περί σωματιδίων και κυμάτων.

Όμως, δεν τελειώσαμε με τη σχετικότητα. Εκτός από την ειδική, πρέπει να λάβουμε υπ' όψη μας και την γενική θεωρία της σχετικότητας, που αποτελεί την σύγχρονη θεωρία για την βαρύτητα. Η γενική θεωρία της σχετικότητας, όπως άλλωστε και η κβαντική μηχανική που αποτέλεσε το αντικείμενο αυτού του βιβλίου, έχει δοκιμαστεί και επιβεβαιωθεί σ' εξίσου εκπληκτικό βαθμό από λεπτομερείς αστρονομικές μετρήσεις (κυριότερη είναι αυτή που αφορά στους δυαδικούς πάλσαρς, ζευγάρια αστέρων νετρονίων που ο καθένας του περιφέρεται γύρω από τον άλλον, και όπου η πρόβλεψη της γενικής σχετικότητας για την μείωση της περιόδου περιφοράς, λόγω απώλειας ενέργειας συνεπεία εκπομπής βαρυτικών κυμάτων, έχει επιβεβαιωθεί με εκπληκτική ακρίβεια). Αν και η βαρύτητα παίζει αμελητέο ρόλο σε θέματα κβαντικής μηχανικής (βλ., όμως, τις §3.5 και §7.7), δεν μπορεί κανείς ν' αποφύγει την ενοποίηση της γενικής σχετικότητας με την κβαντική μηχανική (ακριβέστερα με την κβαντική θεωρία πεδίου). Αυτό γίνεται αναγκαίο σε μια σειρά περιπτώσεων, όπου τα βαρυτικά πεδία γίνονται εξαιρετικά ισχυρά, όπως στη γειτονιά μιας μαύρης οπής και στο πολύ πρώιμο σύμπαν στη θεωρία της μεγάλης έκρηξης. Αυτή όμως η ενοποίηση, με άλλα λόγια η διατύπωση μιας κβαντικής θεωρίας για τη βαρύτητα, αποδείχθηκε μέχρι τώρα εξαιρετικά προβληματική. Ο λόγος είναι κατ' αρχήν τεχνικός: ορισμένοι απειρισμοί που εμφανίζονται σε μια κβαντική θεωρία πεδίου αφαιρούνται ή αναβαθμίζονται με την διαδικασία της λεγόμενης "επανακανονικοποίησης", κάτι τέτοιο όμως δεν είναι άμεσα δυνατό να γίνει σε μια κβαντική θεωρία βαρύτητας, κυρίως λόγω της μη γραμμικότητας της τελευταίας σε αντίθεση με την γραμμικότητα της κβαντικής θεωρίας. Όμως υπάρχουν και εννοιολογικά εμπόδια: η γενική σχετικότητα περιγράφει την βαρύτητα σαν μια καμπύλωση του τετραδιάστατου χωρόχρονου και η εφαρμογή της κβαντικής θεωρίας στην βαρύτητα δημιουργεί εξ αυτού προβλήματα, π.χ. πώς θα μεταφερθεί η αρχή της αβεβαιότητας στον ίδιο τον χωρόχρονο.

Εδώ ακριβώς εμφανίζεται το "μεγάλο" πρόβλημα και αρχίζουν να δυϊστανται οι απόψεις. Υπάρχουν φυσικοί, όπως ο S.Hawking, που ασπάζονται τη θετικιστική άποψη και δέχονται την κβαντική θεωρία όπως διατυπώνεται σήμερα προσπαθώντας να την επεκτείνουν στη μελέτη περιπτώσεων όπου αναμένεται ότι εκδηλώνονται φαινόμενα κβαντικής βαρύτητας. Παραδείγματος χάρη, είναι γνωστή



