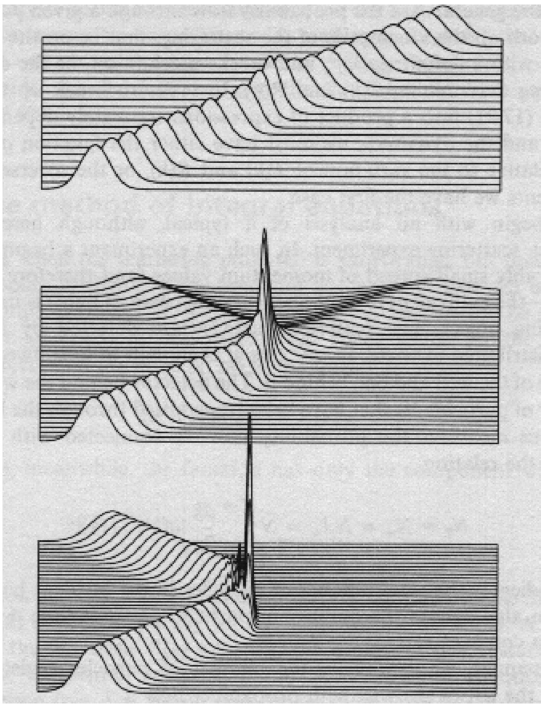
ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ
ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ - ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΣΦΑΕΛΟΣ Ε. ΙΩΑΝΝΗΣ

ΠΑΤΡΑ 2001

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η πραγματοποίηση αυτού του σεμιναρίου στο Πανεπιστήμιο Πατρών, μου έδωσε την ευκαιρία να εμβαθύνω σε κάποια βασικά θέματα της Κβαντομηχανικής και να παρουσιάσω αυτή την εργασία μου στους συνάδελφους καθηγητές της Φυσικής. Πιστεύω, ότι πολύ σύντομα μερικά από αυτά τα θέματα, θα απασχολήσουν όσους διδάξουν την Φυσική στην Γ! Λυκείου, βάσει των νέων Αναλυτικών και Ωρολόγιων προγραμμάτων.

Η επιθυμία μου είναι, να βοηθήσω μέχρις ενός βαθμού τους συναδέλφους, μέσω αυτής της εργασίας αλλά και μέσω της σχετικής βιβλιογραφίας που αναφέρω στο τέλος, ως επίσης και από αρκετές διευθύνσεις στο Internet.

Θέλω να εκφράσω τις ευχαριστίες μου, στους συντελεστές του σεμιναρίου και σε όλους εκείνους τους υπομονετικούς δασκάλους, που μας καθοδήγησαν μέσα από τα μονοπάτια της γνώσης. Θεωρώ ότι ο καθένας εξ αυτών έδωσε ό,τι ήταν δυνατόν, μέσα από τον ελάχιστο χρόνο παρουσίασης, που διέθετε. Νομίζω, ότι αυτού του είδους σεμινάρια, προσφέρουν πολλά στους εκπαιδευτικούς, οπότε άμμεσα συνδράμουν στην αναβάθμιση του εκπαιδευτικού μας συστήματος. Αξίζει λοιπόν η προσπάθεια να συνεχιστούν και τα επόμενα χρόνια.

Γιάννης Σφαέλος

Ε Ι Σ Α Γ Ω Γ Η

Αν προσπαθήσουμε να χρησιμοποιήσουμε την Κλασσική Μηχανική για να ερμηνεύσουμε ορισμένα πειραματικά αποτελέσματα, που αφορούν τον κόσμο του ατόμου θα συναντήσουμε δυσκολίες δύο κατηγοριών:

1) Η κβάντωση : υπάρχουν φυσικά μεγέθη, που υπό ορισμένες συνθήκες, παρουσιάζονται κβαντωμένα, δηλαδή παίρνουν διακεκριμένες τιμές.
2) Η δυαδικότητα σωματίδιο-κύμα : Ο Niels Bohr, που έπαιξε σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη της Κβαντομηχανικής, διετύπωσε την αρχή της συμπληρωματικότητας : “ η κυματική και η σωματιδιακή θεώρηση μιας κβαντικής οντότητας είναι και οι δύο απαραίτητες για μια πλήρη περιγραφή. Παρ΄όλα αυτά και οι δύο θεωρήσεις δεν μπορούν να αποκαλυφθούν ταυτόχρονα σε ένα μόνο πείραμα. Ο χαρακτήρας που αποκαλύπτεται, προσδιορίζεται από την φύση του πειράματος που γίνεται ”. Εν ολίγοις αυτό σημαίνει, ότι ανάλογα με το χρησιμοποιούμενο όργανο μέτρησης, συλλαμβάνουμε τούτη ή εκείνη την όψη της πραγματικότητας, χωροχρονική ή δυναμική, σωματιδιακή ή κυματική (ερμηνεία της Κοπεγχάγης).

Οι κβαντομηχανικές εξισώσεις, περιγράφουν την συμπεριφορά πολύ μικρών σωματιδίων – μεγέθους ατόμων ή μικρότερων – και μας προσφέρουν ένα μοναδικό τρόπο κατανόησης του μικρόκοσμου. Χωρίς αυτές τις εξισώσεις, οι φυσικοί θα ήταν ανίκανοι να σχεδιάσουν πραγματικά πυρηνικά εργοστάσια, να αναπτύξουν εφαρμογές όπως Leiser, ηλεκτρονικά μικροσκόπια, υπεραγωγούς, ηλεκτρονικούς υπολογιστές, τηλεπικοινωνίες κ.ά. Επίσης, δίνονται εξηγήσεις όσον αφορά τους χημικούς δεσμούς, τα ατομικά και μοριακά τροχιακά. Εξηγείται επίσης η δομή των άστρων που έχουν καταρρεύσει. Η Χημεία θα ήταν ακόμη στο επίπεδο του Μεσαίωνα. Δεν θα μπορούσαμε να κατανοήσουμε το DNA και δεν θα υπήρχε καν επιστήμη μοριακής βιολογίας, γενετικής μηχανικής.

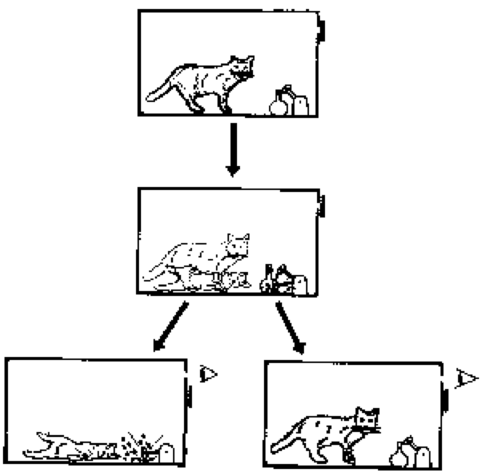
Στις αρχές του 19^{ου} αιώνα, η επιτυχία στην πρόβλεψη των γεγονότων και των φυσικών φαινομένων οδήγησε τον Laplace, στο αίτημα του ντετερμινισμού (κάθε συμβάν έχει και μια αιτία). Ο Laplace υπέθεσε ότι υπάρχει ένα σύνολο νόμων, που θα μπορούσε να προσδιορίσει με απόλυτη ακρίβεια την εξέλιξη του σύμπαντος, αν ήταν γνωστή η κατάστασή του σε κάποια χρονική στιγμή. Γνωρίζουμε σήμερα, ότι οι ελπίδες για τον ντετερμινισμό του Laplace, δεν μπορεί να πραγματοποιηθούν, τουλάχιστον με τους όρους που εννοούσαν οι επιστήμονες του 19^{ου} αιώνα. Η αρχή της απροσδιοριστίας της Κβαντομηχανικής, καθορίζει τα όρια, μέσα στα οποία οι νόμοι της φυσικής θα μας επιτρέπουν να προβλέπουμε τα γεγονότα.

Στην Κβαντική Μηχανική, τα σωμάτια δεν έχουν σαφώς προσδιορισμένες θέσεις και ταχύτητες, αλλά αντιπροσωπεύονται από ένα κύμα. Οι κβαντικές θεωρίες είναι ντετερμινιστικές, με την έννοια ότι παρέχουν νόμους για την εξέλιξη του κύματος με την πάροδο του χρόνου. Έτσι, αν κάποιος γνωρίζει την μορφή του κύματος σε μία χρονική στιγμή, μπορεί να την υπολογίσει και σε οποιαδήποτε άλλη. Το απρόβλεπτο, τυχαίο στοιχείο εμφανίζεται μόνο όταν προσπαθήσουμε να ερμηνεύσουμε το κύμα με όρους θέσεων και ταχυτήτων σωματιδίων. Αλλά αυτό μπορεί να είναι δικό μας λάθος : μπορεί να μην υπάρχουν θέσεις και ταχύτητες σωματίων, αλλά μόνον κύματα. Προσπαθούμε να προσαρμόσουμε τα κύματα στις ιδέες των θέσεων και ταχυτήτων των σωματίων, που έχουμε διαμορφώσει από την Κλασσική Μηχανική. Η αδυναμία να το πετύχουμε αυτό είναι η αιτία της φαινομενικής αδυναμίας πρόβλεψης.

Ο κόσμος της Κβαντομηχανικής είναι στην πραγματικότητα περίπλοκος. Οι νόμοι της φυσικής, όπως τους γνωρίζουμε από την καθημερινή εμπειρία, παύουν πλέον να ισχύουν. Δεν υπάρχουν σίγουρα πράγματα. Τίποτα δεν βρίσκεται σε κάποια συγκεκριμένη θέση, σε κάποια συγκεκριμένη χρονική στιγμή. Τα γεγονότα κυβερνώνται από τις πιθανότητες. Όπως είπε και ο Niels Bohr : “αυτός που δεν συγκλονίστηκε από την κβαντική θεωρία , ασφαλώς δεν την κατάλαβε ”. Η μυστηριώδης γάτα του *Schrödinger* επινοήθηκε απ’αυτόν, για να κάνει σαφή την διαφορά μεταξύ του κβαντικού και του καθημερινού κόσμου.

Σε κάποιο κλειστό αδιαφανές κλουβί περιέχονται, μία ζωντανή γάτα, ένα ασθενές ραδιενεργό υλικό και ένας ανιχνευτής ραδιενέργειας, συνδεδεμένος με ένα μικρό δοχείο που περιέχει υδροκυάνιο.

Ο ανιχνευτής τίθεται σε λειτουργία μόνο μία φορά, για ένα λεπτό. Η πιθανότητα να εκπέμψει το ραδιενεργό υλικό, ένα ανιχνεύσιμο σωματίδιο π.χ. ένα ηλεκτρόνιο, σ΄αυτό το ένα λεπτό είναι 50%. Αν ο



ΕΙΚ. 1Α. Στο μέσον της εικόνας φαίνεται αυτή η εξωπραγματική υβριδική κατάσταση της νεκροζώντανης γάτας, όπως απαιτεί η κβαντική θεωρία . Στο κάτω μέρος η γάτα εμφανίζεται ζωντανή ή νεκρή σαν συνέπεια της παρατήρησης.

ανιχνευτής πιάσει ένα ραδιενεργό σωματίδιο, με κάποιον μηχανισμό ανοίγει το δοχείο του υδροκυανίου με αποτέλεσμα η απελευθέρωση του δηλητηριώδους αυτού αερίου να προκαλέσει τον θάνατο του συμπαθούς αιλουροειδούς. Το όλο σύστημα βρίσκεται μέσα σε κάποιον απομονωμένο χώρο, που δεν είναι άμεσα παρατηρήσιμος. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα, να μην ξέρουμε αν η γάτα είναι ζωντανή ή νεκρή, μόλις περάσει το
κρίσιμο λεπτό. Στον καθημερινό μας κόσμο, υπάρχει μια πιθανότητα 50% η γάτα να είναι ζωντανή , και 50% να είναι νεκρή. Ήδη παρατηρούμε ότι , η κατάσταση της γάτας περιγράφεται όχι από μια πραγματικότητα, αλλά από μακροσκοπικές πιθανότητες. Σύμφωνα με τον κβαντικό κόσμο καμία από τις δύο δυνατότητες που υπάρχουν για την γάτα δεν είναι πραγματική, εκτός και αν παρατηρηθεί. Οι θεωρητικοί της κβαντομηχανικής ισχυρίζονται ότι η γάτα υπάρχει σε απροσδιόριστη κατάσταση, ούτε ζωντανή ούτε νεκρή. Εισάγεται λοιπόν, ένα αναπόφευκτο στοιχείο αδυναμίας πρόβλεψης και τυχαιότητα. Γι'αυτή την περίπτωση ο *Schrödinger* ανέφερε : " η πραγματικότητα αποκαλύπτεται, γίνεται δηλαδή "πραγματικότητα" την στιγμή που θα την παρατηρήσουμε και όχι πριν…".

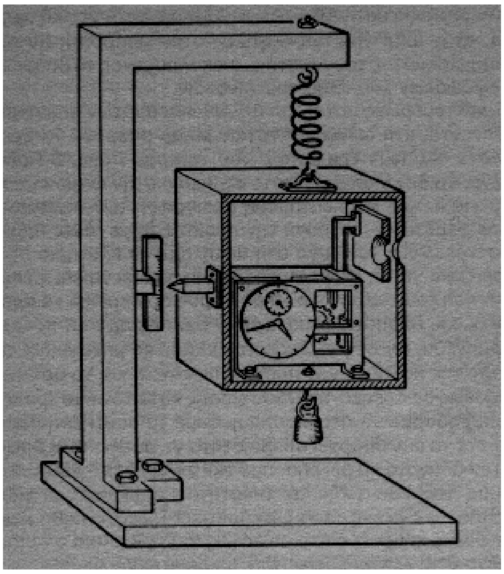
Οι περισσότεροι φυσικοί, με επικεφαλής τον Niels Bohr, δέχτηκαν ότι σε ατομική κλίμακα η αβεβαιότητα είναι πραγματικά εγγενής ιδιότητα της φύσης.

Ο Einstein αντιτάχθηκε σ΄αυτό, παρά τον σημαντικό ρόλο που είχε διαδραματίσει για την ανάπτυξη αυτών των ιδεών. Του φαινόταν απαράδεκτη η εν δυνάμει, δηλαδή η τυχαία (στατιστική) φύση του παντός, όπως επίσης και η λεγόμενη στην κβαντική φυσική, “μη τοπικότητα”. Μη τοπικότητα σημαίνει ότι, τα γεγονότα που συμβαίνουν σε κάποια συντεταγμένη του χωροχρόνου φαίνεται να επηρεάζουν και να καθορίζουν γεγονότα σε άλλες συντεταγμένες, χωρίς καμία προφανή διασύνδεση ανάμεσά τους και ανεξάρτητα από την απόσταση που τα χωρίζει. Το φαινόμενο αυτό είχε προκαλέσει την περίφημη δήλωση του Einstein ότι "ο Θεός δεν παίζει ζάρια". Όμως τα πειράματα συμφωνούσαν απόλυτα με την θεωρία της κβαντικής μηχανικής, σήμερα δε αποτελεί το υπόβαθρο σχεδόν όλης της σύγχρονης φυσικής και τεχνολογίας.

Η διαμάχη των Bohr – Einstein δεν αφορά απλώς λεπτομέρειες της πιο επιτυχημένης επιστημονικής θεωρίας. Στην καρδιά του ζητήματος βρίσκεται το απλό ερώτημα : “είναι το άτομο ένα πράγμα ή ένα αφηρημένο κατασκεύασμα της φαντασίας χρήσιμο για την εξήγηση πολυάριθμων παρατηρήσεων”. Αν το άτομο υπάρχει πραγματικά σαν ανεξάρτητο αντικείμενο, τότε πρέπει το λιγότερο να έχει μια θέση και μια καθορισμένη ταχύτητα. Αυτό όμως το αρνείται η Κβαντομηχανική, επειδή θεωρεί ότι μπορούμε να ξέρουμε το ένα από τα δύο, αλλά ποτέ και τα δύο ταυτόχρονα. Αυτή είναι η διάσημη αρχή αβεβαιότητας (ή απροσδιοριστίας) του Heisenberg, που ήρθε για να συμπληρώσει την αρχή της συμπληρωματικότητας του Bohr. Ένα από τα σημαντικότερα πορίσματα της αρχής της απροσδιοριστίας είναι ότι, στην φύση δεν μπορεί να υπάρξει κενό, αν υπήρχε τότε θα γνωρίζαμε ταυτόχρονα την μη ύπαρξη και του σωματιδίου και του κύματος, πράγμα αδύνατον!

Ένα φανταστικό πείραμα, που επινόησε ο Einstein, στο οποίο θα ήταν δυνατόν να μετρηθούν δύο συμπληρωματικά μεγέθη ταυτόχρονα π.χ. η ενέργεια και ο χρόνος, είναι το εξής :

Φανταστείτε ένα κουτί, είπε ο Einstein, που έχει μια οπή στο ένα του τοίχωμα, που καλύπτεται από ένα κάλυμμα που ανοίγει και κλείνει ελεγχόμενο από ένα ρολόι, που βρίσκεται μέσα στο κουτί. Εκτός από το ρολόι και τον μηχανισμό για το άνοιγμα και το κλείσιμο του καλύμματος, το κουτί είναι πλήρες ακτινοβολίας.



ΕΙΚ. 1Β. Το πείραμα του ρολογιού μέσα στο κουτί.

Ο μηχανισμός τίθεται σε ενέργεια, έτσι ώστε σε κάποια προκαθορισμένη χρονική στιγμή το κάλυμμα να ανοίξει και να επιτρέψει σε ένα φωτόνιο να διαφύγει προτού κλείσει και πάλι (εικ. 1Β). Ζυγίζουμε το κουτί πριν και μετά την διαφυγή του φωτονίου. Έτσι βρίσκουμε την μάζα του φωτονίου άρα και την ενέργειά του, σύμφωνα με τον τύπο : $E = mc^2$. Μ' αυτόν τον τρόπο, γνωρίζουμε ταυτόχρονα την ακριβή ενέργεια του φωτονίου και τον ακριβή χρόνο που πέρασε από την οπή, απορρίπτοντας έτσι την αρχή της αβεβαιότητας.

Η απάντηση του Bohr ήταν η εξής : το κουτί πρέπει να ζυγιστεί, άρα πρέπει να εξαρτηθεί από ελατήριο μέσα σε βαρυτικό πεδίο. Η ταχύτητα με την οποία γυρίζει το ρολόι, εξαρτάται από την θέση του στο βαρυτικό πεδίο, όπως είχε αποδείξει ο Einstein με την θεωρία της σχετικότητας. Όταν όμως το φωτόνιο διαφεύγει από το κουτί, την ίδια στιγμή το ρολόι κινείται αφ'ενός εξαιτείας του γεγονότος ότι αλλάζει το βάρος του και αφ'ετέρου εξαιτίας της ανάδρασης από το διαφεύγον φωτόνιο. Επειδή αλλάζει η θέση του, υπάρχει μια αβεβαιότητα για την θέση του στο πεδίο βαρύτητας και άρα μια αβεβαιότητα για την ταχύτητα με την οποία γυρίζει. Ακόμη και αν προσπαθήσουμε να αποκαταστήσουμε την αρχική κατάσταση προσθέτοντας ένα μικρό βάρος για να ξαναγυρίσει το ελατήριο στην αρχική του θέση και μετρήσουμε το επιπλέον βάρος για να καθορίσουμε την ενέργεια του φωτονίου που έφυγε, ποτέ δεν θα μπορέσουμε να περιορίσουμε την αβεβαιότητα από τα όρια που επιτρέπει η σχέση του Heisenberg. Ο Bohr, κατά γενικήν ομολογία, ήταν ιδιαίτερα προκλητικός στην απόρριψη αυτού του επιχειρήματος του Einstein, επικαλούμενος την βοήθεια των εξισώσεων του ίδιου του Einstein.

Άλλο ένα νοερό πείραμα των Einstein – Podolsky – Rosen (EPR), για το φαινόμενο της μη - τοπικότητας , που έχει να κάνει με το spin των στοιχειωδών σωματιδίων, όπου ως γνωστόν παίρνει δύο μόνο τιμές +1/2 και - 1/2, είναι το εξής :

Έστω δύο ηλεκτρόνια με διαφορετικό spin, με αποτέλεσμα να έχουν συνολικό spin ίσο με μηδέν. Σύμφωνα με την αρχή της απροσδιοριστίας, δεν μπορούμε να καθορίσουμε ποτέ με ακρίβεια το spin του ηλεκτρονίου. Η πράξη της μέτρησης δίνει στο ηλεκτρόνιο το spin του. Μέχρι τότε έχει απλώς κάποια "τάση" προς την μία ή την άλλη τιμή. Ας υποθέσουμε τώρα ότι τα δύο ηλεκτρόνια απομακρύνονται το ένα από το άλλο μέσω μιας διαδικασίας, που δεν επηρεάζει τα spin τους, π.χ. το ένα στην Γη και το άλλο στην Σελήνη. Αν μετρήσουμε το spin του ηλεκτρονίου που βρίσκεται στην Γη ίσο με +1/2 , τότε το spin του ηλεκτρονίου στην Σελήνη είναι -1/2. Το παράδοξο του πειράματος EPR έγκειται στο γεγονός ότι, σύμφωνα με την κβαντική θεωρία, η μέτρηση του spin του γήινου ηλεκτρονίου καθόρισε αυτόματα και το spin του ηλεκτρονίου στην Σελήνη. Ο Einstein δεν δεχόταν να αντιληφθεί, πως ήταν δυνατόν το ηλεκτρόνιο στην Σελήνη να "γνωρίζει" την τιμή του spin του γήινου ηλεκτρονίου, αφού κανένα σήμα δεν είναι δυνατόν να ταξιδέψει τόσο γρήγορα ώστε να μεταφέρει την πληροφορία. Το πείραμα EPR, καταργούσε μια βασική αρχή της θεωρίας της Σχετικότητας, σύμφωνα με την οποία, τίποτα δεν μπορεί να ταξιδέψει στον χωροχρόνο με ταχύτητα μεγαλύτερη του φωτός. Ατυχώς για τον Einstein, το φαινόμενο της μη-τοπικότητας επιβεβαιώθηκε πειραματικά από τον Allen Aspect το 1982.

Βλέπουμε λοιπόν ότι, οι φιλοσοφικές συνέπειες της Κβαντομηχανικής είναι κοσμογονικές. Τα σημεία εμπεριέχουν το Όλον. Υπάρχει ένας υποβόσκων χωροχρονικός ιστός σε κβαντικό επίπεδο, ο οποίος συνδέει τα πάντα μεταξύ τους.

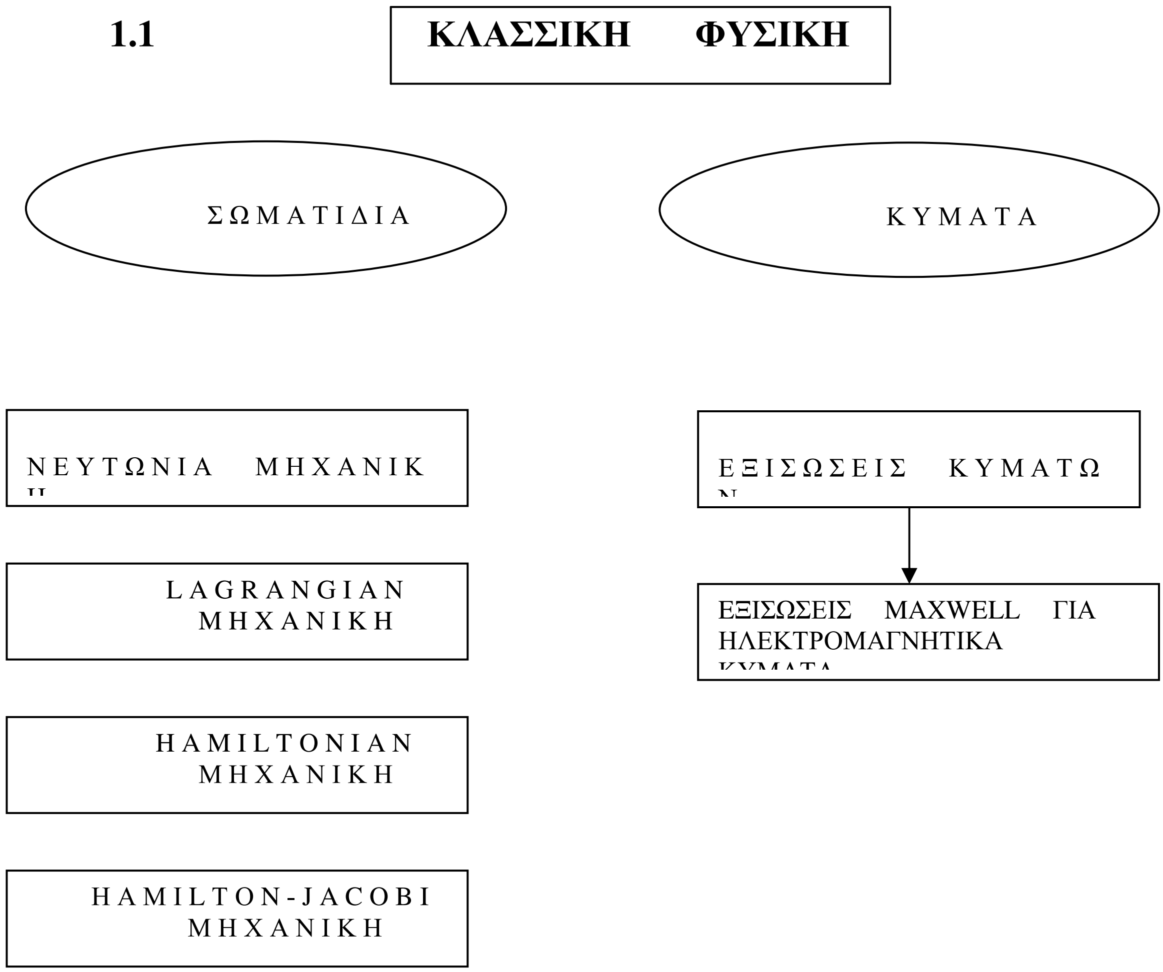
Μέσα από αυτόν τον χωροχρονικό ιστό “ξεπηδούν” σαν φαντάσματα, τα σωματίδια και τα κύματα που συναποτελούν την “πραγματικότητα”.

Η Κβαντική Μηχανική, με την σημερινή μορφή της, δεν αποτελεί μια οριστικά τελειωμένη θεωρία για την ερμηνεία των φυσικών φαινομένων σε ατομική κλίμακα (συνεχίζεται ακόμη η θεωρητική και πειραματική έρευνα γύρω από την εννοιολογική της θεμελίωση, ως επίσης και η όχι απόλυτα ξεκαθαρισμένη σχέση της με την θεωρία της σχετικότητας). Όμως τα πειραματικά αποτελέσματα, που αναφέρονται στα ατομικά φαινόμενα συμφωνούν πολύ καλά με τις προβλέψεις και τα συμπεράσματα της θεωρίας, ενώ προκύπτουν δυσκολίες στο επίπεδο του πυρήνα και των στοιχειωδών σωματιδίων. Στο μακροσκοπικό όριο η Κβαντομηχανική ανάγεται, όπως όφειλε, στην Κλασσική Μηχανική.

Συμπερασματικά, μπορούμε να πούμε ότι η κβαντική θεωρία μαζί την θεωρία της σχετικότητας του Einstein, είναι τα θεμελιώδη βάθρα, στα οποία στηρίζεται η φυσική του 20ού αιώνα. Βέβαια τα δύο αυτά βάθρα, δεν είναι συμβατά μεταξύ τους. Οι προσπάθειες που έγιναν, ώστε αυτές οι δύο μεγάλες θεωρίες να ενοποιηθούν, κατέληξαν τουλάχιστον μέχρι σήμερα σε σχέσεις που δεν έχουν νόημα από μαθηματική άποψη. Βρίθουν δηλαδή από απειρισμούς διαφόρων ειδών. Ένας από τους πιο διάσημους θεωρητικούς φυσικούς της εποχής μας, ο Stephen Hawking αναφέρει ότι, η γενική θεωρία της σχετικότητας είναι μία κλασσική θεωρία, δεν περιέχει την αρχή της απροσδιοριστίας, όπως θα έπρεπε για να μπορεί να συνδυαστεί με τις άλλες φυσικές θεωρίες. Εν τούτοις, βρίσκεται σε συμφωνία με τις παρατηρήσεις, με την προυπόθεση ότι οι βαρυτικές επιδράσεις είναι πολύ μικρές. Όταν αυτές γίνουν πολύ μεγάλες (π.χ μαύρες τρύπες, Μεγάλη έκρηξη), τα κβαντικά φαινόμενα είναι πολύ σημαντικά. Μεγάλες επιτυχίες στην ερμηνεία των φαινομένων του μικροκόσμου όσο και του μακροκόσμου σημείωσε η Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (QED), με δημιουργό αυτής της θεωρίας τον R. Feynman. Τα τελευταία χρόνια έχει αναπτυχθεί μια καινούργια θεωρία, η θεωρία των χορδών, με πρωτότυπες ιδέες που εντυπωσιάζουν και υπόσχεται να αποτελέσει μια ενοποιημένη περιγραφή όλων των δυνάμεων, όλων των θεμελιωδών σωματιδίων της ύλης και του χωροχρόνου. Σύμφωνα μ’αυτήν, τα σωμάτια μπορούν να θεωρηθούν ότι αντιστοιχούν σε κύματα, που διατρέχουν μία χορδή. Όμως, αυτή η θεωρία παρουσιάζει ένα σοβαρό μειονέκτημα προς το παρόν τουλάχιστον. Φαίνεται ότι είναι συνεπής και δεν περιέχει αντιφάσεις μόνο όταν ο χωροχρόνος έχει είτε δέκα είτε είκοσι έξι διαστάσεις (αντί για τις γνωστές μας τέσσερις). Αλλά αυτή η θεωρία, (που θεωρείται η θεωρία των πάντων), μάλλον θα απασχολήσει περισσότερο τους φυσικούς και τους μαθηματικούς τον $21^{ον}$ αιώνα, αφού ακόμα είναι στα σπάργανα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1. <u>ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ</u>

1.1



ΕΙΚ. 2 Μια περιγραφή της κλασσικής φυσικής. Σωματίδια και κύματα είναι εντελώς ξεχωριστές έννοιες μεταξύ τους.

Μέχρι τα τέλη του 19ου αιώνα, η φυσική που αναπτύχθηκε είναι γνωστή σήμερα σαν κλασσική φυσική. Αυτή βασίζεται σε παρατηρήσεις γεγονότων που συμβαίνουν στη φύση. Περιγράφει με ακρίβεια τις κινήσεις των μακροσκοπικών σωμάτων που κινούνται με ταχύτητες πολύ μικρότερες της ταχύτητας του φωτός. Ερμηνεύει επίσης φαινόμενα, που σχετίζονται με την θερμότητα, τον ήχο, το φως, την βαρύτητα, τον ηλεκτρομαγνητισμό κ.ά. Για όλες σχεδόν τις επίγειες κατασκευές του ανθρώπου, ο βαθμός ακρίβειας των αξιωμάτων της Μηχανικής του Newton είναι επαρκής. Μετά την ερμηνεία των φαινομένων της κίνησης από την Νευτώνεια Μηχανική, σύντομα διαπιστώθηκε ότι ορισμένα φαινόμενα, τα οποία παρουσιάζονταν ως διαφορετικά, αποτελούσαν διαφορετικές όψεις του ίδιου αντικειμένου. Έτσι, τα φαινόμενα του ήχου μπορούν να κατανοηθούν ως κίνηση των ατόμων στον αέρα , τα φαινόμενα της θερμότητας ερμηνεύονται με τους νόμους της κίνησης. Αργότερα, ήρθε και η σειρά των ηλεκτρικών και των μαγνητικών φαινομένων, που συνδυάστηκαν με αυτά του φωτός και της οπτικής σε μία μόνη θεωρία από τον Maxwell, από τον οποίο δόθηκε η ερμηνεία ότι το φως είναι ηλεκτρομαγνητικό κύμα.

1.2 Η Νευτώνεια Μηχανική

Η Νευτώνεια Μηχανική περιγράφει, οτιδήποτε θέλουμε να γνωρίσουμε για την κίνηση κλασσικών σωματιδίων (μη σχετικιστικών). Τα βασικά χαρακτηριστικά αυτών των σωματιδίων είναι η μάζα m, η θέση x, η ορμή p, η κινητική ενέργεια K, η δυναμική ενέργεια U και η εξίσωση της κίνησης: $F = md^2x/dt^2$.
Για τις δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ δύο οποιωνδήποτε σωμάτων, ο Newton διετύπωσε τον νόμο παγκόσμιας έλξης : $F = GM_1.M_2/r^2$, για να εξηγήσει τις κινήσεις των ουρανίων σωμάτων.

Αν το σωματίδιο είναι φορτισμένο, η δύναμη προκύπτει από ηλεκτρικό ή μαγνητικό πεδίο. Το βασικό εδώ είναι ότι, η ολική ενέργεια του σωματιδίου παίρνει οποιαδήποτε τιμή, ενώ έχουμε την βεβαιότητα στην περιγραφή της θέσης και της ορμής του σωματιδίου κάθε χρονική στιγμή, εφόσον μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα, χωρίς η μέτρηση να προκαλέσει διαταραχή.

Οι βασικές υποθέσεις που έκανε ο Newton συνίστανται στην παραδοχή, ότι ο χώρος εντός του οποίου εκτυλίσσονται τα φυσικά φαινόμενα, είναι ακίνητος. Επίσης, θεωρείται Ευκλείδιος και ισότροπος. Οι μάζες των σωμάτων δεν εξαρτώνται από την διεύθυνση της κίνησής των στις εφαρμογές της εξίσωσης κίνησης.

Ο χρόνος είναι απόλυτος και κοινός για όλα τα γεγονότα του σύμπαντος. Οι τρεις νόμοι για την κίνηση του Newton ισχύουν ως προς ακίνητο παρατηρητή επί της επιφάνειας της Γης, εφόσον λαμβάνονται υπόψιν οι διορθώσεις λόγω της ημερήσιας περιστροφής της Γης γύρω από τον άξονά της και της στροφικής κίνησης γύρω από τον Ήλιο. Οι τρεις αυτοί νόμοι αποτελούν την αξιωματική μέθοδο που ακολούθησε ο Newton, για να οικοδομήσει την θεωρία του, που είναι οι εξής:

α) <u>Νόμος της αδράνειας :</u> κανένα σώμα δεν μπορεί να αλλάξει την δυναμική του κατάσταση, αν δεν δεχθεί την επίδραση κάποιας εξωτερικής δύναμης.

β) <u>Θεμελιώδης νόμος Μηχανικής</u>: η ως προς τον χρόνο παράγωγος της ορμής ενός σώματος είναι ανάλογος της δύναμης F που ασκείται επ' αυτού, δηλαδή:

$$F = dp/dt.$$

γ) <u>Νόμος δράσης-αντίδρασης</u> : αυτός αντικατοπτρίζει ένα βασικό φυσικό δεδομένο, την ισοτροπία του χώρου.

1.3 Χρονική εξέλιξη ενός συστήματος κατά Newton

Ας θεωρήσουμε ένα κλασσικό σωματίδιο, που διαθέτει μόνο ένα βαθμό ελευθερίας για λόγους απλότητας. Βαθμούς ελευθερίας καλούμε τον αριθμό των ανεξάρτητων μεταβλητών, που είναι αναγκαίες και ικανές για τον καθορισμό της θέσης ενός σώματος. Έστω, ότι το σωματίδιο δέχεται από το περιβάλλον του μία δύναμη F(x), οπότε εφόσον η F εξαρτάται μόνον από την θέση είναι συντηρητική. Αν U(x) είναι η δυναμική

$$F(x) = -\frac{d}{dx}U(x) \qquad (1)$$

ενέργεια του συστήματος, τότε:

Μία τέτοια δύναμη τείνει να επαναφέρει το σωματίδιο στο σημείο, όπου το δυναμικό είναι ελάχιστο. Η κατάσταση του συστήματος ορισμένη χρονική στιγμή καθορίζεται από την θέση x και την αντίστοιχη ορμή του σωματιδίου. Με εφαρμογή του $2^{ου}$ νόμου του Newton και της εξίσωσης p = m.v , θα έχουμε :

Οι εξισώσεις (2) και (3), περιγράφουν την χρονική εξέλιξη του

$$F(x) = m\frac{d^2x}{dt^2} = m\ddot{x} = ma_x \qquad (2) \qquad p = m\frac{dx}{dt} = m\dot{x} \qquad (3)$$

συστήματος. Η ολοκλήρωση των (2) και (3), δίνει τις συναρτήσεις x(t), p(t) για κάθε χρονική στιγμή, εισάγοντας δύο σταθερές, που καθορίζονται αν γνωρίζουμε κατά την χρονική στιγμή t = 0 την αρχική κατάσταση x(0), p(0). Έτσι το πρόβλημα λύνεται. Η ολική ενέργεια του συστήματος είναι :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x) \qquad (4)$$

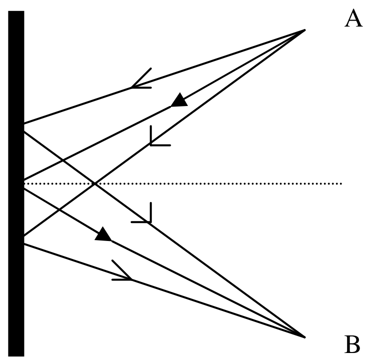
Παρατηρούμε, ότι η ολική ενέργεια είναι μια σταθερά της κίνησης (ανεξάρτητης του χρόνου), για οποιοδήποτε διατηρητικό σύστημα.

1.4 Μοντέρνα κλασσική φυσική

Η μοντέρνα κλασσική φυσική αναπλάθεται, με την βοήθεια των εξισώσεων Lagrange της κίνησης, τις εξισώσεις κίνησης του Hamilton, την περιγραφή της αγκύλης Poisson και την διατύπωση των Hamilton-Jacobi. Όλες αυτές οι εξισώσεις μας παρέχουν μια πιο γενική προσέγγιση, στο να περιγράψουμε τον κλασσικό μας κόσμο. Έχουν δε μια τέτοια δομή, ώστε η αντιστοίχιση αυτών με τις κβαντικές εξισώσεις, να γίνεται με πολύ απλές αλλαγές, οδηγώντας μας απ'ευθείας π.χ. στην αρχή του Heisenberg, στην εξίσωση του *Schrödinger,* Dirac κ.λ.π. Οι εξισώσεις κίνησης έχουν την ίδια μορφή, είτε πρόκειται για υλικά σημεία, είτε για υλικό σύστημα ή στερεό. Διατηρούν την ίδια μορφή, είτε το κινητό είναι ελεύθερο είτε υπόκειται σε περιορισμούς.

Ομοίως, και όταν το σύστημα αναφοράς είναι αδρανειακό ή μη, ή όταν χρησιμοποιούνται καρτεσιανές ή άλλες συντεταγμένες.

1.5 Χρονική εξέλιξη συστήματος κατά Lagrange



ΕΙΚ 3. Τροχιές ανακλώμενου φωτός. Ο συντομώτερος δρόμος μεταξύ πηγής Α , κατόπτρου και παρατηρητού Β είναι η τροχιά, που ακολουθεί το φως ώστε η γωνία προσπτώσεως να είναι ίση με την γωνία ανακλάσεως.

Πριν ξεκινήσουμε με τις Lagrangian εξισώσεις αξίζει να αναφερθεί η αρχή του Hamilton. Αυτή είχε διατυπωθεί σε μια απλούστερη μορφή από τον Ήρωνα τον Αλεξανδρινό, κατά τον οποίον το φως διατρέχει κατά την διάδοσή του μεταξύ δύο σημείων του χώρου, γεωμετρικήν πορεία, που απαιτεί τον πιο σύντομο χρόνο (βραχυστόχρονον). Αυτή είναι και η βασική αρχή, που υπαγορεύει την διάδοση του φωτός στην γεωμετρική οπτική και είναι γνωστή σήμερα ως η αρχή του ελάχιστου χρόνου του Fermat. Ως παράδειγμα , έχουμε την ανάκλαση του φωτός (εικ. 3).

Η σωματιδιακή τροχιά στην κλασσική μηχανική, καθορίζεται από τους νόμους του Newton, αλλά αποδεικνύεται ότι οι τελευταίοι είναι ισοδύναμοι με την αρχή του Hamilton, ότι δηλαδή τα σωματίδια επιλέγουν τέτοιου είδους τροχιές μεταξύ δύο σημείων, ώστε η αντίστοιχη δράση να είναι ελάχιστη.

Αν K η κινητική ενέργεια και U η δυναμική ενέργεια ενός φυσικού συστήματος, τότε :

$$L(x,\dot{x}) = K - U(x) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - U(x) \quad (5)$$

όπου L η συνάρτηση Lagrange (Lagrangian). Θεωρούμε σωματίδιο, που κινείται από την χρονική στιγμή t_1 μέχρι την χρονική στιγμή t_2. Τότε η κίνηση γίνεται κατά τέτοιον τρόπο, ώστε η τροχιά που αντιστοιχεί σε ελάχιστη δράση είναι αυτή την οποία θα ακολουθούσε το σωματίδιο αν σε κάθε σημείο υπάκουε την εξίσωση κίνησης του Newton. Υποθέτουμε ότι τα x και u=dx/dt μεταβάλλονται ελαφρώς σε κάθε σημείο της τροχιάς του σωματιδίου, εκτός από τα σημεία στα άκρα που είναι σταθερά.

Το ολοκλήρωμα δράσης και η μεταβολή του δίνονται από τους τύπους :

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(x,\dot{x})dt \qquad \delta I = \int_{t_1}^{t_2} \delta L(x,\dot{x})dt$$

Η εξέλιξη του συστήματος από t_1 σε t_2 γίνεται μέσω μιας σειράς δυναμικών καταστάσεων, από $L(t_1)$ σε $L(t_2)$, που συγκροτούν μίαν ατραπόν. Η αρχή του Hamilton δέχεται, ότι η φύση, μεταξύ όλων των δυνατών ατραπών, επιλέγει εκείνη, που ελαχιστοποιεί το ολοκλήρωμα δράσης I. Η φαινομενικά απλή αυτή αρχή αποτελεί τον ακρογωνιαίον λίθον των περισσότερων φυσικών θεωριών, συμπεριλαμβανομένων και των θεωριών της σχετικότητας και των κβαντικών πεδίων.

Η μεταβολή της Λαγκρανζιανής δίνεται από την σχέση:

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta \dot{x} \quad (6)$$

Ολοκληρώνοντας κατά μέρη έχουμε :

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x}\delta x dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(d\delta x/dt)dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x}\delta x dt + \{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta x |_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}})\delta x dt\} \quad (7)$$

Επειδή τα ακραία σημεία της τροχιάς είναι σταθερά , ο μεσαίος όρος είναι μηδέν (το δx=0 στα άκρα). Άρα η μεταβολή της δράσης I είναι:

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \{\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}})\}\delta x dt \quad (8)$$

Σύμφωνα με την αρχή Hamilton, η δράση της πραγματικής τροχιάς είναι ελάχιστη, άρα οποιαδήποτε μεταβολή της τροχιάς αντιστοιχεί σε δI=0, που είναι η συνθήκη για ακρότατο (μέγιστο ή ελάχιστο) μιας συνάρτησης. Στην περίπτωση αυτή το δI=0 επιτυγχάνεται για μικρές αλλά κατά τα άλλα

αυθαίρετες μεταβολές δx μόνο όταν η υπό ολοκλήρωση ποσότητα μηδενίζεται.
Ετσι καταλήγουμε σε ένα σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων 2^ας^ τάξης, οι οποίες πρέπει να ικανοποιούνται σε κάθε σημείο της αληθούς

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = 0 \quad (9)$$

τροχιάς:

Οι εξισώσεις Lagrange πλεονεκτούν των εξισώσεων Newton, γιατί είναι αναλλοίωτες ως προς τους μετασχηματισμούς συστημάτων και άρα αν οι Lagrangian δύο συστημάτων είναι της ίδιας μορφής ή διαφέρουν κατά μία ποσότητα, που εξαρτάται από τον χρόνο μόνο, θα συμπεριφέρονται κατά τον ίδιο τρόπο. Η εξίσωση (8) πρέπει να προσέξουμε ότι ισχύει για συντηρητικά συστήματα, όπου οι δυνάμεις απορρέουν από συνάρτηση δυναμικού V, δηλαδή : $F = -\nabla U$ και η δυναμική ενέργεια U είναι συνάρτηση μόνο της θέσης.
Ας χρησιμοποιήσουμε για παράδειγμα τις εξισώσεις Lagrange για να περιγράψουμε την κίνηση ενός σωματιδίου που είναι υποχρεωμένο να κινείται πάνω στον άξονα x και έχει δυναμική ενέργεια U(x). Η κινητική ενέργεια είναι :

$$K = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 \qquad (10)$$

οπότε:

$$\frac{\partial K}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial K}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad (11)$$

Επειδή $L = K - U$ και $F_x = -\partial U/\partial x$ θα έχουμε :

Παρατηρούμε ότι η τελευταία σχέση είναι η εξίσωση του Newton για

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial K}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial K}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} = 0 + F_x, \qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x}) - F_x = 0 \Leftrightarrow m\ddot{x} = F_x \Leftrightarrow F_x = ma_x$$

την κίνηση.

1.6 Χρονική εξέλιξη κατά Hamilton

Άλλος ένας τρόπος ισοδύναμος, με τον οποίο μπορεί να εκφραστεί η κλασσική μηχανική είναι του Hamilton. Αυτή αποτελεί το βασικό εργαλείο, για την μελέτη προβλημάτων της Κβαντικής Μηχανικής.
Ο Hamilton, διετύπωσε την κλασσική μηχανική με τέτοιο τρόπο, ώστε κάνει την μετάβαση από την κλασσική στην κβαντική μηχανική τόσο εύκολη, όσο η μικρή αλλά με τεράστιες συνέπειες αντικατάσταση από τον Heisenberg του μηδέν με το iħ. Επιπλέον, ο φορμαλισμός του οδηγεί κατ'ευθείαν, στην χρονικώς εξηρτημένη μορφή της εξίσωσης *Schrödinger*.
Η διαφορά των εξισώσεων Hamilton, με αυτές του Lagrange είναι ότι για να περιγράψουν την κατάσταση ενός συστήματος, χρησιμοποιούν κανονικές μεταβλητές q και p, που παριστάνουν την θέση και την ορμή του συστήματος είναι δε ανεξάρτητες και έχουν επικρατήσει των χωρικών συντεταγμένων. Η δυναμική του συστήματος περιγράφεται από τις μεταβλητές q(t), p(t) που είναι λύσεις των κανονικών εξισώσεων κινήσεως του Hamilton :

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (12) \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (13) \quad , \quad \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \quad (14)$$

Η συνάρτηση H(q,p,t) είναι χαρακτηριστική για το σύστημα και ονομάζεται Χαμιλτονιανή. Για τα συστήματα που θα εξετάσουμε, υποθέτουμε ότι υπάρχει μία
τέτοια συνάρτηση και παριστάνει την συνολική ενέργεια του συστήματος:

$$H(q,p,t) = \frac{p^2}{2m} + U(q,t) \quad (15)$$

Παρατηρούμε ότι οι εξισώσεις Hamilton είναι σύστημα εξισώσεων $1^{ης}$ τάξης, εν αντιθέσει με τις εξισώσεις του Newton και του Lagrange που είναι $2^{ας}$ τάξης.
Για παράδειγμα ας αναφέρουμε την απλή περίπτωση ενός σωματιδίου που είναι αναγκασμένο να κινείται πάνω στον άξονα x και έχει δυναμική ενέργεια U(x). Ως γνωστόν : p = mv ⇔ dx/dt = p/m (16)

F = ma ⇔ dp/dt = – dU/dx (17)

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (18) \quad , \quad \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial x} \quad (19)$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση (13) θα έχουμε :
οπότε σύμφωνα και με τις σχέσεις (14), (15) καταλήγουμε στις εξισώσεις κίνησης κατά Hamilton :
Αν ολοκληρώσουμε τις εξισώσεις (18), (19) θα πρέπει να εισάγουμε δύο σταθερές ολοκλήρωσης, που μπορούν να προσδιοριστούν από την αρχική

$$\frac{\partial}{\partial p} H(x,p) = \frac{dx}{dt} \quad (20) \quad , \quad \frac{\partial}{\partial x} H(x,p) = -\frac{dp}{dt} \quad (21)$$

κατάσταση χ(0), p(0). Οι εξισώσεις Hamilton, εκφράζουν μεγαλύτερη συμμετρία ως προς τις δύο μεταβλητές της κατάστασης x,p, ενώ αντίθετα η

ασυμμετρία των εξισώσεων του Newton αποτυπώνεται στο γεγονός ότι η συνάρτηση x(t) καθορίζεται από μια διαφορική εξίσωση $2^{ας}$ τάξης.
Με την πάροδο του χρόνου, το κλασσικό σύστημα διαγράφει μια σαφή και καθορισμένη τροχιά στον χώρο και κάθε χρονική στιγμή έχει μια ορισμένη θέση και μια ορισμένη ορμή. Ο χώρος των κανονικών συντεταγμένων και των ορμών ονομάζεται χώρος των φάσεων.