η αξιοσημείωτη σχέση που υπάρχει ανάμεσα στους νόμους της μηχανικής μιας μαύρης οπής και στους συνηθισμένους νόμους της θερμοδυναμικής. Έτσι, η εφαρμογή της κβαντικής θεωρίας στις μαύρες οπές οδηγεί σε "θερμική ακτινοβολία" ("ακτινοβολία Hawking") και είναι αυτό που σύμφωνα με αυτή την άποψη οδηγεί στην απώλεια "πληροφορίας" και "κβαντικής συνοχής". Από την άλλη μεριά, υπάρχουν φυσικοί, όπως ο R. Penrose, που πιστεύουν ότι η κβαντική θεωρία είναι ελλιπής και εκδηλώσεις μιας συνεπούς κβαντικής θεωρίας βαρύτητας παρέχουν τον ελλείποντα κρίκο για μια σύντηξη γενικής σχετικότητας και κβαντικής θεωρίας. Αυτός ο ελλείπων κρίκος είναι που οδηγεί σε φαινόμενα όπως η "κατάρρευση (ή αναγωγή) της κυματοσυνάρτησης". Εάν μια τέτοια συνθήκη μπορεί να πραγματοποιηθεί μέσα στο πλαίσιο κάποιας ενδεχόμενης γενικότερης θεωρίας (όπως π.χ. η θεωρία χορδών ή κάποια άλλη πολυδιάστατη θεώρηση) μένει να δειχθεί. Το κύριο ερώτημα, βέβαια, που συνδέεται με όλα τα παραπάνω έχει να κάνει με το πού υπάρχει το λεπτό όριο μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής και πώς και πότε συμβαίνει η μετάβαση από την μία στην άλλη. Το ερώτημα αυτό θα χρειαστεί πολύ καιρό για ν' απαντηθεί και, ασφαλώς, όχι χωρίς πειραματικές ενδείξεις (ο αναγνώστης μπορεί να διαβάσει το σχετικό άρθρο των Max Tegmark and John A. Wheeler "Quantum Mysteries, 100 Years of", Scientific American, February 2001, p.54).

Είναι γεγονός ότι η κβαντική μηχανική δεν έπαψε ποτέ να προσκρούει σε προκαταλήψεις και να εγείρει διαλεκτικές συζητήσεις. Τα "μεγάλα" προβλήματα που συνδέονται άμεσα ή έμμεσα με την κβαντική θεωρία παραμένουν ανοικτά και θ' αποτελέσουν αναμφίβολα αντικείμενο του 21ου αιώνα.



ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΕΛΛΗΝΙΚΗ**

- Γ. Ανδριτσόπουλου, Εισαγωγή στη κβαντομηχανική
(Παπασωτηρίου 1995)
- Γ. Γούναρη, Κβαντική Μηχανική
(Θεσσαλονίκη 1980)
- Σ.Ν. Ευαγγέλου, Κβαντική Φυσική
(Ιωάννινα 2001)
- Ε. Μάνεση, Εισαγωγή στην Κβαντική Θεωρία Πολλών Βαθμών Ελευθερίας
(Ιωάννινα 1996)
- Κ. Ταμβάκη, Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική
(Ιωάννινα 2000)
- Σ.Τραχανά, Κβαντομηχανική I,II,III
(Π.Ε.Κ. 1988)

ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΟΥ ΚΑΙ ΜΕΣΟΥ ΕΠΙΠΕΔΟΥ

- J.-L. Basdevant, *Mecanique Quantique*
(Ecole Polytechnique 1986)
- H.A.Bethe - R.Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*
(Benjamin 1968)
- B.H. Bransden - C.J. Joachain, *Introduction to Quantum Mechanics*
(Longman 1989)
- M. Chester, *Primer of Quantum Mechanics* (Wiley 1987)



- C. Cohen - Tannoudji - B. Diu - F. Laloë, Quantum Mechanics I, II
(Hermann and Wiley 1977)
- A. Das - A.C. Melissinos, Quantum Mechanics , A Modern Introduction
(Gordon and Breach 1986)
- P.C.W. Davies - D.S. Betts, Quantum Mechanics
(Chapman & Hall 1994)
- R.H. Dicke - J.P. Wittke, Introduction to Quantum Mechanics
(Addison - Wesley 1960)
- R. Feynman - R.B.Leighton - M.Sands, The Feynman lectures on Physics III
(Addison - Wesley 1965)
- A.French, An Introduction to Quantum Mechanics
(Norton 1978)
- S.Gasiorowitz, Quantum Physics
(Wiley 1996)
- W.Greiner, Quantum Mechanics : An Introduction
(Springer 2001)
- D. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics
(Prentice - Hall, 1995)
- F.S. Levin, An Introduction to Quantum Theory
(Cambridge U.Press, 2002)
- A.I.M.Rae, Quantum Mechanics
(Adam Hilger, 1992)
- R.W. Robinett, Quantum Mechanics
(Oxford Univ. Press, 1997)

ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΟΥ ΕΠΙΠΕΔΟΥ

- L.E. Ballentine, Quantum Mechanics
(Prentice Hall 1990)
- G.Baym, Lectures on Quantum Mechanics
(Benjamin 1969)
- P.A.M.Dirac, The Principles of Quantum Mechanics
(Oxford Univ. Press 1967)
- A. Galindo - P. Pascual, Quantum Mechanics I, II
(Springer - Verlag 1990)
- L.Landau - E. Lifshitz, Quantum Mechanics



(Pergamon Press 1977)

E.Merzbacher, Quantum Mechanics

(Wiley 1970)

A.Messiah, Quantum Mechanics I,II

(North Holland 1965)

P.J.E. Peebles, Quantum Mechanics

(Princeton Univ. Press 1992)

J.J.Sakurai, Modern Quantum Mechanics

(Benjamin 1994)

L. Schiff, Quantum Mechnics

(Mc Graw-Hill 1968)

ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

F. Constantinescu and E. Magyari, Problems in Quantum Mechanics

(Pergamon Press, 1976)

G.L. Squires, Problems in Quantum Mechanics

(Cambridge Univ. Press, 1995)

Yung-Kuo Lim, Problems and Solutions on Quantum Mechanics

(World Scientific, 1998)

Σ. Τραχανά, Προβλήματα Κβαντομηχανικής

(Π.Ε.Κ., 2002)

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

ΕΛΛΗΝΙΚΗ

I. Βέργαδου, Μαθηματικές Μέθοδοι Φυσικής I,II

(Αθήνα 1992)

Σ. Τραχανά, Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις

Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις

Mathematica και Εφαρμογές

(Π.Ε.Κ. 2001)

ΔΙΕΘΝΗΣ

M. Abramowitz - I.Stegun, Handbook of Mathematical Functions

(National Bureau of Standards 1964)



- G. Arfken and H. Weber, **Mathematical Methods for Physicists**
(Academic Press 1995)
- M.L. Boas, **Mathematical Methods in the Physical Sciences**
(Wiley 1984)
- W. Boyce-R. Di Prima, **Introduction to Differential Equations**
(Wiley 1970)
- P. Dennery-A. Krzywicki, **Mathematics for Physicists**
(Harper and Row 1967)
- I. Gradshteyn-I. M. Ryzhik, **Tables of Integrales, Series and Products**
(Academic Press 1965)
- J. D. Jackson, **Mathematics for Quantum Mechanics**
(Benjamin 1962)
- J. Mathews-R. L. Walker, **Mathematical Methods of Physics**
(Benjamin 1970)

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ

- S. Brandt-H. D. Dahmen, **The Picture Book of Quantum Mechanics**
(Springer 2001)
- Quantum Mechanics on the Personal Computer**
(Springer 1994)
- Quantum Mechanics on the Mcintosh**
(Springer 1995)
- R.G. Greenhow, **Introductory Quantum Mechanics, A Computer Illustated Text**
(Adam Hilger 1990)
- J. Hiller - J. Johnston - D. Styer, **Quantum Mechanics Simulations**
(Wiley 1995)
- M.A. Nielsen-I.L.Chuang, **Quantum Computation and Quantum Information**
(Cambridge Univ Press 2002)