1.7 Αγκύλη Poisson (Poisson Bracket)

Μια άλλη σπουδαία απεικόνιση, που χρησιμοποιείται στην μοντέρνα κλασσική μηχανική, είναι αυτή που βασίζεται στην περιγραφή της αγκύλης Poisson. Αυτή η προσέγγιση είναι ιδιαίτερα χρήσιμη, στην μετάβαση από τις κλασσικές εξισώσεις, στις εξισώσεις κβαντομηχανικής, που γίνεται πολύ απλά, με αντικατάσταση των αγκύλων Poisson από τους κβαντομηχανικούς μεταθέτες (commutators) .
Τα παρατηρήσιμα μεγέθη της κλασσικής μηχανικής, είναι συναρτήσεις των κανονικών μεταβλητών και του χρόνου. Δεν υπάρχει ουσιώδης διαφορά, ανάμεσα στα καταστατικά μεγέθη και στα παρατηρήσιμα μεγέθη της κλασσικής μηχανικής.
Ένα μέγεθος f(q,p,t) μεταβάλλεται ως προς τον χρόνο, σύμφωνα με την

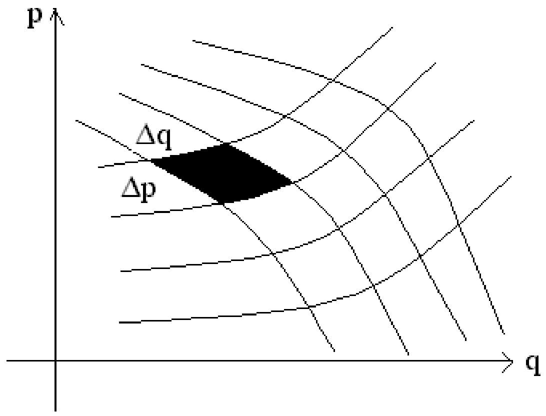
$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [f, H] \quad (22)$$

εξίσωση:

Η έκφραση [f,H] είναι η αγκύλη Poisson των μεγεθών H και f και ορίζεται από την σχέση:

$$[f, H] = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p} \quad (23)$$

Στην κβαντομηχανική μια τέτοια περιγραφή είναι αδύνατη. Η θέση και η ορμή των συστημάτων δεν γίνεται να οριστούν ταυτόχρονα εφόσον δεν είναι δυνατό να μετρηθούν ταυτόχρονα. Τα δύο αυτά μεγέθη είναι συμπληρωματικά και ικανοποιούν την αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg **:** $\Delta p.\Delta q \geq \hbar/2$ (24).



ΕΙΚ. 4 Το εμβαδόν κάθε μίας κυψελίδας στον χώρο των φάσεων είναι : ђ/2

Αν χρησιμοποιήσουμε τον χώρο των φάσεων στην κβαντομηχανική, τότε ο χώρος αυτός δεν είναι δυνατόν να περιέχει σημεία, αλλά κυψελίδες με εμβαδόν μεγαλύτερο ή ίσο το πολύ με την ποσότητα ђ/2 .
Μερικές ιδιότητες της αγκύλης Poisson: $[q,p] = -[p,q]$, $[q_i,q_j] = 0$, $[p_i,p_j] = 0$, $[q_i,p_j] = \delta_{ij}$, όπου δ_{ij} το δέλτα του Kronecker ($\delta_{ij} = 0$ για $i \neq j$ και $\delta_{ij} = 1$ για $i = j$).
Ας γράψουμε για παράδειγμα τις εξισώσεις κίνησης κατά Hamilton, ενός κλασσικού συστήματος , με την χρήση αγκύλης Poisson :

$$[q,H] = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} \quad (25), \qquad [p,H] = -\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p} \quad (26)$$

Σ'αυτό το σημείο, είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι η σχέση που συνδέει την αγκύλη Poisson της κλασσικής φυσικής, με τον κβαντομηχανικό μεταθέτη είναι:

$$[u,v]_{PB} \rightarrow \frac{1}{a}(uv - vu) = \frac{1}{a}[u,v]_{QM} \quad (27)$$

όπου οι δείκτες PB και QM σημαίνουν αγκύλη Poisson και κβαντομηχανική αντίστοιχα. Θέτοντας α = iħ παίρνουμε σχέσεις πολύ σημαντικές στην κβαντική μηχανική.

1.8 Η διατύπωση των Hamilton-Jacobi

Αυτή αποτελεί μια άλλη περιγραφή της κλασσικής μηχανικής και μας επιτρέπει να κάνουμε μία επέκταση, που θα μας οδηγήσει στην κυματομηχανική και στην εξίσωση του *Schrödinger*. Μας επιτρέπει δε να εκφράσουμε την συμπεριφορά ενός σωματιδίου με την περιγραφή ενός κύματος. Η εξίσωση Hamilton-Jacobi είναι η εξής:

$$H(q_1,...q_n,\frac{\partial F}{\partial q_1},...,\frac{\partial F}{\partial q_n},t)+\frac{\partial F}{\partial t}=0 \qquad (28)$$

όπου Η είναι η Hamiltonian του προβλήματος και F είναι η γεννήτρια συνάρτηση των κανονικών μετασχηματισμών.

Η σχέση (28) είναι μία διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης με n+1 ανεξάρτητες μεταβλητές $q_1,\dots,q_n,t$ και με μερικές παραγώγους ως προς την γεννήτρια συνάρτηση F.

<u>Γενικευμένες συντεταγμένες</u>: Πολλές φορές, γίνεται απλούστερη η μελέτη του υλικού συστήματος, εκφράζοντας την κίνηση αυτού σε όρους άλλου συστήματος συντεταγμένων, μη καρτεσιανού. Σε πολλά προβλήματα, τα υλικά σημεία του συστήματος δεν είναι ελεύθερα, αλλά υπόκεινται σε περιορισμούς όσον αφορά στην κίνησή τους. Στις περιπτώσεις αυτές, το πλεονέκτημα του να χρησιμοποιήσουμε ένα γενικότερο σύστημα συντεταγμένων είναι προφανές. Για παράδειγμα, έστω δύο υλικά σημεία, που συνδέονται με στερεά αβαρή ράβδο. Η μελέτη της κίνησης αυτού του συστήματος μπορεί να γίνει με την χρήση πέντε παραμέτρων (τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες του πρώτου σημείου x_1,y_1,z_1 και τις δύο γωνίες φ,θ που καθορίζουν την διεύθυνση της ράβδου), αντί των έξι καρτεσιανών συντεταγμένων x_1,y_1,z_1 x_2,y_2,z_2. Γενικά οι παράμετροι, έστω $q_1,\dots,q_n$, των οποίων οι τιμές σε κάθε δοθείσα χρονική στιγμή t ορίζουν πλήρως την θέση ενός υλικού συστήματος, ονομάζονται γενικευμένες συντεταγμένες. Οι παράγωγοι ως προς τον χρόνο των γενικευμένων συντεταγμένων ονομάζονται γενικευμένες ταχύτητες. Οι γενικευμένες συντεταγμένες δεν είναι ανάγκη να έχουν διαστάσεις μήκους. Αυτές μπορεί να είναι ποσότητες αδιάστατες π.χ. γωνίες, ή με διαστάσεις ενέργειας, εμβαδού, κ.α.

<u>Κανονικοί μετασχηματισμοί</u> : έστω μηχανικό σύστημα n βαθμών ελευθερίας, που εκφράζεται με τις γενικευμένες συντεταγμένες $q_1,\dots,q_n$, και τις γενικευμένες ορμές $p_1,\dots,p_n$. Η γενική μορφή των μετασχηματισμών είναι :

$$Q_i = Q_i\,(q_j,p_j,t)\ , \qquad P_i = P_i\,(q_j,p_j,t) \qquad (I)$$

ή

$$q_j = q_j\,(Q_i,P_i,t)\ , \qquad p_j = p_j\,(Q_i,P_i,t) \qquad (II)$$

Κύριοι σκοποί της θεωρίας μετασχηματισμών στην διατύπωση Hamilton είναι:

A) ο προσδιορισμός των μετασχηματισμών, που διατηρούν την μορφή των εξισώσεων Hamilton και

B) η εύρεση των κατάλληλων μετασχηματισμών, για τους οποίους η Hamiltonian $H(q_j,p_j,t)$ μετασχηματίζεται σε συνάρτηση απλής μορφής. Οι αρχικές μεταβλητές (q_j,p_j) ικανοποιούν τις εξισώσεις Hamilton:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad , \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad , \quad j = 1, 2, \ldots n \quad (III)$$

Τώρα απαιτείται να υπάρχει μία συνάρτηση των νέων μεταβλητών $H'(Q_i,P_i,t)$ τέτοια ώστε οι διαφορικές εξισώσεις της κίνησης να έχουν την μορφή Hamilton:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} \quad , \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n \quad (IV)$$

Οι μετασχηματισμοί, που διατηρούν την μορφή των εξισώσεων Hamilton ονομάζονται “κανονικοί μετασχηματισμοί”.
Γεννήτρια συνάρτηση του μετασχηματισμού ονομάζεται μία αυθαίρετη συνάρτηση $F(q,Q,t)$ δηλαδή μία συνάρτηση των παλαιών και των νέων γενικευμένων συντεταγμένων, με την οποία η Hamiltonian μπορεί να πάρει απλή μορφή, οπότε απλουστεύεται και η λύση του προβλήματος. Ο κανονικός μετασχηματισμός που απορρέει, ορίζεται από τις σχέσεις:

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} \quad , \quad P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} \quad (V)$$

η δε μετασχηματισμένη Hamiltonian είναι:

$$H' = H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (VI)$$

Η εξίσωση Hamilton-Jacobi σχέση (28) , προέρχεται από την υπόθεση ότι η F είναι τέτοια ώστε να μηδενίζει το 2^o μέλος της σχέσης (VI), οπότε $H'= 0$ και από τις εξισώσεις Hamilton (IV), προκύπτουν :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} = 0 \quad , \quad \dot{P}_i = \frac{\partial H'}{\partial Q_i} = 0 \quad (VII)$$

Άρα βγαίνει το συμπέρασμα ότι οι νέες κανονικές μεταβλητές είναι σταθερές της κίνησης, δηλαδή : $Q_i = a_i$ και $P_i = b_i$ όπου οι 2n το πλήθος σταθερές a_i, b_i εξαρτώνται από τις αρχικές συνθήκες.

Παρακάτω συνοψίζονται σε ένα πίνακα οι θεμελιώδεις κλασσικοί νόμοι της Φυσικής :

ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΗΧ/ΚΗ	ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΠΕΔΙΩΝ	ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ
$F = \frac{dp}{dt} (\nu.\ Newton)$	ΗΛΕΚΤΡΟΜ / ΚΟ ΠΕΔΙΟ	
	$\nabla \mathrm{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla \mathrm{B} = 0$	
	$\nabla \times \mathrm{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t}$	
	$\nabla \times B = \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} J$	$\Delta S \geq 0$
$\nabla^2 \psi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$	$F = q(E + \frac{1}{c} u \times B)$	$S = k \ln P$
(ΕΞ. ΚΥΜΑΤΟΣ)	ΒΑΡ / ΚΟ ΠΕΔΙΟ	
	$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2} \hat{r}$	

όπου ρ είναι η πυκνότητα φορτίου, J η πυκνότητα ρεύματος.

Κ Ε Φ Α Λ Α Ι Ο 2

2.1 Βασικές ιδέες κβαντομηχανικής

Στην περιοχή της κβαντομηχανικής, οι νόμοι της Φυσικής, όπως τους γνωρίζουμε από την καθημερινή εμπειρία παύουν να ισχύουν. Τα γεγονότα πλέον κυβερνώνται από τις πιθανότητες. Η αλυσίδα αίτιο-αποτέλεσμα σπάει, εφόσον επιτρέπεται η εμφάνιση αποτελεσμάτων χωρίς αιτίες. Η κλασσική μηχανική δεν είναι παρά μια προσεγγιστική παραλλαγή της κβαντομηχανικής.

Η κβαντομηχανική μπορούμε να πούμε ότι στηρίζεται σε έξι βασικές ιδέες, που είναι:

1) Το διάκριτο: Στον μικρόκοσμο υπάρχουν φυσικά μεγέθη, τα οποία υπό ορισμένες συνθήκες παίρνουν ορισμένες μόνο τιμές (διάκριτες). Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται κβάντωση. Για παράδειγμα: σύμφωνα με τον Planck (που βασίστηκε στην ακτινοβολία του μέλανος σώματος), αντί της διαίρεσης της διαθέσιμης ενέργειας σε άπειρο αριθμό τμημάτων, αυτή διαιρείται σε πεπερασμένο μόνον αριθμό τμημάτων, όπου κάθε τέτοιο τμήμα έχει ενέργεια $E=hf$, όπου $h=6{,}6256.10^{-34}$Js (σταθερά του Planck) , E το κβάντο ενέργειας και f η συχνότητα της ακτινοβολίας.

2) Η πιθανότητα: Στην κβαντική μηχανική είμαστε υποχρεωμένοι να απομακρυνθούμε από τις αντιλήψεις της κλασσικής μηχανικής και να δεχθούμε τον πιθανοκρατικό χαρακτήρα των φυσικών φαινομένων του μικρόκοσμου. Εδώ η κυματοσυνάρτηση Ψ, με την βοήθεια της έννοιας της πιθανότητας, μας παρέχει μια εικόνα των μελλοντικών καταστάσεων ενός σωματιδίου. Η ένταση του κύματος σε κάποιο σημείο του χώρου, είναι ένα μέτρο της πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο σ’ εκείνο το συγκεκριμένο σημείο.

3) Δημιουργία και καταστροφή: Όλα τα σωμάτια μπορούν να δημιουργηθούν ή να καταστραφούν. Το φωτόνιο, για παράδειγμα είναι ένα σωμάτιο, που εμφανίζεται και εξαφανίζεται κατά τρόπο, που μοιάζει με “έκρηξη” σε ατομική κλίμακα.

4) Η δυαδικότητα σωματίου-κύματος: Το περιεχόμενο της κβαντικής θεωρίας συνίσταται στην διαπίστωση, ότι όλα τα σωμάτια και τα πεδία έχουν ταυτόχρονα σωματιδιακό και κυματικό χαρακτήρα. Αυτή η ιδέα, πηγάζει από τον Louis de Broglie, που διετύπωσε την πρόταση: “αν τα φωτεινά κύματα συμπεριφέρονται και σαν σωμάτια, γιατί δεν θα έπρεπε τα ηλεκτρόνια να συμπεριφέρονται και σαν κύματα;”. Πρώτος ο Einstein (1905), εισήγαγε το φωτόνιο για την ερμηνεία του φωτοηλεκτρικού φαινομένου.

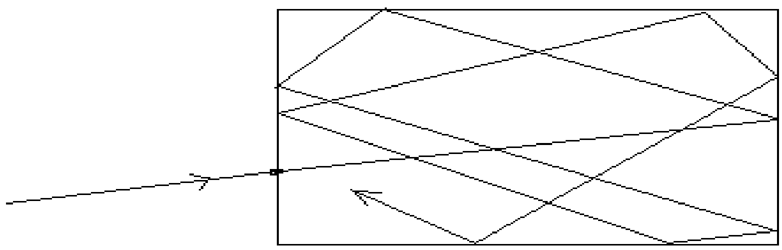
Αργότερα, ο Compton (1923) με το πειραματικό γεγονός, ότι τα φωτόνια είναι σε θέση να συγκρούονται με ηλεκτρόνια. Ακολούθησε ο de Broglie το (1924), με την υπόθεση ότι ένα σωμάτιο με ορμή $p = mv$, μπορεί να συμπεριφέρεται ως κύμα με μήκος κύματος $\lambda = h/p$. Τέλος με την πειραματική διαπίστωση των Davisson – Germer (1927), ότι τα ηλεκτρόνια περιθλώνται από έναν κρύσταλλο, όπως συμβαίνει το ίδιο φαινόμενο και στις ακτίνες Χ. Ο Einstein εξάλλου, είχε προτείνει ότι ο κυματικός χαρακτήρας του φωτός προέρχεται από την μέση συμπεριφορά ενός μεγάλου αριθμού φωτονίων. Αυτό είναι μεν σωστό, αλλά σήμερα γνωρίζουμε ότι και ένα μοναδικό φωτόνιο έχει κυματικές ιδιότητες.

5) Επαλληλία κυματοσυναρτήσεων: Η κβαντική κυματοσυνάρτηση Ψ, μπορεί να συγκριθεί με την μετατόπιση ενός κύματος π.χ. ηχητικού ή με το ηλεκτρικό πεδίο ενός κύματος φωτός. Οι ιδέες της συμφωνίας, επαλληλίας, περιθλάσεως, συμβολής και διαθλάσεως εφαρμόζονται στα κλασσικά αλλά και στα κβαντικά κύματα.

6) Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg: Θεωρείται ότι είναι το κεντρικό χαρακτηριστικό της κβαντικής θεωρίας. Η φύση θέτει θεμελιώδεις περιορισμούς στην ακρίβεια, με την οποία μπορούμε να μετρήσουμε ορισμένες φυσικές ποσότητες.

2.2 Σωματιδιακές ιδιότητες των κυμάτων

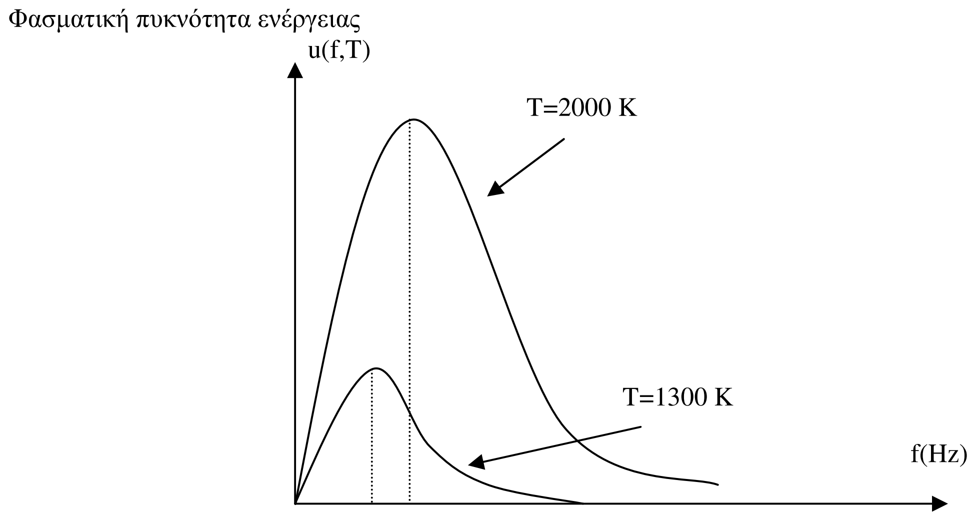
2.2.1) Ακτινοβολία μέλανος σώματος:



ΕΙΚ. 5. Προσέγγιση μέλανος σώματος με κοίλο αντικείμενο, από μία οπή του οποίου προσπίπτει φωτεινή ακτίνα.Η οπή έχει τις ιδιότητες του μέλανος σώματος,γιατί κάθε ακτίνα,που μπαίνει απ'αυτήν,παγιδεύεται και δεν έχει πλέον δυνατότητα εξόδου.

Η αφετηρία της κβαντικής θεωρίας τοποθετείται το 1900, όταν ο Planck παρήγαγε τους νόμους ακτινοβολίας του μέλανος σώματος. Όλοι γνωρίζουμε ότι αν πυρακτωθεί ένα σώμα π.χ. κομμάτι μέταλλο, εκπέμπει ορατό φως με χρώμα που εξαρτάται από την θερμοκρασία του, αλλά επίσης και από το υλικό από το οποίο είναι κατασκευασμένο το σώμα, το σχήμα του και από την φύση της επιφάνειάς του. Η ακτινοβολία που εκπέμπεται από ένα σώμα λόγω της θερμοκρασίας του, ονομάζεται θερμική ακτινοβολία, έχει συνεχές φάσμα, στο οποίο παρουσιάζονται όλες οι συχνότητες. Σε θερμοκρασία δωματίου, το μεγαλύτερο μέρος της ακτινοβολίας, βρίσκεται στο υπέρυθρο τμήμα του φάσματος και ως εκ τούτου είναι αόρατο. Η ικανότητα ενός σώματος να ακτινοβολεί σχετίζεται άμεσα με την ικανότητά του να απορροφά ακτινοβολία. Αυτό συμβαίνει, διότι ένα σώμα σε σταθερή θερμοκρασία βρίσκεται σε θερμική ισορροπία με το περιβάλλον του και θα πρέπει να εκπέμπει, με τον ίδιο ρυθμό που απορροφά ενέργεια. Σαν μέλαν

σώμα ονομάζουμε το ιδανικό σώμα, που απορροφά όλη την ακτινοβολία, που προσπίπτει σ' αυτό, ανεξάρτητα από την συχνότητά του.

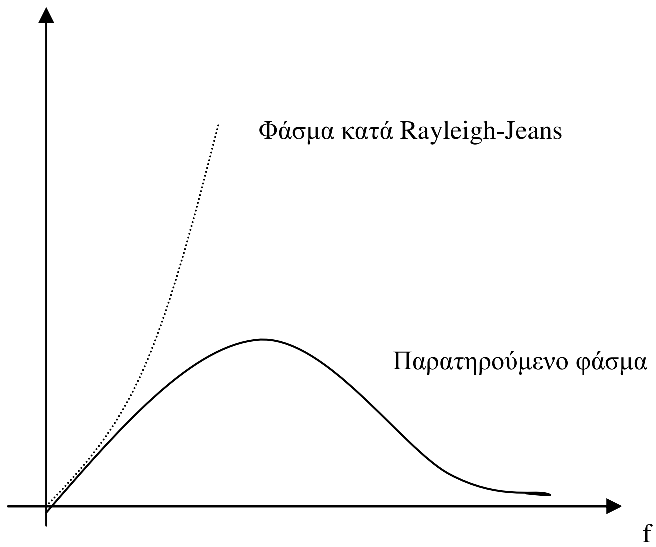


ΕΙΚ. 6. Φάσμα ακτινοβολίας μέλανος σώματος για δύο θερμοκρασίες

Εργαστηριακά, ένα μέλαν σώμα προσεγγίζεται από ένα κοίλο αντικείμενο με μία πολύ μικρή οπή στο τοίχωμά του. Οποιαδήποτε ακτινοβολία προσπίπτει στην οπή, μπαίνει στην κοιλότητα και παγιδεύεται με διαδοχικές ανακλάσεις μέχρι να απορροφηθεί. Πειραματικά μελετούμε την ακτινοβολία του μέλανος σώματος, παρατηρώντας τι βγαίνει από την οπή της κοιλότητας. Διαπιστώνουμε ότι ακτινοβολεί ενέργεια με μεγαλύτερο ρυθμό, από οποιοδήποτε άλλο σώμα και επίσης ακτινοβολεί περισσότερο όταν είναι θερμό παρά όταν είναι ψυχρό, το φάσμα δε του θερμού μέλανος σώματος έχει κορυφή, σε ψηλότερη συχνότητα από την κορυφή του φάσματος του ψυχρού.

Το πρόβλημα του φάσματος του μέλανος σώματος να έχει την μορφή που φαίνεται στην εικ. 6, διερευνήθηκε αρχικά από τους Rayleigh – Jeans, χρησιμοποιώντας κλασσική μηχανική. Αυτοί θεώρησαν μία κοιλότητα θερμοκρασίας T, της οποίας τα τοιχώματα είναι τέλειοι ανακλαστές. Η ακτινοβολία στο εσωτερικό αυτής της κοιλότητας, υπέθεσαν ότι είναι μια σειρά στάσιμων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. Γενίκευσαν λοιπόν το πρόβλημα δημιουργίας στάσιμων κυμάτων από μία παλλόμενη χορδή, σε τρεις διαστάσεις, οπότε χρησιμοποιώντας και το θεώρημα ισοκατανομής ενέργειας, υπολόγισαν την ενέργεια u(f,T)df ανά μονάδα όγκου της κοιλότητας στην περιοχή συχνοτήτων από f έως f + df.

Ο τύπος των Rayleigh – Jeans είναι: $$u(f,T) = (8 \pi f^2 k T / c^3) \qquad (29)$$



ΕΙΚ. 7. Σύγκριση του τύπου Rayleigh-Jeans για το φάσμα ακτινοβολίας μέλανος σώματος με το παρατηρούμενο φάσμα.

Η συνάρτηση u(f,T) ονομάζεται φασματική πυκνότητα και ορίζεται ως εξής:

$$u(f,T) = \frac{1}{V}\frac{dE}{df}$$

όπου dE το μέρος της ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας της κοιλότητας που αντιστοιχεί στο διάστημα συχνοτήτων από f μέχρι f+df και V ο όγκος της κοιλότητας, δηλαδή είναι η ανά μονάδα περιοχής συχνότητας εκπεμπόμενη ενέργεια ανά μονάδα όγκου.

Από τον τύπο (29) παρατηρούμε το λάθος, αφού αυξανομένης της συχνότητας αυξάνεται ο ρυθμός ακτινοβολίας και τείνει στο άπειρο αν η συχνότητα τείνει στο άπειρο, πράγμα που δεν συμφωνεί με το παρατηρούμενο φάσμα. Αυτή η διαφωνία μεταξύ θεωρίας και παρατήρησης έγινε γνωστή με το όνομα “υπεριώδης καταστροφή”, αφού η απόκλιση αυξάνει στο υπεριώδες άκρο του φάσματος.

Το λάθος, στο οποίο οδηγήθηκαν οι Rayleigh – Jeans, οφείλεται στο ότι το θεώρημα ισοκατανομής των ενεργειών ισχύει μόνο για συνεχή κατανομή ενεργειών. Σε μια καλύτερη προσέγγιση έφθασε ο Wilhelm Wien, που υπέθεσε ότι υπάρχει μια αναλογία μεταξύ της φασματικής πυκνότητας ενέργειας της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος και της κατανομής ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann για τα μόρια ιδανικού αερίου. Έτσι κατέληξε στον τύπο του Wien, που δίνει την πυκνότητα ενέργειας των φωτονίων στην

$$u(f,T) = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{f^3}{e^{hf/kT}} \qquad (30)$$

κοιλότητα :

Ο τύπος του Wien, δίνει πολύ καλά αποτελέσματα σε μεγάλες συχνότητες, αλλά ξεφεύγει αξιοσημείωτα στις μικρές συχνότητες. Η αποτυχία αυτή οδήγησε τον

Planck στην ανακάλυψη, ότι αν η εκπομπή του φωτός είναι κβαντικό φαινόμενο έχουμε ένα σωστό τύπο για την ακτινοβολία του μέλανος σώματος.
Ο Planck θεώρησε ότι τα άτομα, που αποτελούν τα τοιχώματα της κοιλότητας, συμπεριφέρονται σαν μικροσκοπικοί ηλεκτρομαγνητικοί ταλαντωτές, που ο καθένας έχει μια χαρακτηριστική συχνότητα ταλάντωσης. Αυτοί οι ταλαντωτές εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ενέργεια μέσα στην κοιλότητα, αλλά και απορροφούν ενέργεια από αυτήν. Άρα, μπορούμε να βρούμε τα χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας από τα χαρακτηριστικά των ταλαντωτών, με τους οποίους βρίσκονται σε ισορροπία. Κατέληξε τελικά στην εξίσωση :

$$u(f,T) = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{f^3}{e^{hf/kT} - 1} \qquad (31)$$

που είναι ο τύπος του Planck για την φασματική πυκνότητα ενέργειας της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος και συμφωνεί απόλυτα με τα πειραματικά αποτελέσματα. Βέβαια, για να καταλήξει ο Planck στην εξίσωση (31), έκανε τις εξής δύο υποθέσεις για τους ατομικούς ταλαντωτές:
α) ο ταλαντωτής δεν μπορεί να έχει οποιαδήποτε ενέργεια αλλά μόνο ενέργειες, που είναι πολλαπλάσιες του hf . Αυτό σημαίνει ότι η ενέργεια είναι κβαντισμένη.
β) Οι ταλαντωτές δεν ακτινοβολούν ενέργεια κατά συνεχή τρόπο, αλλά κατά "άλματα ή εκρήξεις". Αυτά τα "άλματα ή εκρήξεις" τα ονόμασε κβάντα και εκπέμπονται όταν ένας ταλαντωτής πέφτει από μια κβαντισμένη ενεργειακή κατάσταση σε άλλη. Η ενέργεια των κβάντων δίνεται από την σχέση:

$$E = h\,f \qquad (32)$$

Για όσο χρόνο ο ταλαντωτής παραμείνει σε μία από τις κβαντισμένες ενεργειακές καταστάσεις, ούτε εκπέμπει αλλά και ούτε απορροφά ενέργεια.
Ένα άλλο αποτέλεσμα που προκύπτει από τον τύπο του Planck, είναι η συνολική πυκνότητα ενέργειας για όλες τις συχνότητες:

$$u(f,T)_{ολ.} = \int_0^\infty u(f,T)df = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3h^3}T^4 = aT^4 \qquad (33)$$

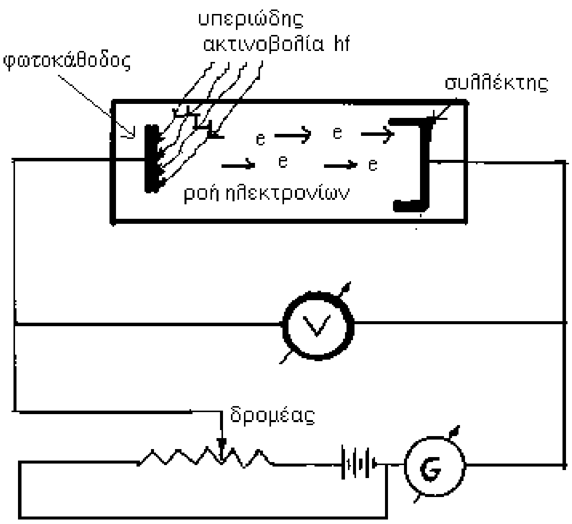
όπου α είναι παγκόσμια σταθερά. Άρα η ολική εκπεμπόμενη ισχύς, που ακτινοβολείται από ένα αντικείμενο, ανά μονάδα επιφανείας είναι:

$$R = \varepsilon\sigma T^4 \qquad (34) \qquad \text{(Νόμος των Stefan-Boltzmann)}$$

όπου $\sigma = \alpha c/4 = 5.67\text{x}10^{-8}\ \text{W/m}^2.\text{K}^4$ (σταθερά Stefan-Boltzmann) και ε είναι ένας αδιάστατος αριθμός, που ονομάζεται αφετική ικανότητα ή συντελεστής εκπομπής και εξαρτάται από την φύση της επιφάνειας του εκπομπού. Οι τιμές που παίρνει το ε είναι από 0, για τέλειο ανακλαστή που δεν εκπέμπει καθόλου, έως 1, για το μέλαν σώμα.

<u>Παρατήρηση:</u> Για κλασσικά συστήματα η σταθερά του Planck h θα μπορούσε να είναι μηδέν. Πράγματι, ένας τρόπος να μετατρέψουμε κβαντικούς τύπους σε αντίστοιχους οριακά κλασσικούς,είναι να θέσουμε $h \rightarrow 0$.

2.2.2) <u>Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο</u>

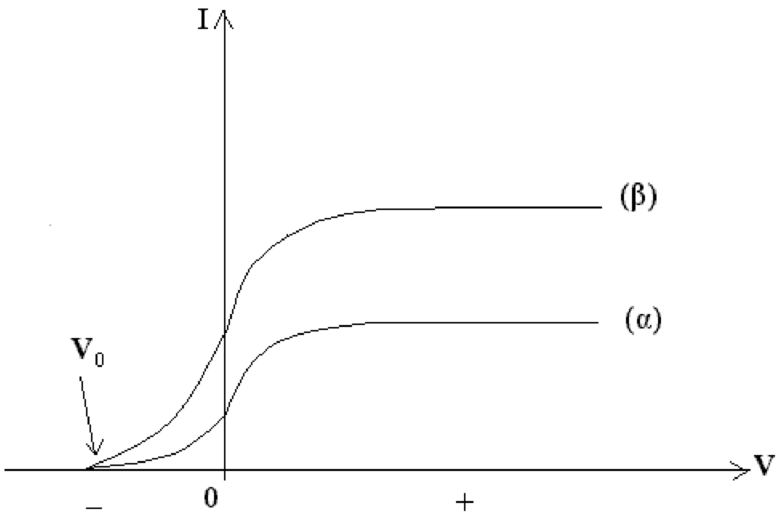


ΕΙΚ. 8 Πειραματική παρατήρηση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου. Υπεριώδες φως , που προσπίπτει σε μια μεταλλική επιφάνεια απελευθερώνει ηλεκτρόνια.

Στην εικ. 8 βλέπουμε ένα αερόκενο σωλήνα, που περιέχει δύο ηλεκτρόδια, την μεταλλική πλάκα (φωτοκάθοδος), πάνω στην οποία πέφτει φως μεγάλης συχνότητας (υπεριώδης ακτινοβολία) και τον συλλέκτη. Τα ηλεκτρόδια συνδέονται με κατάλληλη διάταξη με μία ηλεκτρική πηγή, στην οποία μπορούμε με κάποιον μηχανισμό να αλλάζουμε την πολικότητα. Τα ηλεκτρόνια, που αποσπώνται από την μεταλλική πλάκα ονομάζονται φωτοηλεκτρόνια και μπορούν να ανιχνευτούν σαν ρεύμα καθώς έλκονται από τον συλλέκτη, λόγω της διαφοράς δυναμικού V. Το γαλβανόμετρο G μετρά το φωτοηλεκτρικό ρεύμα.

Αν η διαφορά δυναμικού V έχει θετικό πρόσημο (μεταλλική πλάκα συνδεδεμένη με τον αρνητικό πόλο της πηγής), τότε αυξανομένης της V, το ρεύμα παίρνει μία οριακή σταθερή τιμή (ρεύμα κόρου), οπότε όλα τα ηλεκτρόνια συλλέγονται από τον συλλέκτη. Αν ελαττώσουμε την V στο μηδέν και μετά την αντιστρέψουμε, το φωτοηλεκτρικό ρεύμα δεν μηδενίζεται αμέσως. Αυτό σημαίνει ότι τα ηλεκτρόνια εκπέμπονται από την μεταλλική πλάκα με πεπερασμένη ταχύτητα και μερικά θα καταφέρουν να φθάσουν στον συλλέκτη. Αν όμως, κάνουμε αρκετά μεγάλη την ανάστροφη V , για κάποια τιμή αυτής, V_o , που ονομάζεται δυναμικό αποκοπής, το φωτοηλεκτρικό ρεύμα πέφτει στο μηδέν. Άρα η κινητική ενέργεια K_{max} του ταχύτερου εξερχόμενου ηλεκτρονίου δίνεται από την σχέση :

$$K_{max} = e\, V_o \qquad (35)$$



ΕΙΚ. 9. Γραφική παράσταση των μετρήσεων, που πάρθηκαν από την συσκευή της εικ. 8. Στην καμπύλη (β) , η ένταση του προσπίπτοντος φωτός είναι διπλάσια από αυτήν της καμπύλης (α).

Από την πειραματική μελέτη φθάνουμε στα εξής συμπεράσματα :

α) Η ένταση του ρεύματος, δηλαδή ο αριθμός των φωτοηλεκτρονίων, ανά μονάδα χρόνου, είναι ανάλογη με την φωτεινή ροή(δηλαδή την ένταση του προσπίπτοντος φωτός).

β) Η κινητική ενέργεια Κ των φωτοηλεκτρονίων, όπως και το δυναμικό αποκοπής V_0, είναι ανεξάρτητη από την φωτεινή ροή (εικ. 9).

γ) Τα φωτοηλεκτρόνια έχουν μέγιστη κινητική ενέργεια, που εξαρτάται από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας φωτεινής ακτινοβολίας.

δ) Πέρα από ορισμένο μήκος κύματος (οριακό μήκος κύματος) κανένα ηλεκτρόνιο δεν εκπέμπεται από την φωτοκάθοδο, έστω και αν αυξάνει η φωτεινή ροή.

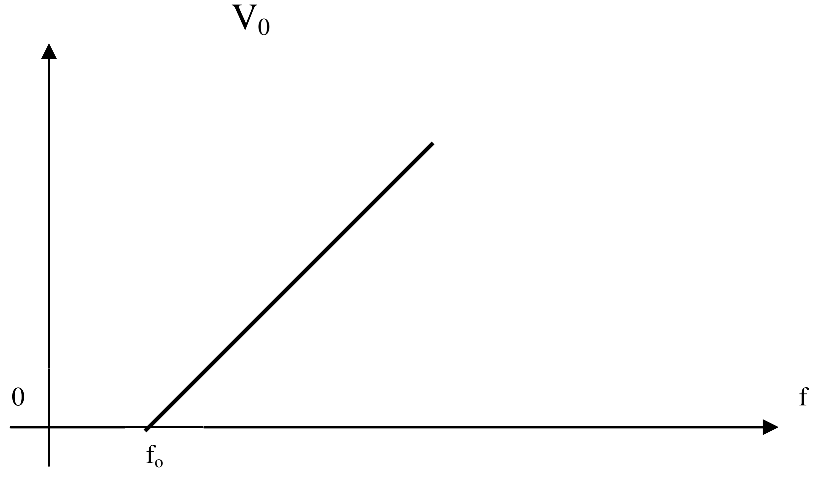
Τρία προβλήματα δημιουργήθηκαν για να ερμηνευτεί το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο με την βοήθεια της κλασσικής κυματικής θεωρίας του φωτός.

1) <u>Πρόβλημα έντασης</u>. Η ένταση Ε του ταλαντούμενου ηλεκτρικού πεδίου του φωτεινού κύματος αυξάνεται σε πλάτος ανάλογα με την ένταση Ι της φωτεινής δέσμης. Η ένταση Ι, δηλαδή ο ρυθμός με τον οποίο μεταφέρεται ενέργεια ανά μονάδα επιφανείας κάθετης προς την διεύθυνση διάδοσης του κύματος, εξαρτάται από τα μεγέθη του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου Ε και Β. Επειδή αυτά τα μεγέθη συνδέονται με την σχέση: $E = c\,B$, είτε το Ε είτε το Β περιγράφουν ικανοποιητικά την ένταση του κύματος. Συνήθως επιλέγεται το Ε .

Η ένταση Ι του κύματος δίνεται από την σχέση :

$$I = \varepsilon_O c\overline{E^2} \qquad (36)$$

όπου $\overline{E^2}$ το κατά μέσον όρο τετράγωνο του στιγμιαίου μεγέθους του ηλεκτρικού πεδίου του κύματος σε μία περίοδο. Επειδή η δύναμη που ασκείται στο ηλεκτρόνιο είναι : F = e E , η κινητική ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων θα αυξάνεται



ΕΙΚ. 10 Δυναμικό αποκοπής V_0 σε συνάρτηση προς την συχνότητα f του προσπίπτοντος φωτός. Αξιοσημείωτον είναι ότι η κλίση της γραμμής ισούται με h/e. Αυτό γιατί : $eV_0=hf-\varphi \Rightarrow V_0 = (hf-\varphi)/e \Rightarrow dV_0/df = h/e$.

όσο η φωτεινή δέσμη γίνεται πιο έντονη. Το πείραμα όμως δείχνει ότι η K_{max} είναι ανεξάρτητη από την ένταση του προσπίπτοντος φωτός (βλέπε εικ. 9).

2) Πρόβλημα συχνότητας: Σύμφωνα με την κυματική θεωρία, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο θα πραγματοποιείται για κάθε συχνότητα του φωτός, δεχόμενοι ότι το φως είναι αρκετά έντονο για να δώσει την απαιτούμενη ενέργεια, για την εξαγωγή των ηλεκτρονίων από την μεταλλική επιφάνεια. Πειραματικά όμως αυτό δεν συμβαίνει. Για κάθε μεταλλική επιφάνεια, υπάρχει μία χαρακτηριστική οριακή συχνότητα f_0, όπου για συχνότητες μικρότερες από αυτήν, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο εξαφανίζεται, ανεξάρτητα από την ένταση του φωτός (βλέπε εικ. 10).

3) Πρόβλημα χρονικής καθυστέρησης: Η ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων προέρχεται από την απορρόφηση του κύματος (φως), που προσπίπτει στην μεταλλική πλάκα. Αν το φως είναι αρκετά ασθενές, θα υπήρχε μια μετρήσιμη χρονική καθυστέρηση, μεταξύ της πρόσπτωσης του φωτός και της εξαγωγής του φωτοηλεκτρονίου. Πειραματικά όμως, δεν ανιχνεύθηκε ποτέ τέτοια καθυστέρηση.

Ο Einstein κατάφερε να δώσει μια εξήγηση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου υποθέτοντας, ότι αν το φως εκπέμπεται σε ξεχωριστά κβάντα, τότε θα απορροφάται και ως ξεχωριστά κβάντα (ή φωτόνια όπως τα ονόμασε). Όταν το φως προσπίπτει σε μία μεταλλική επιφάνεια, ένα μοναδικό φωτόνιο αλληλεπιδρά με ένα μοναδικό ηλεκτρόνιο, που ή απορροφά ολόκληρο το φωτόνιο ή δεν το απορροφά καθόλου. Η πιθανότητα να απορροφήσει ένα ηλεκτρόνιο περισσότερα του ενός φωτόνια είναι αμελητέα, γιατί ο αριθμός των φωτονίων που προσπίπτουν στην επιφάνεια του μετάλλου είναι πολύ μικρότερος από τα ηλεκτρόνια που υπάρχουν. Όλη η ενέργεια τότε του φωτονίου: E=hf , μεταβιβάζεται ακαριαία στο ηλεκτρόνιο. Ένα ηλεκτρόνιο, που θα αποδράσει από το μέταλλο , έχει όλη την ενέργεια του φωτονίου μείον την ενέργεια , που απαιτείται να ξοδέψει για να διαφύγει, λόγω του ότι υπάρχει μία ελκτική δύναμη που τραβά τα ηλεκτρόνια προς το εσωτερικό του μετάλλου. Αυτή η ενέργεια που απαιτείται ονομάζεται έργο εξαγωγής φ. Άρα η εξίσωση του Einstein για το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είναι:

$$hf = K_{max} - \varphi \iff 1/2\, mv^2_{max} = hf - \varphi \quad (37)$$

Από τις σχέσεις (35) και (37) έχουμε: $e V_o = hf - \varphi$ (38)

Το υπόλοιπο της ενέργειας hf – φ μετατρέπεται σε K_{max} του ηλεκτρονίου εφόσον αυτό δεν χάσει ενέργεια σε εσωτερικές κρούσεις, καθώς διαφεύγει από το μέταλλο.

Με αυτήν την υπόθεση, ο Einstein αντιμετώπισε και τα τρία προβλήματα και μέσω της εξίσωσής του (37), εξηγεί πλήρως τα πειραματικά δεδομένα. Για το πρόβλημα της έντασης, έχουμε ότι ο αριθμός των παραγομένων φωτοηλεκτρονίων (ένταση ρεύματος), είναι ανάλογος με τον αριθμό των φωτονίων (ένταση φωτός), που προσπίπτουν στην μεταλλική επιφάνεια. Η κινητική ενέργεια των φωτοηλεκτρονίων είναι ανεξάρτητη από τον αριθμό των φωτονίων (εξ. 37).

Το δεύτερο πρόβλημα της συχνότητας προκύπτει από την εξίσωση (37), βάζοντας την $K_{max} = 0$, οπότε $hf_0 = \varphi$. Εδώ φαίνεται ότι το φωτόνιο αν έχει ενέργεια hf_0 , εξάγεται το φωτοηλεκτρόνιο χωρίς να έχει κινητική ενέργεια. Αν η συχνότητα μειωθεί κάτω από την f_0 , το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο δεν πραγματοποιείται, ανεξάρτητα από την ένταση του φωτός, αφού το φωτόνιο δεν έχει αρκετή ενέργεια για να βγάκει το φωτοηλεκτρόνιο.

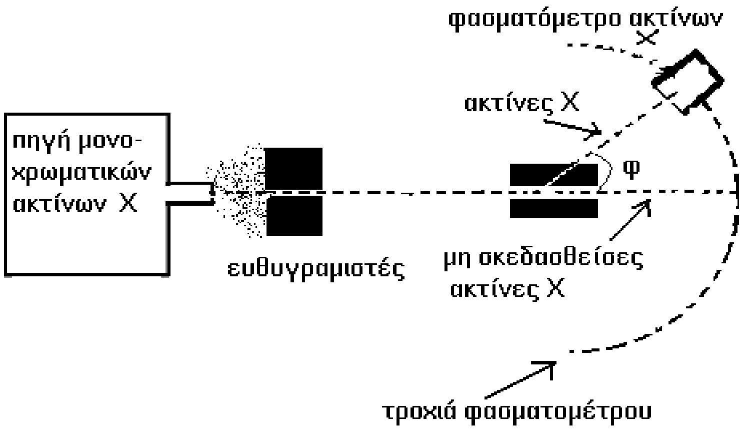
Το τρίτο πρόβλημα καταρρίπτεται από την θεωρία φωτονίου γιατί η απαιτούμενη ενέργεια ανήκει σε ένα περιορισμένο πακέτο (κβάντο) και δεν διασκορπίζεται ομοιόμορφα πάνω σε μεγάλη επιφάνεια, όπως στην κυματική θεωρία.

2.2.3) Φαινόμενο Compton:

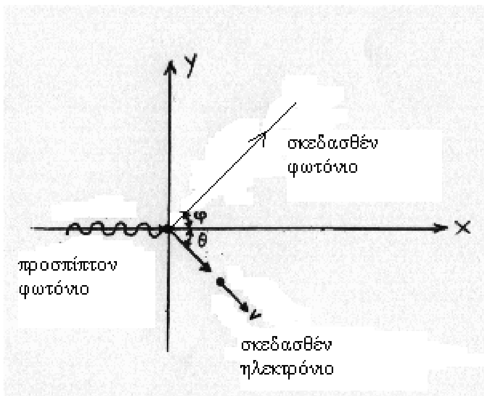
Άλλο ένα φαινόμενο που επιβεβαιώνει ότι το φωτόνιο είναι ένα συμπυκνωμένο πακέτο ενέργειας είναι το φαινόμενο Compton. Ο Compton άφησε δέσμη ακτίνων X, συγκεκριμένου μήκους κύματος λ, να προσπέσει σε κομμάτι γραφίτη και μέτρησε για διάφορες γωνίες σκεδάσεως φ, την ένταση σκεδαζομένων ακτίνων X, συναρτήσει του μήκους κύματος αυτών, οπότε κατέληξε στον εξής πειραματικό νόμο: “ η σκεδαζόμενη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχει μήκος κύματος μεγαλύτερο του αρχικού. Η τιμή του εξαρτάται από την γωνία σκέδασης”.

Σύμφωνα με την κλασσική θεωρία το ηλεκτρικό πεδίο του κύματος, θέτει το ηλεκτρόνιο σε αρμονική ταλάντωση με συχνότητα ίση με την συχνότητα του κύματος. Το ηλεκτρόνιο ακολούθως εκπέμπει αφού επιταχύνεται δευτερογενές ηλεκτρομαγνητικό κύμα ίδιας συχνότητας. Άρα η κλασσική θεωρία έρχεται σε αντίφαση με τα αποτελέσματα του πειράματος.

Η εξήγηση του φαινομένου Compton με την βοήθεια της κβαντικής θεωρίας είναι: το φωτόνιο συγκρούεται προς στιγμήν με το ηλεκτρόνιο, οπότε χάνει μέρος της ενέργειάς του, που ισούται με αυτό που απέκτησε το ηλεκτρόνιο ως



ΕΙΚ. 11. Πειραματική επίδειξη του φαινομένου Compton



ΕΙΚ. 12. Σκέδαση φωτονίου από ηλεκτρόνιο

κινητική ενέργεια Κ. Αν f είναι η συχνότητα του αρχικού φωτονίου, τότε η συχνότητα f΄ του σκεδαζομένου φωτονίου, θα είναι μικρότερη σύμφωνα με την αρχή διατήρησης ενέργειας: $hf - hf' = K$ (39). Ως γνωστόν, για σωμάτιο χωρίς μάζα (φωτόνιο) η σχέση, που συνδέει την ενέργεια με την ορμή είναι:

$E = pc \Leftrightarrow p = E/c$ και επειδή $E = hf$, θα έχουμε : $p = hf/c$ (40)

Αν εφαρμόσουμε αρχή διατήρησης ορμής στον άξονα χ (εικ.10), θα έχουμε:
$hf/c + 0 = (hf'/c)\cos\varphi + p\cos\theta$ (41), όπου p η τελική ορμή του ηλεκτρονίου. Στον άξονα y με αρχή διατήρησης ορμής θα έχουμε:

$0 = (hf'/c)\sin\varphi - p\sin\theta$ (42)

Πολλαπλασιάζουμε τις σχέσεις (41), (42) με το c και έχουμε:

$pc\cos\theta = hf - hf'\cos\varphi$ (43), $pc\sin\theta = hf'\sin\varphi$ (44)

Υψώνουμε στο τετράγωνο τις (43) , (44) και τις προσθέτουμε, οπότε σύμφωνα και με την σχέση: $\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$, καταλήγουμε στην σχέση:

$$p^2c^2 = (hf)^2 - 2(hf)(hf')\cos\varphi + (hf')^2 \qquad (45)$$

Από την ειδική θεωρία σχετικότητας γνωρίζουμε τους τύπους για την ολική ενέργεια:

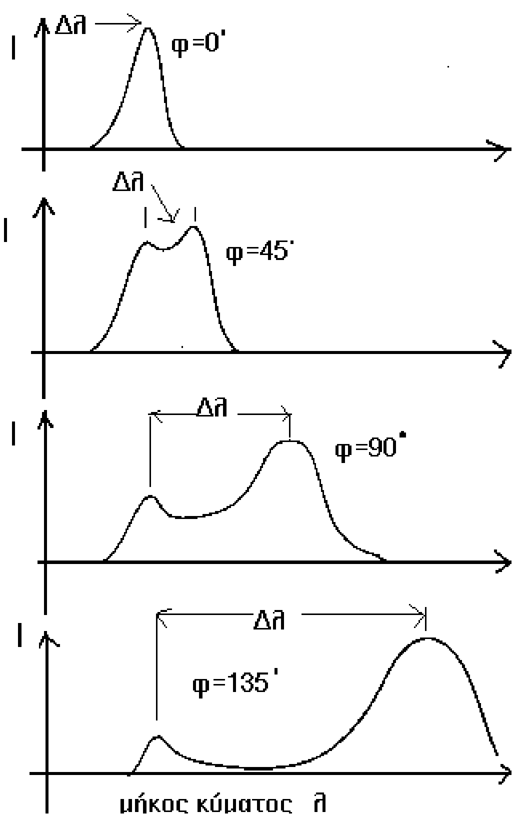
$$E = K + m_0c^2 \qquad (46)$$

$$E = (m_0^2c^4 + p^2c^2)^{1/2} \qquad (47)$$

Εξισώνοντας τα δεύτερα μέλη των (46), (47) παίρνουμε: $(K + m_0c^2)^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2 \Leftrightarrow p^2c^2 = K^2 + 2m_0c^2K$, οπότε εξαιτίας της (39), παίρνουμε: $p^2c^2 = (hf)^2 - 2(hf)(hf') + (hf')^2 + 2m_0c^2(hf - hf')$ και λόγω της (45) καταλήγουμε στην σχέση: $2m_0c^2(hf - hf') = 2(hf)(hf')(1-\cos\varphi)$ (48) Διαιρώντας τα μέλη της (48) με το $2h^2c^2$ και θέτοντας όπου $f/c = 1/\lambda$ και $f'/c = 1/\lambda'$, έχουμε την εξίσωση Compton :
Η ποσότητα : $\lambda_c = h/m_oc$ ονομάζεται μήκος κύματος Compton, ενώ $\Delta\lambda=\lambda'-$

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1-\cos\varphi) \qquad (49)$$

λ , δηλαδή η μεταβολή $\Delta\lambda$ είναι ανεξάρτητη από το μήκος κύματος λ του προσπίπτοντος φωτονίου, ενώ για $\varphi=180^0$ γίνεται μέγιστη, $\Delta\lambda_{max} = 2\lambda_c$.