**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ ΜΕΤΡΗΣΗΣ ΚΑΙ
ΕΝΝΟΙΟΛΟΓΙΚΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ**

- J.S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*
(Cambridge Univ. Press 1987)
- D. Bohm - B.J. Hiley, *The Undivided Universe, An Ontological Interpretation of Quantum Theory*
(Routledge 1993)
- B. d' Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*
(Addison - Wesley 1989)
Veiled Reality
(Addison - Wesley 1995)
- S. Hawking - R. Penrose, *The nature of space and time*
(Princeton Univ. Press 1996, ελληνική έκδοση Γκοβόστης 1996)
- R. Omnès, *The interpretation of Quantum Mechanics*
(Princeton Univ. Press, 1994)
- R. Penrose, *The Emperor's new mind*
(Oxford Univ. Press 1989, ελληνική έκδοση Γκοβόστης 1994)
Shadows of the Mind
(Oxford Univ. Press 1994, ελληνική έκδοση Γκοβόστης 1997)
- I. Prigogine, *From being to becoming*
(Freeman 1980)
La Fin des Certitudes
(Editions O. Jacob, 1996, ελληνική έκδοση Κάτοπτρο 1997)
- A.I.M.Rae, *Quantum Physics, Illusion or reality*
(Cambridge Univ. Press 1986, ελληνική έκδοση Κάτοπτρο 1988)
- J.A. Wheeler - W.H. Zurek (eds), *Quantum Theory and Measurement*
(Princeton Univ. Press 1983).



ΦΥΣΙΚΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ

Ταχύτητα φωτός	$c = 2.997 \times 10^8 \text{ msec}^{-1}$
Σταθερά Planck	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J sec}$ $= 6.582 \times 10^{-22} \text{ MeV sec}$
Μέτρο φορτίου ηλεκτρονίου	$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} = 4.803 \times 10^{-10} \text{ esu}$
Μάζα ηλεκτρονίου	$m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Μάζα πρωτονίου	$m_p = 938.272 \text{ MeV}/c^2 = 1.672 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Σταθερά λεπτής υφής	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137.036$
Κλασική ακτίνα ηλεκτρονίου	$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.818 \times 10^{-15} \text{ m}$
Μήκος κύματος Compton ηλεκτρονίου	$\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e c} = r_e \alpha^{-1} = 3.861 \times 10^{-13} \text{ m}$
Ακτίνα Bohr	$\alpha_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = r_e \alpha^{-2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$
Μαγνητόνη Bohr	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 5.788 \times 10^{-11} \text{ MeV T}^{-1}$
Πυρηνική μαγνητόνη	$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 3.152 \times 10^{-14} \text{ MeV T}^{-1}$
Βαρυτική σταθερά	$G_N = 6.672 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ sec}^{-2}$ $= 6.707 \times 10^{-39} \hbar c (\text{GeV}/c^2)^{-2}$
Αριθμός Avogadro	$N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Σταθερά Boltzmann	$k = 1.380 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ $= 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$
Μάζα ήλιου	$M_\odot = 1.988 \times 10^{30} \text{ kg}$
Ισημερινή ακτίνα ήλιου	$R_\odot = 6.959 \times 10^8 \text{ m}$
Ισημερινή ακτίνα γης	$R_\oplus = 6.381 \times 10^6 \text{ m}$



ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗΣ

$$1\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1\text{fm} = 10^{-15} \text{ m}$$

$$1\text{dyne} = 10^{-5} \text{ N}$$

$$1\text{erg} = 10^{-7} \text{ J}$$

$$1\text{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1\text{eV}/c^2 = 1.782 \times 10^{-36} \text{ kg}$$

$$2.997 \times 10^9 \text{ esu} = 1 \text{ Cb}$$

$$1\text{Gauss} = 10^{-4} \text{ T}$$



ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ

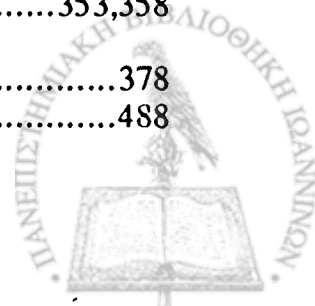
Αβεβαιότητα	
-σχέσεις αβεβαιότητας.....	44
-γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας.....	99
-σχέση ελάχιστης αβεβαιότητας.....	123
Αγωγιμότητα στερεών.....	342
Αέριο Fermi.....	336
-και βαρυτική κατάρρευση αστέρων.....	511
Ακτινοβολία	
-άλφα.....	404
-κοσμική ακτινοβολία μικροκυμάτων.....	523
-μελανού σώματος.....	17,552
Αλλαγή βάσης (ή αναπαράστασης).....	105
Αλγεβρική μέθοδος	
-στον αρμονικό ταλαντωτή.....	210
-στη στροφορμή.....	236
Αναπαράσταση	
-θέσης.....	88
-ορμής.....	88
-με πίνακες.....	102
Ανάπτυγμα	
-σε ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας.....	66
-σε ιδιοδιανύσματα.....	80
Αναρμονικός ταλαντωτής.....	401
Αναστροφή πληθυσμών.....	180
Ανισότητες Bell.....	578
Αντιμεταθέτης.....	100
Απώλεια κβαντικής συνοχής (decoherence).....	583
Αρμονικός ταλαντωτής.....	201,288
Αρμονική διαταραχή.....	413
Αρχή	
-της αβεβαιότητας.....	46
-της αντιστοιχίας.....	20
-απαγορευτική αρχή του Pauli.....	21,333



-της επαλληλίας.....	37
-της συμπληρωματικότητας.....	35,46
Αστέρες νετρονίων.....	515
Ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη.....	97
Άτομο	
-ηλίου.....	479
-λιθίου.....	489
-μονίου.....	294
-π-μεσονίου.....	294
Άτομο υδρογόνου.....	278
-σε ηλεκτρικό πεδίο (φαινόμενο Stark).....	374
-σε μαγνητικό πεδίο (φαινόμενο Zeeman).....	315,380,386
-ρεαλιστικό άτομο υδρογόνου - λεπτή υφή.....	377
-υπέρλεπτη υφή - γραμμή 21 cm.....	383,520
Βαθμίδα	
-μετασχηματισμοί βαθμίδας.....	310
-Coulomb.....	310,327,329
-Landau.....	317,329
Βαρύτητα.....	508
-και γραμμικό δυναμικό (δέσμιες καταστάσεις στο βαρυτικό πεδίο της Γης).....	154 323
-και συμβολόμετρο νετρονίων.....	298
Γυρομαγνητικός λόγος.....	84
Δέλτα συνάρτηση.....	196,197
-δυναμικό δέλτα συνάρτησης.....	137
Δέσμιες καταστάσεις.....	465
-και σκέδαση.....	105
Διαγώνια αναπαράσταση.....	316
Διαμαγνητικός όρος.....	76,77
Διάνυσμα ket ή bra.....	428
Διάσπαση συστήματος.....	369,373
Διαταραχές	
-ανεξάρτητες από τον χρόνο.....	412
-εξαρτημένες από τον χρόνο.....	232
Διατήρηση	
-ορμής.....	233
-ενέργειας.....	53
-πιθανότητας.....	233
-στροφορμής.....	133,161
Διαχωρισμός μεταβλητών	
-σε καρτεσιανές συντεταγμένες.....	267
-σε κεντρικό δυναμικό.....	498
Δυνάμεις van der Waals.....	151
Δυναμικό	
-γραμμικό.....	151