ΕΙΚ. 13. Αποτελέσματα σκέδασης ακτίνων Χ . Το μήκος κύματος των σκεδαζομένων ακτίνων Χ προσδιορίζεται σε διάφορες γωνίες φ. Στην εικόνα φαίνεται η μετατόπιση κύματος όπως προβλέπεται από την εξ. (49). Ι στον κατακόρυφο άξονα είναι η σχετική ένταση.

2.2.4) Σκέδαση Thomson :

Αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο (2.2.3), ότι στο φαινόμενο Compton το φωτόνιο συγκρούεται με ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο του υλικού σκεδάσεως (π.χ. άνθρακας), που απορροφά μέρος της ενέργειας του φωτονίου και την μετατρέπει σε κινητική ενέργεια. Το ερώτημα που τίθεται είναι, τι θα συμβεί στην περίπτωση που είτε η ενέργεια που απορροφά το ηλεκτρόνιο, είναι μικρότερη από την ενέργεια σύνδεσής του μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα του στόχου (δηλαδή το ηλεκτρόνιο δεν είναι ελεύθερο αλλά δέσμιο στον κρύσταλλο), είτε η ενέργεια του φωτονίου που προσπίπτει πάνω στο ηλεκτρόνιο είναι πολύ μικρή. Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι αυτή την περίπτωση, την θεωρούμε σαν κρούση του φωτονίου με ολόκληρο το άτομο του στόχου και όχι με το ηλεκτρόνιο. Άρα η ενέργεια του φωτονίου απορροφάται από όλο τον κρύσταλλο. Επομένως στον τύπο του μήκους κύματος Compton $\lambda_c = h/m_0c$ αντί της μάζας του ηλεκτρονίου m_0 θα θεωρήσουμε την μάζα του ατόμου M_0, όπου φυσικά ισχύει: $M_0 >> m_0$, οπότε η αντίστοιχη μετατόπιση Compton $\Delta\lambda$, σύμφωνα με την σχέση (49) είναι τόσο πολύ μικρή, ώστε η σκεδαζόμενη ακτινοβολία να μην αλλάζει μήκος κύματος, δηλαδή να εξέρχεται σχεδόν με την ίδια ενέργεια (ελαστική σκέδαση). Η σκέδαση αυτή λέγεται σκέδαση Thomson. Συνεπώς κατά την σκέδαση φωτονίων (ακτινοβολίας) με την ύλη, άλλα μεν φωτόνια σκεδάζονται από ελεύθερα ηλεκτρόνια και εξέρχονται από τον στόχο με κάποια κινητική ενέργεια, οπότε παρατηρείται μεταβολή στο μήκος κύματος της σκεδασμένης ακτινοβολίας, άλλα δε φωτόνια σκεδάζονται από δέσμια ηλεκτρόνια, οπότε δεν εξέρχονται και το αντίστοιχο μήκος κύματος της σκεδασμένης ακτινοβολίας μένει αμετάβλητο.

Είναι προφανές ότι εάν η προσπίπτουσα ακτινοβολία έχει συχνότητα στην περιοχή του ορατού φωτός, ή των μικροκυμάτων τότε συμβαίνει σχεδόν μόνο η σκέδαση Thomson, ενώ εάν η προσπίπτουσα ακτινοβολία έχει συχνότητα στην περιοχή των ακτίνων X συμβαίνουν και τα δύο είδη σκεδάσεων. Τέλος για σκληρές ακτίνες X και ακτινοβολία γ, παρατηρείται σχεδόν μόνο σκέδαση Compton.

2.3 Κυματικές ιδιότητες των σωματίων

2.3.1 Κύματα De Broglie:

"Ο σωματιακός χαρακτήρας της φύσης είναι συμπληρωματικός του κυματικού και αντίστροφα" (αρχή της συμπληρωματικότητας του Neils Bohr).
Σύμφωνα με την εξ. (40) λαμβάνοντας υπόψιν την σχέση: $c = \lambda f$ βρίσκουμε ότι : $p = h/\lambda \Leftrightarrow \lambda = h/p$ (50), που είναι το μήκος κύματος του φωτονίου. Ο De Broglie , αναγνώρισε την ομοιότητα μεταξύ της αρχής του Fermat του ελαχίστου χρόνου, που καθόριζε την κίνηση του φωτός και της αρχής του Hamilton της ελάχιστης δράσης. Το 1924 πρότεινε ότι με κάθε κινούμενο σώμα υπάρχει ένα "συνδεόμενο κύμα" και η (50) εφαρμόζεται εξ ίσου καλά και σε σωμάτια. Επειδή η ορμή σωματίου είναι $p = mu$ καταλήγουμε στην σχέση : $\lambda = h / mu$ (51) που είναι το μήκος κύματος De Broglie. Έτσι όπως ο Einstein έφερε κοντά δύο αρχές, που προηγουμένως ήταν χωρισμένες, την ενέργεια και την μάζα, έτσι και ο De Broglie συνένωσε δύο ιδέες, που φαινομενικά ήσαν άσχετες μεταξύ τους, μια κυματική ιδιότητα λ και μια σωματιδιακή ιδιότητα p.
Στην εξίσωση (51) η μάζα δίνεται από τον σχετικιστικό τύπο :

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \qquad (52)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι, η κυματική και η σωματιδιακή φύση κινουμένων σωματίων δεν μπορεί να παρατηρηθεί συγχρόνως, οπότε δεν έχει νόημα η ερώτηση για το ποια είναι η σωστή περιγραφή. Το κινούμενο σωμάτιο, σε συγκεκριμένες περιπτώσεις συμπεριφέρεται σαν κύμα και σε άλλες σαν σωμάτιο. Το κριτήριο για τον τρόπο συμπεριφοράς που θα επικρατήσει, εξαρτάται από το πόσο καλά συγκρίνεται το μήκος κύματος De Broglie του συγκεκριμένου σωματίου με τις διαστάσεις του, όπως και με τις διαστάσεις του σωματίου με το οποίο αλληλεπιδρά.

2.3.2 Κύματα πιθανοτήτων:

Στα κύματα του νερού το μέγεθος, που μεταβάλλεται περιοδικά είναι το ύψος της επιφάνειας του νερού. Στα ηχητικά κύματα είναι η πίεση ενώ στα κύματα φωτός το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο. Στα κύματα της ύλης, αυτό που μεταβάλλεται είναι η κυματοσυνάρτηση, που συμβολίζεται με Ψ και δηλώνει την κυματική διαταραχή των υλικών κυμάτων. Η πιθανότητα να βρεθεί πειραματικά το σωμάτιο που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ στο σημείο x,y,z σε χρόνο t, είναι ανάλογη της τιμής $|\Psi|^2$. Μία μεγάλη τιμή της πυκνότητας πιθανότητας $|\Psi|^2$, εκφράζει ισχυρή πιθανότητα παρουσίας του σωματίου, ενώ μία μικρή τιμή εκφράζει αντίστοιχα ελάχιστη πιθανότητα παρουσίας του σωματίου. Η κυματοσυνάρτηση Ψ παίρνει πάντα μιγαδικές τιμές γι'αυτό δεν μπορεί ποτέ να περιγράψει μια μετρήσιμη φυσική διαταραχή, ενώ αντίθετα η $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$, όπου Ψ^* η συζυγής μιγαδική της Ψ,είναι πάντοτε μια πραγματική ποσότητα και της δίνουμε μια φυσική σημασία.

Είναι συνήθως βολικό, να εξισώνουμε την $|\Psi|^2$ με την πυκνότητα πιθανότητας P να βρεθεί ένα σωμάτιο, που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ, αντί να την υποθέτουμε ανάλογη της P. Αν $|\Psi|^2$ = P

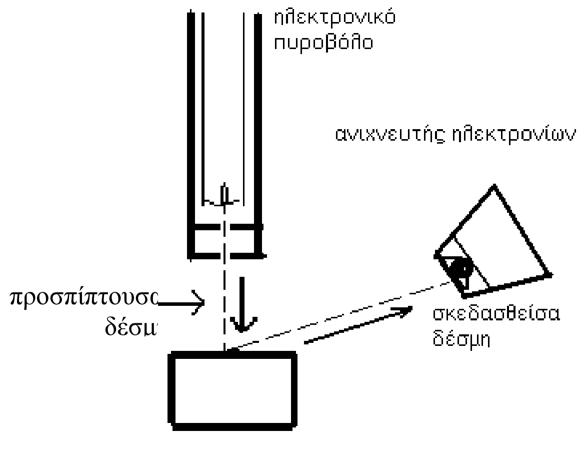
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dV = 1 \qquad (53) \qquad \alpha\phi o\acute{\upsilon} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{P} dV = 1$$

τότε θα πρέπει να ισχύει:
Η σχέση (53), περιγράφει μαθηματικά ότι το σωμάτιο υπάρχει κάπου όλες τις στιγμές, η ολική πιθανότητα πρέπει να είναι βεβαιότητα, ονομάζεται δε "συνθήκη κανονικοποίησης" και μια κυματοσυνάρτηση Ψ, που την ικανοποιεί αποκαλείται
"κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση". Είναι φανερό, ότι για να μπορεί μια κυματοσυνάρτηση να κανονικοποιηθεί πρέπει :
δηλαδή το ολοκλήρωμα πρέπει να συγκλίνει. Συναρτήσεις με αυτήν την ιδιότητα ονομάζονται "τετραγωνικά ολοκληρώσιμες". Τέτοιας μορφής

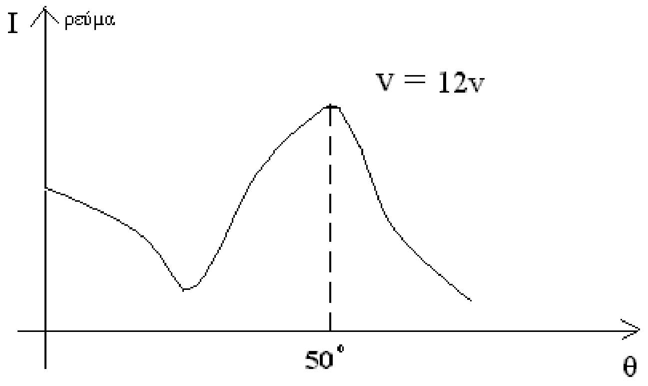
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 \, dV < \infty \qquad (54)$$

κυματοσυναρτήσεις μπορούμε πάντα να τις πολλαπλασιάσουμε με κατάλληλη σταθερά, ώστε η συνολική πιθανότητα να βγαίνει ίση με μονάδα. Η σχέση (54) είναι λοιπόν η βασική απαίτηση για να κρίνουμε αν μία κυματοσυνάρτηση περιγράφει μια πραγματοποιήσιμη φυσική κατάσταση του σωματιδίου.

2.3.3 Πείραμα Davisson-Germer:

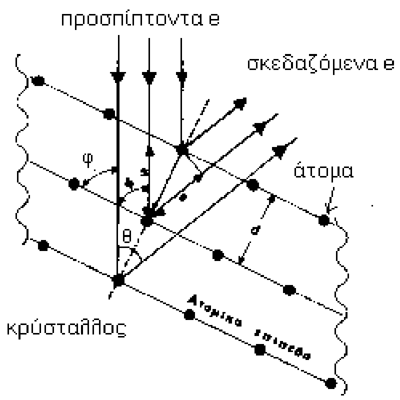


ΕΙΚ. 14. Πειραματική διάταξη Davisson - Germer



ΕΙΚ 15 . Πειραματικά αποτελέσματα μέτρησης γωνιακής κατανομής των σκεδαζομένων ηλεκτρονίων ενέργειας 54eV. Το μέγιστο της κατανομής παρατηρείται γύρω από την γωνία 50^0.

Το 1927 οι Davisson και Germer επιβεβαίωσαν πειραματικά την ύπαρξη των κυμάτων De Broglie (κυματική φύση των σωματίων), επιδεικνύοντας ότι δέσμες ηλεκτρονίων περιθλώνται όταν σκεδάζονται από την κανονική ατομική δομή των κρυστάλλων.

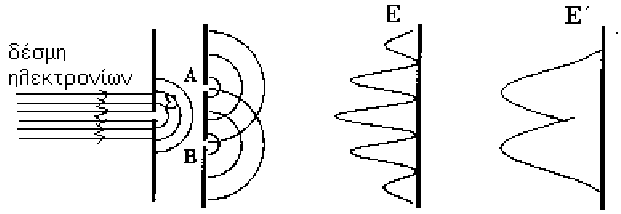


ΕΙΚ. 16. Σχηματική παράσταση σκέδασης ηλεκτρονίων από άτομα κρυστάλλου, που είναι περιοδικά διατεταγμένα σε επίπεδα που απέχουν μεταξύ τους κατά d.

Η κλασσική φυσική προβλέπει ότι τα σκεδαζόμενα ηλεκτρόνια θα σκεδαστούν προς όλες τις κατευθύνσεις με μέτρια εξάρτηση της έντασής τους από την γωνία σκέδασης και ακόμη μικρότερη εξάρτηση από την ενέργεια των ηλεκτρονίων της πρωτεύουσας δέσμης. Όπως φαίνεται στην εικ. 14, μία δέσμη ηλεκτρονίων ενέργειας 54eV, προσπίπτει κάθετα σε στόχο Ni, οπότε και σχηματίζεται ένα οξύ μέγιστο στην κατανομή των ηλεκτρονίων σε γωνία 50^0 ως προς την αρχική δέσμη (εικ. 15). Η ύπαρξη του μεγίστου αυτού επαληθεύει την υπόθεση De Broglie, γιατί η μόνη εξήγηση είναι να το εκλάβουμε ως αποτέλεσμα της συμβολής κυμάτων, που κατά την διεύθυνση των 50^0, παρουσιάζουν προσθετικό αποτέλεσμα, άρα ύπαρξη μεγίστου.

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν κύματα με μήκος κύματος De Broglie λ (σχέση 51). Τα υλικά αυτά κύματα σκεδάζονται από τα άτομα κρυστάλλου (εικ. 16) και συμβάλλουν προσθετικά προς μια κατεύθυνση
σύμφωνα με την συνθήκη σκέδασης Bragg : $n\lambda = 2d\sin\varphi$ (55), όπου $\varphi = 90-\theta/2$.
Για παράδειγμα στην εικ. 16 έστω ότι ο κρύσταλλος έχει d = 0.091nm, n = 1, $\varphi = 90-25 = 65^0$, οπότε αν προσπίπτουν π.χ. ακτίνες X στον κρύσταλλο, από την σχέση (55) καταλήγουμε ότι λ = 0.165 nm. Αυτό είναι το μήκος κύματος των ακτίνων X, που σκεδάστηκαν κατά $\theta = 50^0$. Ας δούμε τώρα, ποιο είναι το μήκος κύματος De Broglie των ηλεκτρονίων, που με ενέργεια E = 54eV, θα σκεδαστούν από τον ίδιο κρύσταλλο κατά την ίδια γωνία $\theta = 50^0$. Εφόσον η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων είναι μικρή, K = 54eV, σε σχέση με την τιμή :
$m_0c^2 = 0.51$MeV, μπορούμε να παραλείψουμε σχετικιστικούς υπολογισμούς. Η ορμή των ηλεκτρονίων είναι: $K = p^2/2m \Leftrightarrow p = (2mK)^{1/2} \Leftrightarrow mu = (2mK)^{1/2}$. Με πράξεις καταλήγουμε : $mu = 4x10^{-24}$Kg.m/s. σύμφωνα με την σχέση (51) βρίσκουμε το μήκος κύματος των ηλεκτρονίων : λ = 0.166nm. Παρατηρούμε ότι αυτό το αποτέλεσμα βρίσκεται σε άριστη συμφωνία με το παρατηρούμενο μήκος κύματος.

2.3.4 <u>Το πείραμα των δύο οπών</u> :



ΕΙΚ. 17. Φαινόμενο συμβολής όταν οι δύο οπές A,B είναι ανοικτές.

Θεωρούμε σε σημείο Σ μια πηγή, που εκπέμπει κύματα ή σωματίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Σε κάποια απόσταση από την πηγή βρίσκεται ένα φράγμα με δύο οπές A και B. Πίσω από το φράγμα υπάρχει επίπεδο E , πάνω στο οποίο υπάρχει κατάλληλος ανιχνευτής, που προσδιορίζει την ένταση του κύματος ή το πλήθος των σωματιδίων, που πέφτουν σε κάθε περιοχή του επιπέδου E (εικ. 17).Θα περιγράψουμε τρία πειράματα, όπου στο πρώτο η πηγή θα εκπέμπει κλασσικά σωματίδια, στο δεύτερο κλασσικά κύματα και στο τρίτο σωματίδια του μικρόκοσμου, π.χ. ηλεκτρόνια.
<u>1^0 πείραμα</u> : Έστω ότι η πηγή εκπέμπει ισότροπα με σταθερό ρυθμό σφαιρίδια μακροσκοπικών διαστάσεων, που έχουν όλα την ίδια μάζα και ενέργεια. Το πλήθος των σφαιριδίων, που πέφτουν στο E όταν και οι δύο οπές είναι ανοικτές έστω P_{12}, ενώ όταν η A μόνο είναι ανοικτή έστω P_1 και όταν η B μόνο είναι ανοικτή έστω P_2. Θα ισχύει : $P_{12} = P_1$

+ P_2 . Εδώ δεν έχουμε φαινόμενα συμβολής και η ενέργεια φθάνει στο Ε κατά ασυνεχή ποσά. Το αποτέλεσμα φαίνεται στο δεύτερο επίπεδο Ε΄.

<u>2^0 πείραμα</u> : Έστω ότι η πηγή εκπέμπει κύματα, που το μήκος κύματός τους είναι της ίδιας τάξεως μεγέθους με την απόσταση ΑΒ, άρα σύμφωνα με την αρχή του Huygens, οι οπές Α και Β γίνονται δευτερογενείς πηγές κυμάτων (περίθλαση). Τα κύματα αυτά συμβάλλουν. Συμβολίζουμε με $\xi_1(x,t)$ και $\xi_2(x,t)$ τα κύματα που πηγάζουν από τα Α και Β αντίστοιχα.

Ισχύει : $\xi_1(x,t) = a\sin(\omega t+b)$ και $\xi_2(x,t) = a'\sin(\omega t+b')$, όπου a, a΄,ω, b, b΄ δεν εξαρτώνται από τον χρόνο t.

Στην Φυσική όμως τα μεγέθη που μεταβάλλονται αρμονικά τα παριστάνουμε με μία μιγαδική εκθετική συνάρτηση, οπότε έχουμε:

$\xi_1(x,t) = ae^{i(\omega t+b)}$ και $\xi_2(x,t) = a'e^{i(\omega t+b')}$.

Ξέρουμε ότι ένταση του κύματος είναι ίση με το τετράγωνο του μέτρου της απομάκρυνσης. Άρα : $I_1(x) = |a|^2$ και $I_2(x) = |a'|^2$ όπου $I_1(x)$, $I_2(x)$ οι εντάσεις των κυμάτων από τα Α,Β αντίστοιχα. Η ένταση του κύματος που πέφτει στο επίπεδο Ε, όταν και

$$I_{12}(x) = |\mathbf{a} + \mathbf{a}'|^2 = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{a}'|^2 + 2|\mathbf{a}||\mathbf{a}'|\cos(\varphi_1 - \varphi_2) \Leftrightarrow$$

$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\varphi_1 - \varphi_2) \qquad (55)$$

οι δύο οπές είναι ανοικτές, θα είναι:

Ο όρος $2(I_1I_2)^{1/2}\cos(\varphi_1-\varphi_2)$ ονομάζεται “όρος συμβολής”, και φ_1-φ_2 η διαφορά φάσης των δύο κυμάτων. Τα αποτελέσματα του πειράματος φαίνονται στο επίπεδο Ε της εικ. 17. Τα συμπεράσματα είναι: α) εμφανίζονται φαινόμενα συμβολής, β) η ενέργεια φτάνει στο Ε συνεχώς και μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή.

<u>3^0 πείραμα</u>: Έστω ότι η πηγή εκπέμπει ισοτρόπως σωματίδια του μικρόκοσμου (π.χ. ηλεκτρόνια), που έχουν όλα την ίδια ενέργεια. Στο επίπεδο Ε υπάρχει ένας απαριθμητής Geiger, με τον οποίο προσδιορίζουμε το πλήθος των ηλεκτρονίων, που πέφτουν σε κάποια περιοχή του Ε.

Σε αντίθεση με τα δύο προηγούμενα πειράματα, αυτό το πείραμα είναι ανέφικτο. Ο λόγος είναι ότι πρέπει όλη η διάταξη να έχει τόσο μικρές διαστάσεις, ώστε η απόσταση ΑΒ να είναι της τάξεως μερικών Angstrom. Τα φαινόμενα βέβαια, που θα περιγράψουμε παρατηρήθηκαν από τους Davisson και Germer (§ 2.3.3), με πολύπλοκες διατάξεις, όπου ένα κρυσταλλικό πλέγμα έπαιζε τον ρόλο του φράγματος.

Το πείραμα “δείχνει” ότι ο απαριθμητής Geiger δίνει διακεκριμένους παλμούς, ίσου περίπου ύψους, που αντιστοιχούν ο καθένας από αυτούς στην άφιξη ενός ηλεκτρονίου στο επίπεδο Ε. Η ενέργεια λοιπόν φτάνει στο Ε ασυνεχώς και κάθε στοιχειώδες ποσό ενέργειας μεταφέρεται από ένα στοιχειώδη φορέα, το ηλεκτρόνιο. Η συμπεριφορά αυτή είναι ανάλογη με την κλασσική συμπεριφορά των σφαιριδίων του $1^{ου}$ πειράματος.

Ταυτόχρονα όμως εμφανίζονται και φαινόμενα συμβολής, όπως στην περίπτωση των κλασσικών κυμάτων στο 2^o πείραμα.

Φαινόμενα συμβολής παρατηρούνται ακόμα και όταν η πηγή εκπέμπει ηλεκτρόνια σε τόσο αργό ρυθμό, ώστε ένα μόνο ηλεκτρόνιο να βρίσκεται σε κίνηση ανάμεσα στην πηγή και τον μετρητή, δηλαδή το μοναδικό αυτό ηλεκτρόνιο φαίνεται να συμβάλλει με τον εαυτό του. Η ερώτηση που είναι προφανής είναι : “από ποια οπή πέρασε το ηλεκτρόνιο, από την Α ή την Β;”. Η ερώτηση αυτή δεν είναι σωστή, γιατί αν δεχτούμε μία από αυτές τις δύο δυνατότητες του ηλεκτρονίου, δεν μπορούμε να ερμηνεύσουμε τα φαινόμενα συμβολής που παρατηρούνται. Εάν δε, προσπαθήσουμε να προσδιορίσουμε από ποια οπή πέρασε το ηλεκτρόνιο, φωτίζοντας καταλλήλως τα ηλεκτρόνια, τα φαινόμενα συμβολής εξαφανίζονται.

Για να ερμηνεύσουμε αυτό το πείραμα, δεχόμαστε ότι το ηλεκτρόνιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$. Σύμφωνα με την παράγραφο 2.3.2, η πυκνότητα πιθανότητος της περίπτωσης που η οπή Α είναι μόνο ανοικτή είναι: $P_1(x) = |\Psi_1(x)|^2$, ενώ αν η οπή Β είναι μόνο ανοικτή, τότε: $P_2(x) = |\Psi_2(x)|^2$. Αν και οι δύο οπές είναι ανοικτές, τότε:

$$P_{12}(x) = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 = P_1(x) + P_2(x) + 2\sqrt{P_1(x)P_2(x)}\cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (56)$$

Ο τρίτος όρος του αθροίσματος της παραπάνω σχέσης εξηγεί τα φαινόμενα της συμβολής. Το συμπέρασμα που καταλήγουμε και είναι γενικό στην κβαντομηχανική είναι:

Όταν ένα πειραματικό αποτέλεσμα μπορεί να πραγματοποιηθεί κατά πολλούς τρόπους, τότε:

α) αν προσδιορίζουμε πειραματικά με ποιον από αυτούς τους τρόπους πραγματοποιείται το αποτέλεσμα , δεν έχουμε συμβολή,

β) αν δεν γίνεται αυτός ο πειραματικός προσδιορισμός, έχουμε συμβολή.

2.4 Σχέσεις απροσδιοριστίας

2.4.1 Εξίσωση κύματος-κυματόδεμα:

Ως γνωστόν η εξίσωση ενός κύματος, που μεταδίδεται κατά την

$$y = A\sin 2\pi(\frac{x}{\lambda} - f\ t) \qquad (57)$$

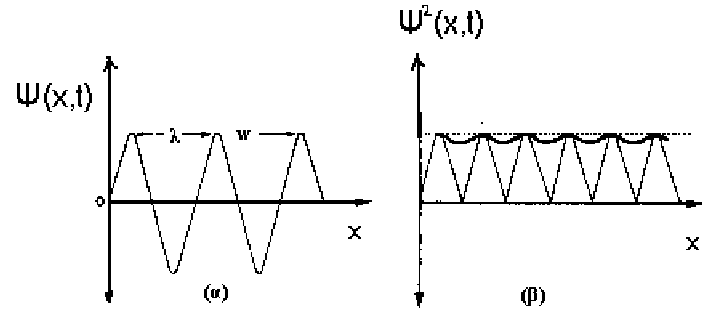
διεύθυνση +x, δίνεται από την εξίσωση :
όπου A το πλάτος της ταλάντωσης. Ας ορίσουμε τώρα τις ποσότητες κυκλική συχνότητα ω και τον κυματάριθμο k με τις σχέσεις:

$$\omega = \frac{\partial\varphi}{\partial t} = 2\pi f \quad (58) \qquad k = \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (59)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις (58) και (59) η εξίσωση του κύματος (57) θα γίνει:

$$y = A\sin(kx - \omega\ t) \qquad (60)$$

Σε τρεις διαστάσεις το kx αντικαθίσταται από το βαθμωτό γινόμενο , k . r όπου k είναι διάνυσμα κάθετο στο μέτωπο κύματος και r είναι το ακτινικό διάνυσμα θέσης.
Ας υποθέσουμε ότι ένα ελεύθερο σωμάτιο κινείται κατά μήκος του άξονα x. Σύμφωνα με την υπόθεση De Broglie, στο υλικό αυτό σωμάτιο αντιστοιχεί ένα υλικό κύμα, με μήκος κύματος που δίνεται από την σχέση: λ = h/mu και που κινείται με σταθερή ταχύτητα w (ταχύτητα διάδοσης κύματος), κατά μήκος του άξονα x. Ένα τέτοιο κύμα εκφράζεται μαθηματικώς από μια κυματοσυνάρτηση



ΕΙΚ. 18. (α) Υλικό κύμα De Broglie σταθερού πλάτους και φασικής ταχύτητας διάδοσης w.
(β) Πιθανότητα Ψ^2.

της μορφής, που έχει η σχέση (60), δηλαδή:

$$\Psi(x,t) = A\sin(kx-\omega t) \qquad (61)$$

Η Ψ^2 εκφράζει το μέτρο της πιθανότητας που υπάρχει, ώστε το σώμα να βρίσκεται σε συγκεκριμένη θέση και σε συγκεκριμένο χρόνο. Υπολογίζοντας την Ψ^2 από την σχέση (61), βλέπουμε ότι έχει κατά μέσον όρο σταθερή τιμή για όλες τις θέσεις x (εικ. 18 β). Αυτό σημαίνει ότι η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο σε κάποια θέση είναι η ίδια για όλα τα σημεία, άρα δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε την θέση του σωματίου. Αιτία του γεγονότος είναι, ότι θεωρήσαμε το υλικό κύμα να περιγράφεται με την σχέση (61).

Άλλο ένα πρόβλημα που δημιουργείται εξ αιτίας της σχέσης (61) είναι το εξής: υπολογίζουμε την σχέση που συνδέει την ταχύτητα διάδοσης του κύματος w, με την ταχύτητα του σωματίου u. Βρίσκουμε τα σημεία x_n, στα οποία μηδενίζεται η $\Psi(x,t)$ στην σχέση (61),

$$k\,x_n - \omega t = n\pi \;\Leftrightarrow\; x_n = n\pi / k + (\omega/k).t \quad (62) \quad \text{όπου } n = 0,\pm1,\pm2,\ldots$$

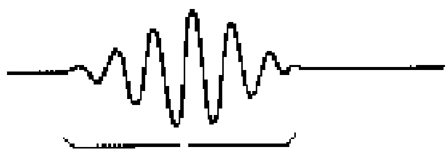
Τα σημεία αυτά όπως και όλα τα σημεία του κύματος, κινούνται στον άξονα x με ταχύτητα:

$$w = \frac{dx_n}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi f}{\frac{2\pi}{\lambda}} = f\lambda = \frac{E}{h}.\frac{h}{p} = \frac{E}{p} = \frac{\frac{p^2}{2m}}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{mu}{2m} = \frac{u}{2} \qquad (63)$$

δηλαδή η ταχύτητα του υλικού κύματος είναι το μισό της ταχύτητας του αντίστοιχου σωματίου. Αν τώρα θεωρήσουμε την σχετικιστική κίνηση του σωματίου, θα έχουμε:

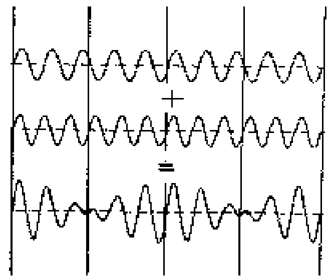
$$w = f\lambda = \frac{E}{h}\frac{h}{p} = \frac{mc^2}{h}\frac{h}{mu} = \frac{c^2}{u} \qquad (64)$$

Από την σχέση (64) διαπιστώνουμε ότι η w είναι μεγαλύτερη από την u αλλά και από την c, επειδή ισχύει πάντα $u < c$.



ΕΙΚ. 19. Ομάδα (πακέτο) κυμάτων (κυματόδεμα).

Από τα προβλήματα αυτά που διαπιστώνονται καταλήγουμε ότι τα κύματα De Broglie δεν μπορούν να αναπαρασταθούν απλά με μία σχέση όπως αυτή της εξίσωσης (61). Στο μικρόκοσμο είναι αδύνατη η ακριβής γνώση της ταχύτητας με την οποία κινείται ένα σωμάτιο. Η ταχύτητα του σωματίου μεταβάλλεται μέσα σε μια περιοχή Δu. Αυτό



ΕΙΚ. 20 . Σχηματισμός διακροτήματος (κυματοδέματος) από επαλληλία δύο αρμονικών κυμάτων.

έχει ως συνέπεια το αντίστοιχο υλικό κύμα να έχει μήκος κύματος που να μεταβάλλεται μέσα σε μια περιοχή Δλ. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το σωμάτιο να μην συνοδεύεται από ένα μόνο κύμα ορισμένης ταχύτητας w, αλλά από ένα πακέτο επιπέδων κυμάτων (κυματόδεμα), όπως αυτή της εικ. 19, όπου τα συνιστώντα κύματα έχουν πλάτη, από τα οποία εξαρτάται η πιθανότητα ανίχνευσης του σωματίου. Ένα παράδειγμα για την περιγραφή της ύπαρξης ενός κυματοδέματος είναι η περίπτωση των διακροτημάτων, π.χ. όταν δύο ηχητικά κύματα του ιδίου πλάτους αλλά με λίγο διαφορετικές συχνότητες παράγονται ταυτόχρονα, ο ήχος που ακούμε έχει συχνότητα ίση με τον μέσο όρο των δύο αρχικών συχνοτήτων και το πλάτος του αυξάνει και μειώνεται περιοδικά. Η περίοδος του διακροτήματος είναι το αντίστροφο της διαφοράς των δύο αρχικών συχνοτήτων. Η παραγωγή των διακροτημάτων φαίνεται στην εικ. 20.

Η μαθηματική προσέγγιση για την περιγραφή ενός κυματοδέματος γίνεται με την συμβολή πολλών επιπέδων κυμάτων που διαφέρουν κατά λίγο ως προς το μήκος κύματος. Αν οι ταχύτητες των κυμάτων είναι ίδιες, η ταχύτητα με την οποία το πακέτο κυμάτων ταξιδεύει είναι η κοινή ταχύτητα. Αν όμως η ταχύτητα των κυμάτων μεταβάλλεται με το μήκος κύματος (περίπτωση κυμάτων De Broglie), τότε η ταχύτητα του κυματοδέματος είναι διαφορετική από αυτή των συνιστώντων κυμάτων. Ας θεωρήσουμε για λόγους ευκολίας δύο μόνο κύματα τα οποία προστίθενται μεταξύ τους και δίνουν ένα κύμα που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση: $\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)$ (65),
όπου τα δύο επίπεδα κύματα περιγράφονται αντιστοίχως από τις κυματοσυναρτήσεις:

$\Psi_1(x,t) = A\sin(kx-\omega t)$ (66) , $\Psi_2(x,t) = A\sin[(k+dk)x-(\omega+d\omega)t]$ (67)

Με την βοήθεια της εξίσωσης: $\sin a+\sin b = 2\cos[(a-b)/2]\sin[(a+b)/2]$ και της σχέσης: $\cos(-\theta) = \cos(\theta)$ βρίσκουμε ότι :

$$\Psi(x,t) = 2A\cos\left(\frac{dk}{2}x - \frac{d\omega}{2}t\right)\sin\left(\frac{2k+dk}{2}x - \frac{2\omega+d\omega}{2}t\right) \qquad (68)$$

Επειδή dω και dk είναι πολύ μικρές ποσότητες συγκριτικά με τα μεγέθη ω και k αντίστοιχα, θα έχουμε: $2\omega + d\omega \approx 2\omega$ και $2k + dk \approx 2k$, οπότε η (68) γίνεται:

$$\Psi(x,t) = 2A\cos\left(\frac{dk}{2}x - \frac{d\omega}{2}t\right)\sin(kx - \omega t) \qquad (69)$$

Στην σχέση (69) παρατηρούμε ότι ο δεύτερος παράγοντας είναι ένα επίπεδο κύμα της μορφής (61), του οποίου το πλάτος διαμορφώνεται από τον πρώτο παράγοντα, έτσι ώστε να εμφανίζονται περιοδικά μέγιστα και ελάχιστα στο πλάτος του συνισταμένου κύματος (βλέπε εικ. 20). Το μεταξύ δύο ελαχίστων κύμα είναι το κυματόδεμα, που κινείται κατά τον άξονα x, με σταθερή ταχύτητα u, που ονομάζεται ομαδική ταχύτητα με τύπο: $u = d\omega / dk$.
Με βάση τις σχέσεις: $p = h/\lambda$, $k = 2\pi/\lambda$ έχουμε: $p = \hbar k$
$E = hf$, $\omega = 2\pi f$ έχουμε: $E = \hbar\omega$
Οπότε σύμφωνα με την σχέση: $E = p^2/2m$ η ομαδική ταχύτητα γίνεται: $u = d\omega / dk \Leftrightarrow u = dE/dp = p/m = v$, όπου v η ταχύτητα του σωματίου. Παρατηρούμε ότι η ταχύτητα του κυματοδέματος είναι ίση με την ταχύτητα του σωματίου, πράγμα που σημαίνει ότι το κυματόδεμα συνοδεύει το σωμάτιο στην κίνηση. Το ίδιο αποτέλεσμα έχουμε και αν λάβουμε υπόψη την σχετικιστική κίνηση, οπότε έχουμε:

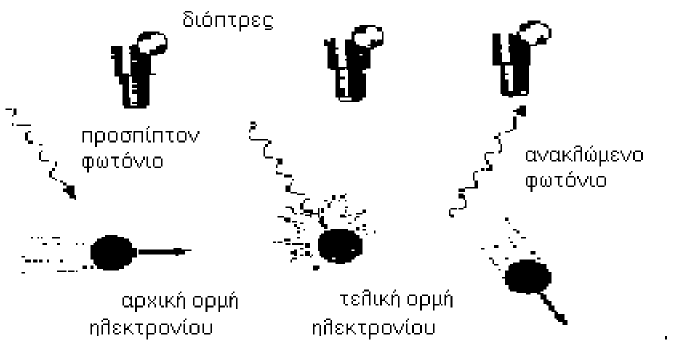
$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4 \quad \Leftrightarrow \quad u = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} \qquad (70)$$

Χρησιμοποιώντας τους γνωστούς τύπους της σχετικότητας:

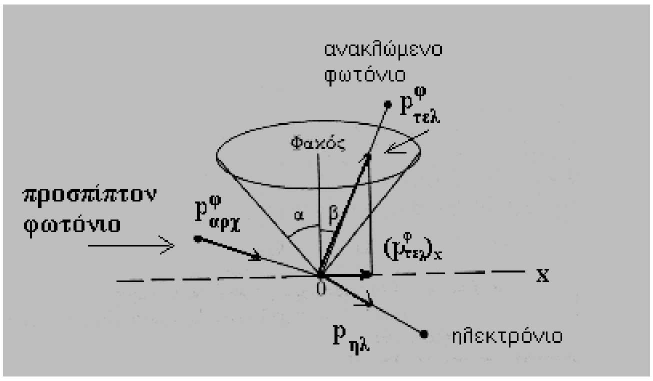
$$E = \frac{m_0c^2}{[1 - (\frac{v}{c})^2]^{1/2}} \, , \qquad p = \frac{m_0 v}{[1 - (\frac{v}{c})^2]^{1/2}} \qquad (71)$$

καταλήγουμε ότι: $u = v$.

2.4.2 Αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg :



ΕΙΚ. 21. Παρατήρηση του ηλεκτρονίου με φως ή κάποιο άλλο τρόπο, προυποθέτει μεταβολή της ορμής του. Κάθε φωτόνιο έχει ορμή h/λ και όταν συγκρούεται με το ηλεκτρόνιο αλλάζει η αρχική ορμή του ηλεκτρονίου.



ΕΙΚ. 22. Νοητό πείραμα για την απόδειξη της αρχής αβεβαιότητας.

Υποθέτουμε ότι θέλουμε να προσδιορίσουμε την θέση και την ορμή ενός σωματιδίου σε ορισμένη χρονική στιγμή, π.χ. να εξετάσουμε ένα ηλεκτρόνιο που ηρεμεί σε ένα σημείο με την βοήθεια ενός μικροσκοπίου (εικ. 21). Το ηλεκτρόνιο βομβαρδίζεται από μια δέσμη φωτονίων, με αποτέλεσμα να αποκτήσει κάποια ορμή. Το ελάχιστο σφάλμα Δx με το οποίο μπορεί να προσδιοριστεί η θέση του ηλεκτρονίου στο πείραμα αυτό, εξαρτάται από την διακριτική ικανότητα του μικροσκοπίου, που δίνεται από τον τύπο της οπτικής: $\Delta x = \lambda/\sin a$ (72), όπου α η γωνία κορυφής του κώνου με βάση τον αντικειμενικό φακό και κορυφή το παρατηρούμενο ηλεκτρόνιο.

Ας αναφέρουμε τώρα λίγα πράγματα όσον αφορά την απροσδιοριστία, που προκαλεί μία μέτρηση. Έστω ότι η μέτρηση ενός μεγέθους Α με ακρίβεια ±ΔΑ προκαλεί μία διαταραχή, τέτοια ώστε μετά την ρηση ένα άλλο μέγεθος Β να είναι να είναι “απροσδιόριστο”. Αυτό σημαίνει ότι το Β μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή μέσα σε ένα διάστημα (Β-ΔΒ, Β+ΔΒ). Το γινόμενο (ΔΑ).(ΔΒ) δίνει το μέτρο της απροσδιοριστίας του συστήματος. Ισχύει δε ότι το διπλάσιο του ΔΒ, είναι ίσο με την διαφορά της μέγιστης μείον την ελάχιστη τιμή του Β, δηλαδή ισχύει: 2ΔΒ = (Β+ΔΒ) – (Β-ΔΒ) (73)

Έστω ότι ένα μόνο φωτόνιο σκεδάζεται πάνω στο ηλεκτρόνιο (εικ. 22). Για να φθάσει αυτό το φωτόνιο στο μάτι του παρατηρητή, πρέπει το διάνυσμα της τελικής ορμής του να βρίσκεται στο εσωτερικό του κώνου, με κορυφή το ηλεκτρόνιο και βάση τον φακό του μικροσκοπίου. Σύμφωνα με την αρχή διατήρησης ορμής θα έχουμε:

$$\vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi} = \vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda} + \vec{p}_{\eta\lambda} \qquad (74)$$

$$(p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x = \left|\vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}\right| \sin\beta \qquad (76)$$

όπου $p_{\eta\lambda}$ η ορμή του ηλεκτρονίου. Το διάνυσμα της τελικής ορμής του φωτονίου πρέπει να βρίσκεται μέσα στον κώνο, δηλαδή : β ≤ α και αφού α, β είναι μικρότερες του π/2 , ισχύει : sinβ ≤ sinα (75). Αλλά για την συνιστώσα στον άξονα x της τελικής ορμής του φωτονίου ισχύει : Σύμφωνα με τις σχέσεις τώρα (75), (76) θα έχουμε:

$$-\left|\vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}\right| \sin\alpha \le (p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x \le \left|\vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}\right| \sin\alpha \qquad (77)$$

Λόγω όμως της σχέσης (74) θα ισχύει :

$$\left|\vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda}\right| \le \left|\vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi}\right| \qquad (78)$$

Ως γνωστόν για το φωτόνιο ισχύει:

$$\left|\vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi}\right| = \frac{h}{\lambda} \qquad (79)$$

Άρα η (77) γίνεται :

$$-\frac{h}{\lambda}\sin\alpha \le (p^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda})_x \le \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \qquad (80)$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση (80) η (74) μετατρέπεται ως εξής :

$$\vec{p}^{\varphi}_{\tau\varepsilon\lambda} = \vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi} - \vec{p}_{\eta\lambda} \Leftrightarrow -\frac{h}{\lambda}\sin\alpha \le \vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi} - \vec{p}_{\eta\lambda} \le \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \Leftrightarrow$$

$$\vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi} - \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \le \vec{p}_{\eta\lambda} \le \vec{p}^{\varphi}_{\alpha\rho\chi} + \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \qquad (81)$$

Η εξίσωση (81) στον άξονα xx΄ μετατρέπεται στην σχέση:

$$(p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi})_x - \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \le (p_{\eta\lambda})_x \le (p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi})_x + \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \qquad (82)$$

Παρατηρούμε από την σχέση (82) ότι η x συνιστώσα της ορμής του ηλεκτρονίου κυμαίνεται ανάμεσα σε δύο όρια. Αν χρησιμοποιήσουμε την σχέση (73) για την απροσδιοριστία Δp_x της x συνιστώσας της ορμής του ηλεκτρονίου, καταλήγουμε :

$$2\Delta p_x = \left[(p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi})_x + \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \right] - \left[(p^{\varphi}_{\alpha\rho\chi})_x - \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \right] = 2\frac{h}{\lambda}\sin\alpha \Leftrightarrow$$

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \quad (83)$$

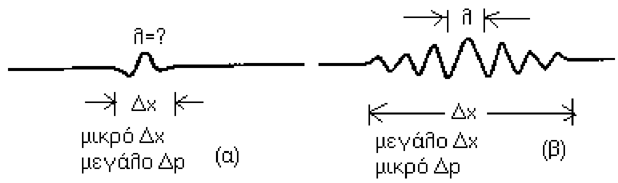
Αν πολλαπλασιάσουμε την σχέση (72) με την (83) βρίσκουμε:

$$\Delta p_x.\Delta x = h \quad (84)$$

Η τιμή αυτού του γινομένου απροσδιοριστίας, βρέθηκε για την ελάχιστη δυνατή διαταραχή, αφού υποθέσαμε ότι ένα μόνο φωτόνιο σκεδάζεται πάνω στο ηλεκτρόνιο. Στην πραγματικότητα όμως το πείραμα γίνεται με μια δέσμη φωτονίων, οπότε το Δp_x είναι μεγαλύτερο από την τιμή που δίνει η σχέση (83) και επομένως στην γενική περίπτωση ισχύει :

$$\Delta p_x.\Delta x \geq h \quad (85)$$

Παρόμοιες σχέσεις ισχύουν και για τις άλλες συνιστώσες των διανυσμάτων θέσεως και ορμής: $\Delta p_y.\Delta y \geq h$ (86) , $\Delta p_z.\Delta z \geq h$ (87).



ΕΙΚ. 23. (α) Ένα στενό πακέτο De Broglie. Η θέση του σωματίου μπορεί να προσδιοριστεί με ακρίβεια αντίθετα από το μήκος κύματος και την ορμή, όπου για τον ακριβή προσδιορισμό τους χρειάζονται περισσότερα κύματα.
(β) Ένα ευρύ πακέτο κυμάτων. Τώρα προσδιορίζεται με ακρίβεια το μήκος κύματος και η ορμή αλλά όχι και η θέση του σωματίου.

Σύμφωνα με την σχέση (85) που καταλήξαμε, προκύπτει η αρχή της αβεβαιότητας ή απροσδιοριστίας του Heisenberg. Το πρώτο όνομα είναι το συνηθέστερο, παρ' όλο ότι το δεύτερο είναι ακριβέστερο, γιατί η αρχή δεν αφορά το εάν γνωρίζουμε κάτι, αλλά κατά πόσον μπορούμε να γνωρίζουμε κάτι. Η αρχή αυτή διατυπώνεται το 1927 ως εξής : "Είναι αδύνατον να γνωρίζουμε συγχρόνως και την ακριβή θέση και την ακριβή ορμή ενός σωματίου". Η αρχή αυτή είναι από τους πιο σημαντικούς νόμους της Φυσικής. Γενικώς, μας αρνείται την ικανότητα προσδιορισμού συγχρόνως και με αυθαιρέτως μεγάλη ακρίβεια των τιμών ορισμένων ζευγών παρατηρησίμων μεγεθών. Παρατηρήσιμα μεγέθη που υφίστανται τον περιορισμό αυτό ονομάζονται συμπληρωματικά.

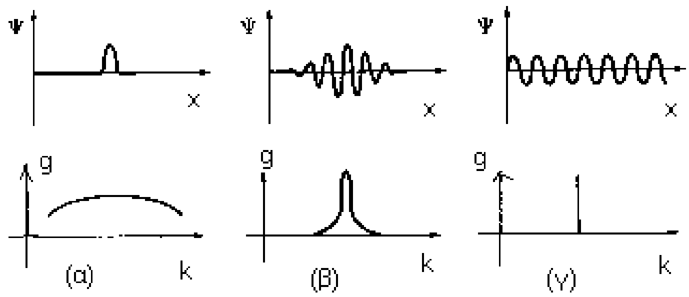
Καθώς αναφέραμε και στην προηγούμενη παράγραφο, το κυματόδεμα το καθοριζόμενο μέσα στην περιοχή Δx είναι το αποτέλεσμα της συμβολής πολλών επιπέδων κυμάτων, που το καθένα χαρακτηρίζεται από ορισμένο μήκος κύματος λ ή κυματάριθμο k. Ορισμένη χρονική στιγμή t το πακέτο κυμάτων Ψ(x) μπορεί να παρασταθεί από το ολοκλήρωμα Fourier :

$$\Psi(x) = \int_0^{\infty} g(k)\cos kx dk \qquad (88)$$

όπου η συνάρτηση g(k) (που ονομάζεται μετασχηματισμός Fourier της Ψ(x)), περιγράφει την μεταβολή του πλάτους των κυμάτων , που συνεισφέρουν στην Ψ(x), συναρτήσει του κυματάριθμου k. Για να ακριβολογήσουμε οι κυματάριθμοι, που αναπαριστούν ένα πακέτο κυμάτων εκτείνονται από το μηδέν μέχρι το άπειρο, αλλά για ένα πακέτο με πεπερασμένο μήκος Δx, τα κύματα με θεωρήσιμα πλάτη g(k) έχουν κυματάριθμους, που βρίσκονται στο πεπερασμένο διάστημα Δk. Η σχέση μεταξύ της απόστασης Δx και του Δk εξαρτάται από το σχήμα του πακέτου και από τον ορισμό των ευρών Δx, Δk (εικ. 24). Η ελάχιστη τιμή για το γινόμενο Δx. Δk υπάρχει όταν το σχήμα της περιβάλλουσας του πακέτου έχει την μορφή συνάρτησης Gauss, οπότε και ο μετασχηματισμός Fourier είναι επίσης μια συνάρτηση Gauss. Αν τα Δx, Δk λαμβάνονται ως οι τυπικές συναρτήσεις Ψ(x) και g(k), τότε η ελάχιστη τιμή του γινομένου τους είναι : Δx. Δk = 1/2 . Επειδή τα κυματοδέματα δεν έχουν γενικά μορφή Gauss (σχήμα καμπάνας), η προηγούμενη σχέση γίνεται:

$$\Delta x.\ \Delta k \geq 1/2 \quad (89).$$

Λόγω των σχέσεων: λ = h/p και k = 2π/λ έχουμε : k = 2πp/h (90).
Άρα μία αβεβαιότητα Δk στον κυματάριθμο των κυμάτων De Broglie που συνδέονται με ένα σωμάτιο έχει ως αποτέλεσμα την αβεβαιότητα στην ορμή του σωματίου σύμφωνα με την σχέση (90), δηλαδή Δp = h Δk/2π (91).
Επομένως από τις σχέσεις (89) και (91) καταλήγουμε στην τελική μορφή που έχει η αρχή της αβεβαιότητας : Δx.Δp ≥ ђ/2 (92), όπου ђ = h/2π.



ΕΙΚ 24. Κυματοσυναρτήσεις και μετασχηματισμοί Fourier για α)παλμό, β)κυματόδεμα, γ)άπειρο αριθμό διαδοχικών κυμάτων. Παρατηρούμε ότι όσο πιο στενό είναι το πακέτο κυμάτων τόσο πλατύτερο είναι το εύρος των κυματαρίθμων, που απαιτούνται για την περιγραφή του.

Η αρχή της αβεβαιότητας δεν περιορίζεται μόνο στην θέση και την ορμή, αλλά γενικεύεται σε κάθε ζεύγος συζυγών μεγεθών. Έτσι η έκφραση (92) μπορεί να γραφεί γενικά:

$$\boxed{\Delta q.\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

όπου q, p είναι συζυγή μεγέθη, όπως εμφανίζονται στις εξισώσεις του Hamilton.
Μία άλλη μορφή της αρχής της αβεβαιότητας του Heisenberg αρκετά χρήσιμης είναι η εξής:
Έστω, ότι θέλουμε να προσδιορίσουμε την χρονική στιγμή, κατά την οποία ένα σωμάτιο διερχόμενο από συγκεκριμένο σημείο x , έχει ενέργεια Ε. Για τον προσδιορισμό της χρονικής αυτής στιγμής, θεωρούμε την κυματική μορφή του σωματίου, που όπως έχουμε αναφέρει είναι ένα κυματόδεμα. Ως γνωστόν για να δημιουργηθεί ένα κυματόδεμα πρέπει να συμβάλλουν πολλά κύματα, των οποίων οι γωνιακές συχνότητες θα κυμαίνονται μέσα στην περιοχή Δω. Από την θεωρία της αναλύσεως κατά Fourier αποδεικνύεται ότι το γινόμενο : $\Delta t.\Delta\omega \geq 1/2 \Leftrightarrow \Delta t.\Delta f \geq 1/4\pi$. Με βάση την σχέση: $E = hf$ καταλήγουμε στην σχέση:

$$\Delta t.\Delta E \geq \hbar/2 \quad (93)$$

όπου ΔΕ είναι η αβεβαιότητα στην τιμή ενέργειας, λόγω της ύπαρξης της πεπερασμένης χρονικής διάρκειας Δt, που το σωμάτιο έχει την ενέργεια αυτή.
Η σχέση αυτή είναι τελείως διαφορετική από τις προηγούμενες, γιατί ο χρόνος δεν είναι ένα δυναμικό μέγεθος αλλά μία παράμετρος. Η σχέση (93) θα πρέπει να ισχύει, μόνο αν ο χρόνος εμφανίζεται αναλυτικά στην ενέργεια, όπως για παράδειγμα όταν το δυναμικό εξαρτάται από τον χρόνο. Σύμφωνα με την σχέση (93), αν Δt είναι ο χρόνος, που χρειάζεται ένα σύστημα για να μεταβάλλει την κατάστασή του και να αλλάξει ενέργεια, τότε αυτή η αλλαγή της ενέργειας ΔΕ είναι της τάξεως: $\Delta E \sim \hbar / (2\Delta t)$. Επομένως όσο πιο γρήγορα μεταβάλλεται ένα σύστημα τόσο μεγαλύτερη είναι η αβεβαιότητα της ενέργειάς του. Στην περίπτωση δε που έχουμε ένα στάσιμο σύστημα, οπότε η ενέργειά του παραμένει σταθερή, δηλαδή $\Delta E = 0$, τότε έχει άπειρο χρόνο ζωής, $\Delta t \to \infty$. Συμπέρασμα: η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας και χρόνου, περιορίζει την ακρίβεια με την οποία μπορούμε να επαληθεύσουμε πειραματικά την αρχή διατήρησης ενέργειας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

3.1 Εξίσωση Schrödinger I:

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, διαπιστώσαμε τον δυαδικό χαρακτήρα των σωματίων, δηλαδή να διατηρούν τις σωματιακές τους ιδιότητες, αλλά και να συμπεριφέρονται σαν κύματα De Broglie, που εκφράζονται με την γνωστή μας κυματική έκφραση ενός απλού ημιτονοειδούς κύματος με σταθερό μήκος κύματος λ : Ψ(x,t) = Asin(kx-ωt) (94), ή με την επαλληλία πολλών απλών ημιτονοειδών κυμάτων (κυματόδεμα).

Σύμφωνα με την θεωρία De Broglie το αντίστοιχο σωμάτιο θα έχει ορμή : p = h/λ και εφόσον το μήκος κύματος De Broglie λ είναι σταθερό, τότε και η ορμή p είναι σταθερή, πράγμα που σημαίνει ότι στο σωμάτιο δεν ασκούνται δυνάμεις, δηλαδή είναι ελεύθερο. Άρα η σχέση (94) δίνει τις κυματοσυναρτήσεις, που περιγράφουν την κίνηση ενός ελεύθερου σωματίου.

Η δυναμική ενέργεια U είναι γενικά συνάρτηση των χωρικών συντεταγμένων x και πιθανόν και του χρόνου. Ωστόσο υπάρχει μια ειδική περίπτωση, όταν η U(x,t) είναι ανεξάρτητη των x,t, δηλαδή είναι σταθερή οπότε η δύναμη που ασκείται είναι μηδέν, γιατί : $F = -\partial V/\partial x = 0$ (95).
Αν διαφορίσουμε την (94) ως προς x δύο φορές, παίρνουμε:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2 \mathrm{A}\sin(kx - \omega t) = -k^2\Psi \qquad (96)$$

Επειδή όμως k = 2π/λ , λ = h/p και $p = (2mK)^{1/2}$ ο κυματάριθμος γίνεται :
$k = (2mK)^{1/2}/\hbar$ (97)

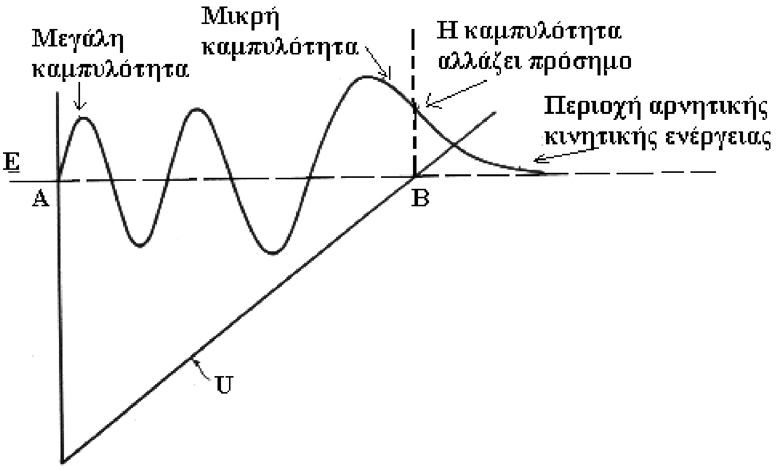
Αντικαθιστούμε την (97) στην (96) οπότε έχουμε:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{\hbar^2}\Psi \qquad (98)$$

Η σπουδαιότητα της εξίσωσης (98) είναι ότι εκφράζει ιδιότητες της Ψ σε κάθε σημείο, σαν συνάρτηση της κινητικής ενέργειας στο ίδιο σημείο. Αν υποθέσουμε, ότι το σωμάτιο βρίσκεται υπό την επίδραση ενός τυχαίου δυναμικού V(x) παίρνουμε σαν δοσμένη την ορθότητα της εξίσωσης (98). Μια και ισχύει : K = E-U(x) μπορούμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση (98) με την μορφή:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\Psi \Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi} \qquad (99)$$

Η σχέση (99) είναι η ανεξάρτητη του χρόνου εξίσωση του *Schrödinger* σε μία διάσταση. Μπορούμε να την θεωρήσουμε σαν το κβαντικό ανάλογο της κλασσικής εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας. Ουσιαστικά, ο *Schrödinger* αντικατέστησε την αλγεβρική εξίσωση του De Broglie εξίσωσης (98), που είναι κατάλληλη για ένα ορισμένο μήκος κύματος, με μία διαφορική εξίσωση, που είναι κατάλληλη για ένα μήκος κύματος που μεταβάλλεται κατά συνεχή τρόπο, δηλαδή η εξίσωση του *Schrödinger,* ενώνει ένα άπειρο αριθμό απειροστών κυμάτων De Broglie, σε μία συνεχή κυματοσυνάρτηση, που στο σύνολό της μπορεί να διαφέρει



ΕΙΚ. 25. Ελαττουμένης της κινητικής ενέργειας του σωματίου μειώνεται η καμπυλότητα της κυματοσυναρτήσεώς του. Στο κλασσικό σημείο καμπής Β, όπου Κ = 0, η καμπυλότητα αλλάζει σημείο. Το κύμα διεισδύει μέσα στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή.

κατά πολύ από ένα ημιτονοειδές κύμα. Ας αλλάξουμε λίγο την μορφή της εξίσωσης (98) :

$$\frac{d^2\Psi / dx^2}{\Psi} = -\frac{2mK}{\hbar^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U) \qquad (100)$$

Παρατηρούμε ότι εφόσον η κινητική ενέργεια είναι θετική, η Ψ και η δεύτερη παράγωγος της Ψ έχουν αντίθετα πρόσημα. Στην εικ. 25 βλέπουμε ότι η κυματοσυνάρτηση μπορεί να εισχωρήσει μέσα σε μια “κλασσικά απαγορευμένη περιοχή” αρνητικής κινητικής ενέργειας. Το φαινόμενο αυτό εμφανίζεται δεξιά του σημείου Β. Το σημείο Β, που ονομάζεται κλασσικό σημείο καμπής ορίζεται από Κ = 0 ή Ε = U. Κλασσικά είναι το όριο της κίνησης. Κβαντομηχανικά, το σωμάτιο έχει μια ορισμένη πιθανότητα να περάσει πιο πέρα από το Β προς τα δεξιά. Η πιθανότητα όμως αυτή εξασθενεί πολύ γρήγορα για $x > x_B$.

Η απλούστερη εφαρμογή της εξίσωσης *Schrödinger* είναι σε ελεύθερο σωμάτιο, όπου η κινητική ενέργεια είναι σταθερή, οπότε η εξίσωση (98) γίνεται:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2mK}{\hbar^2}\Psi=0 \qquad (101)$$

Η χαρακτηριστική εξίσωση της (101) είναι: $y^2+2mK/\hbar^2=0$, οπότε οι λύσεις της είναι : $y=\pm i(2mK/\hbar^2)^{1/2}$ και λόγω της (97) έχουμε: $y=\pm ik$. Άρα η γενική λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι: $\Psi=A_1e^{ikx}+A_2e^{-ikx}$. Λόγω της γνωστής σχέσης: $e^{ix}=\cos x+i\sin x$, η λύση της εξ. (101) μπορεί να πάρει την μορφή :

$$\Psi=C_1\cos kx+C_2\sin kx.$$

Σε τρεις διαστάσεις η εξίσωση *Schrödinger* η ανεξάρτητη του χρόνου είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+U(x,y,z)\Psi=E\Psi \Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U\Psi=E\Psi} \qquad (102)$$

όπου $\nabla^2=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$ η Λαπλασιανή.

3.2 <u>Εξίσωση Schrödinger II</u> :

Στην κβαντομηχανική, η κυματοσυνάρτηση Ψ αντιστοιχεί στην κυματική μεταβλητή y της κίνησης του κύματος. Βέβαια η Ψ δεν είναι μία μετρήσιμη ποσότητα, όπως η y, γι'αυτό μπορεί να έχει μιγαδική μορφή. Το ελεύθερο σωμάτιο σύμφωνα με την θεωρία De Broglie συνδέεται με ένα κύμα, του οποίου η κυματοσυνάρτηση στην γενική της μορφή είναι :

$$\Psi=Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad (103)$$

Αν θέσουμε στην (103) $k=2\pi/\lambda$, $\omega=2\pi f$ γίνεται :

$$\Psi=Ae^{-i2\pi(ft-x/\lambda)} \qquad (104)$$

Με την σχέση (104) έχουμε μια βολική μορφή της κυματοσυνάρτησης γιατί ήδη γνωρίζουμε την συχνότητα f και το μήκος κύματος λ συναρτήσει της ολικής ενέργειας Ε και της ορμής p του σωματίου. Επειδή $E=hf=2\pi\hbar f$ και

$\lambda=h/p=2\pi\hbar/p$ η σχέση (104) γίνεται: $\Psi=Ae^{-(i/\hbar)(Et-xp)}$ (105)

Η σχέση (105) είναι μια μαθηματική περιγραφή του κύματος και ισοδυναμεί με ένα ελεύθερο σωμάτιο ολικής ενέργειας Ε και ορμής p, που κινείται κατά την διεύθυνση +x.

Διαφορίζοντας την εξίσωση (105) ως προς t, παίρνουμε:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-i\frac{E}{\hbar}\Psi \qquad (106)$$

Διαφορίζουμε τώρα την εξίσωση (105) δύο φορές ως προς x:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \qquad (107)$$

Για ταχύτητες του σωματίου μικρές συγκριτικά με την ταχύτητα του φωτός, η ολική ενέργεια Ε δίνεται από την σχέση:

$$E=K+U \Leftrightarrow E=(p^2/2m)+U \qquad (108)$$

Η συνάρτηση U της δυναμικής ενέργειας αναπαριστά την επίδραση του υπόλοιπου σύμπαντος στο σωμάτιο. Βέβαια ένα μικρό μέρος του σύμπαντος αλληλεπιδρά με το σωμάτιο, π.χ. στην περίπτωση του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου, μόνο το ηλεκτρικό πεδίο του πυρήνα θα ληφθεί υπόψιν.
Αν πολλαπλασιάσουμε και τα δύο μέλη της εξ. (108) με την Ψ, παίρνουμε:

$$E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + U\Psi \qquad (109)$$

Λύνουμε την εξ. (106) ως προς ΕΨ και την εξίσωση (107) ως προς $p^2\Psi$, οπότε έχουμε :

$$E\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (110) \qquad\qquad p^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \qquad (111)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (110), (111) στην σχέση (109) παίρνουμε:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \qquad (112)$$

Η σχέση (112) είναι η χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση *Schrödinger* σε μία διάσταση.
Σε τρεις διαστάσεις η χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση *Schrödinger* είναι :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \qquad (113)$$

όπου η δυναμική ενέργεια U είναι συνάρτηση των x,y,z,t.
Αν εισάγουμε κάποιους περιορισμούς στην κίνηση του σωματίου, τότε αυτοί θα επιδράσουν στην δυναμική ενέργεια U. Αν η U είναι γνωστή η εξίσωση (113) μπορεί να λυθεί οπότε υπολογίζουμε την πυκνότητα πιθανότητας $|\Psi|^2$.
Αυτό τώρα που πρέπει να προσέξουμε είναι το εξής: η επέκταση της εξίσωσης *Schrödinger,* από την ειδική περίπτωση ενός ελευθέρου σωματίου (με σταθερή δυναμική ενέργεια), στην γενική περίπτωση ενός σωματίου, που υπόκειται σε αυθαίρετες δυνάμεις, που μεταβάλλονται με τον χρόνο και τον χώρο (το δυναμικό είναι της μορφής: V = V(x,y,z,t)), δεν υπάρχει τρόπος να αποδειχθεί ότι είναι σωστή. Το μόνο που μπορούμε να κάνουμε, είναι να θέσουμε ως αξίωμα την εξίσωση του *Schrödinger*, να την λύσουμε για μια ποικιλία φυσικών περιπτώσεων και να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα των υπολογισμών μας με τα αποτελέσματα πειραμάτων. Στην πράξη, έχει αποδειχθεί αξιοσημείωτα ακριβής στην πρόβλεψη των αποτελεσμάτων των πειραμάτων. Πρέπει βέβαια, να λάβουμε υπόψιν ότι η εξίσωση (113) δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για σχετικιστικά προβλήματα. Αξίζει να παρατηρήσουμε, ότι η εξίσωση *Schrödinger* δεν αναπαριστά μία επιπλέον αύξηση στον αριθμό των αξιωμάτων, που απαιτούνται για να περιγράψουμε τον φυσικό κόσμο. Ο $2^{ος}$ νόμος του Newton, που θεωρείται στην κλασσική μηχανική ως αξίωμα, μπορεί να εξαχθεί από την εξίσωση

Schrödinger με την προυπόθεση, ότι οι ποσότητες που συνδέει λαμβάνονται ως μέσοι όροι και όχι ως ορισμένες τιμές.

3.3 Εισήγηση Heisenberg :

Στην κλασσική Φυσική ως γνωστόν, η χρονική εξέλιξη ενός συστήματος υπολογίζεται λύνοντας κατάλληλες εξισώσεις και εκφράζοντας τα αποτελέσματα ως συναρτήσεις x(t) και p(t). Για παράδειγμα, στην περίπτωση ενός σωματίου μάζας m, που εκτελεί απλή αρμονική κίνηση, η βασική εξίσωση είναι ο 2ος νόμος του Newton: $F = md^2x/dt^2$, όπου $F = -kx$ οπότε: $md^2x/dt^2 + kx = 0$ (114).

Μία λύση είναι προφανώς η $x = a\cos\omega t$ (115), με $\omega = (k/m)^{1/2}$.

Η γραμμική ορμή του σωματιδίου είναι: $p = mdx/dt = -ma\omega\sin\omega t$ (116).

Υπολογίζουμε το γινόμενο xp από τις σχέσεις (115), (116) και έχουμε :

$xp = -ma^2\omega\cos\omega t.\sin\omega t = -1/2ma^2\omega\sin2\omega t$ (117)

Φυσικά και η ποσότητα px έχει την ίδια τιμή, άρα : $xp - px = 0$ (118).

Το αποτέλεσμα της σχέσης (118) μπορεί να είναι τετριμένο, αλλά δεν είναι αληθές. Η συνεισφορά του Heisenberg στην κβαντομηχανική είναι ισοδύναμη με το να πούμε ότι το δεξιό μέλος της (118) δεν είναι στην πραγματικότητα μηδέν, αλλά μικρή μη μηδενική ποσότητα, που η κλασσική μηχανική την αγνοεί, ενώ η κβαντομηχανική την λαμβάνει υπόψιν. Οι διαστάσεις του γινομένου xp είναι L^2MT^{-1} , που είναι διαστάσεις δράσης. Το μηδέν στο δεξιό μέλος της (118) πρέπει να αντικατασταθεί, σύμφωνα με τον Heisenberg με μία μικρή ποσότητα διαστάσεων δράσης. Τελικά , αποδεικνύεται ότι για να έχουμε συμφωνία με το πείραμα η μικρή αυτή ποσότητα είναι το $i\hbar$, δηλαδή έχουμε: $xp - px = i\hbar$ (119) (αντιμεταθετική σχέση). Αυτή η σχέση είναι η πλέον θεμελιώδης έκφραση στην κβαντομηχανική, ολόκληρη δε η θεωρία απορρέει εξ αυτής. Μια άμεση και πολύ σημαντική συνέπεια αυτής της σχέσης είναι ότι τα μεγέθη x,p δεν μπορούν πλέον να θεωρηθούν ως χρονικές συναρτήσεις, γιατί ως γνωστόν οι συναρτήσεις πάντοτε μετατίθενται. Άρα, μία περίπτωση είναι να θεωρήσουμε τα x,p ως τελεστές και η δεύτερη περίπτωση είναι να θεωρηθούν ως πίνακες. Τελεστής είναι απλά μια οδηγία πράξεων, όπου η σειρά πραγμάτωσης των οδηγιών, επηρεάζει το αποτέλεσμα. Εξάλλου, ιδιότητα των πινάκων είναι ότι η σειρά, με την οποία πολλαπλασιάζονται επηρεάζει το αποτέλεσμα.

Μία επιλογή αναλυτικής εκφράσεως των τελεστών x και p είναι η ακόλουθη : ο τελεστής, που αντιστοιχεί στην θέση x, εκφράζει πολλαπλασιασμό με την συντεταγμένη x, η γραμμική ορμή θα ερμηνευτεί ως ο τελεστής παραγωγίσεως ως προς x, δηλαδή :

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

Τώρα παίρνουμε μία συνάρτηση Ψ ώστε να δράσουν επ'αυτής οι τελεστές, οπότε
η σχέση (119) γίνεται :

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\Psi = i\hbar\Psi \qquad (120)$$

Ελέγχουμε τώρα αν ικανοποιείται η σχέση (120) :

$$\hat{x}\hat{p}\Psi = x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi = -i\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \qquad (121)$$

$$\hat{p}\hat{x}\Psi = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})x\Psi = -i\hbar(\Psi + x\frac{\partial\Psi}{\partial x}) \qquad (122)$$

Αφαιρώντας κατά μέλη τις σχέσεις (121), (122) καταλήγουμε στην (120). Η κβαντομηχανική απαιτεί να κάνουμε τους υπολογισμούς μας με τους τελεστές, που αντιστοιχούν στα παρατηρήσιμα μεγέθη και όχι όπως στην κλασσική μηχανική με αυτές καθ'αυτές τις παρατηρήσιμες ποσότητες.

Μαθηματική προετοιμασία

3.4 Ο Ευκλείδιος χώρος : Ο γνωστός μας από την καθημερινή εμπειρία μας Ευκλείδιος χώρος E_3, είναι ένας γραμμικός διανυσματικός χώρος. Ένα διάνυσμα v ορίζεται στον E_3 ως ένας γραμμικός συνδυασμός τριών μοναδιαίων διανυσμάτων e_1,e_2,e_3, που αποτελούν μία βάση του E_3, δηλαδή : $u = u_1e_1 + u_2e_2 + u_3e_3$ (123), όπου u_1,u_2,u_3 οι προβολές του v στους άξονες x,y,z αντίστοιχα.

Ιδιότητες του E_3 : Μπορούμε να ορίσουμε :

α) το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων u,v: $u.v = (u,v) = u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3$ (124)

Η σχέση (124) γράφεται και με την μορφή : $u.v = |u|.|v|\cos\theta$ (125) , όπου θ η γωνία μεταξύ των u και v.

β) την νόρμα ενός διανύσματος : $(u,u) = |u|^2 = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2$ (126)

γ) το μήκος ή μέτρο ενός διανύσματος :

$$|u| = \sqrt{(u,u)} = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2} \qquad (127)$$

Προφανώς το μέτρο των μοναδιαίων διανυσμάτων είναι αντίστοιχα : $|e_1|=|e_2|=|e_3|=1$.

Σύμφωνα με αυτούς τους ορισμούς, αποδεικνύονται εύκολα οι επόμενες ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου : $(u,v) = (v,u)$ (I) , $(u+v,w) = (u,w)+(v,w)$ (II) ,

$(\lambda u,v) = \lambda(u,v)$ (III) για κάθε πραγματικό αριθμό λ , $|(u,v)| \le |u|.|v|$ (IV) (ανισότητα Cauchy-Schwarz).

Για την νόρμα ισχύουν : $(u,u) \ge 0$ (V) , $(u,u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$ (VI)

Για το μέτρο : $|u| \ge 0$ (VII) , $|u| = 0 \Leftrightarrow u = 0$ (VIII) , $|\lambda u| = |\lambda|.|u|$ (IX) για κάθε πραγματικό αριθμό λ, $|u+v| \le |u|+|v|$ (X) (ανισότητα τριγώνου).

Δύο διανύσματα u και v είναι ορθογώνια μεταξύ τους ($u \perp v$), όταν και μόνο όταν : $(u,v) = 0$ (συνθήκη ορθογωνιότητας). Σύμφωνα με την σχέση (125) για να λέγονται ορθογώνια τα διανύσματα u,v πρέπει : $\theta = \pm\pi/2$.

Όταν τα μέτρα των διανυσμάτων είναι ίσα με την μονάδα, όπως τα διανύσματα βάσης e_1,e_2,e_3, τότε τα διανύσματα λέγονται κανονικά.

Όταν τα διανύσματα είναι συγχρόνως ορθογώνια και κανονικά, λέγονται ορθοκανονικά. Η ιδιότητα της ορθοκανονικότητας δύο διανυσμάτων a_i,a_j εκφράζεται με την βοήθεια του συμβόλου του Kronecker δ με την σχέση : $(a_i,a_j) = \delta_{ij}$. Προφανώς την ιδιότητα της ορθοκανονικότητας πληρούν τα διανύσματα βάσης e_1,e_2,e_3.

3.5 Χώρος Hilbert:

Οι παραπάνω ιδιότητες και μερικές ακόμη των διανυσμάτων του E_3 μπορούν να γενικευθούν και σε "αφηρημένους χώρους" απείρων διαστάσεων, όπου όμως τα γνωστά μας διανύσματα έχουν αντικατασταθεί από "αφηρημένα διανύσματα", που το καθένα αντιστοιχεί σε μια συνάρτηση Ψ(N). Ο αφηρημένος αυτός χώρος των απείρων διαστάσεων είναι ένας "συναρτησιακός χώρος", του οποίου κάθε στοιχείο είναι γενικά μία μιγαδική συνάρτηση. Ένας γραμμικός συναρτησιακός χώρος του τύπου αυτού είναι ο "χώρος Hilbert (H)".

Ο χώρος Hilbert μπορεί να θεωρηθεί ως μια γενίκευση του διανυσματικού χώρου E_3 (ή καλύτερα του E_n). Η γενίκευση αυτή γίνεται ταυτόχρονα προς δύο κατευθύνσεις:

A) ο χώρος του Hilbert είναι ένας διανυσματικός χώρος που γενικά έχει άπειρες διαστάσεις (ο αριθμός των γραμμικά ανεξαρτήτων διανυσμάτων τείνει στο άπειρο),

B) ο χώρος του Hilbert ορίζεται με την βοήθεια του σώματος C των μιγαδικών αριθμών.

Ο χώρος H παρέχει μια επαρκή γλώσσα για την διατύπωση των αιτημάτων και ολόκληρου του εννοιολογικού συστήματος της κβαντομηχανικής. Προσφέρει συγχρόνως μια "γεωμετρική" αντίληψη για τα κβαντικά φυσικά φαινόμενα.

Όπως έχουμε αναφέρει οι δυνατές φυσικές καταστάσεις ενός κβαντομηχανικού συστήματος εκφράζονται από μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση Ψ(r,t). Το σύνολο των καταστάσεων ενός κβαντικού συστήματος αποτελεί ένα διανυσματικό χώρο. Μπορούμε να θεωρήσουμε τις φυσικές καταστάσεις σαν διανύσματα ενός διανυσματικού χώρου. Τα διανύσματα αυτά λέγονται διανύσματα καταστάσεως ή καταστατικά διανύσματα.

Ακολουθώντας τον Dirac, θα συμβολίσουμε αυτά τα καταστατικά διανύσματα του H με το σύμβολο: $| >$ (διάνυσμα ket), με δείκτη την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση. Μία κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ, στον διανυσματικό χώρο με τον συμβολισμό Dirac περιγράφεται από το ket $|\Psi>$.

Ως γνωστόν ένα σύνολο του οποίου κάθε γραμμικός συνδυασμός των στοιχείων του ανήκει πάλι στο σύνολο, ονομάζεται "διανυσματικός χώρος", οπότε και για τον χώρο H αν πάρουμε π.χ. δύο οποιαδήποτε διανύσματα $|u>$ και $|v>$ του χώρου H , κάθε γραμμικός συνδυασμός $\lambda|u> + \mu|v>$, $\forall\ \lambda,\mu \in C$, αποτελεί ένα καλά ορισμένο διάνυσμα του H.

Ανάλογα με τον χώρο στον οποίο υλοποιούνται τα αφηρημένα αυτά διανύσματα γράφουμε την αντίστοιχη "οντότητα" μέσα στο ket. Για παράδειγμα, αν το αφηρημένο διάνυσμα υλοποιείται στον τρισδιάστατο χώρο, η αντίστοιχη "οντότητα" είναι το διάνυσμα **α**, και λέμε ότι $|\alpha> \Leftrightarrow \boldsymbol{\alpha}$, ενώ αν η "οντότητα" είναι μια συνεχής συνάρτηση f τότε : $|f> \Leftrightarrow f$.

Το συζυγές του ket είναι επίσης ένα διάνυσμα, που ονομάζεται bra και συμβολίζεται ως $<|$, και αντιστοιχεί στην συζυγή κυματοσυνάρτηση Ψ^*. Επειδή μια βασική ιδιότητα των διανυσματικών χώρων είναι η ύπαρξη

$$<\Psi_1|\Psi_2>=\int_V \Psi_1^*\Psi_2 dV \quad (128)$$

του εσωτερικού γινομένου, αν $|\Psi_1>$ και $|\Psi_2>$ είναι δύο διανύσματα του διανυσματικού χώρου των φυσικών καταστάσεων, το εσωτερικό τους γινόμενο είναι ένας μιγαδικός αριθμός, που δίνεται από την σχέση :

όπου το σύμβολο $<|>$ ονομάζεται bracket (αγκύλη) και dV ο στοιχειώδης χώρος που ορίζεται από τις N διαστάσεις στον χώρο.

Η κβαντική μηχανική μπορεί να διατυπωθεί με πολλούς διαφορετικούς τρόπους. Ένας τρόπος είναι αυτός που στηρίζεται στον αφηρημένο χώρο του Hilbert και χρησιμοποιεί τον συμβολισμό του Dirac. Ένας άλλος πολύ συνηθισμένος τρόπος είναι εκείνος που χρησιμοποιεί όχι τον αφηρημένο χώρο του Hilbert, αλλά μια συγκεκριμένη πραγμάτωσή του. Πρόκειται για τον συναρτησιακό ή τον "κυματικό" τρόπο παρουσίασης της κβαντικής μηχανικής. Η "συναρτησιακή πραγμάτωση" του χώρου του Hilbert, ορίζεται ως ο χώρος όλων των ολοκληρώσιμων κατά τετράγωνο συναρτήσεων με πεδίο ορισμού τους πραγματικούς αριθμούς και πεδίο τιμών τους μιγαδικούς αριθμούς.

Παρακάτω αναφέρουμε μερικές ιδιότητες του συναρτησιακού χώρου του Hilbert:

1) ο χώρος H είναι γραμμικός. Αν $\Psi_1, \Psi_2,\ldots, \Psi_n$, συναρτήσεις του χώρου αυτού, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός αυτών θα δίνει μια συνάρτηση Ψ του ίδιου χώρου, δηλαδή : $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \ldots + c_n\Psi_n$, όπου $c_1, c_2,\ldots, c_n$ σταθερές (γενικά μιγαδικοί αριθμοί).

2) Το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων $\Psi_1(N)$, $\Psi_2(N)$ του χώρου H, δίνεται από την σχέση :

$$(\Psi_1(N),\Psi_2(N)) = \int \Psi_1^*(N)\Psi_2(N)dN \quad (129)$$

όπου dN είναι ο στοιχειώδης χώρος που ορίζεται από τις μεταβλητές N.

3) η απεικόνιση ενός χώρου S πάνω στον εαυτό του πραγματοποιείται με έναν τελεστή $\hat{A}$, που όταν δράσει πάνω σε μία συνάρτηση Ψ του χώρου S, δίνει μία άλλη συνάρτηση Ψ΄ που ανήκει και αυτή στον ίδιο χώρο S, δηλαδή :

$$\Psi\in S : \quad \hat{A}\Psi=\Psi'\in S$$

Η Ψ΄ που προκύπτει ονομάζεται και εικόνα της Ψ.

3.6 Η έννοια του τελεστή :

Θεωρούμε ως χώρο S το διάστημα (-∞,+∞), στο οποίο ορίζεται το σύνολο των συναρτήσεων Ψ, που υποθέτουμε ότι έχουν όλες τις ιδιότητες (συνέχεια, πολλαπλή παραγωγισιμότητα κ.λ.π.) ώστε να διασφαλίζεται η νομιμότητα όλων των δυνατών πράξεων, που μπορούμε να κάνουμε πάνω τους. Τελεστής είναι μία μαθηματική έκφραση, που καθορίζει μια σειρά μαθηματικών πράξεων, που εκτελούμενες πάνω σε μία συνάρτηση Ψ την μετασχηματίζει σε μία άλλη συνάρτηση Ψ΄ του ίδιου χώρου S. Η μορφή του τελεστή καθορίζει το είδος και την σειρά των μαθηματικών πράξεων και εξαρτάται από τον εκάστοτε χρησιμοποιούμενο χώρο.

Στην κβαντομηχανική οι τελεστές που χρησιμοποιούμε είναι οι γραμμικοί. Αν $\hat{A}$ είναι ένας γραμμικός τελεστής ισχύει:

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1(\hat{A}\,\Psi_1) + c_2(\hat{A}\Psi_2) = c_1\Psi_1' + c_2\Psi_2'$$

όπου c_1, c_2 σταθερές (γενικά μιγαδικοί αριθμοί). Παρατηρούμε ότι η δράση τους πάνω σε ένα γραμμικό συνδυασμό συναρτήσεων δίνει τον αντίστοιχο γραμμικό συνδυασμό των εικόνων τους. Στο εξής επειδή θα συναντάμε μόνο γραμμικούς τελεστές θα παραλείπουμε τον προσδιορισμό "γραμμικός" χάριν απλότητας.

<u>Άλγεβρα τελεστών:</u> 1) πρόσθεση τελεστών: $(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)\Psi = \hat{A}_1\,\Psi + \hat{A}_2\,\Psi$,
2) πολλαπλασιασμός τελεστών: $(\hat{A}_1\,\hat{A}_2)\Psi = \hat{A}_1\,(\hat{A}_2\,\Psi)$

Οι πράξεις ανάμεσα στους τελεστές έχουν όλες τις γνωστές μας από την αριθμητική ιδιότητες εκτός από μία, την μεταθετικότητα του πολλαπλασιασμού, δηλαδή εν γένει ισχύει : $\hat{A}_1\,\hat{A}_2\Psi \neq \hat{A}_2\,\hat{A}_1\Psi$. Αυτό σημαίνει ότι οι τελεστές $\hat{A}_1$ και $\hat{A}_2$ δεν μετατίθενται (βλέπε παράδειγμα στην §3.3). Φυσικά υπάρχουν και τελεστές που μετατίθενται. Ορίζουμε ως αντιμεταθέτη ή εναλλάκτη δύο τελεστών $\hat{A}_1$ και $\hat{A}_2$ τον τελεστή $[\hat{A}_1, \hat{A}_2]$, που δίνεται από την σχέση :

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_1\,\hat{A}_2 - \hat{A}_2\,\hat{A}_1 .$$

Αν ισχύει : $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = 0$ σημαίνει ότι οι τελεστές $\hat{A}_1, \hat{A}_2$ μετατίθενται, ενώ αν $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] \neq 0$, τότε οι $\hat{A}_1, \hat{A}_2$ δεν μετατίθενται.

3) Αντίστροφος τελεστής $\hat{A}^{-1}$: γι'αυτό τον τελεστή ισχύει $\hat{A}\,\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\,\hat{A} = \hat{I}$, όπου $\hat{I}$
είναι ο μοναδιαίος τελεστής. Ο μοναδιαίος τελεστής έχει την ιδιότητα να αφήνει αναλλοίωτη κάθε συνάρτηση πάνω στην οποία ενεργεί.

4) Μηδενικός τελεστής $\hat{O}$: είναι ο τελεστής που απεικονίζει οποιαδήποτε συνάρτηση σε μια συνάρτηση ίση εκ ταυτότητος με το μηδέν.

<u>Ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές ενός τελεστή</u> : Συμβαίνει μερικές φορές, όταν ένας τελεστής $\hat{A}$ δράσει σε μία κατάλληλη συνάρτηση Ψ, να ξαναπάρουμε την ίδια συνάρτηση πολλαπλασιασμένη με έναν αριθμό α, δηλαδή: $\underline{\hat{A}\Psi = \alpha\,\Psi}$ (130). Αν μία συνάρτηση ικανοποιεί την (130) ονομάζεται ιδιοσυνάρτηση του τελεστή. Ο αριθμός α ονομάζεται ιδιοτιμή του τελεστή και είναι εν γένει μιγαδικός αριθμός.

Η εξίσωση (130) ονομάζεται εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή $\hat{A}$.
Γενικά, ένας τελεστής μπορεί να έχει πολλές ιδιοσυναρτήσεις και πολλές ιδιοτιμές. Είναι δυνατόν σε μία ιδιοτιμή του τελεστή $\hat{A}$ να αντιστοιχούν δύο ή και περισσότερες γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις (γραμμικά ανεξάρτητες δύο συναρτήσεις F_1,F_2 είναι αυτές για τις οποίες αν ισχύει: $\kappa F_1 + \lambda F_2 = 0$, τότε πρέπει: $\kappa = \lambda = 0$). Οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές ονομάζονται εκφυλισμένες.

Συναφής ή συζυγής τελεστής του $\hat{A}$ είναι ο τελεστής $\hat{A}^+$ που για κάθε δύο συναρτήσεις Ψ_1,Ψ_2 ικανοποιεί την σχέση : $(\Psi_1, \hat{A}\,\Psi_2) = (\hat{A}^+\Psi_1,\Psi_2)$

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dV = \int (\hat{A}^+ \Psi_1)^* \Psi_2 dV \quad (131)$$

ή ισοδυνάμως :
Η ολοκλήρωση γίνεται στην περιοχή μεταβολής των ανεξαρτήτων μεταβλητών και με το dV συμβολίζουμε τον στοιχειώδη χώρο της περιοχής αυτής.
Ερμιτιανός τελεστής ή αυτοσυναφής ή αυτοσυζυγής: Είναι ο τελεστής που συμπίπτει με τον συναφή του, δηλαδή $\hat{A} = \hat{A}^+$ ή ισοδυνάμως :

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dV = \int (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 dV \quad (132)$$

Μία βασική ιδιότητα του ερμιτιανού τελεστή είναι ότι οι ιδιοτιμές του είναι πραγματικές.
<u>Απόδειξη</u>: Έστω Ψ μία ιδιοσυνάρτηση ερμιτιανού τελεστή και α η

$$\int \Psi^* \hat{A} \Psi dV = \int (\hat{A}\Psi)^* \Psi dV \Leftrightarrow \int \Psi^* \alpha \Psi dV = \int (\alpha\Psi)^* \Psi dV \Leftrightarrow$$

$$a\int \Psi^* \Psi dV = a^* \int \Psi^* \Psi dV \Leftrightarrow a = a^*$$

αντίστοιχη ιδιοτιμή. Ισχύει : $\hat{A}\,\Psi = \alpha\,\Psi$. Σύμφωνα με την (132) έχουμε:
Η τελευταία ισότητα ως γνωστόν δείχνει ότι ο α είναι πραγματικός αριθμός.
<u>Συνθήκη ορθογωνιότητας</u> : Δύο συναρτήσεις Ψ_1,Ψ_2 λέγονται ορθογώνιες όταν :

$$(\Psi_1,\Psi_2) = \int \Psi_1^* \Psi_2 dV = 0$$

<u>Συνθήκη κανονικοποίησης</u> : Μία συνάρτηση Ψ είναι κανονικοποιημένη όταν :

$$(\Psi,\Psi) = \int \Psi^* \Psi dV = 1$$

<u>Παρατήρηση 1^Η</u> : Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τελεστή, που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές, είναι ορθογώνιες.
<u>Απόδειξη</u>: Αν Ψ_1,Ψ_2 είναι δύο ιδιοσυναρτήσεις του ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$, με ιδιοτιμές α_1,α_2 αντίστοιχα ($\alpha_1 \neq \alpha_2$), τότε θα έχουμε:

$$\int \Psi_1^*\, \hat{A}\, \Psi_2\, dV = \alpha_2 \int \Psi_1^*\, \Psi_2\, dV\ , \qquad \int (\hat{A}\,\Psi_1)^*\, \Psi_2\, dV = \alpha_1 \int \Psi_1^*\, \Psi_2\, dV$$

Επειδή $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, σύμφωνα με την (132) θα έχουμε : $\alpha_2 \int \Psi_1^*\, \Psi_2\, dV = \alpha_1 \int \Psi_1^*\, \Psi_2\, dV \Leftrightarrow (\alpha_2 - \alpha_1) \int \Psi_1^*\, \Psi_2\, dV = 0$. Αλλά αφού έχουμε $\alpha_1 \neq \alpha_2$ τότε $\alpha_2 - \alpha_1 \neq 0$, οπότε θα ισχύει : $\int \Psi_1^* \Psi_2\, dV = 0$ δηλαδή οι συναρτήσεις Ψ_1,Ψ_2 είναι ορθογώνιες.
<u>Παρατήρηση 2^Η</u> : Επειδή οι ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή ικανοποιούν μια γραμμική ομογενή εξίσωση, αυτές καθορίζονται με μια αυθαίρετη σταθερά. Μπορούμε να εκλέξουμε την σταθερά αυτή έτσι ώστε οι ιδιοσυναρτήσεις να είναι κανονικοποιημένες. Έτσι όταν έχουμε ιδιοσυναρτήσεις ερμιτιανού

τελεστή, που αντιστοιχούν σε διακεκριμένες ιδιοτιμές, γράφουμε σύμφωνα με τα παραπάνω:

$\int \Psi_i^* \Psi_j \, dV = \delta_{ij}$, όπου δ_{ij} το δέλτα του Kronecker.

Ιδιοτιμές ερμιτιανών τελεστών :

1) το άθροισμα δύο ερμιτιανών τελεστών είναι επίσης ερμιτιανός τελεστής.
2) το γινόμενο δύο ερμιτιανών τελεστών είναι επίσης ερμιτιανός, εφόσον οι τελεστές μετατίθενται.
3) Σε κάθε ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$ αντιστοιχεί ένα σύνολο ιδιοτιμών α_n και ιδιοσυναρτήσεων Ψ_n , που ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών : $\hat{A}\Psi_n = \alpha_n \Psi_n$, όπου $n = 1,2,3,\ldots$
4) Οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί.
5) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τελεστή είναι ορθοκανονικές, δηλαδή ισχύει:

$$\int \Psi_m^* \Psi_n \, dV = \delta_{nm}$$

6) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τελεστή αποτελούν πλήρες σύστημα (ιδιότητα επαλληλίας), δηλαδή κάθε συνάρτηση Ψ του χώρου στον οποίο δρα ο τελεστής μπορεί να αναπτυχθεί σε μία σειρά ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή, σύμφωνα με την σχέση :

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n \quad (133)$$

όπου α_n είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί. Την ιδιότητα αυτή την έχουν μόνον οι ερμιτιανοί τελεστές, που χρησιμοποιούνται στην κβαντομηχανική. Οι συντελεστές α_n υπολογίζονται ως εξής : Ως γνωστόν $(\Psi_n,\Psi) = \int \Psi_n^* \Psi \, dV$ οπότε με βάση την σχέση (133) έχουμε

$$(\Psi_n, \Psi) = \int \Psi_n^* (\sum_n a_n \Psi_n) dV = a_1 \int \Psi_n^* \Psi_1 dV + a_2 \int \Psi_n^* \Psi_2 dV + \ldots + a_n \int \Psi_n^* \Psi_n dV$$

:

Εφόσον οι συναρτήσεις Ψ_n είναι ορθοκανονικές, θα έχουμε : $(\Psi_n,\Psi) = \alpha_n$, άρα

$\alpha_n = \int \Psi_n^* \Psi \, dV$.

7) Η μέση τιμή ενός ερμιτιανού τελεστή είναι πάντα πραγματική.

Με βάση τις παραπάνω ιδιότητες μπορούμε να διατυπώσουμε την ακόλουθη πρόταση, που συνδέει την φύση με τον μαθηματικό φορμαλισμό:

"Σε κάθε παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος της κλασσικής Μηχανικής (θέση, ταχύτητα, ορμή, ενέργεια, κ.λ.π.) αντιστοιχεί στην Κβαντομηχανική ένας ερμιτιανός τελεστής, που ενεργεί πάνω στην κυματοσυνάρτηση Ψ. Μεταξύ των ερμιτιανών αυτών τελεστών, ισχύουν οι ίδιες αλγεβρικές σχέσεις, που ισχύουν και μεταξύ των αντίστοιχων μεγεθών της κλασσικής Μηχανικής. Οι μόνες "επιτρεπτές" τιμές, δηλαδή οι μόνες τιμές που μπορεί να πάρει ένα φυσικό μέγεθος, είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή".

3.7 Αντιστοιχία φυσικών μεγεθών – τελεστών :

Με βάση τα προηγούμενα ορίζουμε τους τελεστές, που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες x,y,z, στις συνιστώσες της ορμής p_x, p_y, p_z και στην ενέργεια Ε ενός σωματίου. Συναρτήσει των τελεστών αυτών μπορεί να εκφραστεί ο τελεστής, που αντιστοιχεί σε οποιοδήποτε άλλο μέγεθος της κλασσικής Μηχανικής.

Για την συντεταγμένη x, ο αντίστοιχος τελεστής είναι ένας πολλαπλασιαστικός τελεστής, που μετατρέπει την Ψ στην xΨ, ομοίως για την συντεταγμένη y ο τελεστής μετατρέπει την Ψ σε yΨ και για την z ο τελεστής μετατρέπει την Ψ σε zΨ. Συμβολικά έχουμε :

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \qquad \hat{y}\Psi = y\Psi, \qquad \hat{z}\Psi = z\Psi$$

Η τριάδα των τελεστών των συντεταγμένων x,y,z αποτελεί τον τελεστή της θέσης r:

$$\hat{r}\Psi = r\Psi \quad (134)$$

Για τις συνιστώσες της ορμής p_x, p_y, p_z αντιστοιχούν οι διαφορικοί τελεστές :

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \acute{\alpha}\rho\alpha \quad \hat{p}_x\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad \acute{\alpha}\rho\alpha \quad \hat{p}_y\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial y},$$

$$\kappa\alpha\iota \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \quad \acute{\alpha}\rho\alpha \quad \hat{p}_z\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial z}$$

Η τριάδα των τελεστών των ορμών p_x, p_y, p_z αποτελεί τον τελεστή της ορμής p :

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad o\pi\acute{o}\tau\varepsilon \quad \hat{p}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi \quad (135)$$

Τέλος, το φυσικό μέγεθος Ε της ενέργειας αντιστοιχεί στον τελεστή :

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad o\pi\acute{o}\tau\varepsilon \quad \hat{E}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (136)$$

Συμπερασματικά μπορούμε να αναφέρουμε δύο βασικές προτάσεις, που αποτελούν τον σύνδεσμο μεταξύ της μέτρησης (πείραμα) και του υπολογισμού (θεωρία).

1^{η}: Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος A(r,p) αντιστοιχεί ένας ερμιτιανός κβαντικός τελεστής $\hat{A}$, που λαμβάνεται με αντικατάσταση των μεγεθών r,p με τους αντίστοιχους τελεστές τους σύμφωνα με τις σχέσεις (134), (135), δηλαδή έχει την μορφή : $\hat{A}(r,-i\hbar\nabla)$.

2^{η} : Οι τιμές ενός μετρήσιμου φυσικού μεγέθους A(r,p), που μπορεί να ληφθούν κατά την μέτρησή του, είναι ίσες με τις ιδιοτιμές α_n του αντίστοιχου τελεστή $\hat{A}$, που υπολογίζονται από την αντίστοιχη εξίσωση ιδιοτιμών :

$$\hat{A}\,\Psi_n(r) = \alpha_n\,\Psi_n(r)$$

όπου $\Psi_n(r)$ είναι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{A}$.

Για παράδειγμα όλων των ανωτέρω ας ορίσουμε τον τελεστή της χαμιλτονιανής και μετά να γράψουμε την εξίσωση *Schrödinger* με την χρήση τελεστών.