-διπλό φρέαρ δυναμικού.....	168
-κεντρικό.....	265
-περιοδικό.....	183
-σφαιρικό φρέαρ δυναμικού.....	273
-τετραγωνικό φρέαρ δυναμικού.....	163
-Coulomb.....	278,453
-Hartree-Fock.....	487
-Kronig-Penney.....	187
-Yukawa.....	452
Εικόνα	
-αλληλεπίδρασης (Dirac).....	121,410
-Heisenberg.....	116
-Schrödinger.....	116
Εκπομπή	
-αυθόρμητη.....	418
-εξαναγκασμένη.....	414,418
-ψυχρή εκπομπή ηλεκτρονίων.....	367
Ελάχιστη ζεύξη.....	309
Ελεύθερο σωματίδιο.....	37,129,270
Εκφυλισμός	
-άρση εκφυλισμού.....	97
-βαθμός εκφυλισμού.....	53
Ενέργεια	
-ιονισμού.....	280
-Fermi.....	336
Ενεργό δυναμικό.....	269
Ενεργός,	
-διατομή σκέδασης.....	440
-μάζα.....	344,368
Εξέλιξη με τον χρόνο.....	111
Εξίσωση	
-συνέχειας.....	54
-κίνησης του πίνακα πυκνότητας (εξίσωση Liouville).....	534
-Ginzburg - Landau.....	357
-Heisenberg.....	119
-Klein - Gordon	68,70
-London.....	356
-Schrödinger.....	50,112
-Wheeler - De Witt.....	586
Επίπεδο κύμα.....	38
-ανάλυση σε σφαιρικά κύματα.....	273
-ιδιοσυνάρτηση της ορμής.....	91
Ζεύγος Cooper.....	353,358
Ζεύξη	
-σπιν - τροχιά.....	378
-L-S ή j-j.....	488



Ζώνες

-αγωγιμότητας.....	190,345
-απαγορευμένες.....	189
-επιτρεπόμενες.....	189
-σθένους.....	345
-Brillouin.....	190,343

Θεώρημα

-αδιαβατικό.....	434
-οπτικό.....	445
-Bell.....	576
-Bloch (Floquet).....	186
-Ehrenfest.....	121
-Feynman - Helman.....	126
-Liouville.....	535
-virial.....	126

Ιδιοστροφορμή (σπιν).....	247
---------------------------	-----

Κβαντικός μη διαχωρισμός (entanglement: εναγκαλισμός).....	575
--	-----

Κβαντική τηλεμεταφορά.....	576
----------------------------	-----

Κβαντική στατιστική.....	527
--------------------------	-----

Κανόνας Fermi

-για αρμονική διαταραχή.....	417
-για σταθερή διαταραχή.....	427

Κανόνες επιλογής.....	423
-----------------------	-----

Κανονικοποίηση

-δέλτα συνάρτησης.....	133
-κουτιού.....	133

Κατανομή

-Bose-Einstein.....	548
-Fermi-Dirac.....	549
-Maxwell-Boltzmann.....	546

Κατάρρευση κυματοσυνάρτησης.....	563,582
----------------------------------	---------

Κατάσταση

-καθαρή.....	527
-μεικτή.....	527

Καταστάσεις σκέδασης.....	139
---------------------------	-----

Καταστατικός χώρος.....	76
-------------------------	----

Κρυμμένες μεταβλητές.....	576
---------------------------	-----

Κυματοπακέτο.....	39
-------------------	----

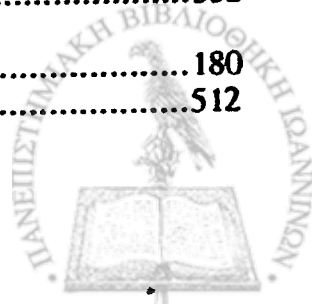
Κυματοσυνάρτηση.....	35
----------------------	----

-αντισυμμετρική.....	332
----------------------	-----

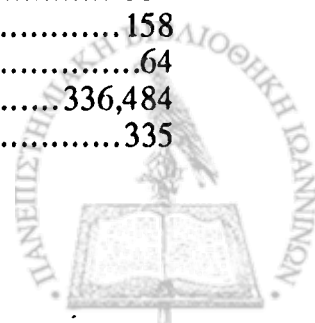
-συμμετρική.....	332
------------------	-----