Υπενθυμίζουμε ότι στην κλασσική μηχανική ονομάζουμε χαμιλτονιανή (Hamiltonian) H την συνάρτηση : $H = H(x,p) = (p^2/2m) + U(x)$, που δίνει την ολική ενέργεια (κινητική και δυναμική) του σωματίου. Υπόψιν ότι το σύμβολο Ε της ολικής ενέργειας, το χρησιμοποιούμε για μια συγκεκριμένη σταθερή τιμή της ενέργειας του σωματιδίου, ενώ το σύμβολο Η και το όνομα Χαμιλτονιανή, όταν θεωρούμε την ολική ενέργεια σαν μια καθορισμένη συνάρτηση των x και p. Όταν η δυναμική ενέργεια U είναι μηδέν η Χαμιλτονιανή έχει μόνο τον όρο $p^2/2m$ της κινητικής ενέργειας και ονομάζεται "ελεύθερη Χαμιλτονιανή", συμβολίζεται δε με H_0. Ο τελεστής της ελεύθερης Χαμιλτονιανής είναι :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Αν επιδράσει τώρα αυτός ο τελεστής στην κυματοσυνάρτηση Ψ, έχουμε:

$$\hat{H}_0\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

Για τον τελεστή της Χαμιλτονιανής, θα έχουμε :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + U(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x), \quad \textit{οπότε}: \quad \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi$$

Επομένως η εξίσωση *Schrödinger* με την βοήθεια των τελεστών γίνεται :

$$\boxed{\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi} \quad (137)$$

Για μια τρισδιάστατη κίνηση σωματίου σε ένα τυχαίο δυναμικό V(r,t) η Χαμιλτονιανή γίνεται :

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r,t) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U(x,y,z,t)$$

οπότε ο αντίστοιχος τελεστής του είναι :

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

3.8 Διανυσματικός χώρος :

Ανάλογος είναι ο ρόλος ενός τελεστή στον διανυσματικό χώρο. Συγκεκριμένα, όταν ένας τελεστής Â δρα πάνω σε ένα διάνυσμα του χώρου Η, το μετασχηματίζει σε ένα άλλο διάνυσμα του ίδιου χώρου, δηλαδή :

$$\hat{A}\,|u\rangle = |v\rangle.$$

Γενικά όλες οι ιδιότητες, που ισχύουν για τους τελεστές όταν δρουν σε συναρτήσεις ισχύουν αντίστοιχα και για τα διανύσματα. Για παράδειγμα, η εξίσωση ιδιοτιμών στην αναπαράσταση του διανυσματικού λογισμού είναι :

$$\hat{A}\,|a\rangle = \alpha\,|a\rangle \quad (138)$$

Το διάνυσμα |a> ονομάζεται ιδιοδιάνυσμα του τελεστή Â και ο αριθμός α λέγεται ιδιοτιμή του τελεστή Â.

Αντίστοιχα η εξίσωση των ιδιοτιμών του Χαμιλτονιανού τελεστή στον διανυσματικό χώρο των φυσικών καταστάσεων, έχει την μορφή :

$$\hat{H}\,|\Psi_n\rangle = E_n\,|\Psi_n\rangle \quad (139)$$

όπου $|\Psi_n>$ και E_n τα ιδιοδιανύσματα και οι ιδιοτιμές αντίστοιχα της ολικής ενέργειας του φυσικού συστήματος, όταν αυτό βρίσκεται σε στάσιμη κατάσταση (ιδιοκατάσταση) με ολική ενέργεια E_n. Η σχέση (139) είναι η εξίσωση *Schrödinger* , κάθε δε γραμμικός συνδυασμός των ορθοκανονικών ιδιοδιανυσμάτων $|\Psi_n>$ θα δίνει ένα καταστατικό διάνυσμα, δηλαδή :

$$|\Psi>=\sum_n a_n |\Psi_n>$$

Να θυμίσουμε ότι ένα σύνολο διανυσμάτων $\{|u_n>\}$ του Η με πεπερασμένο ή άπειρο πλήθος στοιχείων, ονομάζεται <u>ορθοκανονικό</u> αν :

$$<u_i|u_j> = \delta_{ij} .$$

Ένα σύνολο διανυσμάτων $\{|v_n>\}$, γενικά με άπειρο πλήθος στοιχείων, ονομάζεται <u>πλήρες</u>, αν κάθε διάνυσμα $|\Psi>$ του χώρου Η μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός :

$$|\Psi>=\sum_{n=1}^{\infty} a_n |v_n>$$

όπου οι μιγαδικοί αριθμοί α_n δεν είναι τίποτα άλλο από τα εσωτερικά γινόμενα του διανύσματος $|\Psi>$ με όλα τα διανύσματα του πλήρους συνόλου $\{|v_n>\}$, ή κατ'άλλον τρόπο οι συνιστώσες του $|\Psi>$ κατά τα διανύσματα $\{|v_n>\}$ δηλαδή:

$$\alpha_n = <v_n|\Psi> .$$

Ένα σύνολο διανυσμάτων $\{|e_n>\}$, γενικά με άπειρο πλήθος στοιχείων, ονομάζεται <u>ορθοκανονική βάση</u> του Η αν είναι ταυτόχρονα και ορθοκανονικό και πλήρες, δηλαδή αν για κάθε $|\Psi>$ του Η έχουμε:

$$|\Psi>=\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n |e_n> \quad , \quad <e_i|e_j>=\delta_{ij}$$

όπου και εδώ οι συνιστώσες ε_n γράφονται : $\varepsilon_n = <e_n|\Psi>$.

3.9 <u>Αναπαράσταση γραμμικών τελεστών με πίνακες</u> :

Σε ορισμένες περιπτώσεις, που ο συναρτησιακός φορμαλισμός δεν μπορεί να εφαρμοστεί , π.χ. στην περίπτωση της μελέτης του spin ενός κβαντικού συστήματος, χρησιμοποιούμε έναν άλλο φορμαλισμό, που βασίζεται στους πίνακες και χρησιμοποιήθηκε από τον Heisenberg προκειμένου να μελετήσει τα κβαντικά συστήματα.

Ο νέος αυτός τρόπος περιγραφής και μελέτης των κβαντικών φυσικών συστημάτων και των διαφόρων φαινομένων, που συνδέονται με τα συστήματα αυτά, βασίζεται στα εξής:

Σε ένα Ν-διάστατο χώρο ή και απείρων διαστάσεων γραμμικό χώρο (χώρος Hilbert H) των καταστάσεων ενός συστήματος, στον οποίο έχει οριστεί μια ορθοκανονική βάση $\{|e_n>\}$, i = 1,2,…,N ή άπειρο, κάθε διάνυσμα $|\Psi>$, που περιγράφει μια φυσική κατάσταση του συστήματος, αναπαρίσταται με ένα μονόστηλο πίνακα τόσων στοιχείων όσες είναι και οι διαστάσεις του χώρου και κάθε γραμμικός τελεστής, που δρα στον διανυσματικό αυτό χώρο μπορεί να παρασταθεί με ένα κατάλληλο πίνακα.

Ας δούμε πως ένας γραμμικός τελεστής μπορεί να αντιπροσωπευθεί από ένα πίνακα. Ξεκινάμε από την σχέση : Â|u> = |v>. Τα δύο διανύσματα |u> και |v> μπορούν να αναπτυχθούν σε μία

$$|u>=\sum_{n=1}^{\infty}|e_n><e_n|u> \qquad |v>=\sum_{m=1}^{\infty}|e_m><e_m|v>$$

ορθοκανονική βάση $\{|e_n>\}$:

$$<e_m|v>=<e_m|\hat{A}|u>=<e_m|\hat{A}(\sum_{n=1}^{\infty}|e_n><e_n|u>=\sum_{n=1}^{\infty}<e_m|\hat{A}|e_n><e_n|u>$$

Όμως :

Ας συμβολίσουμε τώρα τις συνιστώσες των διανυσμάτων |u> και |v> στην βάση $\{|e_n>\}$: $v_m = <e_m|v>$, $u_n = <e_n|u>$ και τους μιγαδικούς

γενικά αριθμούς, που υπεισέρχονται στην προηγούμενη παράσταση και

$$v_m=\sum_{n=1}^{\infty}\hat{A}_{mn}u_n \quad (140)$$

χαρακτηρίζουν τον τελεστή Â με $\hat{A}_{mn}$, δηλαδή : $\hat{A}_{mn} = <e_m|\hat{A}|e_n>$.
Τώρα με βάση τα προηγούμενα σύμβολα θα έχουμε :
Μπορούμε ένα διάνυσμα με βάση τα προηγούμενα να παρασταθεί με ένα

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ . \\ . \\ v_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & . & . & \hat{A}_{1n} \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & . & . & \hat{A}_{2n} \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ \hat{A}_{m1} & \hat{A}_{m2} & . & . & \hat{A}_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ u_n \end{bmatrix} \quad (141)$$

μονόστηλο πίνακα, του οποίου κάθε στοιχείο να είναι ένας μιγαδικός αριθμός. Η τελευταία σχέση (140) μπορεί να γραφεί ως μια εξίσωση πινάκων άπειρης τάξης:
ή με την συμπαγή μορφή : [v] = [Â] [u].
Ο πίνακας [Â] ονομάζεται αντιπροσωπευτικός πίνακας του τελεστή Â στην βάση $\{|e_n>\}$. Προφανώς όλα όσα αναφέρθησαν για τον χώρο του Hilbert και τους γραμμικούς τελεστές που δρουν σ'αυτόν μπορούν να ξαναδιατυπωθούν στην γλώσσα των πινάκων. Για παράδειγμα, ένας ερμιτιανός τελεστής Â είναι ένας τελεστής, του οποίου ο αντιπροσωπευτικός πίνακας έχει στοιχεία που υπακούουν στην σχέση :

$$\hat{A}_{mn} = \hat{A}_{nm}^{*} .$$

3.10 <u>Βασικές στατιστικές έννοιες</u> :

1) <u>Μέση τιμή</u>: Έστω ένα στατιστικό μέγεθος Α, που παίρνει τις διάκριτες

$$<A>=\frac{N_1a_1+N_2a_2+...+N_na_n}{N}=\sum_n a_n f_n \quad (142)$$

τιμές $α_1,α_2,…,α_n$. Αν σε ένα συνολικό αριθμό μετρήσεων Ν η τιμή $α_1$

εμφανίζεται N_1 φορές, η τιμή α_2 N_2 φορές κ.ο.κ. τότε η μέση τιμή <A> δίνεται από τον τύπο :
όπου $f_n = N_n/N$ οι συχνότητες εμφάνισης των δυνατών τιμών του Α. Αν το Ν τείνει στο άπειρο οι συχνότητες f_n τείνουν στις πιθανότητες εμφάνισης P_n των δυνατών τιμών α_n, οπότε Ĥ μέση τιμή δίνεται από την σχέση :
Μια τυχαία συνάρτηση G(A) ενός στατιστικού μεγέθους Α είναι επίσης ένα στατιστικό μέγεθος, που οι δυνατές του τιμές είναι προφανώς g_n =

$$< A >= a_1 P_1 + a_2 P_2 + ... + a_n P_n = \sum_n a_n P_n \quad (143)$$

$G(a_n)$, οπότε η μέση του τιμή είναι :

$$< G(A) >= \sum_n g_n P_n \quad (144)$$

2) <u>Πυκνότητα πιθανότητας</u> : Υπάρχει περίπτωση οι δυνατές τιμές ενός στατιστικού μεγέθους να καλύπτουν ένα συνεχές διάστημα, που συνήθως εκτείνεται από μείον άπειρο μέχρι συν άπειρο. Τώρα, δεν έχει έννοια η πιθανότητα μιας ορισμένης διάκριτης τιμής, αλλά η πιθανότητα ενός συνεχούς διαστήματος τιμών. Έτσι εισάγουμε την έννοια της "πυκνότητας πιθανότητας" Ρ(α), που ορίζεται από την απαίτηση ότι το γινόμενο Ρ(α)dα πρέπει να μας δίνει την πιθανότητα εύρεσης μιας τιμής α μεταξύ ενός απειροστού διαστήματος τιμών dα, δηλαδή να βρεθεί μεταξύ του α+(dα/2) και α-(dα/2). Η μέση τιμή <A> έχει ανάλογη με την σχέση (143) μορφή, μόνο που τώρα το διάκριτο άθροισμα αντικαθίσταται με ένα συνεχές άθροισμα, δηλαδή ολοκλήρωμα, οπότε :

$$< A >= \int_{-\infty}^{+\infty} aP(a)da \quad (145)$$

Για μια τυχούσα συνάρτηση G(A) ο αντίστοιχος τύπος είναι :

$$< G(A) >= \int_{-\infty}^{+\infty} G(a)P(a)da \quad (146)$$

Πρέπει να τονίσουμε ότι το άθροισμα (διάκριτο ή συνεχές) των πιθανοτήτων για όλα τα δυνατά αποτελέσματα πρέπει να κάνει μονάδα. Έτσι πρέπει να ισχύουν οι ακόλουθες συνθήκες "κανονικοποίησης των

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

πιθανοτήτων" :

(Διάκριτη περίπτωση) (Συνεχής περίπτωση)

3) <u>Διασπορά ή τυπική απόκλιση</u> : Αυτό είναι ένα άλλο μέγεθος χαρακτηριστικό μιας στατιστικής κατανομής τινών, που μας δείχνει πόσο συγκεντρωμένες είναι οι πιθανές τιμές του μεγέθους γύρω από την μέση τιμή. Ορίζεται από την σχέση : $(\Delta A)^2 = <(A-<A>)^2>$ (147)

Στην στατιστική το μέγεθος ΔΑ συμβολίζεται και ως δα. Στην κβαντομηχανική εκφράζει και τον βαθμό αβεβαιότητας του μεγέθους Α. Η σχέση (147) γράφεται ισοδύναμα και με την μορφή : $(\Delta A)^2 = <A^2>-<A>^2$ (148).

4) <u>Στατιστικές ροπές</u> : Ονομάζουμε στατιστική ροπή n-στής τάξης μιας στατιστικής κατανομής, την μέση τιμή της n-στής δυνάμεως της στατιστικής μεταβλητής Α, δηλαδή $<A^n>$. Η γνώση όλων των στατιστικών ροπών οδηγεί στον πλήρη προσδιορισμό μιας στατιστικής κατανομής. Έστω το στατιστικό μέγεθος Α συνεχούς φάσματος τιμών α, άρα και συνεχούς κατανομής πυκνότητας της πιθανότητας Ρ(α). Η στατιστική ροπή τάξης n δίνεται από την σχέση :

$$< A^n >= \int_{-\infty}^{+\infty} a^n P(a)da$$

Γνωρίζοντας τις ροπές $<A^n>$ για $n=1,2,\dots,\infty$ μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή μιας τυχαίας συνάρτησης G(A), που μπορεί να αναπτυχθεί σε δυναμοσειρά Taylor. Συγκεκριμένα ας θεωρήσουμε την συνάρτηση : $G(A,\xi) = e^{i\xi A}$, όπου ξ τυχαία πραγματική παράμετρος. Άρα η μέση τιμή της

$$g(\xi) =< e^{i\xi A} >=< \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} A^n >= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} < A^n > \quad (149)$$

G(A ,ξ) είναι :

Η g(ξ) ονομάζεται χαρακτηριστική συνάρτηση της στατιστικής κατανομής και μπορεί να υπολογιστεί από την (149) αν όλες οι στατιστικές ροπές είναι γνωστές.

Η g(ξ) συναρτήσει της πυκνότητας πιθανότητας Ρ(α) γράφεται :

$$g(\xi) =< e^{i\xi A} >= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi A} P(a)da \quad (150)$$

Βλέπουμε ότι η g(ξ) ισούται με τον μετασχηματισμό Fourier της Ρ(α), οπότε μέσω του αντίστροφου μετασχηματισμού έχουμε :

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

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι αν γνωρίζουμε όλα τα $<A^n>$ προσδιορίζουμε την g(ξ) και στην συνέχεια την Ρ(α).

3.11 <u>Εξίσωση Klein-Gordon</u>

Στην εξίσωση *Schrödinger* οδηγηθήκαμε, χρησιμοποιώντας την μη σχετικιστική έκφραση της ολικής ενέργειας, πράγμα που σημαίνει ότι η εξίσωση *Schrödinger* δεν ισχύει για σχετικιστικές ταχύτητες. Το 1928 ο Dirac, ανέπτυξε μια σχετικιστική θεωρία κβαντομηχανικής, βασιζόμενος στα ίδια αξιώματα όπως και ο *Schrödinger*, μόνο που θεώρησε την σχετικιστική έκφραση της ολικής ενέργειας :

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + (m_o c^2)^2} + U$$

Ας προσπαθήσουμε τώρα, να βρούμε την ελεύθερη κυματική εξίσωση γι' αυτήν την περίπτωση, οπότε θεωρούμε $U = 0$ και $E^2 = (cp)^2 + (m_o c^2)^2$. Θα χρησιμοποιήσουμε στην παραπάνω εξίσωση τους τελεστές της ορμής και της ενέργειας, δηλαδή :

$$E \to \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \kappa\alpha\iota \quad p \to \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

οπότε παίρνουμε :

$$\hat{E}^2 \psi = (c^2 \hat{p}^2 + m_o^2 c^4)\psi \Leftrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = (-c^2\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + m_o^2 c^4)\psi \Leftrightarrow$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_o^2 c^2}{\hbar^2} \right)\psi = 0$$

Η τελευταία εξίσωση είναι γνωστή σαν "εξίσωση Klein-Gordon" και είναι δευτεροτάξια ως προς τον χρόνο.

3.12 Ανάπτυγμα κατά Taylor – Μετασχηματισμός Fourier :

Α) Ανάπτυγμα κατά Taylor : Αν όλες οι παράγωγοι μιας συνάρτησης σε ένα σημείο x_o υπάρχουν, η συνάρτηση μπορεί να γραφεί σαν δυναμοσειρά γύρω από αυτό το σημείο x_o, ως εξής :

$$f(x) = f(x_o) + (x-x_o)\left(\frac{df}{dx}\right)_{x_o} + \frac{(x-x_o)^2}{2!}\left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_{x_o} + \frac{(x-x_o)^3}{3!}\left(\frac{d^3f}{dx^3}\right)_{x_o} + \ldots$$

Β) Μετασχηματισμός Fourier : Μία συνάρτηση f(x), μπορεί να αναπτυχθεί σε ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων u(x,k), δηλαδή :

$$f(x) = \sum_k u(x,k)\varphi(k)dk$$

όπου οι συντελεστές ανάπτυξης αυτής φ(k) υπολογίζονται από την σχέση :

$$\varphi(k) = \sum_x u^*(x,k) f(x)dx$$

Σύμφωνα με την θεωρία του ολοκληρωτικού μετασχηματισμού Fourier , η μήτρα μετασχηματισμού u(x,k) είναι της μορφής :

$$u(x,k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Η ανάπτυξη σε σειρά Fourier για $0 \le x \le 2\pi$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ είναι :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \varphi_k , \quad \varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} dx$$

Για το ολοκλήρωμα Fourier με -∞ < x < + ∞ και 0 < k < + ∞ έχουμε :

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

Κ Ε Φ Α Λ Α Ι Ο 4

4.1 Θεμελίωση Κβαντικής θεωρίας :

Για την θεμελίωση της Κβαντικής θεωρίας, σε τελική ανάλυση δεν χρειάζονται, παρά λίγες προτάσεις. Οτιδήποτε άλλο θα μπορεί να θεωρηθεί συνέπεια των προτάσεων αυτών. Αναφέρουμε παρακάτω δέκα "δομικές" προτάσεις, όπου θα φανεί η λιτότητα της θεωρίας.

1) Μαθηματική περιγραφή των φυσικών μεγεθών : Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας γραμμικός ερμιτιανός τελεστής, του οποίου οι ιδιοτιμές (που είναι πραγματικές), είναι οι μόνες τιμές που μπορεί να πάρει το μέγεθος αυτό. Ο τελεστής αυτός κατασκευάζεται από την κλασσική έκφραση του μεγέθους με την αντικατάσταση:

$$\vec{r} \to \hat{r} \quad \textit{και} \quad \vec{p} \to \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad \textit{Για την ενέργεια}: \ \mathrm{E} \to \hat{\mathrm{E}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\textit{όπου} \quad \vec{\nabla} = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}$$

2) Μαθηματική περιγραφή των φυσικών καταστάσεων : Κάθε φυσική κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση Ψ, που εκφράζει ένα κύμα πιθανότητας. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης $|\Psi|^2$ δίνει την πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σύστημα σε μια περιοχή του χώρου. Η κυματοσυνάρτηση περιέχει όλες τις πληροφορίες σχετικά με τα μετρήσιμα μεγέθη του συστήματος.

3) Στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης: Η μέση τιμή των αποτελεσμάτων μεγάλου πλήθους μέτρησεων ενός φυσικού μεγέθους δίνεται από την σχέση :

$$< A >= \int_V \Psi^*(\hat{A}\Psi)dV$$

όπου $\hat{A}$ είναι ο τελεστής που αντιστοιχεί στο μέγεθος Α.

4) Αρχή της επαλληλίας : Μια κατάσταση ενός φυσικού συστήματος μπορεί να
περιγραφεί από τον γραμμικό συνδυασμό ιδιοσυναρτήσεων $\Psi_n(r,t)$ του τελεστή της χαμιλτονιανής, δηλαδή :

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

Οι συντελεστές α_n , παίρνουν τιμές από 0 έως 1 και εκφράζουν τον βαθμό συμμετοχής κάθε $\Psi_n(r,t)$, στον γραμμικό συνδυασμό και δίνονται από την σχέση :

$$a_n = \int_V \Psi_n^*(r,t)\Psi(r,t)dV$$

Η πιθανότητα εμφάνισης σε μια μέτρηση της ιδιοτιμής λ_n, που αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση Ψ_n , είναι : $P_n = |\alpha_n|^2$, όπου $|\alpha_n|^2 = \alpha_n^* \alpha_n$.

Η Ψ(r,t) είναι η γενική λύση της εξίσωσης *Schrödinger* και μπορεί να γραφεί με την μορφή : $\Psi(r,t)=\sum_n a_n\psi_n(r)\,\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}$ και πρέπει να κανονικοποιείται, δηλαδή να ισχύει :

$$\int_V \Psi^*(r,t)\Psi(r,t)dV=1$$

όπου αποδεικνύεται ότι πραγματοποιείται, αν ισχύει η σχέση :

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

5) <u>Νόμος της μέτρησης στον μικρόκοσμο</u>: Η κατάσταση ενός φυσικού συστήματος
μετά από μία μέτρηση, περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση της ιδιοτιμής, που μετρήθηκε.
6) <u>Κβαντικός νόμος της κίνησης</u>: Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης ενός φυσικού
συστήματος, δίνεται από την εξίσωση του *Schrödinger :*

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

7) <u>Συμβιβαστά μεγέθη</u> : Δύο κβαντικά μεγέθη A_1 και A_2 είναι συμβιβαστά όταν οι αντίστοιχοι τελεστές τους μετατίθενται, δηλαδή ισχύει : $\hat{A}_1\hat{A}_2-\hat{A}_2\hat{A}_1=0$.

Η διαφορά είναι ένας τελεστής, που λέγεται μεταθέτης και συμβολίζεται ως $[\hat{A}_1,\hat{A}_2]$, δηλαδή ισχύει : $[\hat{A}_1,\hat{A}_2]=0$. Στην περίπτωση αυτή τα μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια.

Εδώ ας αναφέρουμε μερικές γενικές ιδιότητες του μεταθέτη:

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

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

Στην 3.3§ είχε αναφερθεί ότι οι τελεστές της συντεταγμένης x και ορμής p δεν
μετατίθενται και μάλιστα ισχύει η σχέση (120). Με την βοήθεια των τελεστών, η απόδειξη είναι η εξής :
Θεωρούμε μια τυχαία κυματοσυνάρτηση Ψ(x) στην οποία θα δράσουν οι τελεστές, οπότε έχουμε :

$$(\hat{x}\hat{p})\Psi-(\hat{p}\hat{x})\Psi=-i\hbar x\dot{\Psi}-[-i\hbar\frac{d}{dx}(x\Psi)]=-i\hbar x\dot{\Psi}+i\hbar\Psi+i\hbar x\Psi=i\hbar\Psi$$

$$\dot{\alpha}\rho\alpha\quad [\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$$

Ομοίως μπορούμε να υπολογίσουμε και άλλους μεταθέτες, όπως :

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, \hat{p}\hat{p}] = 2i\hbar\hat{p} \quad [\hat{x}, \hat{p}^3] = 3i\hbar\hat{p} \quad \kappa\alpha\iota \ \ \gamma\varepsilon\nu\iota\kappa\dot{\alpha}:$$

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

Δεδομένου ότι μια τυχούσα συνάρτηση A(x,p) μπορεί να αναπτυχθεί σε μια δυναμοσειρά ως προς p, η παραπάνω σχέση γενικεύεται ως εξής :

$$[\hat{x}_i, \hat{A}(\hat{x}_i, \hat{p}_i)] = i\hbar\frac{\partial A}{\partial p_i} \quad o\mu o\iota\omega\varsigma : [\hat{p}_i, \hat{A}(\hat{x}_i, \hat{p}_i)] = -i\hbar\frac{\partial A}{\partial x}$$

8) <u>Γενικευμένη συνθήκη της αβεβαιότητας</u> : Δύο κβαντικά μεγέθη A και E, που
είναι ασυμβίβαστα μεταξύ τους δεν μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια. Οι αντίστοιχες αβεβαιότητες συνδέονται με την συνθήκη :
(ΔA) (ΔE) ≥ ½ |<[Â, Ê]>| , όπου |<[Â, Ê]>| είναι το απόλυτο της μέσης τιμής του μεταθέτη των μεγεθών A , E.

9) <u>Χρονική μεταβολή της μέσης τιμής</u> : Ο ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής
ενός κβαντικού μεγέθους A είναι ανάλογος της μέσης τιμής του μεταθέτη του με τον τελεστή της χαμιλτονιανής του συστήματος, δηλαδή :

$$\frac{d<A>}{dt} = \frac{1}{i\hbar} < [\hat{A}, \hat{H}] >$$

Σ’αυτό το σημείο αξίζει να διατυπωθεί το θεώρημα του Ehrenfest :
“Οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών ακολουθούν τις κλασσικές εξισώσεις της κίνησης”. Για παράδειγμα, αποδεικνύεται πολύ εύκολα ότι :

$$\frac{d<x>}{dt} = <v>, \quad \frac{d<p>}{dt} = <F>$$

10) <u>Νόμοι διατηρήσεως – συμμετρίες</u> : Ένα φυσικό μέγεθος A είναι διατηρήσιμο, δηλαδή είναι σταθερά της κινήσεως του συστήματος, μόνον όταν ο τελεστής του μετατίθεται με τον τελεστή της χαμιλτονιανής, δηλαδή

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

Η διατήρηση ενός μεγέθους συνδέεται με την ύπαρξη συμμετρίας του συστήματος. Όπως είναι γνωστό από την κλασσική Μηχανική τα μεγέθη, που διατηρούνται είναι η ενέργεια (εφόσον το δυναμικό V είναι ανεξάρτητο του χρόνου), η ορμή, και η στροφορμή. Η διατήρηση της ενέργειας συνδέεται με την συμμετρία της χρονικής μεταφοράς, ή διατήρηση της ορμής με την συμμετρία της χωρικής μεταφοράς και η διατήρηση της στροφορμής με την συμμετρία της περιστροφής. Στην Κβαντομηχανική υπάρχει ένα ακόμη μέγεθος, που υπόκειται σε νόμους διατήρησης με αντίστοιχη συμμετρία. Το μέγεθος αυτό έχει σχέση με την αντιστροφή του χώρου και ονομάζεται parity (στην Ελληνική βιβλιογραφία συναντάται και ως αρτιότητα ή ισοτιμία ή ομοτιμία). Η parity αποτελεί χαρακτηριστική ιδιότητα της κυματοσυνάρτησης και μας λέει τι θα συμβεί σ'αυτήν όταν γίνει μια αντιστροφή του χώρου.

Για παράδειγμα, έστω ένα σωμάτιο, που βρίσκεται στην θέση r και μέσω μιας κατάλληλης πράξης, βρίσκεται στην κατοπτρική ως προς κέντρο συμμετρίας την αρχή των αξόνων, θέση -r, δηλαδή έχουμε την κατοπτρική πράξη : (r) → (-r). Το ερώτημα τώρα είναι τι θα συμβεί στην κυματοσυνάρτηση, που περιγράφει το σωμάτιο. Για την απάντηση του ερωτήματος πρέπει να προσδιορίσουμε έναν ερμιτιανό τελεστή του μεγέθους

$$\hat{P}\Psi(r) = \Psi(-r) \quad (I)$$

της parity και ακολούθως να βρούμε τις ιδιοτιμές του, δηλαδή :

Ο χρόνος σαν παράμετρος δεν παίζει κανένα ρόλο στην προκειμένη περίπτωση, γι'αυτό παραλείπεται. Αν ρ ένας πραγματικός αριθμός, είναι η ιδιοτιμή του τελεστή, τότε η εξίσωση ιδιοτιμών του είναι :

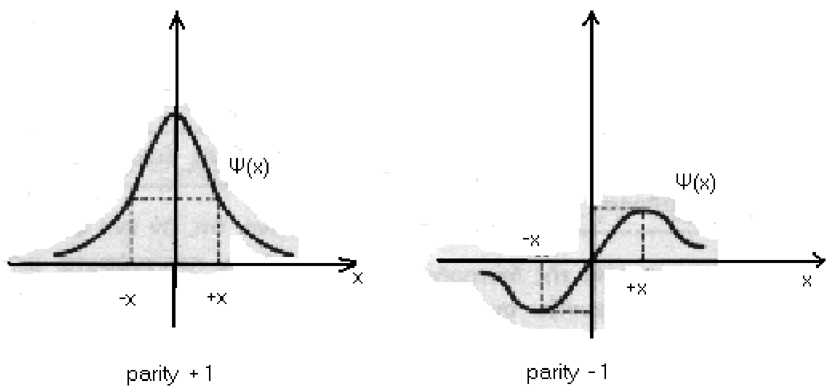
$$\hat{P}\Psi(r) = \rho\Psi(r) \quad (II)$$

Σύμφωνα με την προηγούμενη σχέση θα ισχύει : Ψ(-r) = ρΨ(r) (III).
Κάνοντας τώρα την αντιστροφή (κατοπτρισμό) του χώρου : (r) → (-r), η εξίσωση των ιδιοτιμών γίνεται : Ψ(r) = ρΨ(-r) (IV).
Σύμφωνα με την σχέση (III) η (IV) γίνεται : Ψ(r) = ρρΨ(r) = ρ^2Ψ(r) (V).

Αλλά η (V) ισχύει μόνον αν $\rho^2 = 1$ άρα $\rho = \pm 1$, οπότε οι ιδιοτιμές του τελεστή της parity είναι ± 1, δηλαδή έχουμε :

$$\hat{P}\Psi(r) = \pm\Psi(-r) \quad (VI)$$

Από την (VI) συμπαιρένουμε ότι όταν ο τελεστής της parity, που θεωρήσαμε ότι προκαλεί την αντιστροφή του χώρου, δράσει πάνω σε μία κυματοσυνάρτηση, τότε η κυματοσυνάρτηση θα μείνει ίδια κατ' απόλυτη



ΕΙΚ. 26. Απλές μορφές κυματοσυναρτήσεων.

τιμή και πρόσημο, ή θα αλλάξει πρόσημο με την ίδια και πάλι απόλυτη τιμή. Οι κυματοσυναρτήσεις που δεν αλλάζουν πρόσημο με την αντιστροφή του χώρου λέγονται άρτιες κυματοσυναρτήσεις (έχουν θετική parity), ενώ αυτές που αλλάζουν πρόσημο λέγονται περιττές (έχουν αρνητική parity).

4.2 Λύση της εξαρτημένης από τον χρόνο εξίσωσης Schrödinger :

Η εξαρτημένη από τον χρόνο εξίσωση *Schrödinger*, όπως έχουμε αναφέρει είναι:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x,t)]\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad (151)$$

Χάριν απλότητας πήραμε την μονοδιάστατη μορφή. Η αναζητούμενη λύση της εξίσωσης (151) μπορεί να γραφεί ως γινόμενο συναρτήσεων, που κάθε μία είναι συνάρτηση μιας ανεξάρτητης μεταβλητής, δηλαδή : Ψ(x,t) = ψ(x)φ(t) (152).

Λύση της μορφής (152) υπάρχει εφόσον η δυναμική ενέργεια U είναι συνάρτηση μόνο της x, δηλαδή είναι της μορφής : U = U(x). Η τεχνική επίλυσης που θα χρησιμοποιήσουμε είναι η γνωστή μέθοδος των διαχωρισμένων μεταβλητών. Αντικαθιστούμε την Ψ(x,t) της σχέσης (152) στην εξίσωση (151) και διαιρούμε με το γινόμενο ψ(x)φ(t), οπότε έχουμε :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi(t)}{\psi(x)\varphi(t)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\frac{\psi(x)\varphi(t)}{\psi(x)\varphi(t)}=i\hbar\psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}\frac{1}{\psi(x)\phi(t)}\Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{\psi(x)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)]=i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} \quad (153)$$

Παρατηρούμε ότι το αριστερό μέλος της σχέσης (153) είναι συνάρτηση μόνο του x, ενώ το δεξιό μέλος μόνο του t. Επειδή οι μεταβλητές x,t είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους, μπορούμε να εξισώσουμε κάθε μέλος της (153) με μια σταθερά M, που ονομάζεται σταθερά διαχωρισμού. Άρα έχουμε

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt}=M\Leftrightarrow\frac{d\varphi(t)}{dt}=-\frac{i}{\hbar}M\varphi(t)\Leftrightarrow\frac{d\varphi(t)}{dt}+\frac{i}{\hbar}M\varphi(t)=0\Leftrightarrow$$

$$\varphi(t)=A\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Mt} \quad (154)$$

$$\frac{1}{\psi(x)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)]=M\Leftrightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=M\psi(x)-U(x)\psi(x)=0\Leftrightarrow$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[M-U(x)]\psi(x)=0\Leftrightarrow$$

$$\psi(x)=B\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(M-U)}x}+C\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(M-U)}x} \quad (155)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις (152), (154) η λύση της εξίσωσης (151) είναι :

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\,\mathrm{e}^{-i(M/\hbar)t} \quad (156)$$

όπου η αυθαίρετη σταθερά A έχει τεθεί ίση με την μονάδα.

Η συνάρτηση φ(t) όπως δείχνει η (154) είναι μια μιγαδική αρμονική συνάρτηση, ταλαντευόμενη ως προς τον χρόνο με συχνότητα f και γράφεται ως εξής :

$$\varphi(t) = \mathrm{e}^{-i\frac{M}{\hbar}t} = \cos(\frac{M}{\hbar}t) - i\sin(\frac{M}{\hbar}t) \quad (157)$$

Η συχνότητα f δίνεται από τον τύπο : f = ω/2π με ω = M/ ђ οπότε: f = M/h άρα M = hf. Αλλά ως γνωστόν hf = E, όπου E η ολική ενέργεια, δηλαδή M = E.

Επομένως η (156) γράφεται : Ψ(x,t) = ψ(x) $\mathrm{e}^{-i(E/\hbar)t}$ (158), και η (155) γίνεται:

$$\psi(x) = B\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}x} + C\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}x} \quad (159)$$

Αν στην (151) αντικαταστήσουμε την Ψ(x,t) σύμφωνα με την (158) θα πάρουμε τελικά :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)]\psi(x) = E\psi(x) \quad (160)$$

Η λύση ψ(x) είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή της χαμιλτόνιας και εκφράζει το πλάτος της κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t). Λόγω αυτού του γεγονότος η σχέση (160), που είναι η ανεξάρτητη από τον χρόνο εξίσωση του *Schrödinger*, αναφέρεται και ως εξίσωση του πλάτους. Αν θεωρήσουμε την χαμιλτόνια συνάρτηση H, η (160) γράφεται :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (161)$$

4.3 <u>Λύση εξίσωσης Schrödinger σε μία διάσταση για ελεύθερο σωμάτιο</u> :

Έστω σωμάτιο που κινείται κατά μήκος του άξονα x, στο απλούστερο δυναμικό της μορφής : V(x,t) = V σταθερό. Το δυναμικό αυτό αντιστοιχεί σε δύναμη: F = 0.

Ένα σωμάτιο, που κινείται μέσα σε αυτό το δυναμικό, είναι ελεύθερο. Επειδή δεν μας ενδιαφέρει η σταθερή τιμή που έχει το δυναμικό, μπορούμε χωρίς βλάβη της γενικότητας να πάρουμε V = 0. Η εξίσωση *Schrödinger* γι' αυτήν την περίπτωση είναι :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad (162)$$

Επειδή ένα ελεύθερο σωμάτιο έχει ορισμένη σταθερή ολική ενέργεια, σύμφωνα με την σχέση (158) η λύση της εξίσωσης (160) : Ψ(x,t) = ψ(x)exp[-i(E/ђ)t] (163)

Σύμφωνα με όσα αναφέρθησαν στην προηγούμενη παράγραφο η αντίστοιχη εξίσωση πλάτους εδώ θα βρεθεί αν θέσουμε όπου U(x) = 0, οπότε

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (164)$$

παίρνουμε :

Επειδή $E = K = p^2/2m = \hbar^2k^2/2m$ η (164) θα γίνει :
Η εξίσωση (165) είναι η εξίσωση *Schrödinger* για ένα ελεύθερο σωμάτιο

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (165)$$

και είναι όμοια με την εξίσωση του πλάτους στασίμων κυμάτων με μήκος κύματος
$\lambda = 2\pi/k$, που δημιουργούνται πάνω σε χορδή ή ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων εγκλωβισμένων μέσα σε κοιλότητα.
Η γενική λύση της εξ. (165) βγαίνει σύμφωνα με την (159) αν θέσουμε $U(x) = 0$,

οπότε : $$\psi(x) = A\,e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + B\,e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} \quad (166)$$

Οι συντελεστές A,B είναι τα πλάτη του κύματος και είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί. Αν αντικαταστήσουμε τώρα την (166) στην σχέση (163) θα πάρουμε :

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} + B\,e^{-i(kx+\omega t)} \quad (167)$$

εφόσον θέσουμε $E = \hbar\omega$ *και* $\sqrt{2mE}/\hbar = k$

Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στην κίνηση του σωματίου κατά την διεύθυνση +x, ενώ ο δεύτερος όρος στην κίνηση κατά την διεύθυνση -x. Λόγω της σχέσης : $e^{ix} = \cos x + i\sin x$ η λύση (167) γράφεται και :

$$\Psi(x,t) = C_1\cos(kx-\omega t) + C_2\sin(kx-\omega t) \quad (168)$$

Και στις δύο μορφές λύσεων οι συντελεστές A, B, C_1, C_2 θα προσδιοριστούν από τις οριακές συνθήκες του προβλήματος.

Αν θεωρήσουμε την ειδική περίπτωση όπου $B = 0$, η (167) γίνεται : $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = A\cos(kx-\omega t) + iA\sin(kx-\omega t)$ (169), που παριστάνει ένα αρμονικό κύμα που οδεύει κατά την θετική φορά του άξονα των x. Η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο στην θέση μεταξύ x και x+dx , δίνεται από τον τύπο : $\Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)dx = A^*e^{-i(kx-\omega t)}Ae^{i(kx-\omega t)} = |A|^2dx$ (170). Παρατηρούμε ότι η πιθανότητα είναι ανεξάρτητη από την θέση x του σωματίου.

Αν τώρα θεωρήσουμε την περίπτωση όπου $A = 0$, η (167) θα γίνει : $\Psi(x,t) = Be^{-i(kx+\omega t)} = B\cos(kx+\omega t) - iB\sin(kx+\omega t)$ (171), που παριστάνει ένα αρμονικό κύμα που οδεύει κατά την αρνητική φορά του άξονα των x. Όπως προηγουμένως η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο στην θέση μεταξύ x και x+dx
είναι : $\Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)dx = B^*e^{-i(kx+\omega t)}\,Be^{i(kx+\omega t)} = |B|^2dx$ (172), δηλαδή ανεξάρτητη της θέσης x του σωματίου.

Από τις σχέσεις (170), (172) διαπιστώνουμε ότι το σωμάτιο έχει την ίδια πιθανότητα να βρεθεί σε οποιαδήποτε θέση πάνω στον άξονα x, δηλαδή η αβεβαιότητα ως προς την θέση του σωματίου είναι άπειρη. Αυτό το αποτέλεσμα ήταν αναμενόμενο εφόσον η ορμή $p = \hbar k$ είναι με ακρίβεια γνωστή, δηλαδή $\Delta p=0$

οπότε σύμφωνα με την αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg, θα πρέπει $\Delta x \to \infty$.
Ας θεωρήσουμε την εξίσωση (167) στην ειδική περίπτωση όπου A = -B, τότε θα έχουμε : $\Psi(x,t) = -B[e^{ikx}-e^{-ikx}]e^{-i\omega t}$ (173). Επειδή είναι γνωστό ότι :

$$\sin a = \frac{e^{ia} - e^{-ia}}{2i} \quad \eta \ (173) \ \gamma \acute{\iota}\nu \varepsilon \tau \alpha \iota :$$

$$\Psi(x,t) = -2iB\sin(kx)\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \Leftrightarrow \Psi(x,t) = B'\sin(kx)\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \qquad (174)$$

όπου $B' = -2iB$.
Αν πάρουμε ότι A = B, τότε : $\Psi(x,t) = B[e^{ikx} + e^{-ikx}]e^{-i\omega t}$ (175). Ισχύει όμως ότι :

$$\cos a = \frac{\mathrm{e}^{ia} + e^{-ia}}{2} \quad \acute{\alpha}\rho\alpha \ \Psi(x,t) = 2B\cos(kx)\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \Leftrightarrow$$

$$\Psi(x,t) = B''\cos(kx)\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \ (176) \quad \acute{o}\pi o\upsilon \ B'' = 2B$$

Οι σχέσεις (174), (176) εκφράζουν στάσιμα κύματα, αφού προκύπτουν από προσθαφαίρεση αρμονικών κυμάτων (169), (171) με $A = \pm B$, δηλαδή προσθαφαιρώντας αρμονικά κύματα, που έχουν το ίδιο πλάτος και οδεύουν κατ'αντίθετη φορά. Η επαλληλία των δύο στάσιμων κυμάτων (174), (176) παριστάνει και αυτή στάσιμο κύμα: $\Psi(x,t) = [B''\cos(kx)+B'\sin(kx)]e^{-i\omega t}$ (177).
Τα παραπάνω ισχύουν για κάθε τιμή του $\omega = E/\hbar$, άρα για κάθε τιμή ενέργειας, δηλαδή το σύστημα δεν είναι υποχρεωμένο να είναι κβαντισμένο και το σωμάτιο μπορεί να καταλαμβάνει οποιαδήποτε ενεργειακή κατάσταση. Αυτές οι καταστάσεις ονομάζονται ελεύθερες.
Όπως είδαμε παραπάνω η πυκνότητα πιθανότητας στις περιπτώσεις που η κίνηση περιγράφεται από τις (169), (171) είναι ανεξάρτητη της θέσης x. Για να εξαρτάται
από την θέση x, πρέπει το κύμα που συνοδεύει το σωμάτιο να έχει την μορφή κυματοδέματος, άρα πρέπει να θεωρήσουμε αριθμό λύσεων της μορφής (167) με
διάφορες τιμές k, οπότε από την επαλληλία αυτών των κυμάτων θα προκύψει το κυματόδεμα, όπου οι συντελεστές A,B θα εξαρτώνται από τον κυματάριθμο k.

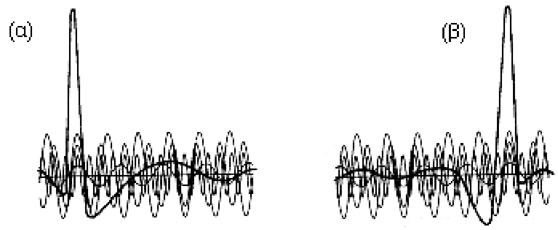
Αν εφαρμόσουμε τον μετασχηματισμό Fourier για την $\Psi(x,t)$, θα έχουμε :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\,\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\,dk + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} B(k)\,\mathrm{e}^{-i(kx+\omega t)}\,dk \quad (178)$$

όπου $\omega = \omega(k)$.
Τα A(k) και B(k) δίνονται από τις σχέσεις :

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0)\,\mathrm{e}^{-ikx}\,dx \ (179) \ \kappa\alpha\iota \ B(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0)\,\mathrm{e}^{ikx}\,dx \ (180)$$

Το κυματόδεμα εξ. (178) περιγράφει την κίνηση ενός ελεύθερου σωματίου, υπό την προυπόθεση ότι : $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = 1$



ΕΙΚ. 27. α) Κυματοδέσμη αρχικά, β) Κυματοδέσμη αργότερα. Είναι σαφές ότι λόγω συμβολής μεταξύ των κυμάτων, σε δεδομένη χρονική στιγμή έχει μεγάλο εύρος σε ένα σημείο του χώρου, αλλά επειδή ο χρονικά εξαρτημένος παράγων επηρεάζει τις φάσεις των κυμάτων επαλληλίας η περιοχή της ενισχυτικής συμβολής αλλάζει συναρτήσει του χρόνου.

4.4 <u>Σωμάτιο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού</u>:

Εξετάζουμε την περίπτωση όπου η κίνηση του σωματίου περιορίζεται από αδιαπέραστα τοιχώματα κατά μήκος του άξονα x μεταξύ x = 0 και x = L. Το σωμάτιο δεν χάνει ενέργεια όταν έρχεται σε σύγκρουση με τέτοιους τοίχους, έτσι ώστε η ολική του ενέργεια παραμένει σταθερή. Το γεγονός ότι το δυναμικό είναι άπειρο έξω από το πηγάδι, σημαίνει ότι το σωμάτιο δεν μπορεί να υπάρχει έξω από αυτό, επομένως η κυματοσυνάρτησή του Ψ θα είναι μηδέν έξω από το πηγάδι και θα έχει μη μηδενικές τιμές μόνο μέσα σ'αυτό. Για να υπάρχει συνέχεια των τιμών της Ψ(x) μέσα και έξω από το διάστημα 0 < x < L, θα πρέπει να ισχύουν οι συνοριακές συνθήκες : Ψ(0) = Ψ(L) = 0.

Μέσα στο πηγάδι η εξίσωση του *Schrödinger* γίνεται :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi=0 \quad (181)$$

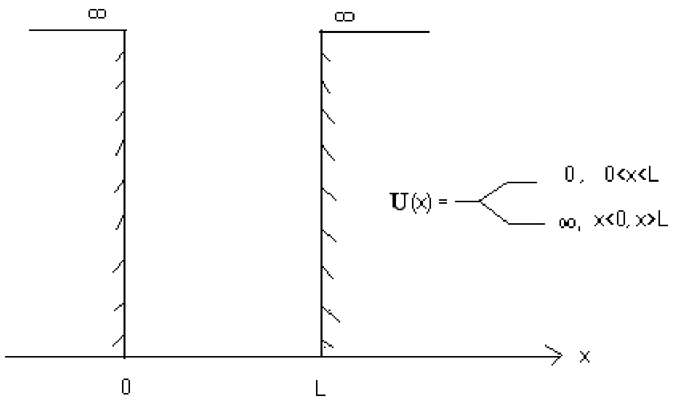
επειδή η δυναμική ενέργεια U = 0. Η εξίσωση (181) δίνει την γενική λύση : Ψ(x) = Asinkx + Bcoskx (182), όπου $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$. Αν επιβάλλουμε τις οριακές συνθήκες στην εξίσωση (182), παίρνουμε :

$\Psi(0) = 0 \Leftrightarrow B = 0$, αφού cos0 = 1 και $\Psi(L) = 0 \Leftrightarrow A\sin kL = 0$.

Επειδή στην εξίσωση (182) B = 0, θα πρέπει $A \neq 0$, αλλοιώτικα η λύση (182) θα ήταν εκ ταυτότητας μηδέν. Άρα θα πρέπει : sinkL = 0, που συμβαίνει μόνον αν :

$$kL = n\pi \quad (183), \qquad \text{με } n = 1,2,3,\ldots$$

Η τιμή n = 0 απορρίπτεται γιατί δίνει Ψ = 0, ενώ οι αρνητικές τιμές του n δεν παίζουν κανένα ρόλο γιατί απλώς αλλάζουν το πρόσημο της κυματοσυνάρτηση.



ΕΙΚ. 28 . Πηγάδι δυναμικού που αντιστοιχεί σε κιβώτιο με αδιαπέραστα τοιχώματα.

Οι ενεργειακές ιδιοτιμές υπολογίζονται από την σχέση (183) με αντικατάσταση του k, οπότε έχουμε :

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi \Leftrightarrow E = E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 = n^2E_1 \quad (184)$$

όπου $E_1 = (\hbar\pi)^2/2mL^2$ είναι η χαμηλότερη δυνατή ενέργεια και ονομάζεται “ενέργεια θεμελιώδους στάθμης”.
Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός σωματίου σε πηγάδι, που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές ενέργειας E_n είναι :

$$\Psi_n = A\sin kx \Leftrightarrow \Psi_n = A\sin\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}x \Leftrightarrow \Psi_n = A\sin\frac{n\pi x}{L} \quad (185)$$

Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι αυτές οι ιδιοσυναρτήσεις πληρούν όλες τις συνθήκες ώστε να είναι αποδεκτές. Για κάθε κβαντικό αριθμό n, η Ψ_n είναι μια μονότιμη συνάρτηση του x και οι μερικές παράγωγοί της ως προς x είναι συνεχείς συναρτήσεις.
Η σταθερά A στις ιδιοσυναρτήσεις (185) υπολογίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης, που εκφράζει ως γνωστόν την απαίτηση να έχουμε ολική πιθανότητα θέσης ίση με μονάδα, οπότε έχουμε :

$$\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow A^2\int_0^L \sin^2 kx dx = 1 \Leftrightarrow A^2\frac{L}{2} = 1 \Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (186)$$

{ η απόδειξη ότι το ολοκλήρωμα αυτό ισούται με L/2, υπολογίζεται εύκολα ως εξής : ισχύει ότι $\sin^2 kx = (1-\cos 2kx)/2$, οπότε :

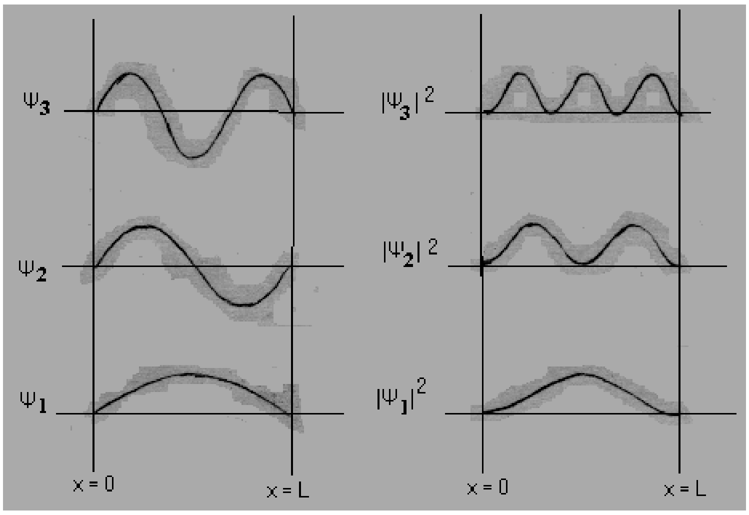
$$\int_0^L \frac{1}{2}(1-\cos 2kx)dx = \frac{L}{2} - \frac{\sin 2kL}{4k} = \frac{L}{2} - \frac{\sin 2n\pi}{4k} = \frac{L}{2} \quad \alpha\varphi o\acute{\upsilon} \quad \sin 2n\pi = 0 \ \}$$

Άρα οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του σωματίου θα είναι :

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, ... \quad (187)$$

Φυσική ανάλυση αποτελεσμάτων :

1) Σε κάθε ενεργειακή ιδιοτιμή αντιστοιχεί μία μόνο ιδιοσυνάρτηση, δηλαδή το φάσμα δεν παρουσιάζει εκφυλισμό. Αξίζει να σημειώσουμε το θεώρημα των κόμβων, που λέει ότι ο αριθμός των κόμβων (σημεία όπου τέμνει η Ψ_n τον άξονα x, (βλέπε εικ. 29)), αυξάνει κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από την θεμελιώδη στάθμη (μηδέν κόμβοι), στις ανώτερες. Όπως βλέπουμε στην εικ. 29 η ιδιοσυνάρτηση της πρώτης διεγερμένης στάθμης έχει ένα κόμβο, η δεύτερη διεγερμένη δύο κ.ο.κ. Το θεώρημα των κόμβων ουσιαστικά απορρέει από την κυματική θεωρία, δεδομένου ότι οι κβαντομηχανικές στάσιμες καταστάσεις δεν



ΕΙΚ. 29. Κυματοσυναρτήσεις και πυκνότητες πιθανότητας σωματίου περιορισμένου σε πηγάδι με συμπαγή τοιχώματα.

είναι παρά στάσιμα κύματα, οπότε πρέπει να χωρέσει ένας ακέραιος αριθμός ημικυμάτων μέσα στο επιτρεπόμενο διάστημα. Στην εικ. 29 οι κυματοσυναρτήσεις μοιάζουν με τις πιθανές δονήσεις μιας τεντωμένης χορδής, στερεωμένης και στα δύο άκρα της.

2) Σε συγκεκριμένη θέση του πηγαδιού η πιθανότητα του σωματίου να είναι παρόν είναι διαφορετική για διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς, π.χ. η $|\Psi_1|^2$ έχει την μέγιστή της τιμή 2/L, στο μέσον του πηγαδιού, ενώ στο ίδιο σημείο $|\Psi_2|^2 = 0$.

3) Η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης είδαμε ότι είναι $E_1 = (\hbar\pi)^2/2mL^2$, δηλαδή είναι πιο ψηλά από τον πυθμένα (E = 0) του πηγαδιού. Στην κλασσική Μηχανική η κατάσταση ελάχιστης ολικής ενέργειας ενός σωματίου αντιστοιχεί στον πυθμένα του δυναμικού. Αυτό όμως απαγορεύεται στην Κβαντομηχανική λόγω της αρχής της αβεβαιότητας, γιατί αν το σωμάτιο βρεθεί στον πυθμένα του

δυναμικού τότε θα έχει απόλυτα καθορισμένη θέση ($\Delta x = 0$), οπότε η αντίστοιχη αβεβαιότητα της ορμής Δp θα είναι άπειρη, άρα και η κινητική του ενέργεια.

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι όσο ισχυρό και αν είναι ένα ελκτικό δυναμικό, δεν πρόκειται να καταφέρει το σωμάτιο να το τραβήξει στον πυθμένα του. Γι' αυτό εξ άλλου τα ηλεκτρόνια δεν πέφτουν ποτέ πάνω στον πυρήνα. Άρα η σταθερότητα της ύλης είναι ένα καθαρά κβαντομηχανικό φαινόμενο.

4) Η απόσταση ΔΕ μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών επιπέδων είναι :

$$\Delta \mathrm{E} = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n+1)^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(2n+1) \quad (188)$$

Συμπεραίνουμε ότι όσο πιο μικρή είναι η περιοχή μέσα στην οποία κινείται ένα σωμάτιο τόσο πιο μεγάλη είναι η ενέργειά του, όπως και η απόσταση ανάμεσα στις ενεργειακές του στάθμες.

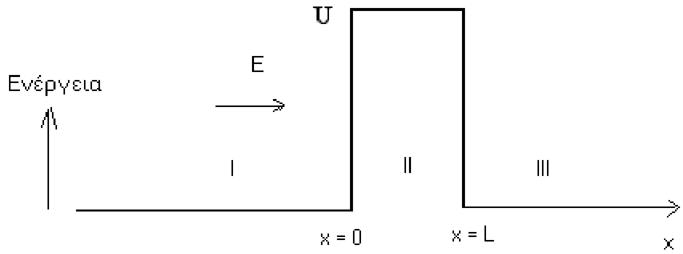
5) Στον τύπο της ενέργειας της θεμελιώδους στάθμης : $E_1 = (\hbar\pi)^2/2mL^2$ αν το $\hbar \to 0$ (κλασσικό όριο) τότε προκύπτει ότι σωμάτιο πέφτει στον πυθμένα ($E_1 \to 0$).

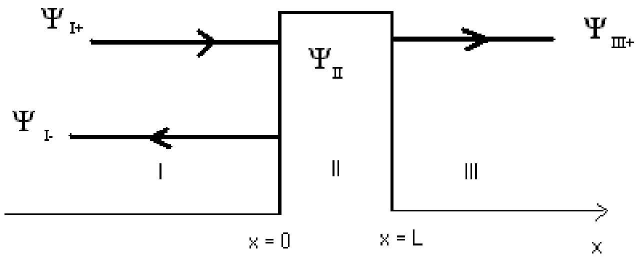
Εξάλλου, όσο πιο μεγάλη μάζα έχει το σωμάτιο τόσο πιο μικρή είναι η E_1 και για $m \to \infty$ η $E_1 \to 0$. Το κλασσικό όριο ($\hbar \to 0$, $m \to \infty$) ονομάζεται "ασθενές κβαντικό όριο" γιατί δείχνει την κατεύθυνση προς την οποία εξασθενούν οι κβαντικές εκδηλώσεις και αποκαθίσταται βαθμιαία η κλασσική συμπεριφορά. Αντίθετα στο αποκαλούμενο "ισχυρό κβαντικό όριο", όπου ($\hbar \to \infty$, $m \to 0$), η κβαντική συμπεριφορά εκδηλώνεται με ιδιαίτερη ένταση εφόσον η ενέργεια τείνει στο άπειρο $E_1 \to \infty$ και η απόσταση ανάμεσα στις στάθμες πολύ μεγάλη, δηλαδή το σωμάτιο βρίσκεται σε πολύ μεγάλη απόσταση από τον πυθμένα. Γίνεται σαφές λοιπόν ότι ένα σωμάτιο όσο πιο ελαφρύ είναι τόσο πιο κβαντομηχανικά συμπεριφέρεται.

Άλλος ένας παράγοντας, που καθορίζει τα σύνορα της κβαντικής από την κλασσική συμπεριφορά ενός σωματίου, είναι το πλάτος L του πηγαδιού. Όσο το L γίνεται μικρότερο τόσο πιο έντονα είναι τα κβαντικά φαινόμενα, ενώ αν το L είναι μεγάλο, οπότε το σωμάτιο είναι ελεύθερο να κινηθεί σε μια μεγάλη περιοχή, η συμπεριφορά του είναι σχεδόν κλασσική.

Όσον αφορά τους κβαντικούς αριθμούς n, έχουμε να παρατηρήσουμε ότι σύμφωνα με τον τύπο (184), για μεγάλες τιμές αυτού έχουμε αντίστοιχα μεγάλες τιμές ενέργειας E_n , όπου το μήκος κύματος είναι αρκετά μικρό, οπότε εξασθενούν οι κβαντικές ιδιομορφίες και αποκαθίσταται βαθμιαία η κλασσική συμπεριφορά.

4.5 <u>Φαινόμενο σήραγγας</u> :





ΕΙΚ. 30. Δέσμη σωματίων ενέργειας Ε προσπίπτει από τα αριστερά στο φράγμα δυναμικού. Σχηματική αναπαράσταση της διέλευσης από το φράγμα.

Θεωρούμε μία δέσμη σωματίων, που έχουν την ίδια κινητική ενέργεια K = E και προσπίπτει από τα αριστερά σε ένα φράγμα δυναμικού ύψους U και εύρους L, δηλαδή είναι της μορφής :

$$U(x) = \begin{Bmatrix} U, & \gamma\iota\alpha \quad 0 \le x \le L \\ 0, & \gamma\iota\alpha \quad x < 0, x > L \end{Bmatrix}$$

Επειδή το δυναμικό δεν εξαρτάται από τον χρόνο η λύση της εξίσωσης *Schrödinger* έχει την μορφή στάσιμου κύματος της μορφής :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}, \quad \text{όπου} \quad E = \hbar\omega.$$

Η συνάρτηση ψ(x) και η σταθερά Ε είναι η ιδιοσυνάρτηση και η ιδιοτιμή αντίστοιχα του τελεστή της ενέργειας, δηλαδή είναι λύσεις της ακόλουθης εξίσωσης ιδιοτιμών του *Schrödinger :*

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

Το σωμάτιο δεν είναι δέσμιο, άρα το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές. Την εξίσωση αυτή θα λύσουμε παρακάτω στις τρεις περιοχές του σχήματος και θα επιβάλλουμε μετά τις κατάλληλες συνθήκες, ώστε να μην υπάρχουν ασυνέχειες στα σημεία 0 και L, δηλαδή στα σημεία ασυνέχειας του του δυναμικού.

Αριστερά και δεξιά του φράγματος τα σωμάτια κινούνται ελεύθερα, εφόσον U = 0. Σ’αυτές τις περιοχές η εξίσωση του *Schrödinger* για τα σωμάτια είναι :

$$\frac{\partial^2\psi_I}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_I = 0 \quad (189) \qquad \frac{\partial^2\psi_{III}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{III} = 0 \quad (190)$$

Οι λύσεις των εξισώσεων (189), (190) είναι αντίστοιχα :

$$\psi_I = A\,e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} \quad (191) \qquad \psi_{III} = C\,e^{ik_1x} + D\,e^{-ik_1x} \quad (192)$$

όπου ο κυματάριθμος k_1 έξω από το φράγμα είναι: $k_1 = (2mE)^{1/2}/\hbar = p/\hbar = 2\pi/\lambda$ (193)

Το φυσικό νόημα των δύο όρων της εξίσωσης (191) φαίνεται καθαρά στην εικ.30

όπου ο πρώτος όρος, αντιστοιχεί στο εισερχόμενο κύμα και ο δεύτερος στο ανακλώμενο, δηλαδή :

$$\textit{Εισερχόμενο κύμα} : \psi_{I+} = A\,e^{ik_1x} \quad (194)$$

$$\textit{Ανακλώμενο κύμα} : \psi_{I-} = B\,e^{-ik_1x} \quad (195)$$

Ένα χαρακτηριστικό μέγεθος μιας δέσμης σωματίων είναι η έντασή της J. Ως ένταση δέσμης σωματίων κινουμένων με ταχύτητα u προς μία διεύθυνση, ορίζουμε τον αριθμό των σωματίων N, που διέρχονται την μονάδα επιφανείας ΔS, που είναι κάθετη στην διεύθυνση αυτών, ανά

$$J = \frac{N}{\Delta S.\Delta t} \quad (196)$$

μονάδα χρόνου Δt, δηλαδή :

Αν πολλαπλασιάσουμε αριθμητή και παρανομαστή της σχέσης (196) με την μονάδα μήκους Δx, θα έχουμε :

όπου N/ΔV είναι ο αριθμός των σωματίων ανά μονάδα όγκου, που ουσιαστικά παριστάνει την πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης των σωματίων

$$J = \frac{N}{\Delta S.\Delta x}\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{N}{\Delta V}u \quad (197)$$

εντός του όγκου ΔV = Δx.Δy.Δz, άρα η (197) γίνεται : $J = P.u = \psi^*.\psi.u$ (198).

Συνήθως το γινόμενο P.u ονομάζεται ροή πυκνότητας της πιθανότητας. Όμως στην Κβαντομηχανική το u είναι ένας τελεστής, που ισούται με :

$$\hat{u} = \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m}\nabla$$

οπότε περιοριζόμενοι σε μία διάσταση η ροή πυκνότητας πιθανότητας είναι

$$J(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) \quad (199)$$

Με βάση την σχέση (198) η ένταση των σωματίων, που προσπίπτουν στο φράγμα είναι : $J = |\psi_{I+}|^2u$, οπότε αντικαθιστώντας την $\psi = \psi_{I+}$ στην σχέση (199) καταλήγουμε εύκολα ότι : $J = |A|^2.u$ ή καλύτερα : $J = |A|^2.\ \hbar\, k/m$ (200).

Από την άλλη πλευρά του φράγματος (x > L), υπάρχει μόνον ένα κύμα της μορφής : $\psi_{III+} = Ce^{ik_1x}$ (201), που κινείται στην διεύθυνση +x, εφόσον στην περιοχή III δεν υπάρχει τίποτα , που μπορεί να προκαλέσει ανάκλαση στο κύμα. Άρα η σταθερά D της εξίσωσης (192) είναι μηδέν, οπότε :

$$\psi_{III} = \psi_{III+} = C\,e^{ik_1x} \quad (202)$$

Μέσα στο φράγμα τώρα στην περιοχή II, η εξίσωση *Schrödinger* των σωματίων είναι :

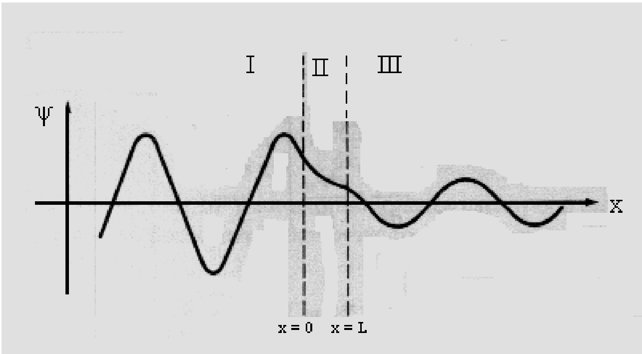
$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi_{II} = 0 \quad (203)$$

όπου U η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου και ισχύει: E < U. Η λύση

$$\psi_{II} = F\,\mathrm{e}^{ik'x} + G\,\mathrm{e}^{-ik'x} \quad (204)$$

της εξίσωσης (203) είναι :
όπου k΄ είναι ο κυματάριθμος μέσα στο φράγμα και ισούται με :

$$k' = [2m(E-U)/\hbar^2]^{1/2} \quad (205)$$



ΕΙΚ. 31. Σε κάθε τοίχωμα του φράγματος οι κυματοσυναρτήσεις στο εσωτερικό και εξωτερικό πρέπει να έχουν τις ίδιες τιμές και κλίσεις.

Αφού E < U, το k΄ είναι φανταστικό, οπότε ορίζουμε ένα νέο κυματάριθμο k_2 ως εξής : $k_2 = -ik' = [2m(U-E)/\hbar^2]^{1/2}$ (206), οπότε η εξίσωση (204) γράφεται :

$$\psi_{II} = Fe^{-k_2x} + G\,e^{k_2x} \quad (207)$$

Στην εξίσωση (207) οι εκθέτες είναι πραγματικοί αριθμοί, οπότε η ψ_{II} δεν παρουσιάζει ταλάντωση και επομένως δεν παριστάνει κινούμενο σωμάτιο. Όμως η πιθανότητα $|\psi_{II}|^2$ δεν είναι μηδέν, άρα υπάρχει πεπερασμένη πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο μέσα στο φράγμα. Έτσι μπορεί να έχουμε εκπομπή του σωματίου στην περιοχή III ή επιστροφή στην περιοχή I.
Οι αυθαίρετες σταθερές A,B,C,F,G , που εμφανίζονται στις λύσεις (194),(195),(202),(207) καθορίζονται από τις οριακές συνθήκες. Οι οριακές συνθήκες υπαγορεύονται από την φύση του προβλήματος και πρέπει να ικανοποιούν τις κυματοσυναρτήσεις. Οι συνθήκες αυτές είναι :

1) Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να παραμένει πεπερασμένη ή να τείνει στο μηδέν, όταν οι συντεταγμένες τείνουν στο άπειρο.
2) Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι συνεχής και μονότιμη σε ολόκληρο το διάστημα ορισμού της.
3) Η παράγωγος της κυματοσυνάρτησης πρέπει να είναι συνεχής και μονότιμη σε όλο το διάστημα ορισμού της.

Σύμφωνα με την εικ. 31 οι συνθήκες αυτές σημαίνουν ότι σε κάθε τοίχωμα του φράγματος, οι κυματοσυναρτήσεις στο εσωτερικό και εξωτερικό πρέπει να έχουν την ίδια τιμή και την ίδια κλίση. Άρα στο αριστερό τοίχωμα του φράγματος οι συνοριακές συνθήκες για x = 0 είναι :

$$\psi_I = \psi_{II} \quad (208), \qquad \frac{\partial \psi_I}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \quad (209)$$

ενώ στο δεξιό τοίχωμα για x = L είναι :

$$\psi_{II} = \psi_{III} \quad (210), \qquad \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x} \quad (211)$$

Αντικαθιστούμε τώρα τις ψ_I, ψ_{II}, ψ_{III} από τις εξισώσεις (191),(202),(207) στις παραπάνω συνοριακές συνθήκες, οπότε παίρνουμε :

$$A + B = F + G \quad (212), \qquad ik_1(A - B) = -k_2(F - G) \quad (213),$$

$$Fe^{-k_2L} + G\, e^{k_2L} = C\, e^{ik_1L} \ (214),$$

$$-k_2F\, e^{-k_2L} + k_2G\, e^{k_2L} = ik_1C\, e^{ik_1L} \ (215).$$

Λύνουμε το σύστημα των τεσσάρων αυτών εξισώσεων και βρίσκουμε τις σταθερές A,B,F,G συναρτήσει της C, η οποία μπορεί να προσδιοριστεί από την συνθήκη κανονικοποίησης. Η λύση του συστήματος είναι :

$$F = \frac{1}{2}C\left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right)\mathrm{e}^{ik_1L}\,\mathrm{e}^{-Lk_2} \quad (216) \qquad G = \frac{1}{2}C\left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right)\mathrm{e}^{ik_1L}\,\mathrm{e}^{Lk_2} \quad (217)$$

$$A = \frac{1}{2}\left(2\cosh(Lk_2) + \frac{k_1^2 - k_2^2}{ik_1k_2}\sinh(Lk_2)\right)C\,\mathrm{e}^{ik_1L} \quad (218)$$

$$B = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{ik_1k_2}\sinh(Lk_2)\right)C\,\mathrm{e}^{ik_1L} \quad (219)$$

Υπολογίζουμε τον λόγο A/C από την σχέση (218), οπότε έχουμε :

$$\frac{A}{C} = \mathrm{e}^{ik_1L}\left[\cosh(Lk_2) - \frac{1}{2}i\left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1}\right)\sinh(Lk_2)\right] \quad (220)$$

Ας κάνουμε τώρα κάποιες προσεγγίσεις : α) υποθέτουμε ότι το φράγμα δυναμικού έχει μεγάλο ύψος σε σχέση με την ενέργεια Ε των προσπιπτόντων σωματίων, οπότε : $U >> E$ αλλά και $U-E >> E \Leftrightarrow 2m(U-E)/\hbar >>2mE/\hbar \Leftrightarrow k_2^2 >> k_1^2 \Leftrightarrow$
$k_2/ k_1 >> k_1/ k_2 \Leftrightarrow k_2/ k_1 - k_1/ k_2 \approx k_2/ k_1$, άρα η (220) γίνεται :

$$\frac{A}{C} = \mathrm{e}^{ik_1L}\left[\cosh(Lk_2) + \frac{1}{2}i\sinh(Lk_2)\right] \quad (221)$$

β) υποθέτουμε ότι το φράγμα δυναμικού είναι αρκετά ευρύ οπότε η ψ_{II} ελαττώνεται αρκετά μεταξύ του x = 0 και x = L. Αυτό σημαίνει ότι $k_2L >> 1$, άρα και $e^{k_2L} >> e^{-k_2L}$. Ως γνωστόν όμως: $\sinh(Lk_2) = (e^{k_2L} + e^{-k_2L})/2 \Leftrightarrow$
$\sinh(Lk_2) = e^{k_2L}/2$ και $\cosh(Lk_2) = (e^{k_2L} - e^{-k_2L})/2 \Leftrightarrow$
$\cosh(Lk_2) = e^{k_2L}/2$, άρα η (221) τώρα γίνεται :

$$\frac{A}{C} = \mathrm{e}^{ik_1L}(\mathrm{e}^{Lk_2}/2 + i\,\mathrm{e}^{Lk_2}/4) \Leftrightarrow \frac{A}{C} = \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_2}{4k_1}\right)\mathrm{e}^{(ik_1+k_2)L} \quad (222)$$

Ο μιγαδικός συζυγής του κλάσματος A/C της σχέσης (222) είναι :

$$\frac{A^*}{C^*} = \left(\frac{1}{2} - \frac{ik_2}{4k_1}\right) \mathrm{e}^{(-ik_1+k_2)L} \qquad (223)$$

Η πιθανότητα διέλευσης T του σωματίου από το φράγμα είναι ο λόγος της ροής των σωματίων, που διέρχεται από το φράγμα προς την προσπίπτουσα ροή των σωματίων, δηλαδή :

$$T = \frac{J_{III+}}{J_{I+}} = \frac{|\Psi_{III+}|^2 u}{|\Psi_{I+}|^2 u} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{CC^*}{AA^*} \qquad (224)$$

Σύμφωνα με την κλασσική μηχανική όλα τα σωμάτια με ενέργεια μικρότερη από την U θα ανακλαστούν από το φράγμα δυναμικού. Κανένα σωμάτιο δεν είναι δυνατόν να βρεθεί στην περιοχή III. Ας δούμε όμως ποιο είναι το κβαντομηχανικό αποτέλεσμα. Αν λάβουμε υπόψιν τις σχέσεις (222), (223), (224) η πιθανότητα διέλευσης T είναι :

$$T^{-1} = \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_2}{4k_1}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{ik_2}{4k_1}\right) \mathrm{e}^{(ik_1+k_2)L}\, \mathrm{e}^{(-ik_1+k_2)L} \Leftrightarrow T^{-1} = \left(\frac{1}{4} + \frac{k_2^2}{16k_1^2}\right) \mathrm{e}^{2k_2L} \Leftrightarrow$$

$$T^{-1} = \frac{4k_1^2 + k_2^2}{16k_1^2} \mathrm{e}^{2k_2L} \Leftrightarrow T = \left[\frac{16}{4 + (k_2/k_1)^2}\right] \mathrm{e}^{-2k_2L} \qquad (225)$$

Αλλά :

$$\left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2 = \frac{2m(U-E)/\hbar^2}{2mE/\hbar^2} = \frac{U}{E} - 1 \quad \textit{οπότε η (225) γίνεται:}$$

$$\mathrm{T} = \left[\frac{16}{\frac{U}{E} + 3}\right] \mathrm{e}^{-2k_2L} \qquad (226)$$

Παρατηρούμε ότι η πιθανότητα διέλευσης T είναι διάφορη του μηδενός και η ποσότητα μέσα στην αγκύλη της σχέσης (226) μεταβάλλεται πολύ πιο αργά με το E και U σε σχέση με τον εκθετικό όρο. Άρα η ποσότητα T έχει εκθετική ευαισθησία στις μεταβολές της ενέργειας E και του πλάτους του φράγματος L. Όσο μεγαλώνει το φράγμα δυναμικού, δηλαδή όσο μεγαλύτερη είναι η δυναμική ενέργεια U από μια δεδομένη ενέργεια E των σωματίων, τόσο μικρότερη είναι η πιθανότητα διέλευσης των σωματίων στην απαγορευμένη περιοχή II. Για μικρές μεταβολές της ενέργειας είναι δικαιολογημένο να θεωρήσουμε την αγκύλη της σχέσης (226) σταθερή, μια που είναι μια αργομετάβλητη συνάρτηση του E συγκριτικά με τις τεράστιες μεταβολές του εκθετικού στην ίδια ενεργειακή περιοχή, οπότε με μια προσέγγιση να γράψουμε απλά :

$$\mathrm{T} = \mathrm{e}^{-2k_2\mathrm{L}} \qquad (227)$$

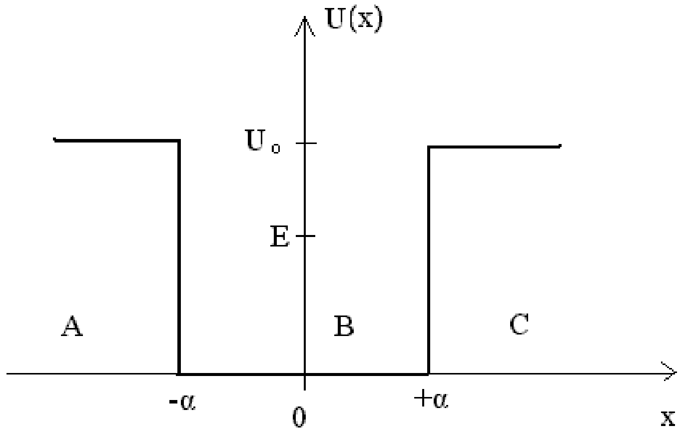
Το καθαρά αυτό κβαντικό φαινόμενο ονομάζεται φαινόμενο σήραγγας και επαληθεύεται πειραματικά από την θερμιονική εκπομπή ηλεκτρονίων, την εκπομπή ακτινοβολίας α-σωματίων από ραδιενεργούς πυρήνες και από άλλα φαινόμενα του μικροκόσμου.

Μια παρατήρηση, που έχουμε να κάνουμε είναι στην επίδραση της μάζας του σωματίου στο φαινόμενο της σήραγγας. Σύμφωνα με την σχέση (227) και λόγω του ότι $k_2 = [2m(U-E)/\hbar^2]^{1/2}$ βλέπουμε ότι όσο πιο μικρή είναι η μάζα, τόσο μεγαλύτερη είναι η πιθανότητα διέλευσης ενός φράγματος και αντιστρόφως, όσο μεγαλώνει η μάζα, τόσο η πιθανότητα διέλευσης μικραίνει, μέχρις ότου στο όριο $m \to \infty$, μηδενίζεται. Το πέρασμα λοιπόν μέσα από κλασσικά απαγορευμένες περιοχές είναι ένα κατ'εξοχήν κβαντομηχανικό φαινόμενο, που μπορούν να πραγματοποιήσουν με μεγάλη ευκολία τα ελαφρότερα σωμάτια. Για παράδειγμα αν η πιθανότητα διέλευσης του ηλεκτρονίου μέσα από ένα φράγμα είναι $T_e = 10^{-1}$ τότε βγαίνει ότι η πιθανότητα διέλευσης ενός πρωτονίου ίδιας ενέργειας με αυτήν του ηλεκτρονίου, μέσα από το ίδιο φράγμα είναι $T_p = 10^{-43}$. Συμπεραίνουμε ότι το πρωτόνιο έχει ουσιαστικά μηδενική πιθανότητα να διαβεί το φράγμα. Το ηλεκτρόνιο είναι ένα κατ'εξοχήν κβαντομηχανικό σωμάτιο στην Φύση, παίζοντας καθοριστικό ρόλο η πολύ μικρή του μάζα. Να σκεφτούμε ότι ο σχηματισμός των μορίων, οι χημικές αντιδράσεις, η δομή και οι ιδιότητες των στερεών κ.ά. οφείλονται στην συνεχή μεταφορά ηλεκτρονίων από το ένα άτομο στο άλλο, μέσα από κλασσικά απαγορευμένες περιοχές.

4.6 Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού :

Η μορφή του πηγαδιού αυτού σε μία διάσταση, ορίζεται από την σχέση :

$$U(x) = \left\{ \begin{array}{l} 0, \ \gamma\iota\alpha \ \ -\alpha < x < a \\ \\ U_o, \ \gamma\iota\alpha \ \ x < -a \ \ \kappa\alpha\iota \ \ x > +a \end{array} \right\}$$



ΕΙΚ. 32. Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, ύψους U_O και πλάτους 2α.

Το δυναμικό αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως πρώτη προσέγγιση για πολλά δυναμικά της φύσης, π.χ. πολλά χαρακτηριστικά της κίνησης ενός νετρονίου, μέσα στον πυρήνα, ως επίσης τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας σε ένα κομμάτι μετάλλου, μπορούν να εξηγηθούν με την παραδοχή ότι το νετρόνιο είναι δέσμιο σε ένα τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού. Επειδή ενδιαφερόμαστε μόνο για δέσμιες καταστάσεις, η ενέργεια Ε του σωματίου είναι πιο χαμηλά από το χείλος του πηγαδιού ($E < U_o$).
Η εξίσωση *Schrödinger* σε κάθε μια από τις περιοχές A,B,C γράφεται :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_A}{dx^2} + U_o\psi_A = E\psi_A \quad (A), \ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_B}{dx^2} = E\psi_B \quad (B), \ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_C}{dx^2} + U_o\psi_C = E\psi_C \quad (C)$$

Οι κυματοσυναρτήσεις, που περιγράφουν το σωμάτιο και είναι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων (που οι μορφές τους είναι γνωστές από τις προηγούμενες παραγράφους), είναι:

$$\psi_A = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x} \ (I), \ \psi_B = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x} \ (II), \ \psi_A = Fe^{k_3 x} + Ge^{-k_3 x} \ (III),$$

$$\acute{o}\pi o\upsilon \ \ k_1^2 = k_3^2 = \frac{2m(U_o - E)}{\hbar^2}, \ \ k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Η σχέση (II) μας διευκολύνει αν εκφραστεί τριγωνομετρικά, δηλαδή :

ψ_B = C΄sink_2x + D΄cosk_2x (IV), όπου C΄ = 2iC και D΄ = 2D όπως έχουμε προαναφέρει στην §4.3. Η σχέση (IV) εκφράζει ένα στάσιμο κύμα και περιγράφει το σωμάτιο, που εκτελεί παλινδρομική κίνηση μέσα στο πηγάδι. Ας εξετάσουμε ξεχωριστά, τις άρτιες και τις περιττές λύσεις :

1) Άρτιες λύσεις : Η μορφή της κυματοσυνάρτησης σε κάθε μία περιοχή

$$\psi_A = Ae^{k_1 x},\ \psi_B = D'\cos k_2 x,\ \psi_C = Ae^{-k_1 x}$$

είναι :

λόγω του γεγονότος ότι στην περιοχή Α η $\psi_A \to 0$ για $x \to -\infty$, οπότε Β = 0.

Στην περιοχή Β κρατάμε τον δεύτερο όρο, που είναι άρτια συνάρτηση.

Στην περιοχή C πρέπει για $x \to +\infty$ η $\psi_C \to 0$, που συμβαίνει αν F = 0.

Επίσης για λόγους αρτιότητας θα πρέπει : $\psi_A(x) = \psi_C(-x)$, πράγμα που επιβάλλει όπως

G = A. Λόγω συμμετρίας, οι συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της στα σημεία x = α και x = -α είναι ταυτόσημες, οπότε αρκεί να θεωρήσουμε την μία μόνο από αυτές, π.χ. έστω στο x = α. Άρα θα έχουμε :

$\psi_B(\alpha) = \psi_C(\alpha) \Leftrightarrow D'\cos k_2\alpha = Ae^{-k_1\alpha}$ και $\psi_B'(\alpha) = \psi'_C(\alpha) \Leftrightarrow -D'k_2\sin k_2\alpha = -k_1Ae^{-k_1\alpha}$

Διαιρώντας κατά μέλη τις δύο τελευταίες σχέσεις παίρνουμε : $\tan k_2\alpha = k_1/k_2$ (V).

Δεδομένου ότι τα k_1,k_2 είναι συναρτήσεις των αναζητουμένων ιδιοτιμών Ε, η σχέση (V) είναι μια αλγεβρική εξίσωση, της οποίας οι λύσεις θα μας δώσουν τις ιδιοτιμές, που αντιστοιχούν στις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις.

2) Περιττές λύσεις : Εδώ έχουμε :

$$\psi_A = Ae^{k_1 x},\ \psi_B = C'\sin k_2 x,\ \psi_C = -Ae^{-k_1 x}$$

Λαμβάνοντας υπόψιν τις οριακές συνθήκες στο σημείο $x = \alpha$, έχουμε :

$\psi_B(\alpha) = \psi_C(\alpha) \Leftrightarrow C'\sin k_2\alpha = -Ae^{-k_1\alpha}$ και $\psi_B'(\alpha) = \psi'_C(\alpha) \Leftrightarrow C'k_2\cos k_2\alpha = k_1Ae^{-k_1\alpha}$

Διαιρώντας κατά μέλη τις δύο τελευταίες σχέσεις παίρνουμε : $\tan k_2\alpha = -k_2/k_1$ (VI).

Η λύση των εξισώσεων (V),(VI) γίνεται γραφικά, αφού τις συγχωνεύσουμε πρώτα σε μία εξίσωση. Θέτουμε :

$$\frac{2mU_o}{\hbar^2} = \tau^2,\ \textit{οπότε παρατηρούμε}:\ k_1^2 + k_2^2 = \tau^2.$$

Η μορφή της τελευταίας σχέσης μας επιτρέπει να θεωρήσουμε τα k_1,k_2 με την μορφή : $k_1 = \tau\sin\theta$ και $k_2 = \tau\cos\theta$. Επειδή τα k_1,k_2 είναι θετικά, η γωνία θ παίρνει τιμές : $0 \le \theta \le \pi/2$. Άρα :

$$k_2^2 = \tau^2\cos^2\theta \Leftrightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU_o}{\hbar^2}\cos^2\theta \Leftrightarrow \boxed{E = U_o\cos^2\theta}\ \ (VII)$$

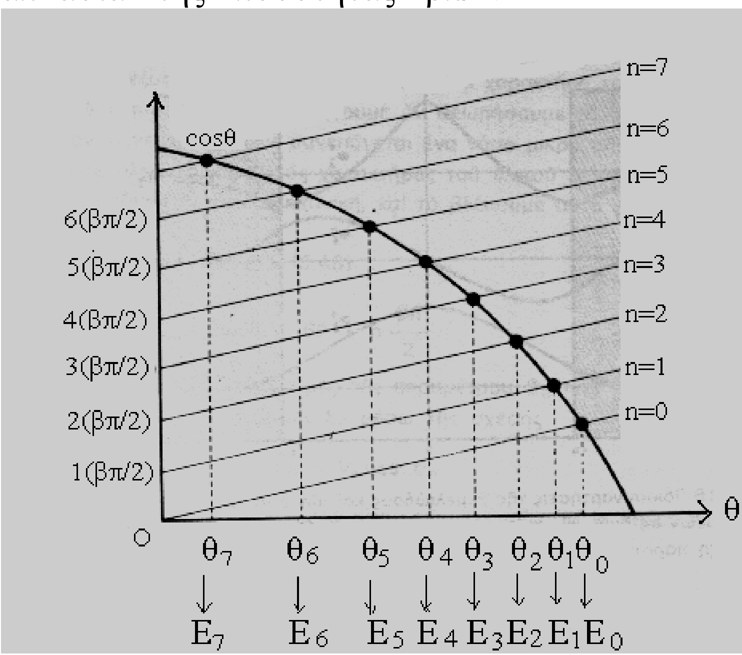
Άρα για δοθείσα δυναμική ενέργεια U_o, ανάλογα με την τιμή που θα πάρει η θ θα έχουμε και την αντίστοιχη ιδιοτιμή. Προφανώς, οι ιδιοτιμές E_n είναι διάκριτες, οπότε από τις τιμές που μπορεί να πάρει η

παράμετρος θ ορισμένες μόνο είναι επιτρεπτές, τις οποίες θα προσδιορίσουμε στην συνέχεια.
Οι σχέσεις (V),(VI) γράφονται βάσει της (VII) :
$\tan k_2\alpha = k_1/k_2 = \tan\theta \Leftrightarrow k_2\alpha = \theta + 2\,n_+\pi/2$ (VIII), $n_+ = 0,1,2\ldots$
$\tan k_2\alpha = -k_2/k_1 = \tan(\theta-\pi/2) \Leftrightarrow k_2\alpha = \theta - \pi/2 + n_-\pi = \theta + (2n_- - 1)\pi/2$ (IX), $n_- = 1,2,\ldots$
Οι δείκτες ± στους ακέραιους αριθμούς n_+, n_- είναι για να μας δηλώνουν τις άρτιες και τις περιττές λύσεις αντίστοιχα, ή με άλλα λόγια την parity της αντίστοιχης ιδιοσυνάρτησης. Οι δύο σχέσεις (VIII), (IX) συγχωνεύονται στην ενιαία εξίσωση : $k_2\alpha = \theta + n\pi/2$ (X) , $n = 0,1,2,\ldots$
όπου οι άρτιες τιμές του n αντιστοιχούν στις άρτιες λύσεις και οι περιττές στις περιττές. Αν λάβουμε υπόψιν ότι $k_2 = \tau\cos\theta$ η (X) γίνεται :

$$\alpha\tau\cos\theta = \theta + n\frac{\pi}{2} \Leftrightarrow a\left(\frac{2mU_o}{\hbar^2}\right)^{1/2}\cos\theta = \theta + n\frac{\pi}{2} \Leftrightarrow \boxed{\cos\theta = \beta\theta + n\frac{\beta\pi}{2}} \quad (XI)$$

$$\acute{o}\pi o\upsilon \;\; a\left(\frac{2mU_o}{\hbar^2}\right)^{1/2} = \frac{1}{\beta}.$$

Η γραφική λύση αυτής της εξίσωσης θα μας δώσει τις επιτρεπτές τιμές θ_n της παραμέτρου θ, που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές E_n , σύμφωνα με την (VII).
Το πρώτο μέλος της εξίσωσης (XI) είναι η καμπύλη του συνημιτόνου στο διάστημα
[0,π/2], ενώ το δεύτερο μέλος είναι μια οικογένεια παραλλήλων ευθειών, που έχουν κλίση β και τέμνουν τον κατακόρυφο άξονα στα ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας βπ/2.



ΕΙΚ. 33Α. Γραφική λύση της εξίσωσης (XI) για τον προσδιορισμό των E_n.

Τα σημεία τομής των ευθειών με την καμπύλη του συνημιτόνου δίνουν τις επιτρεπόμενες τιμές θ_o, θ_1, $\theta_2,\ldots$, θ_n, οπότε οι αντίστοιχες ιδιοτιμές θα είναι :

$$E_n = U_o\cos^2\theta_n \quad (XII)$$

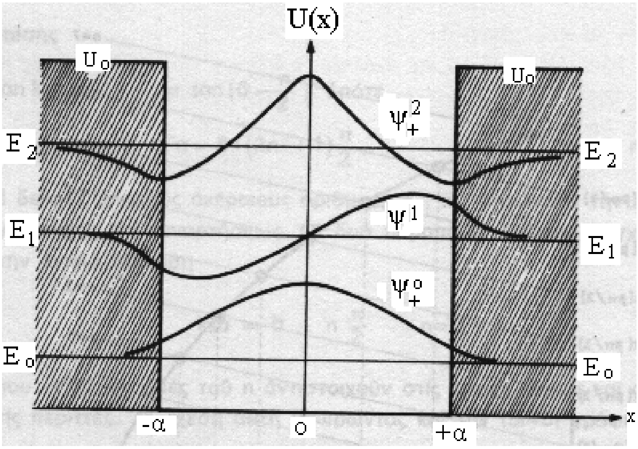
<u>Φυσική ανάλυση αποτελεσμάτων</u> :

1) Αν το τετραγωνικό πηγάδι γίνει απείρου ύψους ($U \to \infty$) ή μεγάλου πλάτους, τότε η κλίση β γίνεται πολύ μικρή, οπότε οι γωνίες θ_n, τουλάχιστον για τις πρώτες τιμές του n, θα πέφτουν πολύ κοντά στην π/2, οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι $\theta = \pi/2 - \varphi$, όπου φ μια πολύ μικρή γωνία. Επομένως έχουμε :

$\cos\theta = \cos(\pi/2 - \varphi) = \sin\varphi \approx \varphi$. Άρα η (XI) γίνεται: $\varphi = -\beta\varphi + (n+1)\beta\pi/2 \Leftrightarrow$

$$\varphi = \frac{1}{1+\beta}(n+1)\frac{\beta\pi}{2} \Leftrightarrow \varphi^2 = \frac{1}{4(1+\beta)^2}\frac{(n+1)^2\pi^2\hbar^2}{2mU_o a^2} = \frac{E_n^\infty}{4(1+\beta)^2 U_o}$$

όπου E_n^∞ είναι οι ιδιοτιμές του πηγαδιού απείρου βάθους (σχέση 184), μόνο που εδώ το n αρχίζει από την τιμή μηδέν, γι'αυτό και εμφανίζεται το n+1 αντί του n που είχαμε παλιότερα.



ΕΙΚ. 33Β. Ιδιοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και των δύο πρώτων διεγερμένων καταστάσεων σε δυναμικού τετραγωνικού πηγαδιού.

Η σχέση (XII) στην ειδική περίπτωση που $\beta \to 0$ γίνεται : $E_n = U_o \sin\varphi \approx U_o\varphi^2$ και τελικά : $E_n = E_n^\infty/4(\beta+1)^2$. Η σχέση αυτή είναι μια αναλυτική σχέση, που προσδιορίζει τις ιδιοτιμές E_n, βάσει των αντιστοίχων E_n^∞ διορθωμένων κατά τον παράγοντα $4(\beta+1)^2$ και επειδή ο διορθωτικός παράγοντας είναι μικρότερος της μονάδας, οι E_n βρίσκονται χαμηλότερα των E_n^∞.

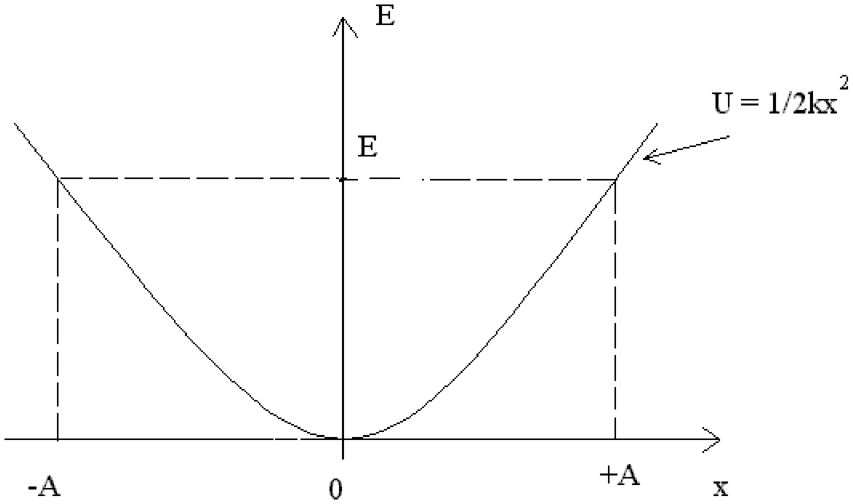
2) Όπως φαίνεται στην εικ. 33Β, οι ιδιοσυναρτήσεις μοιάζουν με τις ιδιοσυναρτήσεις του συστήματος τετραγωνικού πηγαδιού απείρου βάθους, με την μόνη διαφορά ότι επεκτείνονται στην παρούσα περίπτωση και στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή $|x| > \alpha$. Το γεγονός ότι το σωμάτιο έχει μη μηδενική πιθανότητα να βρεθεί σε μια περιοχή, όπου η δυναμική ενέργεια είναι μεγαλύτερη από την ολική, δίνει συχνά λαβή ότι στην Κβαντομηχανική δεν ισχύει πάντα η διατήρηση της ενέργειας. Το λάθος εδώ βρίσκεται στο εξής σημείο : στην Κλασσική Μηχανική, τόσο η κινητική όσο και η δυναμική ενέργεια μπορούν να μετρηθούν χωριστά και το άθροισμά τους δίνει πάντα την δεδομένη σταθερή τιμή της ολικής ενέργειας του σωματιδίου. Στην Κβαντομηχανική αυτό δεν είναι σωστό, γιατί

η ολική ενέργεια είναι μια ποσότητα, που χαρακτηρίζει την εξεταζόμενη κατάσταση στο σύνολό της, χωρίς να μπορεί να αναλυθεί σε κάθε θέση σε ένα άθροισμα κινητικού και δυναμικού όρου. Με άλλα λόγια, το να λέμε ότι σε ένα σημείο x είναι $E < U(x)$ δεν έχει νόημα, γιατί τα μεγέθη U(x) και $E \equiv H = p^2/2m + U(x)$ δεν μετατίθενται και επομένως η ταυτόχρονη γνώση τους είναι αδύνατη.
Λόγω της κατοπτρικής συμμετρίας στον χώρο της U(x) η συμπεριφορά των ιδιοσυναρτήσεων στην περιοχή A είναι ίδια με την C , συνεπώς περιοριζόμαστε στην C όπου $x > α$. Στην περιοχή αυτή το σωμάτιο περιγράφεται από μια εκθετικά φθίνουσα συνάρτηση της μορφής $e^{-k_1 x}$. Η ταχύτητα απόσβεσης της κυματοσυνάρτησης καθορίζεται από τον κυματαριθμό k_1, που έχει διαστάσεις του αντιστρόφου της απόστασης, που στην προκειμένη περίπτωση είναι η απόσταση διείσδυσης d του σωματίου στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή. Συνεπώς :

$$d = k_1^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(U_o - E)}}$$

Για $U_o \to \infty$ η απόσταση $d \to 0$, δηλαδή η κυματοσυνάρτηση περιορίζεται αποκλειστικά μόνο στην κλασσικά επιτρεπόμενη περιοχή B (περίπτωση πηγαδιού απείρου βάθους). Όσον αφορά την ενέργεια E παρατηρούμε ότι όσο πλησιάζει την U_o τόσο μεγαλύτερη είναι η διείσδυση (εικ. 33B).
Η μάζα του σωματίου m, παίζει καθοριστικό ρόλο στην συμπεριφορά του συστήματος, δηλαδή όσο η μάζα μειώνεται τόσο πιο βαθειά διεισδύει το σωμάτιο στην απαγορευμένη περιοχή C, δηλαδή τόσο πιο έντονη είναι η κβαντομηχανική συμπεριφορά. Αντίθετα για πολύ μεγάλες μάζες έχουμε εξασθένηση του κβαντομηχανικού χαρακτήρα. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουμε αν θεωρήσουμε την σταθερά $\hbar$ να τείνει στο μηδέν (άρα $d \to 0$), που συνεπάγεται ένα τόσο μικρό μήκος κύματος, που χάνεται πλέον ο κυματικός χαρακτήρας του υλικού σωματίου, οπότε δεν χρειάζεται η Κβαντομηχανική.

4.7 <u>Σωμάτιο σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή</u> :



ΕΙΚ. 34. Η δυναμική ενέργεια αρμονικού ταλαντωτή.

Ένα από τα σημαντικότερα κεφάλαια της Κβαντομηχανικής, είναι ο αρμονικός ταλαντωτής.Αρμονικές ταλαντώσεις λαμβάνουν χώρα, όταν ένα σύστημα υπόκειται σε δύναμη επαναφοράς ανάλογη της απομάκρυνσης, που το κινεί προς την θέση ισορροπίας όταν αυτό διαταραχθεί. Η αδράνεια των μαζών του συστήματος τα εξαναγκάζει να ξεπεράσουν την θέση ισορροπίας και το σύστημα εκτελεί ταλάντωση επ' αόριστον, αν δεν υπάρχουν τριβές. Τα εκκρεμή και οι χορδές είναι γνωστά μακροσκοπικά παραδείγματα. Παραδείγματα προφανούς χημικού ενδιαφέροντος είναι η δόνηση δύο ατόμων ενός μορίου, τα οποία συνδέονται μέσω χημικού δεσμού, η κίνηση ενός ατόμου σε κρυσταλλικό πλέγμα κ.ά.