Λέξεις.....	180
-------------	-----

Λευκοί νάνοι.....	512
-------------------	-----



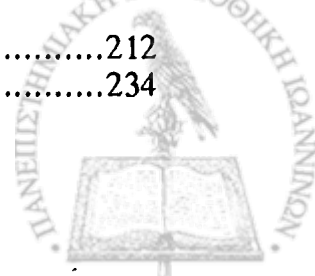
Μαγνητική ροπή	297
-δευτερίου.....	303
Μαγνητικός συντονισμός.....	305
Μαγνητόνη	
-πυρηνική.....	302
-Bohr.....	299
Μαύρη οπή.....	516
Μέθοδος	
-μερικών πλατών σκέδασης.....	454
-μεταβολών (Rayleigh-Ritz).....	397
-Hartree-Fock.....	487
-Thomas-Fermi.....	487
-WKB.....	389
Μείζερ	
-αμμωνίας.....	179
-κοσμικά μείζερς.....	522
Μέση τιμή.....	56,83
Μεταθέτης.....	60
Μετάπτωση	
-Larmor.....	299,301
-Thomas.....	378
Μετασηματισμός	
-μοναδιακός.....	106
-συμμετρίας.....	233
-Fourier.....	32
Μετατόπιση	
-φάσης.....	456
-Lamb.....	380,386
Μέτρηση	
-κβαντική.....	82,562
-παράδοξα κβαντικών μετρήσεων.....	566
Μόριο	
-αμμωνίας.....	168
-υδρογόνου.....	498
Μοριακό ιόν υδρογόνου.....	495
Μποξόνια.....	332,554
Νόμος	
-Planck.....	18,552
-Stefan-Boltzmann.....	18
-Wien.....	18
Ομαδική ταχύτητα.....	40
Όμοια σωματίδια.....	331
Ομοτιμία ιδιοσυνάρτησης.....	158
Ορθογωνιοποίηση Schmidt.....	64
Ορθόηλιο.....	336,484
Ορίζουσα Slater.....	335



Όριο	
-Chandrasekhar.....	514
-Landau-Oppenheimer-Volkov.....	515
Ορμή	
-ιδιοσυνάρτηση ορμής.....	91
-τελεστής ορμής.....	38,57,91
Όρος Darwin.....	379
Παραήλιο.....	336,484
Παράγοντας	
-Gamow.....	405
-Landé.....	302,303
Παραμαγνητικός όρος.....	315
Πείραμα	
-δύο οπών.....	33,566
-Einstein-Podolski-Rosen (EPR).....	573
-Stern-Gerlach.....	300
Πιθανότητα	
-διατήρηση πιθανότητας.....	53
-ιδιοτιμής.....	67,84
-μετάβασης.....	408
-πυκνότητα πιθανότητας.....	36
-ρεύμα πιθανότητας.....	54
Πίνακας πυκνότητας.....	528
Πίνακες Pauli.....	250
Πλάτος	
-πιθανότητας.....	76,83
-σκέδασης.....	444
Πλήρες	
-σύνολο ιδιοσυναρτήσεων.....	66
-σύνολο συμβιβαστών φυσικών μεγεθών.....	97
Πολυώνυμα	
-Hermite.....	204
-Laguerre.....	282
-Legendre.....	241,243
Πρόσέγγιση	
-αδιαβατική.....	432
-αιφνίδια.....	426
-ηλεκτρική διπολική.....	419
-κεντρικού πεδίου.....	485
-Born.....	413,450
-Born-Oppenheimer.....	491,493
Ροπή	
-ηλεκτρική διπολική.....	174,419
-μαγνητική.....	297