Η σπουδαιότητα του απλού αρμονικού ταλαντωτή τόσο στην κλασσική όσο και στην μοντέρνα φυσική δεν βρίσκεται στο γεγονός ότι οι δυνάμεις επαναφοράς ακολουθούν αυστηρά τον νόμο του Hooke, που σπάνια ισχύει, αλλά στο γεγονός ότι αυτές οι δυνάμεις επαναφοράς προσεγγίζονται από τον νόμο του Hooke για μικρές απομακρύνσεις x. Για την επιβεβαίωση αυτού του γεγονότος αναφέρουμε ότι οποιαδήποτε δύναμη επαναφοράς, που είναι συνάρτηση του x, μπορεί να εκφραστεί σε σειρά

$$F(x) = F_{x=0} + \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2F}{dx^2}\right)_{x=0} x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3F}{dx^3}\right)_{x=0} x^3 + \ldots \quad (228)$$

Maclaurin περί την θέση ισορροπίας $x = 0$, ως εξής :

Αφού το $x = 0$ είναι θέση ισορροπίας, ο πρώτος όρος της σχέσης (228) είναι μηδέν και αφού για μικρές τιμές του x οι τιμές των x^2, x^3, … είναι πολύ μικρότερες από το x, ο τρίτος και οι ανώτεροι όροι της σειράς μπορούν να παραληφθούν, οπότε απομένει μόνο ο δεύτερος όρος, δηλαδή :

$$F(x) = \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x \quad (229)$$

Η σχέση (229) εκφράζει τον νόμο του Hooke, όταν το $(dF/dx)_{x=0}$ είναι αρνητικό, όπως συμβαίνει με κάθε δύναμη επαναφοράς. Συμπεραίνουμε λοιπόν, ότι όταν τα πλάτη είναι αρκετά μικρά όλες οι ταλαντώσεις έχουν απλό αρμονικό χαρακτήρα.
Η συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας είναι : $U(x) = 1/2kx^2$.
Κατά την Κλασσική Μηχανική, η ολική ενέργεια (χαμιλτώνια) του συστήματος έχει την μορφή :

$$H = E = T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (230)$$

και μπορεί να πάρει οποιαδήποτε μη αρνητική τιμή. Στην Κβαντομηχανική όμως μόνο ορισμένες τιμές E_1, E_2, E_3,… είναι φυσικώς αποδεκτές (διακριτό φάσμα).
Η εξίσωση του *Schrödinger* η ανεξάρτητη από τον χρόνο για τον αρμονικό ταλαντωτή είναι :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right)\psi = 0 \quad (231)$$

Για να βρούμε τις ενεργειακές ιδιοτιμές, πρέπει να αναζητήσουμε τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες λύσεις της εξίσωσης (231). Είναι σκόπιμο να απλοποιήσουμε την (231) εισάγοντας τις παραμέτρους α,b δηλαδή :

$$a = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (232) \qquad b^2 = \frac{mk}{\hbar^2} \quad (233)$$

οπότε η (231) γίνεται :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (a - b^2x^2)\psi = 0 \quad (234)$$

Η εξίσωση (234) είναι μία γραμμική διαφορική εξίσωση με μεταβλητούς συντελεστές. Ξεκινάμε με το να βρούμε την ασυμπτωτική μορφή που πρέπει να έχει η ψ καθώς το x τείνει στο **±∞.** Για να μπορεί μια κυματοσυνάρτηση ψ να αντιπροσωπεύει ένα περιορισμένο σωμάτιο στον χώρο, η τιμή της θα πρέπει να τείνει στο μηδέν καθώς το $x \to \pm\infty$, έτσι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2\, dx < \infty \quad (\textit{τετραγωνικά ολοκληρώσιμη})$$

ώστε το ολοκλήρωμα :
δηλαδή να είναι μια πεπερασμένη μη μηδενική ποσότητα.
Η μέθοδος με την οποία λύνεται η μορφή αυτής της διαφορικής εξίσωσης είναι η "πολυωνυμική μέθοδος", θα αναζητήσουμε δηλαδή την λύση με την μέθοδο του αναπτύγματος σε απειροσειρά. Η φυσικά παραδεκτή λύση είναι εκείνη για την οποία η σειρά τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο.
Για να δούμε πόσο γρήγορα τείνουν στο μηδέν οι κυματοσυναρτήσεις, θεωρούμε μια προσεγγιστική μορφή της εξίσωσης (234) για μεγάλες τιμές του x, οπότε μπορούμε να θέσουμε : $(bx)^2 >> α$, άρα η (234) γίνεται :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - (b^2x^2)\psi = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = (b^2x^2)\psi \quad (235)$$

Μια απλή λύση, που να ικανοποιεί την (235) και να μηδενίζεται ταυτόχρονα πολύ γρήγορα για μεγάλες τιμές του x, είναι η εξής : $\psi_\infty(x) = \exp(-cx^2)$ (236), όπου $\psi_\infty(x)$ ονομάζεται ασυμπτωτικός παράγοντας και c μια σταθερά, που μπορεί να προσδιοριστεί. Υπολογίζουμε την δεύτερη

$$\frac{d\psi_\infty}{dx} = -2cx\,\mathrm{e}^{-cx^2}, \quad \frac{d^2\psi_\infty}{dx^2} = -2c\,\mathrm{e}^{-cx^2} + 4c^2x^2\,\mathrm{e}^{-cx^2} \quad (237)$$

παράγωγο της $\psi_\infty(x)$, που είναι:

Αντικαθιστούμε την (236) και (237) στην (235) και παίρνουμε :

Στην περιοχή όμως όπου $x \to \pm\infty$, ο όρος $4c^2x^2$ είναι πολύ μεγαλύτερος

$$-2c\,\mathrm{e}^{-cx^2} + 4c^2x^2\,\mathrm{e}^{-cx^2} = b^2x^2\,\mathrm{e}^{-cx^2} \Leftrightarrow 4c^2x^2 - 2c = b^2x^2$$

του 2c, οπότε το 2c μπορούμε να το παραλείψουμε, άρα έχουμε : $4c^2x^2 =$

$$\psi_\infty(x) = \mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} \quad (238)$$

b^2x^2 και καταλήγουμε ότι : $c = b/2$, οπότε η (236) γίνεται :

Αφού βρήκαμε την ασυμπτωτική λύση προχωρούμε στην εύρεση της λύσης για όλο το διάστημα ορισμού του x. Για τον σκοπό αυτό εισάγουμε μία συνάρτηση H(x), που είναι μία δυναμοσειρά οπότε η ψ(x) θα έχει την μορφή :

Για να βρούμε την άγνωστη συνάρτηση H(x), αντικαθιστούμε την (239)

$$\psi(x)=\psi_\infty(x)H(x) \Leftrightarrow \psi(x)= \exp\left(-\frac{b}{2}x^2\right)H(x) \quad (239)$$

στην (234) και παίρνουμε μια νέα διαφορική εξίσωση για την H. Κατ'αρχήν βρίσκουμε την δεύτερη παράγωγο της ψ(x) :

$$\frac{d\psi}{dx} = \psi' = \mathrm{H}'\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} + H(-bx\,\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2})$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \psi'' = \mathrm{H}''\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} + 2\mathrm{H}'(-bx\,\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2}) + H(b^2x^2 - b)\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} \Leftrightarrow$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2}[H'' - 2bxH' + (b^2x^2 - b)]H \quad (240)$$

Άρα η εξίσωση (234) γίνεται :

$$e^{-\frac{b}{2}x^2}[H'' - 2bxH' + (b^2x^2 - b)H] + (a - b^2x^2)He^{-\frac{b}{2}x^2} = 0 \Leftrightarrow$$

$$e^{-\frac{b}{2}x^2}[H'' - 2bxH' + (a - b)H] = 0 \Leftrightarrow \boxed{H'' - 2bxH' + (a - b)H = 0} \quad (241)$$

Η εξίσωση (241) ονομάζεται <u>διαφορική εξίσωση του Hermite.</u>

Η καθιερωμένη διαδικασία για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων αυτής της μορφής είναι να υποθέσουμε ότι η H(x) μπορεί να αναπτυχθεί σε δυναμοσειρά του x, δηλαδή :

$$H(x) = A_0 + A_1x + A_2x^2 + A_3x^3 + ... = \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n \quad (242)$$

Εμείς θέλουμε η σειρά αυτή να τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο με πεπερασμένο αριθμό όρων, ώστε να είναι αποδεκτή. Για να υπολογίσουμε την τιμή των συντελεστών A_n βρίσκουμε την πρώτη και δεύτερη παράγωγο της H(x) :

$$H'(x) = A_1 + 2A_2x + 3A_3x^2 + ... = \sum_{n=1}^{\infty} nA_n x^{n-1} \quad \acute{o}\pi\acute{o}\tau\varepsilon$$

$$xH'(x) = A_1x + 2A_2x^2 + 3A_3x^3 + ... = \sum_{n=0}^{\infty} nA_n x^n \quad (243)$$

$$H''(x) = 1.2A_2 + 2.3A_3x + 3.4A_4x^2 + ... = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)A_n x^{n-2} \quad (244)$$

Στην (244) αν μετατοπίσουμε τον δείκτη n κατά δύο μονάδες προς τα πάνω θα γίνει :

$$H''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)A_{n+2}x^n \quad (245)$$

Αντικαθιστούμε τώρα στην (241) την (242), (243), (245) και παίρνουμε **:**

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_{n+2}(n+1)(n+2)x^n - 2b\sum_{n=0}^{\infty} A_n nx^n + (a-b)\sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n = 0 \Leftrightarrow$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} [A_{n+2}(n+1)(n+2) - 2bA_n n + (a-b)A_n]x^n = 0 \quad (246)$$

Για να ισχύει η εξίσωση (246) για οποιαδήποτε τιμή του x, θα πρέπει η ποσότητα μέσα στην αγκύλη να είναι ίση με μηδέν, οπότε έχουμε :

$$A_{n+2}(n+1)(n+2) = 2bA_n n - (a-b)A_n$$

Λύνοντας ως προς A_{v+2} παίρνουμε την αναδρομική σχέση :

$$A_{n+2} = \frac{2bn-(a-b)}{(n+1)(n+2)}A_n \quad (247)$$

H σχέση (247) μας επιτρέπει να υπολογίσουμε διαδοχικά όλους τους συντελεστές της σειράς σαν συνάρτηση των A_0 και A_1, εφόσον η εξίσωση (241) είναι μια δευτεροβάθμια διαφορική εξίσωση, οπότε η λύση της περιέχει δύο σταθερές, που εδώ είναι οι A_0 και A_1. Ξεκινώντας από τον συντελεστή A_0 , μπορούμε να υπολογίσουμε τους συντελεστές A_2,A_4,A_6,…, ενώ ξεκινώντας από τον A_1 υπολογίζουμε τους υπόλοιπους συντελεστές A_3,A_5,A_7,…

Από την μορφή της αναδρομικής σχέσης (247), γίνεται φανερό ότι η σειρά τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο βαθμού n, όταν :

$$2bn = a - b \Leftrightarrow b(2n+1) = a \Leftrightarrow \frac{a}{b} = 2n+1 \;\; \kappa\alpha\iota \;\; \lambda\acute{o}\gamma\omega \;\; \tau\omega\nu \;\; (232),(233) \;\; \acute{\varepsilon}\chi o\upsilon\mu\varepsilon:$$

$$\frac{\frac{2m\mathrm{E}_n}{\hbar^2}}{\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}} = 2n+1 \Leftrightarrow \frac{2mE_n}{\hbar\sqrt{mk}} = 2n+1. \;\; \Omega\varsigma \;\; \gamma\nu\omega\sigma\tau\grave{o}\nu \;\; k = m\omega^2 \;\; \acute{\alpha}\rho\alpha \;\; \frac{2mE_n}{\hbar m\omega} = 2n+1 \Leftrightarrow$$

$$\boxed{E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega} \quad (248)$$

Η σχέση (248) μας δίνει τα ενεργειακά επίπεδα (ενεργειακές στάθμες) του αρμονικού ταλαντωτή και αν λάβουμε υπόψιν ότι ω = 2πf η (248) γράφεται :

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)hf \quad n = 0, 1, 2, ...} \quad (249)$$

Παρατηρούμε ότι η ενέργεια του αρμονικού ταλαντωτή είναι κβαντισμένη με βήμα hf. Για n = 0 έχουμε : E_0 = hf/2 (250). Αυτή είναι η μικρότερη ενέργεια, που μπορεί να έχει ο ταλαντωτής και ονομάζεται ενέργεια μηδενικού σημείου, λόγω του ότι ένας ταλαντωτής σε ισορροπία με το περιβάλλον του αποκτά ενέργεια Ε = E_0 και όχι Ε = 0 όταν η θερμοκρασία τείνει στους 0^0K.

Κατασκευή των ιδιοσυναρτήσεων :

Οι ιδιοσυναρτήσεις έχουν την μορφή της σχέσης (239), δηλαδή :

$$\psi_n(x) = N.H_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} \quad (250)$$

όπου b είναι μια σταθερά που μπορεί να υπολογιστεί από την (233), αν θέσουμε k = $m\omega^2$, οπότε : b = mω/ħ, το Ν είναι ο παράγοντας κανονικοποίησης και H_n (x) ένα πολυώνυμο n βαθμού (πολυώνυμο Hermite), που ικανοποιεί την εξίσωση (241) :

$$H_n''(x) - 2bxH_n'(x) + (a - b)H_n(x) = 0 \quad (251)$$

Όπως φαίνεται στην αναδρομική σχέση (247) επειδή έχει βήμα δύο, θα συνδέει αναγκαστικά μόνο άρτιους ή μόνο περιττούς όρους, οπότε τα πολυώνυμα Hermite θα είναι άρτια ή περιττά, ανάλογα με το αν ο βαθμός τους n είναι άρτιος ή περιττός.

Για οποιαδήποτε ιδιοσυνάρτηση χρειαζόμαστε το αντίστοιχο πολυώνυμο Hermite, που το βρίσκουμε αν αντικαταστήσουμε στην (251) ένα άρτιο ή περιττό πολυώνυμο του επιθυμητού βαθμού και να προσδιορίσουμε τους συντελεστές του ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση.

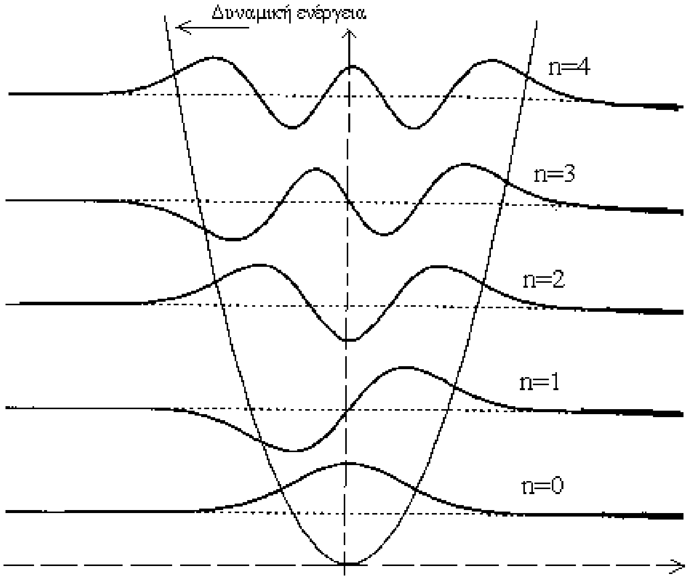
Επειδή αναφέραμε προηγουμένως ότι α –b = 2bn, η σχέση (251) γίνεται :

$$H_n''(x) - 2bxH_n'(x) + 2bnH_n(x) = 0 \quad (252)$$

Α) Ιδιοσυνάρτηση θεμελιώδους στάθμης :

Σ'αυτήν την περίπτωση το πολυώνυμο Hermite είναι μηδενικού βαθμού, δηλαδή σταθερά με αποτέλεσμα H_0(x) = A_0. Επειδή η εξίσωση Hermite είναι ομογενής μπορούμε να βάλουμε A_0 = 1, οπότε η κυματοσυνάρτηση είναι σύμφωνα με την εξίσωση (250) :

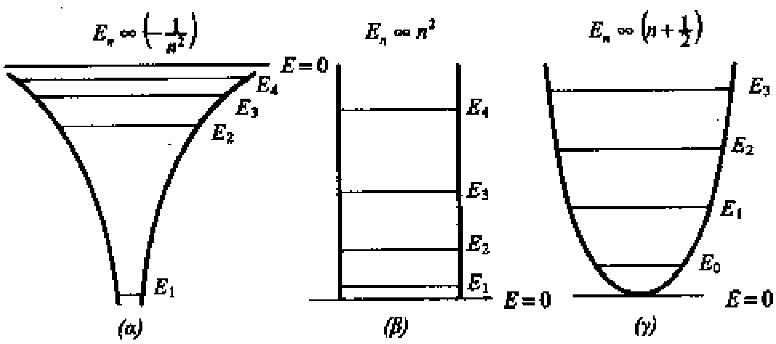
$$\psi_0(x) = N\,\mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} \quad (253)$$



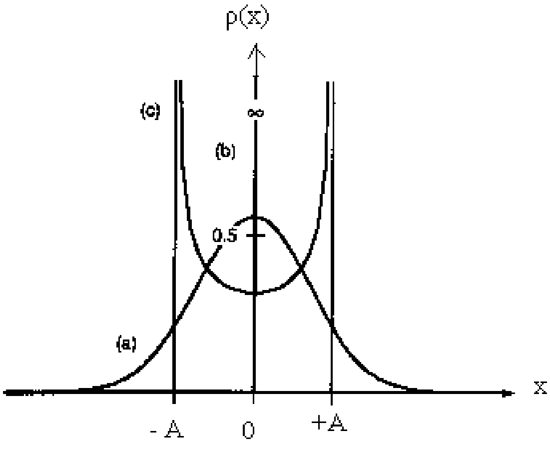
0

x

ΕΙΚ. 35Α. Οι πρώτες πέντε κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή



ΕΙΚ. 35Β. Πηγάδια δυναμικού και ενεργειακά επίπεδα : α) του ατόμου του υδρογόνου, β) σωματίου σε κιβώτιο και γ) του αρμονικού ταλαντωτή. Παρατηρούμε ότι, τα ενεργειακά επίπεδα εξαρτώνται με διαφορετικό τρόπο από τον κβαντικό αριθμό n.



ΕΙΚ. 35Γ. Πυκνότητα πιθανότητας της θεμελιώδους κατάστασης του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή (a)
και του κλασσικού αρμονικού ταλαντωτή με την ίδια ενέργεια (b).

Η συνθήκη κανονικοποίησης για την $\psi_0(x)$ γράφεται :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2\, dx = 1 \Leftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} N^2\, e^{-bx^2}\, dx = 1 \Leftrightarrow N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2}\, dx = 1 \quad (254)$$

Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος στην σχέση (254) χρησιμοποιούμε τον γενικό τύπο :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}\, e^{-x^2}\, dx = \frac{1.3.5...(2n-1)}{2^n}\sqrt{\pi} \quad (255)$$

Άρα έχουμε :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi} \quad (256)$$

Θέτοντας $bx^2 = y^2$ έχουμε : $x = (1/b)^{1/2}y$, άρα $dx = (1/b)^{1/2}dy$. Τώρα με την βοήθεια της σχέσης (256), μπορούμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα της σχέσης (254), δηλαδή :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2}\, dx = \frac{1}{\sqrt{b}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}\, dy = \sqrt{\frac{\pi}{b}} \;\; \textit{οπότε}: \; \mathrm{N}^2 \sqrt{\frac{\pi}{b}} = 1 \Leftrightarrow \mathrm{N} = \sqrt[4]{\frac{b}{\pi}} \quad (257)$$

Αντικαθιστούμε τώρα όπου : $b = m\omega/\hbar$ οπότε η (253) γίνεται :

$$\boxed{\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\; e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \quad (258)$$

Παρατηρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης έχει την Γκαουσιανή μορφή (εικ. 35Α).

Β) <u>Ιδιοσυνάρτηση για την πρώτη διεγερμένη στάθμη</u> :
Σ'αυτήν την περίπτωση το πολυώνυμο Hermite είναι πρώτου βαθμού και περιττό, οπότε είναι της μορφής : $H_1(x) = A_1x$. Έχουμε την δυνατότητα να θέσουμε $A_1 = 1$, οπότε η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση είναι : $\psi_1(x) = N x \exp(-bx^2/2)$ (259).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(x)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} N^2 x^2\, e^{-bx^2}\, dx = 1 \quad (260)$$

$$\textit{Θέτουμε}\;:\; bx^2 = y^2 \Leftrightarrow x^2 = \frac{y^2}{b} \Leftrightarrow x = \frac{1}{\sqrt{b}}\, y \Leftrightarrow dx = \frac{1}{\sqrt{b}}\, dy, \quad \textit{οπότε}:$$

$$\frac{N^2}{\sqrt{b^3}} \int_{-\infty}^{+\infty} y^2\, e^{-y^2}\, dy = 1 \quad (261).\;\; \text{Α}\textit{λλά για}\; n=1 \;\textit{η}\; (255)\; \textit{δίνει}: \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, e^{-x^2}\, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\textit{άρα η}\; (261)\; \textit{γίνεται}: \; \frac{N^2}{\sqrt{b^3}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} = 1 \Leftrightarrow \mathrm{N} = \sqrt[4]{\frac{4b^3}{\pi}} \quad (262).$$

Παίρνουμε τώρα το ολοκλήρωμα κανονοκοποίησης και έχουμε :

Έτσι η κυματοσυνάρτηση για την πρώτη διεγερμένη στάθμη είναι :

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4b^3}{\pi}}\, x\, \mathrm{e}^{-\frac{b}{2}x^2} \quad \textit{και επειδή} \quad b = \frac{m\omega}{\hbar} \quad \textit{καταλήγουμε:}$$

$$\boxed{\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}}\, x\, \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \qquad (263)$$

Γενικά, αν θέλουμε να βρούμε την ιδιοσυνάρτηση οποιασδήποτε διεγερμένης στάθμης, αποδεικνύεται ότι η σταθερά κανονικοποίησης N , και τα πολυώνυμα Hermite $H_n(y)$ δίνονται από τους γενικευμένους τύπους :

$$N = \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4}\left(\frac{2^{-n}}{n!}\right)^{1/2} \quad (264), \qquad H_n(y) = (-1)^n\, \mathrm{e}^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}\mathrm{e}^{-y^2} \quad (265)$$

όπου b = mω/ђ και $y = (b)^{1/2}x$. Άρα μπορούμε να γράψουμε τον γενικό τύπο των ιδιοσυναρτήσεων του αρμονικού ταλαντωτή, που ονομάζονται και συναρτήσεις Hermite :

$$\boxed{\psi_n(x) = (\frac{b}{a})^{1/4}(\frac{2^{-n}}{n!})^{1/2} H_n(y) e^{-\frac{b}{2}x^2}} \qquad (266)$$

<u>Φυσικές συνέπειες των αποτελεσμάτων αρμονικού ταλαντωτή</u> :

Τα σημεία μηδενισμού των κυματοσυναρτήσεων (στο x = 0), ονομάζονται κόμβοι ή κομβικά σημεία. Ο αριθμός των κόμβων αυξάνεται κατά μία μονάδα, καθώς προχωρούμε από την θεμελιώδη (κανένας κόμβος) στις ανώτερες διεγερμένες στάθμες (εικ. 35Α). Μια παρατήρηση που μπορούμε να κάνουμε είναι ότι ο αριθμός των κόμβων είναι ίσος με τον αριθμό των πραγματικών ριζών του πολυωνύμου Hermite. Στις θέσεις του x, που μηδενίζεται το πολυώνυμο θα έχουμε και ένα κόμβο. Οι κυματοσυναρτήσεις δεν είναι πλέον οι απλές ημιτονοειδείς συναρτήσεις του ορθογωνίου φρέατος, αλλά τους μοιάζουν αρκετά και μπορούν να θεωρηθούν ως ημιτονοειδείς καμπύλες, που μηδενίζονται στις μεγάλες μετατοπίσεις. Η ακριβή τους μορφή αποτελείται από γινόμενο δύο συναρτήσεων, μιας συνάρτησης κατά Gauss (που είναι ο ασυμπτωτικός παράγοντας $\exp(-bx^2/2)$ και εξασφαλίζει την αναγκαία εκθετική απόσβεση στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή), πολλαπλασιασμένης επί ενός πολυωνύμου μετατόπισης (πολυώνυμο Hermite), που δίνει την κυματοειδή μορφή μέσα στο κλασσικά επιτρεπόμενο διάστημα.

Όπως γνωρίζουμε η χρονοανεξάρτητη εξίσωση *Schrödinger* έχει την μορφή της κλασσικής κυματικής εξίσωσης σε ένα ανομοιογενές μέσο, με μήκος

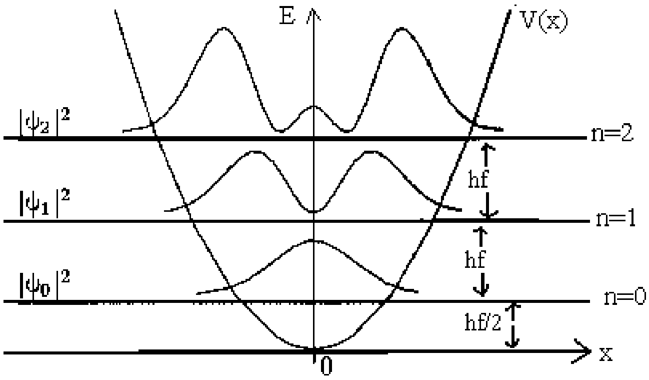
$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - U(x)]}}$$

κύματος :

Όσο απομακρυνόμαστε από την αρχή των αξόνων, όπως φαίνεται από τον παραπάνω τύπο η ορμή της κλασσικής κίνησης μειώνεται και το τοπικό μήκος

κύματος αυξάνει. Αυτό σημαίνει για τον αρμονικό ταλαντωτή ότι οι διαδοχικοί θετικοί και αρνητικοί λωβοί της κυματοσυνάρτησης πλαταίνουν. Με όλες αυτές τις ιδιότητες μπορούμε να σχεδιάσουμε ποιοτικά μια οποιαδήποτε ιδιοσυνάρτηση του αρμονικού ταλαντωτή.
Η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης όπως είδαμε είναι :

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$$

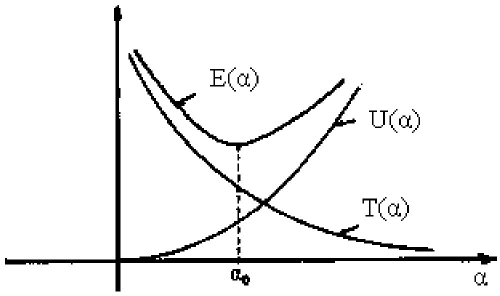


ΕΙΚ. 36. Η πυκνότητα πιθανότητας για τον αρμονικό ταλαντωτή.

και βρίσκεται ψηλότερα από τον πυθμένα (Ε = 0) του δυναμικού.Στο κλασσικό όριο ($\hbar \rightarrow 0$ ή $m \rightarrow \infty$) βλέπουμε ότι $E_0 \rightarrow 0$, δηλαδή το σωματίδιο πέφτει στον πυθμένα. Στο ισχυρό κβαντικό όριο ($\hbar \rightarrow \infty$ ή $m \rightarrow 0$), η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης απειρίζεται.
Όσον αφορά τις κβαντισμένες ενεργειακές στάθμες, το πλέον σημαντικό σημείο είναι ότι κάθε στάθμη ισαπέχει από την γειτονική της, κατά $E_{n+1}-E_n = hf$. Αυτό σημαίνει ότι οι ενεργειακές στάθμες σχηματίζουν μία ομοιόμορφη κλίμακα.
Με την αύξηση της σταθεράς k αυξάνει ο διαχωρισμός μεταξύ των γειτονικών στάθμεων. Καθώς το k ελαττώνεται (ή καθώς η μάζα αυξάνει) η συχνότητα f γίνεται μικρότερη με αποτέλεσμα ο διαχωρισμός μεταξύ γειτονικών στάθμεων να ελαττούται. Στην περίπτωση που $k \rightarrow 0$ το παραβολικό δυναμικό αδυνατεί να περιορίσει το σωμάτιο και η ενέργεια μεταβάλλεται συνεχώς : δεν υπάρχει κβαντισμός στο όριο αυτό, οπότε το σωμάτιο είναι ελεύθερο.
Με γνωστές τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ μπορούμε να προσδιορίσουμε τις πυκνότητες πιθανότητας $|\psi_n(x)|^2$. Στην εικ. 36 δίνονται οι πυκνότητες πιθανότητας για την θεμελιώδη και τις δύο πρώτες διεγερμένες

καταστάσεις, ενός απλού αρμονικού ταλαντωτή. Παρατηρούμε ότι για την θεμελιώδη κατάσταση η κλασσική πρόβλεψη είναι τελείως αντίθετη από εκείνη της κβαντομηχανικής. Η μεν κβαντομηχανική προβλέπει το μέγιστο της πιθανότητας στην θέση ισορροπίας x = 0 , όπου η δυναμική ενέργεια είναι ελάχιστη , ενώ η κλασσική θεωρία προβλέπει σαν πιθανότερες θέσεις εκείνες, για τις οποίες η δυναμική ενέργεια είναι μέγιστη. Όσο αυξάνει ο κβαντικός αριθμός n και για αρκετά μεγάλα n, λόγω του μεγάλου αριθμού των μεγίστων στην επιτρεπτή περιοχή, η κλασσική πρόβλεψη της πυκνότητας πιθανότητας εκφράζει την μέση τιμή της κβαντομηχανικής πρόβλεψης (αρχή της αντιστοιχίας στην παλαιά κβαντική θεωρία).

Αν η $\psi_0(x)$ είναι έντονα εντοπισμένη γύρω από τον πυθμένα, τότε η δυναμική ενέργεια U θα είναι πολύ μικρή, αλλά θα έχει αυξηθεί υπερβολικά η κινητική ενέργεια T. Εάν όμως η $\psi_0(x)$ διαπλατυνθεί πολύ, τότε θα ελαττωθεί η κινητική



ΕΙΚ. 37. Γραφικές παραστάσεις της κινητικής, της δυναμικής και της ολικής ενέργειας σωματίου σε συνάρτηση του μήκους εντοπισμού α.

ενέργεια ενώ θα αυξηθεί η δυναμική μια και τώρα υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο μακριά από τον πυθμένα.

Ας υποθέσουμε ότι στην θεμελιώδη κατάσταση το σωμάτιο είναι εντοπισμένο σε μια περιοχή εύρους $\Delta x \approx \alpha$ γύρω από τον πυθμένα. Χρησιμοποιούμε την αρχή της αβεβαιότητας για να κάνουμε μια εκτίμηση της κινητικής, δυναμικής και ολικής ενέργειας του συγκεκριμένου σωματίου σε συνάρτηση του μήκους εντοπισμού α: $(\Delta x)(\Delta p) \approx \hbar$ άρα $(\Delta p) \approx \hbar/(\Delta x)$ οπότε η κινητική ενέργεια προσεγγιστικά είναι: $T(\alpha) = (\Delta p)^2/2m) \approx \hbar^2/(2m\alpha^2)$.

Η δυναμική ενέργεια θα είναι: $U(\alpha) = k\alpha^2/2$.

Επομένως η ολική ενέργεια θα είναι: $E(\alpha) \approx \hbar^2/(2m\alpha^2) + k\alpha^2/2$.

Από αυτές τις τελευταίες σχέσεις παρατηρούμε ότι όταν το α μειώνεται δηλαδή όταν η κυματοσυνάρτηση στενεύει, η κινητική ενέργεια αυξάνει ενώ η δυναμική ενέργεια μειώνεται. Εάν φυσικά το α αυξάνεται, οπότε η κυματοσυνάρτηση πλαταίνει, η κινητική ενέργεια μειώνεται και η δυναμική ενέργεια αυξάνεται. Όλα αυτά φαίνονται και στην εικ. 37. Η ελάχιστη ολική ενέργεια επιτυγχάνεται για μια κατάλληλη τιμή του μήκους εντοπισμού α, που προσδιορίζεται προσεγγιστικά από την συνθήκη :

$dE/d\alpha = 0$, από την οποία προκύπτει ότι : $\alpha = (\hbar/m\omega)^{1/2}$, δηλαδή το σωμάτιο είναι τελείως εντοπισμένο στον πυθμένα $x = 0$ του δυναμικού, που είναι και αυτό που θέλει η κλασσική θεωρία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

5.1 Εξίσωση Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου :

Το άτομο του υδρογόνου αποτελείται από ένα πρωτόνιο και ένα ηλεκτρόνιο, που έχει μάζα 1836 φορές ελαφρύτερο του πρωτονίου. Για ευκολία, θα θεωρήσουμε ότι το πρωτόνιο είναι ακίνητο, ενώ το ηλεκτρόνιο κινείται γύρω του, χωρίς να μπορεί όμως να διαφύγει από το ηλεκτρικό πεδίο του πρωτονίου. Αν θέλουμε να ληφθεί υπόψιν η κίνηση του πρωτονίου, θα πρέπει να αντικαταστήσουμε την μάζα του ηλεκτρονίου m με την ανηγμένη μάζα m΄ που δίνεται από την σχέση :

$$m' = \frac{mM}{m+M} \quad (267)$$

Η εξίσωση *Schrödinger* του ηλεκτρονίου στις τρεις διαστάσεις για το άτομο του υδρογόνου είναι :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x,y,z)]\psi=0 \Leftrightarrow \left[\nabla^2+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\right]\psi=0 \quad (268)$$

όπου U είναι η ηλεκτροστατική δυναμική ενέργεια Coulomp, που δίνεται από τον τύπο :

$$U=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad (269)$$

Επειδή η U είναι συνάρτηση του r και όχι των x,y,z δεν μπορούμε να κάνουμε άμεσα αντικατάσταση της (269) στην εξίσωση (268). Λόγω αυτού του γεγονότος, έχουμε δύο επιλογές : ή θα εκφράσουμε την U σε καρτεσιανές συντεταγμένες αντικαθιστώντας : $r = (x^2+ y^2+ z^2)^{1/2}$, ή θα γράψουμε την εξίσωση *Schrödinger* σε σφαιρικές συντεταγμένες r,θ,φ. Επειδή η δυναμική ενέργεια παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία, θα εργαστούμε σε σφαιρικές συντεταγμένες, οπότε η εξίσωση *Schrödinger* γράφεται :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi=0 \quad (270)$$

Η εξίσωση (270) προκύπτει αν λάβουμε υπόψιν την εικ. 38 και τις

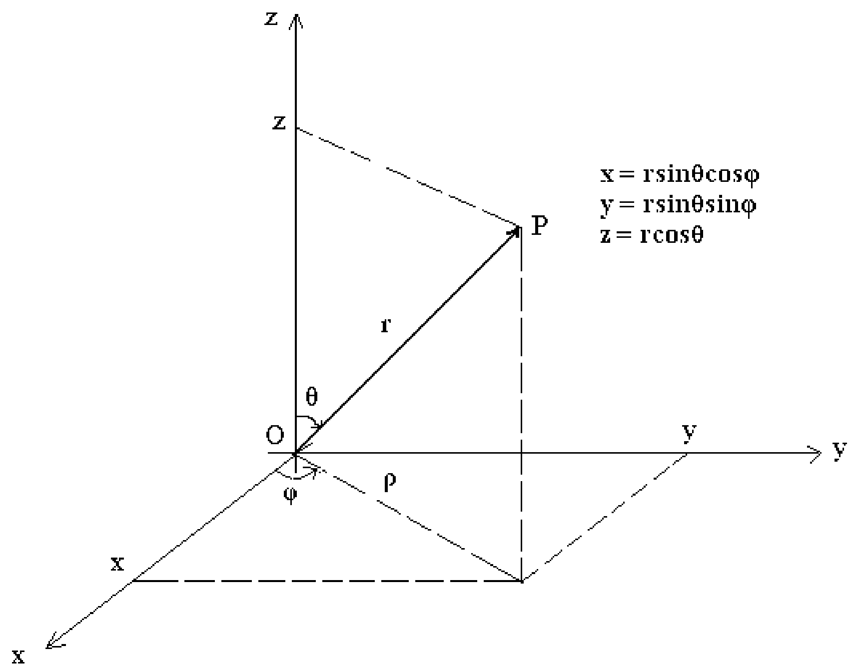
$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad \acute{o}\pi o\upsilon \quad r=\sqrt{x^2+y^2+z^2},\ \sin\theta=\frac{\rho}{r},\ \rho=\sqrt{x^2+y^2},\ \tan\varphi=\frac{y}{x}.$$

$$\acute{A}\rho\alpha:\ \frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

$$O\mu o\acute{\iota}\omega\varsigma:\ \frac{\partial}{\partial y}=\sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\sin\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}.$$

σχέσεις :



ΕΙΚ. 38. Σφαιρικές συντεταγμένες. r είναι το μέτρο του διανύσματος θέσης, θ είναι η γωνία μεταξύ του r και του άξονα +z (ζενιθία γωνία), φ είναι η γωνία μεταξύ της προβολής του r στο επίπεδο xOy και του άξονα +x (αζιμουθιακή γωνία). Οι τιμές αυτών είναι : $0 \le r < \infty$, $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$.

Πολλαπλασιάζουμε τα μέλη της (270) με $r^2\sin^2\theta$, οπότε έχουμε :

$$\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi=0 \quad (271)$$

Σε συνδυασμό με τις διάφορες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η ψ, παραπάνω εξίσωση περιγράφει πλήρως την συμπεριφορά του ηλεκτρονίου. Κατά την επίλυση αυτής της εξίσωσης προκύπτει ότι απαιτούνται τρεις κβαντικοί αριθμοί, των οποίων οι δυνατές τιμές τους, είναι :
Κύριος κβαντικός αριθμός : $n = 1,2,3,\ldots$
Τροχιακός κβαντικός αριθμός : $\ell = 0,1,2,\ldots,n-1$
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός : $m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell$.
Ο κύριος κβαντικός αριθμός n καθορίζει την ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου, ο τροχιακός κβαντικός αριθμός ℓ καθορίζει το μέτρο της στροφορμής του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ καθορίζει την διεύθυνσή της.

5.2 Διαχωρισμός των μεταβλητών :

Το πλεονέκτημα της έκφρασης της εξίσωσης *Schrödinger* μέσω σφαιρικών συντεταγμένων, είναι ότι μπορεί να διαχωριστεί σε τρεις ανεξάρτητες εξισώσεις, που η κάθε μία περιλαμβάνει μία μόνο συντεταγμένη.

Έτσι γράφουμε : ψ(r,θ,φ) = R(r)Θ(θ)Φ(φ) (272), δηλαδή αντί της συνάρτησης ψ θεωρούμε το γινόμενο τριών συναρτήσεων, κάθε μία των οποίων εξαρτάται από μία συντεταγμένη. Η συνάρτηση R(r) περιγράφει τον τρόπο, με τον οποίο μεταβάλλεται η κυματοσυνάρτηση ψ του ηλεκτρονίου, κατά μήκος ενός ακτινικού διανύσματος με αρχή τον πυρήνα, για σταθερά θ και φ. Η συνάρτηση Θ(θ) περιγράφει την μεταβολή της ψ με την γωνία θ, κατά μήκος ενός μεσημβρινού μιας σφαίρας με κέντρο τον πυρήνα, για σταθερά r και φ. Η συνάρτηση Φ(φ) περιγράφει την μεταβολή της ψ με την αζιμουθιακή γωνία φ κατά μήκος ενός παραλλήλου μιας σφαίρας με κέντρο τον πυρήνα, για σταθερά r και θ.

Πιο απλά η εξίσωση (272) γράφεται : ψ = RΘΦ , οπότε παίρνουμε τις

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{dR}{dr} \quad (273), \qquad \frac{\partial\psi}{\partial\theta} = R\Phi\frac{d\Theta}{d\theta} \quad (274), \qquad \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = R\Theta\frac{d\Phi}{d\varphi} \Leftrightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = R\Theta\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \quad (275)$$

παραγώγους :

Αντικαθιστώντας τις (272),(273),(274),(275) στην εξίσωση (271) και διαιρώντας με RΘΦ, βρίσκουμε ότι :

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E) = 0 \quad (276)$$

Μεταφέρουμε τώρα ένα όρο της (276) που να έχει μία μόνο μεταβλητή στο άλλο μέλος, οπότε έχουμε :

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E) = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \quad (277)$$

Αυτή η εξίσωση επαληθεύεται μόνο αν και τα δύο μέλη της είναι ίσα με την ίδια σταθερά, επειδή πρόκειται για συναρτήσεις διαφορετικών μεταβλητών. Ονομάζουμε αυτήν την σταθερά m_ℓ^2 , άρα η διαφορική εξίσωση για την συνάρτηση φ είναι :

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m_l^2 \Leftrightarrow \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2\Phi = 0 \Leftrightarrow \Phi(\varphi) = A\,e^{im_l\varphi} \quad (278)$$

Η γενική λύση βέβαια αυτής της διαφορικής εξίσωσης είναι :

Φ(φ) = Aexp(im_ℓφ) + Bexp(-im_ℓφ) , αλλά διαλέξαμε τον πρώτο μόνο όρο γιατί η Φ αντιστοιχεί σε μια καθορισμένη τιμή της z-συνιστώσας της στροφορμής L_z, όπως θα δούμε παρακάτω. Η σταθερά m_ℓ είναι γνωστή ως ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του ατόμου του υδρογόνου. Η εκπλήρωση της συνθήκης του μονοτίμου (μία τιμή σε κάθε δεδομένο σημείο του χώρου) της συνάρτησης ψ(r,θ,φ), άρα και της Φ , που είναι μέρος αυτής είναι : Φ(φ) = Φ(φ+2π), οπότε :

$$A\,\mathrm{e}^{im_l\varphi} = A\,\mathrm{e}^{im_l(\varphi+2\pi)} \Leftrightarrow A\,\mathrm{e}^{im_l\varphi} = A\,\mathrm{e}^{im_l\varphi}.\mathrm{e}^{im_l 2\pi}$$

Για να είναι $e^{im_\ell 2\pi} = 1$ πρέπει το m_ℓ να παίρνει τιμές 0,±1,±2,…
Την σταθερά Α την υπολογίζουμε από την συνθήκη κανονικοποίησης, δηλαδή :

$$\int_0^{2\pi} \Phi\Phi^* d\varphi = 1 \Leftrightarrow A^2 \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{im_l\varphi}\,\mathrm{e}^{-im_l\varphi}\,d\varphi = 1 \Leftrightarrow A^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \Leftrightarrow A^2 2\pi = 1 \Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \quad (279)$$

$$\grave{}A\rho\alpha \quad : \quad \Phi(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\,\mathrm{e}^{im_l\varphi} \quad (280)$$

Εδώ θα κάνουμε μία παρένθεση για να γνωρίσουμε τους τελεστές της στροφορμής.

5.3 <u>Οι τελεστές της στροφορμής</u> :

Κλασσικά η στροφορμή ενός σωματίου ορίζεται από το εξωτερικό

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (281)$$

γινόμενο :
Οι τελεστές της στροφορμής εκφράζονται σε διαφορική μορφή από την σχέση :

$$\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla} \quad (282)$$

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\quad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Αναλυτικά έχουμε :

Σε σφαιρικές συντεταγμένες οι τελεστές της στροφορμής γράφονται :

$$L_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \;(283),\quad L_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \;(284),\quad L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \;(285)$$

Άρα υπολογίζεται ότι ο τελεστής της ολικής στροφορμής L^2 είναι :

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \quad (286)$$

όπου $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ (287).
Αν δράσει ο τελεστής L_z της σχέσης (285) πάνω στην Φ, θα έχουμε: $L_z\Phi$ = $-i\hbar(d\Phi/d\varphi)$, οπότε υψώνοντας στο τετράγωνο παίρνουμε : $L_z^2\Phi = -\hbar^2(d^2\Phi/d\varphi^2)$.
Στην προηγούμενη παράγραφο είχαμε κάνει την αντικατάσταση : $-d^2\Phi/d\varphi^2 = m_\ell^2\Phi$, οπότε καταλήγουμε : $L_z^2\Phi = m_\ell^2\,\hbar^2\Phi$ (288).
Η εξίσωση (288) έχει την μορφή μιας εξίσωσης ιδιοτιμών του τελεστή L_z^2 . Συμπεραίνουμε, ότι οι φυσικώς παραδεκτές τιμές m_ℓ = 0,±1,±2,…

πολλαπλασιασμένες με ħ, δίνουν τις ιδιοτιμές της συνιστώσας L_z της στροφορμής. Η προβολή της στροφορμής στον άξονα των z μπορεί να πάρει επομένως μόνο τις τιμές $m_\ell\hbar$. Οι αντίστοιχες νορμαλισμένες ιδιοσυναρτήσεις δίνονται από την (280). Έχουμε :

$$L_z\Phi(\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im_l\varphi}\right) = m_l\hbar\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im_l\varphi}\right) = m_l\hbar\Phi(\varphi) \quad (289)$$

Αποδεικνύεται ότι οι σχέσεις αντιμεταθέσεως των τελεστών της στροφορμής είναι:

$[L_x,L_y] = i\,\hbar L_z$, $[L_y,L_z] = i\,\hbar L_x$, $[L_z,L_x] = i\,\hbar L_y$.

τελεστής L^2 εναλλάσσεται με όλες τις συνιστώσες της στροφορμής :

$[L^2,L_x] = 0$, $[L^2,L_y] = 0$, $[L^2,L_z] = 0$.

Από τις σχέσεις αντιμεταθέσεως προκύπτει ότι, από τα τέσσερα φυσικά μεγέθη L^2, L_x , L_y , L_z , μόνο το L^2 μαζί με ένα από τα υπόλοιπα μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα.

5.4 **Λύση της εξίσωσης Schrödinger ως προς Θ(θ)** :

Αντικαθιστώντας το 2ο μέλος της (277) με m_ℓ^2, καταλήγουμε :

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E) = m_l^2 \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E) = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) \quad (290)$$

Έχουμε ξανά μια εξίσωση, όπου στο κάθε μέλος εμφανίζεται διαφορετική μεταβλητή, πράγμα που απαιτεί τα δύο μέλη να είναι ίσα με την ίδια σταθερά, έστω λ. Έτσι, οι εξισώσεις για τις συναρτήσεις Φ και R είναι :

$$\frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) = \lambda \Leftrightarrow \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) + (\lambda - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta})\Theta = 0 \quad (291)$$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E) = \lambda \Leftrightarrow \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R = 0 \quad (292)$$

Για να λύσουμε την εξίσωση (291), χρησιμοποιούμε τις αντικαταστάσεις : $\xi = \cos\theta$ και $\Theta(\theta) = P(\xi)$. Το διάστημα $0 \le \theta \le \pi$ αντιστοιχεί στο $-1 \le \xi \le 1$. Έχουμε : $d\Theta/d\theta = dP/d\theta = (dP/d\xi)(d\xi/d\theta) = -(dP/d\xi)\sin\theta = -(dP/d\xi)(1-\xi^2)^{1/2}$.
Άρα η εξίσωση (291) γράφεται :

$$\left[\frac{1}{\sqrt{1-\xi^2}}(-\sqrt{1-\xi^2}\frac{d}{d\xi})\sqrt{1-\xi^2}(-\sqrt{1-\xi^2}\frac{d}{d\xi}) - \frac{m_l^2}{1-\xi^2} + \lambda\right]P(\xi) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\left[\frac{d}{d\xi}(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi} + \lambda - \frac{m_l^2}{1-\xi^2}\right]P(\xi) = 0 \Leftrightarrow \left((1-\xi^2)P'\right)' + \left(\lambda - \frac{m_l^2}{1-\xi^2}\right)P = 0 \Leftrightarrow$$

$$(1-\xi^2)P'' - 2\xi P' + \left(\lambda - \frac{m_l^2}{1-\xi^2}\right)P = 0 \quad (293)$$

Θεωρούμε αρχικά, την ειδική περίπτωση όπου $m_\ell = 0$, οπότε η (293) γίνεται :
Η εξίσωση αυτή εμφανίζεται σε πολλά προβλήματα φυσικής και ονομάζεται εξίσωση του Legendre.
Το σημείο $\xi = 0$ είναι ομαλό σημείο για την εξίσωση αυτή (ομαλό σημείο της διαφορικής εξίσωσης $P'' + f(\xi)P' + g(\xi)P = 0$ είναι το σημείο $\xi = \xi_o$, για το οποίο οι συναρτήσεις f,g παίρνουν πεπερασμένες τιμές $f(\xi_o)$, $g(\xi_o)$).
Άρα μπορούμε να βρούμε τουλάχιστον μία λύση της μορφής :

$$P(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{n+k} \quad (295)$$

$$(1-\xi^2)P'' - 2\xi P' + \lambda P = 0 \quad (294)$$

Παραγωγίζουμε δύο φορές την P(ξ) και αντικαθιστούμε στην (294) :

$$P' = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)\xi^{n+k-1} \quad , \quad P'' = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)(n+k-1)\xi^{n+k-2} \quad , \acute{\alpha}\rho\alpha :$$

$$(1-\xi^2)\sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)(n+k-1)\xi^{n+k-2} - 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)\xi^{n+k-1} + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{n+k} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)(n+k-1)\xi^{n+k-2} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+k)(n+k+1)\xi^{n+k} + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{n+k} = 0 \quad (296)$$

Η ελάχιστη δύναμη του ξ, αντιστοιχεί στον όρο $n = 0$ του πρώτου αθροίσματος της (296), οπότε εξισώνοντας τον συντελεστή αυτής της δύναμης με μηδέν, παίρνουμε : $\alpha_0\, k(k-1) = 0$. Για $\alpha_0 \neq 0$ παίρνουμε τις ρίζες $k = 0$, $k = 1$.
Για την ρίζα $k = 0$, παίρνουμε μία άρτια λύση της μορφής :
$P(\xi) = \alpha_0 + \alpha_2\xi^2 + \alpha_4\xi^4 + \ldots$ (297).
Για να βρούμε την αναδρομική σχέση για τους συντελεστές μετατοπίζουμε τον δείκτη n κατά δύο μονάδες προς τα πάνω για το πρώτο άθροισμα της (296) και έχουμε :

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+2)(n+1)\xi^n - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n)(n+1)\xi^n + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n = 0 \Leftrightarrow$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \left[a_{n+2}(n+2)(n+1) - a_n (n)(n+1) + \lambda a_n \right] = 0 \quad (298)$$

Για να ισχύει η εξίσωση (298) για οποιαδήποτε τιμή του ξ θα πρέπει η ποσότητα μέσα στην αγκύλη να είναι ίση με μηδέν, δηλαδή :

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) - a_n (n)(n+1) + \lambda a_n = 0 \Leftrightarrow \boxed{a_{n+2} = \frac{n(n+1)-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n} \quad (299), \quad n = 0,2,4,...$$

Για $k = 1$, παίρνουμε μία περιττή λύση της μορφής :
$P(\xi) = \alpha_0\xi + \alpha_2\xi^3 + \alpha_4\xi^5 + \ldots$ (300).