Σκέδαση	
-από σκαλοπάτι δυναμικού.....	140
-από σφαιρικό φρέαρ δυναμικού.....	464
-από τετραγωνικό δυναμικό.....	167
-από φράγμα δυναμικού.....	146
-και όμοια σωματίδια.....	471
-και σύστημα εργαστηρίου.....	441
-και σύστημα κέντρου μάζας.....	441
Σταθερά	
-της κίνησης.....	114,120
-λεπτής υφής.....	279
-Rydberg.....	19,281
Σταθερή διαταραχή..	426
Στάθμες Landau.....	317
Στάσιμη κατάσταση.....	53
Στροφορμή.....	231
Συλλογή	
-κανονική.....	539
-μεγαλοκανονική.....	543
-μικροκανονική.....	537
Συμβιβαστά φυσικά μεγέθη.....	97
Συμβολισμός Dirac.....	23,75,76,77
Συμμετρίες και νόμοι διατήρησης.....	233
Σύμφωνη κατάσταση.....	229
Συνάρτηση επιμερισμού.....	541,544
Συναρτήσεις	
-παραβολικές κυλινδρικές.....	219
-συρρέουσες υπεργεωμετρικές.....	289
-σφαιρικές αρμονικές.....	241,243
-Airy.....	153,393,395
-Bessel.....	270
-Hankel.....	271
-Neuman.....	270
Συντελεστής	
-ανάκλασης.....	143
-διέλευσης.....	145
Συντελεστές Clebsch-Gordan.....	255
Σύστημα	
-δευτερίου.....	276
-ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου.....	284
-κουάρκ-αντικουάρκ.....	285
Σχέση πληρότητας.....	67,80
Ταλαντώσεις νετρίνων.....	517
-και ηλιακά νετρίνα.....	519
Τελεστής	
-αριθμητικός.....	212
-αντιγραμμικός.....	234



-αντιμοναδιακός.....	234
-γραμμικός.....	58
-δημιουργίας.....	211
-εναλλαγής.....	332
-ερμιτιανός.....	55,78
-καταστροφής.....	211
-μετάβασης.....	448
-μοναδιακός.....	106
-ομοτιμίας.....	158,291
-προβολικός.....	81
-σκέδασης.....	459
-στροφής.....	233
-χαμιλτονιανός.....	51
-χρονικής εξέλιξης.....	111
-χρονικής μετατόπισης.....	233
-χωρικής μετατόπισης.....	232
Τύπος	
-σύνδεσης.....	393
-Mott.....	473,474
-Rabi.....	178,308
-Rutherford.....	454
Υπεραγωγιμότητα.....	347-
Υπερρευστότητα.....	557
Φαινόμενο	
-Ζήγωνα.....	128
-σήραγγας.....	148
-Aharonov-Bohm.....	312
-Hall.....	319
-Josephson.....	360,361,362
-Mössbauer.....	432
-Stark.....	374
-Paschen-Back.....	381
-Ramsauer-Townsend.....	476
-Zeeman.....	302,315,380,386
Φασική ταχύτητα.....	40
Φασματική αναπαράσταση.....	105
Φερμιόνια.....	332,555
Φωνόνια.....	222
Χαμιλτονιανή Pauli.....	316
Χώρος	
-των φάσεων.....	163,536,538
-Hilbert.....	76



Copyright: Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Απαγορεύεται η μερική ή ολική ανατύπωση, καθώς και η λήψη φωτοαντιγράφων από το βιβλίο χωρίς τη γραπτή άδεια του Τμήματος Δημοσιευμάτων του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων και του συγγραφέα.

Διατίθεται και στο Βιβλιοπωλείο του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων,
Πανεπιστημιούπολη - Δουρούτη, Ιωάννινα - Τηλ. (0651) 97122.

ΔΙΑΝΕΜΕΤΑΙ ΔΩΡΕΑΝ στους φοιτητές.

Γραφικές Τέχνες

ΘΕΟΔΩΡΙΔΗ

Γαριβάλδη 10, 45221 Ιωάννινα

Τηλ.-Fax: 0651 - 77358