Όπως και προηγουμένως καταλήγουμε ότι οι συντελεστές δίνονται από την αναδρομική σχέση :

$$\boxed{a_{n+2} = \frac{(n+1)(n+2)-\lambda}{(n+2)(n+3)} a_n} \quad (301), \quad n = 0, 2, 4, ...$$

Αν οι σειρές (297), (300) είναι άπειρα αθροίσματα, τότε για $\xi = \pm 1$ αποκλίνουν, πράγμα φυσικά απαράδεκτο. Το γεγονός αυτό μπορούμε να το αποφύγουμε αν αναγκάσουμε τις σειρές να τελειώνουν κάπου, δηλαδή αν θεωρήσουμε πολυωνυμικές λύσεις.
Από την (299) αν το πολυώνυμο είναι n βαθμού, συμπεραίνουμε ότι η άρτια λύση (297) είναι πολυωνυμική αν $\lambda = n(n+1) \mid n = 0,2,4,\ldots$
Από την (301) αν το πολυώνυμο είναι n+1 βαθμού, η περιττή λύση (300) είναι πολυωνυμική αν $\lambda = (n+1)(n+2) \mid n = 0,2,4,\ldots$

Γενικά για $\lambda = \ell(\ell+1) \mid \ell = 0,1,2,\ldots$ βρίσκουμε ένα πολυώνυμο ℓ βαθμού $P_\ell(\xi)$ με parity $(-1)^\ell$. Τα πολυώνυμα αυτά ονομάζονται πολυώνυμα του Legendre.

Θεωρούμε την εξίσωση του Legendre (294) με $\lambda = \ell(\ell+1)$:

$$(1-\xi^2)P_l(\xi)'' - 2\xi P_l(\xi)' + l(l+1)P(\xi)_l = 0 \quad (302)$$

Αν παραγωγίσουμε την εξίσωση (302) m_ℓ φορές (όπου $m_\ell \leq l$) τότε αποδεικνύεται ότι προκύπτει :

$$\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}P_l^{m_l}(\xi)\right] - \frac{m_l^2}{1-\xi^2}P_l^{m_l}(\xi) + l(l+1)P_l^{m_l}(\xi) = 0 \quad (303)$$

όπου :

$$\boxed{P_l^{m_l}(\xi) = (1-\xi^2)^{m_l/2}\frac{d^{m_l}P_l(\xi)}{d\xi^{m_l}}} \quad (304) \qquad \begin{array}{l} l = 0,1,2,... \\ m_l = 0,1,2,...l \end{array}$$

Παρατηρούμε ότι η (303) συμπίπτει με την γωνιακή εξίσωση (293) και ικανοποιείται από τις συναρτήσεις $P_\ell^{m_\ell}$, που ορίζονται από την εξίσωση (304).

Επομένως, οι συναρτήσεις $P_\ell^{m_\ell}$ είναι οι λύσεις που αναζητούμε.

5.5 <u>Σφαιρικές αρμονικές – Ιδιοτιμές στροφορμής</u> :

Είδαμε προηγουμένως την εξίσωση του *Schrödinger* σε σφαιρικές συντεταγμένες εξίσωση (270). Ας συμβολίσουμε με $\Lambda(\theta,\varphi)$ τον τελεστή :

$$\Lambda(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (305)$$

που είναι γνωστός ήδη ως τελεστής της στροφορμής L^2, οπότε η εξ. (270) γίνεται :

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\Lambda(\theta,\varphi)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\right]\psi(r,\theta,\varphi)=0 \quad (306)$$

όπου U(r) η ηλεκτροστατική δυναμική ενέργεια Coulomb. Χρησιμοποιούμε και πάλι τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών, δηλαδή γράφουμε: ψ(r,θ,φ) = R(r)Y(θ,φ) ή πιο απλά : ψ = RY, οπότε η (306) γίνεται

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\Lambda(\theta,\varphi)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\right]RY=0. \quad \Delta\iota\alpha\iota\rho o\acute{\upsilon}\mu\varepsilon \quad \mu\varepsilon \quad RY/r^2:$$

$$\frac{\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}R)}{R}+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-U(r)]=-\frac{\Lambda Y}{Y} \quad (307)$$

Το αριστερό μέλος εξαρτάται μόνο από το r, ενώ το δεξιό μόνο από τις γωνίες θ,φ , άρα τα δύο μέλη είναι ίσα με την ίδια σταθερά, έστω λ, οπότε έχουμε :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left[\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]-\frac{\lambda}{r^2}\right]R=0 \quad (308)$$

$$-\frac{\Lambda Y}{Y}=\lambda \Leftrightarrow \Lambda Y+\lambda Y=0 \quad (309)$$

Οι λύσεις των δύο εξισώσεων (308), (309) ονομάζονται “ακτινική κυματοσυνάρτηση” και “γωνιακή κυματοσυνάρτηση” αντίστοιχα. Η (308) περιέχει την δυναμική ενέργεια U(r) , άρα οι λύσεις της εξαρτώνται από την μορφή της συνάρτησης U(r), ενώ η (309) είναι ανεξάρτητη από την U(r), άρα οι λύσεις της είναι ίδιες για όλα τα σφαιρικώς συμμετρικά δυναμικά.

Θα συνδυάσουμε τώρα τις λύσεις ως προς φ, εξίσωσης (280) με τις λύσεις ως προς θ, εξίσωσης (304), για να βρούμε τις φυσικώς αποδεκτές λύσεις της γωνιακής εξίσωσης (309), δηλαδή τις σφαιρικές αρμονικές.
Οι σφαιρικές αρμονικές ορίζονται από την σχέση :

$$Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi) = N(\ell,m)P_\ell^{m_\ell}(\cos\theta)\exp(im_\ell\varphi) \quad (310),$$

όπου ℓ =0,1,2,… και $m_\ell = 0,1,2,\dots,\ell$.
N(ℓ,m) είναι μια σταθερά νορμαλισμού (κανονικοποίησης), ανεξάρτητης των θ,φ, έτσι ώστε η $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi)$ να είναι νορμαλισμένη στην μονάδα για $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$. Από τον τύπο (310) ορίζονται οι σφαιρικές αρμονικές για θετικό ακέραιο m_ℓ. Στην περίπτωση που ο m_ℓ είναι ακέραιος και αρνητικός, με $|m_\ell| \le \ell$, ορίζουμε :

$$Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi) = (-1)^{m_\ell}\, Y_\ell^{-m_\ell}(\theta,\varphi)^* \quad (311).$$

Έτσι για κάθε τιμή του ℓ, έχουμε $2\ell+1$ σφαιρικές αρμονικές, που αντιστοιχούν σε $m_l = 0,\pm1,\pm2,\dots,\pm\ell$.
Η σταθερά νορμαλισμού N(ℓ,m) αποδεικνύεται ότι δίνεται από την σχέση

$$N(\ell,m) =(-1)^{\frac{1}{2}(m_l+|m_l|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m_l|)!}{(\ell+|m_l|)!}\right]^{1/2} \quad (312)$$

Αν πολλαπλασιάσουμε τα μέλη της εξίσωσης (309) με $\hbar^2$ παίρνουμε :

$\hbar^2\Lambda Y+\lambda\ \hbar^2 Y = 0$. Σύμφωνα όμως με την σχέση (286) και την (305) έχουμε ότι $\hbar^2\Lambda = -L^2$ και επειδή $\lambda = \ell(\ell+1)$ καταλήγουμε ότι :

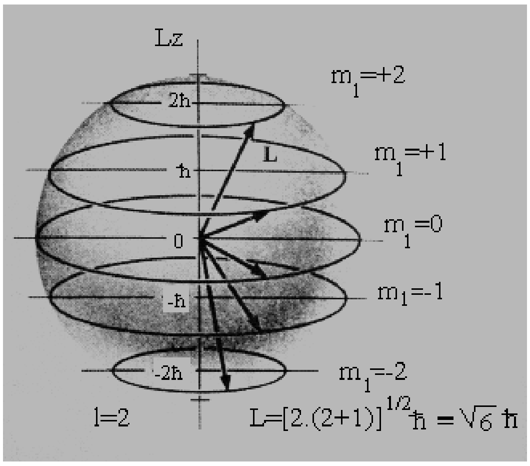
$$L^2 Y = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y \quad (313).$$

Η εξίσωση (313) έχει την μορφή μιας εξίσωσης ιδιοτιμών του τελεστή L^2. Συμπεραίνουμε ότι οι φυσικώς αποδεκτές τιμές της παραμέτρου λ, δηλαδή οι τιμές $\lambda = \ell(\ell+1)$ με $\ell = 0,1,2,\ldots$ πολλαπλασιασμένες με $\hbar^2$, δίνουν τις ιδιοτιμές του τετραγώνου του μέτρου της στροφορμής. Οι επιτρεπτές τιμές, για το μέτρο της στροφορμής, θα είναι : $[\hbar^2\ell(\ell+1)]^{1/2}$.

Οι λύσεις της (313) που αντιστοιχούν σε μια ορισμένη τιμή του ℓ, είναι όπως είδαμε παραπάνω, οι σφαιρικές αρμονικές $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi)$ με $m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell$. Κάθε μία από τις $2\ell+1$ αυτές συναρτήσεις είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή L^2, με ιδιοτιμή $\ell(\ell+1)\hbar^2$. Εδώ παρουσιάζεται ένα παράδειγμα εκφυλισμένων ιδιοσυναρτήσεων με βαθμό εκφυλισμού $2\ell+1$, δηλαδή :

$$L^2\, Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2\, Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi) \quad (314) \quad \text{για κάθε } m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell.$$

Υπενθυμίζουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εκφυλισμένες όταν στην ίδια ιδιοτιμή αντιστοιχούν περισσότερες από μία ιδιοσυναρτήσεις. Ο εκφυλισμός των ιδιοσυναρτήσεων του L^2 ως προς m_ℓ έχει μία ενδιαφέρουσα φυσική ερμηνεία. Όταν το λ πάρει μία ορισμένη τιμή τότε το μέτρο της στροφορμής καθορίζεται πλήρως, παίρνει την τιμή $[\hbar^2\ell(\ell+1)]^{1/2}$. Η συνιστώσα L_z της στροφορμής τότε μπορεί να πάρει μία από τις $2\ell+1$ τιμές $\hbar m_\ell$ όπου $m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell$. Κατά συνέπεια το διάνυσμα της ολικής στροφορμής L μπορεί να έχει ορισμένους μόνο προσανατολισμούς στον χώρο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται κβάντωση κατευθύνσεως.



ΕΙΚ. 39. Το διάνυσμα της στροφορμής L εκτελεί μεταπτωτική κίνηση συνεχώς γύρω από τον άξονα z. Για $\ell = 2$, υπάρχουν $2\ell+1=5$ πιθανές τιμές του m_ℓ, οπότε η προβολή του L πάνω στον άξονα Oz μπορεί να πάρει μία από πέντε μόνο τιμές.

5.6 <u>Λύση της ακτινικής εξίσωσης</u> :

Ξεκινώντας από την ακτινική εξίσωση (308) και αντικαθιστώντας όπου $\lambda = \ell(\ell+1)$, $U(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_o r$ (δυναμική ενέργεια Coulomb), έχουμε :

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \quad (315)$$

Ο παράγοντας $\hbar^2\ell(\ell+1)/2mr^2$ συχνά ονομάζεται "φυγοκεντρικό δυναμικό". Εξετάζουμε πρώτα, πως πρέπει να συμπεριφέρονται οι φυσικώς αποδεκτές λύσεις της (315) για μεγάλα r. Όταν $r \to \infty$, οι όροι $(2/r)dR/dr$, η δυναμική ενέργεια Coulomb και το φυγοκεντρικό δυναμικό τείνουν στο μηδέν, οπότε η εξίσωση (315) μπορεί να προσεγγιστεί από την εξίσωση :

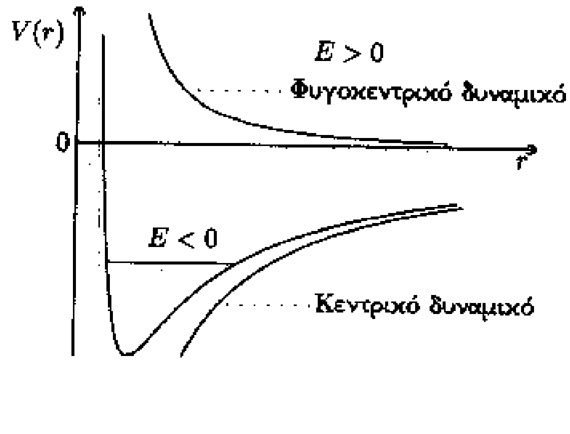
$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}ER=0 \quad (316)$$

Η λύση αυτής της απλής εξίσωσης είναι η εξής :

$$R = C_1\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}\,r}+C_2\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}\,r} \quad (317)$$

Επειδή θεωρούμε δέσμιες καταστάσεις, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε άπειρη απόσταση από το πρωτόνιο πρέπει να είναι μηδέν και επομένως για $r\to\infty$ πρέπει $R\to 0$. Για να ικανοποιείται αυτή η συνθήκη υποχρεούμαστε να διαλέξουμε την λύση :

$$R = C_2\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}\,r} \quad (318)$$



ΕΙΚ. 40. Δυναμικό Coulomb. Το σωμάτιο είναι δέσμιο και έχει ενέργεια $E < 0$ κβαντισμένη. Η περιοχή $E > 0$ είναι περιοχή σκεδάσεως.

Το συμπέρασμα αυτό και για πεπερασμένες τιμές του r, μας οδηγεί να αναζητήσουμε λύσεις της μορφής : $R(r) = F(r)e^{-\alpha r}$ (319), όπου $\alpha = (-2mE/\hbar^2)^{1/2}$.

Επειδή ενδιαφερόμαστε για το άτομο του υδρογόνου (δέσμιες καταστάσεις συστήματος ηλεκτρονίου-πρωτονίου), θεωρούμε μόνο την περίπτωση που $E < 0$.

Αντικαθιστούμε τώρα στην (315) την (319) και προκύπτει :

$$F'' + 2(\frac{1}{r} - a)F' + [\frac{b-2a}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}]F = 0 \quad (320)$$

Για να καταλήξουμε στην (320) έχουμε διαιρέσει προηγουμένως και τα δύο μέλη της εξίσωσης με $e^{-\alpha r}$ και έχουμε θέσει $b = me^2/(2\pi\varepsilon_o \hbar^2)$.

Θέτουμε στην (320) όπου $F = G_{nl}/r$ και εκτελώντας τις πράξεις έχουμε :

$$F' = \frac{G'_{nl}}{r} - \frac{G_{nl}}{r^2}, \quad F'' = \frac{G''_{nl}}{r} - \frac{2G'_{nl}}{r^2} + \frac{2G_{nl}}{r^3}$$

$$\text{Από } (320) \Leftrightarrow \frac{G''_{nl}}{r} - \frac{2G'_{nl}}{r^2} + \frac{2G_{nl}}{r^3} + 2(\frac{1}{r} - a)(\frac{G'_{nl}}{r} - \frac{G_{nl}}{r^2}) + [\frac{b-2a}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}]\frac{G_{nl}}{r} = 0 \Leftrightarrow$$

$$G_{n\ell}'' - 2aG_{n\ell}' + \left[\frac{b}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]G_{n\ell} = 0 \quad (321)$$

Το μηδέν είναι κανονικό ανώμαλο σημείο για την εξίσωση (321), οπότε εφαρμόζουμε την μέθοδο Frobenius ,δηλαδή δέχεται λύση της μορφής :

$$G_{nl} = \sum_{p=0}^{\infty} c_p r^{p+\nu} \quad (322)$$

<u>-Μαθηματική παρένθεση</u> : Έχουμε μια διαφορική εξίσωση δευτέρας τάξης της μορφής : $P''+f(x)P'+g(x)P = 0$. Όπως αναφέραμε σε προηγούμενη παράγραφο ένα σημείο $x = x_0$ είναι ομαλό αυτής της διαφορικής εξίσωσης αν οι συναρτήσεις $f(x)$ και $g(x)$ παίρνουν πεπερασμένες τιμές : $f(x_0)$, $g(x_0)$.

Αν μία τουλάχιστον από τις συναρτήσεις $f(x)$, $g(x)$ τείνει στο $\pm\infty$ για $x = x_0$, τότε το σημείο αυτό ονομάζεται ανώμαλο της διαφορικής εξίσωσης.

Αν το $x = x_0$ είναι ανώμαλο σημείο της διαφορικής εξίσωσης αλλά οι συναρτήσεις $(x-x_o)f(x)$ και $(x-x_o)^2g(x)$ είναι πεπερασμένες στο σημείο $x = x_0$, τότε το σημείο αυτό ονομάζεται κανονικό ανώμαλο σημείο της διαφορικής εξίσωσης .

Αν το σημείο $x = 0$ είναι ομαλό ή κανονικό ανώμαλο σημείο της διαφορικής εξίσωσης, τότε μια τουλάχιστον λύση αυτής μπορεί να βρεθεί με την μέθοδο του Frobenius ή μέθοδο σειρών.

Εισάγουμε λοιπόν την έκφραση (322) στην εξ. (321) και παίρνουμε τελικά το άθροισμα :

$$\sum_{p=0}^{\infty} c_p[(p+\nu)(p+\nu-1) - l(l+1)]r^{p+\nu-2} - \sum_{p=0}^{\infty} c_p[2a(p+\nu) - b]r^{p+\nu-1} = 0 \quad (323)$$

Η ελάχιστη δύναμη του r αντιστοιχεί στον όρο $p = 0$ του πρώτου αθροίσματος. Εξισώνοντας τον συντελεστή αυτής της δύναμης με μηδέν, παίρνουμε :

$c_0[\nu(\nu-1)-\ell(\ell+1)]=0$ και επειδή $c_0 \neq 0$ θα έχουμε: $\nu^2-\nu-\ell(\ell+1) = 0$. Οι ρίζες αυτής της εξίσωσης είναι: $\nu = \ell+1$ και $\nu = -\ell$. Επειδή η συνάρτηση πρέπει να μηδενίζεται για $r \to 0$ είναι προφανές ότι η αρνητική ρίζα $\nu = -\ell$ αντιστοιχεί σε φυσικά απαράδεκτη συμπεριφορά, οπότε την απορρίπτουμε και κρατάμε την λύση $\nu = \ell+1$, που είναι φυσικά αποδεκτή.

$$R(r) = \frac{\sum_{p=0}^{\infty} c_p r^{p+\nu}}{r} \mathrm{e}^{-ar}. \quad \Gamma\iota\alpha \quad \nu = -l \quad \acute{\varepsilon}\chi o\upsilon\mu\varepsilon:$$

$$R(r) = \frac{\sum_{p=0}^{\infty} c_p r^{p}}{r^{l+1}} \mathrm{e}^{-ar}, \quad \pi o\upsilon \quad \gamma\iota\alpha \quad r \to 0 \quad \eta \quad R(r) \to \infty$$

$$\Gamma\iota\alpha \quad n = l+1 \quad \acute{\varepsilon}\chi o\upsilon\mu\varepsilon: R(r) = r^{l+1} \frac{\sum_{p=0}^{\infty} c_p r^{p}}{r} \mathrm{e}^{-ar},$$

που για $r \to 0$ *η* $R(r)$ *είναι πεπερασμένη.*

Αυτά τα συμπεράσματα φαίνονται παρακάτω:
Βάσει των σχέσεων (319), (322) έχουμε: $R(r) = (G_{nl}/r)\, e^{-\alpha r}$.
Για να βρούμε την αναδρομική σχέση για τους συντελεστές μετατοπίζουμε τον δείκτη p κατά μία μονάδα προς τα πάνω για το πρώτο άθροισμα της σχέσης (323) και έχουμε:

$$\sum_{p=0}^{\infty} c_{p+1}[(p+\nu)(p+\nu+1)-l(l+1)]r^{p+\nu-1} - (\sum_{p=0}^{\infty} c_p[2a(p+\nu)-b]r^{p+\nu-1} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\sum_{p=0}^{\infty} \{c_{p+1}\left[(p+\nu)(p+\nu+1)-l(l+1)\right] - c_p[2a(p+\nu)-b]\} r^{p+\nu-1} = 0 \quad (324)$$

Επειδή το άθροισμα αυτό πρέπει να μηδενίζεται ταυτοτικά, απαιτούμε η ποσότητα
μέσα στο άγκιστρο να είναι ίση με μηδέν, δηλαδή:

$$c_{p+1}\left[(p+\nu)(p+\nu+1)-l(l+1)\right] - c_p[2a(p+\nu)-b] = 0 \Leftrightarrow$$

$$c_{p+1}\left[(p+\nu)(p+\nu+1)-l(l+1)\right] = c_p[2a(p+\nu)-b] \Leftrightarrow$$

$$c_{p+1} = \frac{2a(p+\nu)-b}{(p+\nu)(p+\nu+1)-l(l+1)} c_p \quad (325)$$

Θέτουμε όπου $\nu = \ell+1$ στην (325) οπότε έχουμε:

$$c_{p+1} = \frac{2a(p+l+1)-b}{(p+l+1)(p+l+2)-l(l+1)} c_p \quad (326)$$

Πρέπει και εδώ να απαιτήσουμε να τερματίζεται η σειρά ώστε να έχουμε πολυωνυμικές λύσεις σαν φυσικά παραδεκτές. Υποθέτουμε ότι τι ζητούμενο πολυώνυμο είναι p βαθμού, $p \geq 0$. Από την αναδρομική σχέση (326) φαίνεται ότι για να ισχύουν οι σχέσεις $c_{p+1} = 0$ και $c_p \neq 0$ πρέπει ο αριθμητής της (326) να είναι μηδέν, δηλαδή: $2\alpha(p+\ell+1)-b = 0$, άρα αν θέσουμε $n = p+\ell+1$, βρίσκουμε:

$$2\alpha n = b \quad (327)$$

Αντικαθιστώντας το α και το b, που έχουμε ορίσει παραπάνω στην σχέση (327) βρίσκουμε :

$$2\sqrt{-\frac{2m\mathrm{E}_n}{\hbar^2}}\,n = \frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} \Leftrightarrow \boxed{E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}} \quad (328)$$

Επειδή ο κβαντικός αριθμός ℓ μπορεί να πάρει τις τιμές 0,1,2,…συμπεραίνουμε από την σχέση n = p+ℓ+1, ότι ο n παίρνει τιμές 1,2,3,… και ονομάζεται κύριος κβαντικός αριθμός. Επειδή n ≥ ℓ+1 τα όρια μεταβολής του ℓ είναι: ℓ = 0,1,2,…,n-1.
Δηλαδή το ℓ παίρνει n διαφορετικές τιμές. Άρα η ιδιοτιμή της ενέργειας λόγω του κβαντικού αριθμού ℓ είναι n φορές εκφυλισμένη. Εξαίρεση αποτελεί η θεμελιώδης κατάσταση n = 1 και ℓ = 0 όπου δεν υπάρχει εκφυλισμός.
Η αναγωγική σχέση (326) με βάση την (327) γίνεται :

$$c_{p+1} = -2a\frac{n-(p+l+1)}{(p+1)(p+2l+2)}c_p \quad (329)$$

Η σχέση (329) δίνει όλους τους όρους του αναπτύγματος συναρτήσει του πρώτου. Βρίσκουμε τελικά ότι οι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης γράφονται

$$G_{nl}(r) = r^{l+1}c_0\left(1+\frac{c_1}{c_0}r+\ldots+\frac{c_{n-l-1}}{c_0}r^{n-l-1}\right).$$

$$\frac{c_1}{c_0} = (-2a)\frac{n-l-1}{2l+2}, \qquad \frac{c_2}{c_0} = \frac{c_2}{c_1}\frac{c_1}{c_0} = \frac{(-2a)^2}{2!}\frac{n-l-1}{2l+2}\frac{n-l-2}{2l+3}.$$

$$\Gamma\varepsilon\nu\iota\kappa\acute{\alpha}: \ \frac{c_p}{c_0} = \frac{(-2a)^p}{p!}\frac{(n-l-1)(n-l-2)\ldots(n-l-p)}{(2l+2)(2l+3)\ldots(2l+p+1)} = \frac{(-2a)^p}{p!}\frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(n-l-p-1)!(2l+p+1)!},$$

$$p = 0,1,2,\ldots,n-l-1.$$

$$\grave{}A\rho\alpha: \ G_{nl}(r) = c_0 r^{l+1}\sum_{p=0}^{n-l-1}\frac{(-2a_n r)^p}{p!}\frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(n-l-p-1)!(2l+p+1)!} \quad (330)$$

Το άθροισμα της (330) ονομάζεται συμφυές πολυώνυμο του Laguerre :

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(2a_n r) = \sum_{p=0}^{n-l-1}\frac{(-2a_n r)^p}{p!}\frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(n-l-p-1)!(2l+p+1)!} \quad (331)$$

<u>-Μαθηματική παρένθεση</u> : Ορίζουμε τα συνήθη πολυώνυμα Laguerre από την σχέση :

$$L_n(x) = \frac{\mathrm{e}^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(\mathrm{e}^{-x}x^n) = \sum_{m=0}^{n}\frac{n!}{(n-m)!m!}\frac{(-x)^m}{m!} \quad (332)$$

Παρά την εμφάνιση των εκθετικών στον ορισμό (332), οι ποσότητες $L_n(x)$ είναι πολυώνυμα n βαθμού. Συναρτήσει των πολυωνύμων του Laguerre, ορίζονται τα “συμφυή πολυώνυμα του Laguerre” $L_n^k(x)$, που είναι επίσης πολυώνυμα n βαθμού, και ορίζονται από την σχέση :

$$L_n^k(x) = (-1)^k\frac{d^k}{dx^k}L_{n+k}(x) = \sum_{m=0}^{n}\frac{(-x)^m}{m!}\frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!} \quad (333)$$

ή ισοδύναμα ο τύπος του Rodrigues :

$$L_n^k(x) = \frac{x^{-k}\,\mathrm{e}^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^{n+k}\,\mathrm{e}^{-x}) \quad (334)$$

Η σχέση (334) είναι γενικότερη από την (333) γιατί μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για μη ακέραιο k. Σ'αυτήν την περίπτωση, οι συναρτήσεις (334) δεν είναι πολυώνυμα και ονομάζονται "συμφυείς συναρτήσεις του Laguerre". –

Οι ακτινικές ιδιοσυναρτήσεις επομένως είναι :

$$\boxed{R_{nl}(r) = C_{nl} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2a_n r)\,\mathrm{e}^{-\alpha r}} \quad (335)$$

Οι δείκτες n και ℓ μπήκαν για να υπενθυμίζουν το γεγονός ότι η σταθερά $C_{n\ell}$ (σταθερά κανονικοποιήσεως) και η συνάρτηση $R_{n\ell}(r)$, εξαρτώνται από τους κβαντικούς αριθμούς n και ℓ.
Έχοντας βρει τις ακτινικές ιδιοσυναρτήσεις $R_{n\ell}(r)$ και τις γωνιακές ιδιοσυναρτήσεις $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$, μπορούμε τώρα να γράψουμε τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του υδρογόνου :

$$\boxed{\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = D_{nl} r^l L_{nl}(2a_n r)\,\mathrm{e}^{-a_n r}\,P_l^{m_l}(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{im_l\varphi}} \quad (336)$$

όπου $D_{n\ell}$ μια σταθερά τέτοια ώστε η (336) να είναι νορμαλισμένη στην μονάδα, στο διάστημα $0 \le r \le \infty$, $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$, δηλαδή :

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi)\psi^*_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi = 1 \quad (337)$$

όπου $r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$ είναι ο στοιχειώδης όγκος dV του συστήματος εκπεφρασμένος σε σφαιρικές συντεταγμένες, η δε ολοκλήρωση πραγματοποιείται σε όλο το χώρο.
Ας αναφερθεί επιπλέον ότι οι επιμέρους συναρτήσεις $R_{n\ell}(r)$, $\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)$, $\Phi_{m_\ell}(\varphi)$ είναι επίσης κανονικοποιημένες , δηλαδή :

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = 1, \quad \int_0^\pi \Theta^*\Theta \sin\theta\, d\theta = 1, \quad \int_0^{2\pi} \Phi^*\Phi\, d\varphi = 1$$

Να σχολιάσουμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας μπορεί να γραφεί ως : $\psi\psi^* = |R|^2|\Theta|^2|\Phi|^2$, όπου $R = R_{n\ell}(r)$ η λύση της ακτινικής εξίσωσης, που περιγράφει την μεταβολή της ψ με το r όταν ο κύριος και ο τροχιακός κβαντικός αριθμός είναι n και ℓ , $\Theta = \Theta_{\ell m_\ell}(\theta)$ η συνάρτηση, που περιγράφει την μεταβολή της ψ με την θ, όταν ο τροχιακός και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός είναι ℓ και m_ℓ και η $\Phi = \Phi_{\ell m_\ell}(\varphi)$ η συνάρτηση που περιγράφει την μεταβολή της ψ με την φ, όταν ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός είναι m_ℓ.
Από την εξίσωση (280), που είναι η αζιμουθιακή κυματοσυνάρτηση Φ μπορούμε να υπολογίσουμε την αζιμουθιακή πυκνότητα πιθανότητας, που είναι : $|\Phi|^2 = (1/2\pi)$.
Παρατηρούμε ότι η πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο σε συγκεκριμένη αζιμουθιακή γωνία φ είναι σταθερή και ανεξάρτητη της γωνίας φ.

5.7 <u>Το spin του ηλεκτρονίου</u> :

Διάφορα πειραματικά δεδομένα μας οδήγησαν στην παραδοχή ότι τα στοιχειώδη σωματίδια έχουν και άλλες εσωτερικές ιδιότητες εκτός από την μάζα και το φορτίο τους. Μια τέτοια εσωτερική ιδιότητα του ηλεκτρονίου είναι το spin, ανεξάρτητα από το αν το ηλεκτρόνιο είναι μέρος ενός ατόμου ή είναι ένα ελεύθερο σωμάτιο.
Το πείραμα που έδειξε την παρουσία του spin, είναι το πείραμα Stern-Gerlach. Μία δέσμη από άτομα αργύρου, εκτοξεύονται μέσα σε ένα μη ομογενές μαγνητικό πεδίο, με αποτέλεσμα η δέσμη να διασπάται σε δύο μέρη. Το φαινόμενο αυτό, δηλαδή το σπάσιμο μιας φασματικής γραμμής σε άλλες, που ενεργειακά διαφέρουν πολύ λίγο μεταξύ τους, λέγεται λεπτή υφή του πλάσματος. Εξάλλου, όταν ένα άτομο βρεθεί υπό την επίδραση ασθενούς εξωτερικού μαγνητικού πεδίου Β, σε σχέση με το ενδογενές ατομικό μαγνητικό πεδίο, εμφανίζεται το φαινόμενο Zeeman. Στο ομαλό φαινόμενο Zeeman μια μονή γραμμή του φάσματος διαχωρίζεται σε τρεις, όταν το πεδίο είναι κάθετο προς την διαδρομή του φωτός ή σε δύο, όταν το πεδίο είναι παράλληλο. Αυτό το φαινόμενο παρατηρείται στα φάσματα μερικών στοιχείων υπό ορισμένες συνθήκες, στις περισσότερες όμως περιπτώσεις συμβαίνει το αντίθετο. Τέσσερις, έξι ή και περισσότερες συνιστώσες μπορεί να εμφανιστούν.
Η εξήγηση δόθηκε από τους Goudsmit – Uhlenbeck, που θεώρησαν κατά τρόπο αξιωματικό, ότι το ηλεκτρόνιο κατέχει μια ενδογενή ιδιότητα, που παρουσιάζει τα γνωρίσματα της στροφορμής, χωρίς να έχει καμμιά σχέση με την κλασσική στροφορμή και την ονόμασαν spin.
Το spin είναι ένα φυσικό μέγεθος, που παριστάνεται από τον διανυσματικό τελεστή S με συντεταγμένες τους τελεστές S_x, S_y ,S_z. Οι τελεστές αυτοί εναλλάσσονται με όλους τους τελεστές, που έχουμε γνωρίσει μέχρι τώρα. Επίσης ικανοποιούν τις ίδιες σχέσεις αντιμεταθέσεως, που ικανοποιούν και οι τελεστές της στροφορμής :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z\ , \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x\ , \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y\ ,$$
$$[S^2,S_x] = 0\ , [S^2,S_y] = 0\ , [S^2,S_z] = 0.$$

Η κατάσταση ενός σωματίου με spin περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση :

$$\Psi(r,S) = \psi(r)U(S) \quad (338).$$

Το spin του ηλεκτρονίου και η προβολή του σε τυχόντα άξονα, π.χ. z, συνδέονται αντίστοιχα με δύο κβαντικούς αριθμούς s και m_s με τις σχέσεις :

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (339), \qquad S_z = m_s\hbar \quad (340)$$

Ο κβαντικός αριθμός s περιγράφει το spin του ηλεκτρονίου. Η μόνη δυνατή τιμή του s είναι : s = 1/2, περιορισμός που προβλέπεται από την θεωρία Dirac, αλλά μπορεί να προκύψει και εμπειρικά από φασματικά δεδομένα. Η χωρική κβάντωση του ηλεκτρονικού spin περιγράφεται από

τον μαγνητικό κβαντικό αριθμό spin m_s, που παίρνει δύο μόνο τιμές : $m_s = +1/2$ και $m_s = -1/2$.
Συμβολίζουμε με U_+ και U_- τις ιδιοσυναρτήσεις του S_z με ιδιοτιμές $m_s\hbar$, δηλαδή:

$$S_z U_+ = \frac{1}{2}\hbar U_+ \quad (341), \quad S_z U_- = -\frac{1}{2}\hbar U_- \quad (342)$$

Αν το spin είναι παράλληλο ή αντιπαράλληλο προς τον άξονα των z, τότε η κατάστασή του είναι U_+ ή U_- αντίστοιχα. Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις, η κατάσταση spin είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των δύο αυτών καθαρών καταστάσεων U_+ και U_-, δηλαδή : $U(S) = c_+U_+ + c_-U_-$, όπου c_+, c_- είναι τα πλάτη πιθανότητας για παράλληλο και αντιπαράλληλο spin, και πρέπει να ισχύει :

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \quad (343).$$

Θεωρούμε τα U_+ και U_- σαν βάσεις του χώρου, οπότε οι ιδιοσυναρτήσεις U_+ και U_- ως προς την βάση (U_+, U_-) έχουν την μορφή στήλης διανυσμάτων :

$$U_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \kappa\alpha\iota \quad U_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Κυματοσυναρτήσεις, που περιγράφουν σωμάτια με spin $\pm \hbar/2$ γράφονται με την μορφή στήλης διανυσμάτων :

$$\psi(\vec{r})U(S) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (344)$$

Ο αντίστοιχος πίνακας του S_z είναι προφανώς ένας διαγώνιος πίνακας με διαγώνια στοιχεία τις ιδιοτιμές του S_z, δηλαδή :

$$S_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (345)$$

Με την βοήθεια των σχέσεων εναλλαγής, που αναφέραμε παραπάνω αποδεικνύονται εύκολα οι πίνακες των S_x και S_y :

$$S_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (346), \quad S_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (347)$$

Για τον τελεστή S^2 βρίσκουμε τον διαγώνιο πίνακα :

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (348)$$

Να επισημάνουμε ότι το spin δεν είναι η στροφορμή, που έχει το ηλεκτρόνιο γυρίζοντας γύρω από τον άξονά του, γιατί η στροφορμή παίρνει ακέραιες τιμές. Η "σβούρα" αυτή που λέγεται ηλεκτρόνιο, πρέπει να περιστραφεί δύο φορές γύρω από τον άξονά του για να φθάσει στην αρχική του θέση. Από την άλλη μεριά, στο κλασσικό όριο του $\hbar\to 0$, το spin μηδενίζεται, άρα δεν υπάρχει κλασσικό ανάλογο για να περιγράψουμε τι ακριβώς είναι το spin. Στην πραγματικότητα είναι μία κβαντομηχανική ιδιότητα.

Το spin των σωματίων παίζει σπουδαίο ρόλο στην στατιστική των στοιχειωδών σωματίων. Τα συστήματα σωματίων με άρτιο αριθμό μονάδων spin $2\nu\hbar/2$, περιγράφονται με συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις και ονομάζονται μποζόνια, ενώ τα συστήματα σωματίων με περιττό αριθμό μονάδων spin $(2\nu+1)\ \hbar/2$, περιγράφονται με αντισυμμετρικές κυματοσυναρτήσεις και ονομάζονται φερμιόνια. Για παράδειγμα, τα σωμάτια – φορείς όλων των πεδίων είναι μποζόνια, ενώ τα βασικά πυρηνικά σωμάτια, όπως τα πρωτόνια, τα νετρόνια και τα ηλεκτρόνια είναι φερμιόνια.

Για τα ηλεκτρόνια, όπως και γενικά για τα φερμιόνια, ισχύει η απαγορευτική αρχή του Pauli, που δηλώνει ότι δύο ηλεκτρόνια του ατόμου δεν μπορεί να βρίσκονται στην ίδια κβαντική κατάσταση. Καθένα πρέπει να έχει διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς n,ℓ,m_ℓ,m_s. Αντιθέτως για τα μποζόνια δεν ισχύει τέτοια απαγορευτική αρχή.

5.8 <u>Ολοκληρωμένη μορφή κυματοσυνάρτησης του ατόμου του υδρογόνου</u> :

Ας συμβολίσουμε με $\psi_{n\ell m_\ell s}(r,\theta,\varphi)$ την λύση του ατόμου του υδρογόνου. Αν $U_\pm$ είναι η ιδιοσυνάρτηση του spin του ηλεκτρονίου, που μπορεί να πάρει δύο μόνο τιμές, που αντιστοιχούν στις δύο τιμές του m_s και λάβουμε υπόψιν και την εξίσωση (336) στην οποία έχουμε καταλήξει, τότε μπορούμε να γράψουμε :

$$\boxed{\psi_{nlm_ls}(r,\theta,\varphi) = D_{nl} r^l L_{nl}(2a_n r)\,\mathrm{e}^{-a_n r}\, P_l^{m_l}(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{im_l\varphi}\, U_\pm} \quad (349)$$

Συνοψίζοντας, έχουμε να επισημάνουμε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι ταυτόχρονα ιδιοσυνάρτηση των εξής τελεστών :

1) Της ενέργειας Η με ιδιοτιμές :

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_1}\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1,2,3,...$$

όπου $r_1 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2) = 0{,}53.10^{-10}$m είναι η μικρότερη ακτίνα επιτρεπόμενης τροχιάς του ηλεκτρονίου και ονομάζεται ακτίνα θεμελιώδους τροχιάς ή ακτίνα του Bohr, ενώ $E_1 = -me^4/(32\pi^2\varepsilon_0{}^2\ \hbar^2) = -13{,}6$eV είναι η ελάχιστη ενέργεια, που έχει το ηλεκτρόνιο στην θεμελιώδη τροχιά.

2) Της στροφορμής L^2 με ιδιοτιμές : $\hbar^2\ell(\ell+1)$, όπου $\ell = 0,1,2,\ldots,n-1$.

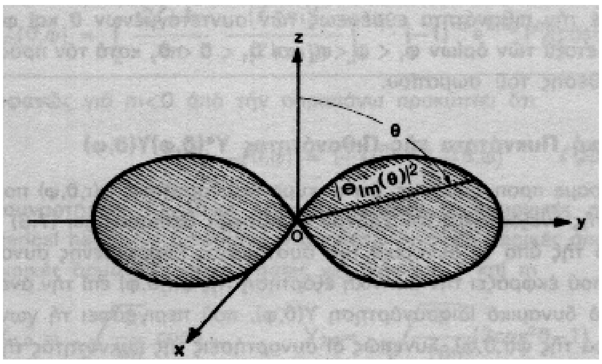
3) Της προβολής της στροφορμής στον άξονα z με ιδιοτιμές : $\hbar m_\ell$, όπου $m_\ell = 0,\pm1, \pm2,\ldots, \pm\ell$.

4) Της προβολής του spin στον άξονα z με ιδιοτιμές :

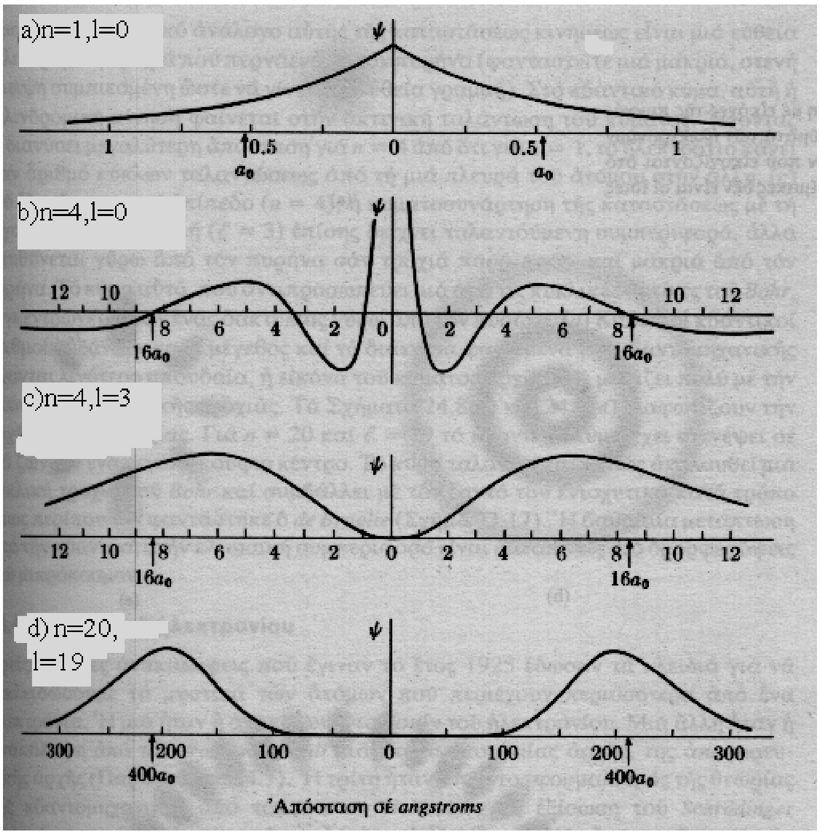
$s = +\hbar/2$ ή $s = -\hbar/2$.

n l m s	Κατάσταση	$\psi_{nlms}(\vec{r}) = R_{nl}(\vec{r})\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)U_{\pm}$
1 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sigma e^{-\rho}$
2 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	2s	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\sigma(\rho-2)e^{-\rho/2}$
2 1 0 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{συν}\,\theta$
2 1 1 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{ημ}\,\theta e^{i\varphi}$
2 1 1 $\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\sigma\rho e^{-\rho/2}\,\text{ημ}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 0 0 $\pm\frac{1}{2}$	3s	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\sigma(21-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}$
3 1 0 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{συν}\,\theta$
3 1 1 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta e^{i\varphi}$
3 1 -1 $\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho(6-\rho)e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 2 0 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}(3\,\text{συν}^2\,\theta-1)$
3 2 1 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\theta e^{i\varphi}$
3 2 -1 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}\,\theta\,\text{συν}\,\theta e^{-i\varphi}$
3 2 2 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}^2\,\theta e^{2i\varphi}$
3 2 2 $\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\sigma\rho^2 e^{-\rho/3}\,\text{ημ}^2\,\theta e^{-2i\varphi}$

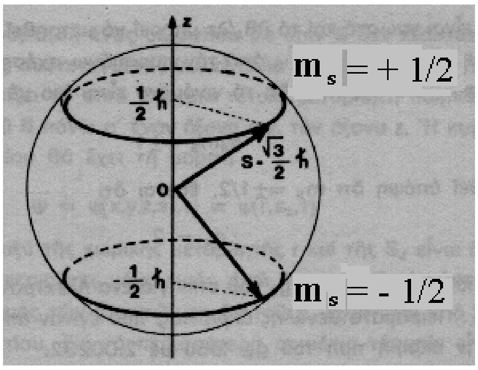
41. Πίνακας αποτελεσμάτων για τις τρεις πρώτες ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου, όπου έχει τεθεί : $r_1 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$, $\rho = r/r_1$, $\sigma = (1/r_1)^{3/2}$.



ΕΙΚ. 42. Πολικό διάγραμμα του Θ(θ), που καθορίζει την γωνιακή εξάρτηση της πυκνότητας πιθανότητας $\psi\psi^*$



ΕΙΚ. 43. Διατομές των κυμάτων των ηλεκτρονίων κατά την ακτινική διεύθυνση για τέσσερις καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου.



ΕΙΚ. 44. Οι δύο προβολές του spin στον άξονα z.

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΙΣ ΣΤΟ INTERNET (ΓΙΑ ΤΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ ΤΩΝ ΦΥΣΙΚΩΝ).

1) hhtp://th.physik.uni-frankfurt.de/
(εκτός των άλλων υπάρχει η δυνατότητα να κατεβάσετε φωτογραφίες, γκραβούρες και σκίτσα επιστημόνων).
2) hhtp://maths.tcd.ie/pub/histmath/people/newton
(πλούσιο υλικό για την ζωή και το έργο του Newton. Αξιοποίηση στη διδασκαλία της Φυσικής του Λυκείου).
3) hhtp://physics.nist.gov/genint/time/
(πληροφορίες για τον χρόνο, (ιστορικό,συσκευές μέτρησης,ζώνες ώρας,…).
4) hhtp://physics.umd.edu/deptinfo/facilities/lecdem/
(εντυπωσιακά πειράματα Φυσικής για την τάξη ή το εργαστήριο).
5) hhtp://physics.bu.edu/~duffy/
(εντυπωσιακά πειράματα Φυσικής για την τάξη ή το εργαστήριο, ιδέες για πειράματα με απλά μέσα και μοντελοποιήσεις φαινομένων).
6) hhtp://wwwcn.cern.ch/
(μια συλλογή υλικού για τον Newton. Σύνδεση με άλλες σχετικές πηγές).
7) hhtp://members.aol.com/voraze/
(πύραυλοι και μοντέλα πυραύλων).
8) hhtp://curtin.edu.au/curtin/dept/phys-sci/
(μαθήματα Φυσικής με Η/Υ).
9) hhtp://es.rice.edu:80/es/humsoc/galileo/
(η ζωή και το έργο του Γαλιλαίου).
10) hhtp://mip.berkeley.edu/physics/
(πειράματα φυσικής).
11) hhtp://info.itp.berkeley.edu/
(προβλήματα φυσικής με πεδίο εμπειρικής αναφοράς την καθημερινή πραγματικότητα και οι λύσεις τους).
12) hhtp://krev.com/
(σελίδα από την οποία μπορείτε να πάρετε demo εκδόσεις προγραμμάτων φυσικής).
13) hhtp://colorado.edu/physics/2000/
(προγράμματα προσομοίωσης στην φυσική).
14) hhtp://physics.umd.edu/rgroups/
(διδακτική φυσικής).
15) hhtp://www.treasure-troves.com/
(διάφορα θέματα Φυσικής).
16) hhtp://hep.physics.uch.gr/
(Ελληνική εταιρεία σπουδών Φυσικής υψηλών ενεργειών).
17) hhtp://www.explorescience.com/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
18) hhtp://www.spin.gr/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).

19) hhttp://www.msu.edu/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
20) hhttp://www.control.co.kr/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
21) hhttp://www.its.caltech.edu/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
22) hhttp://webphysics.ph.msstate.edu/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
23) hhttp://www.sc.ehu.es/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
24) hhttp://winger.byu.edu/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
25) hhttp://www.bekkoame.ne.jp/
(διάφορα θέματα φυσικής-προσομοιώσεις).
26) hhttp://leandros.chem.demokritos.gr/labs/
(προσομοιώσεις στην Φυσική-Χημεία)
27) hhttp://physics.uch.gr/
(διάφορα θέματα φυσικής).
28) hhttp://physics.about.com/
(διάφορα θέματα φυσικής).
29) hhttp://physicsweb.org/TIPTOP/
(μια πολύ σημαντική διεύθυνση του Internet για όλα τα θέματα Φυσικής,από πολλά μέρη του κόσμου).
30) hhttp:// chem.salve.edu
(προσομοιώσεις στην Φυσική-Χημεία).
31) hhttp://physics.about.com/cs/quantumphysics/
(θέματα κβαντομηχανικής).
32) hhttp://www.studyweb.com/links/662.html
(θέματα κβαντομηχανικής αλλά και φυσικής γενικότερα).
33) hhttp://sparc.airtime.co.uk/users/station/m-worlds.faq
(θέματα κβαντομηχανικής αλλά και φυσικής γενικότερα).
34) hhttp://members.aol.com/roblap/phy.html
(θέματα κβαντομηχανικής αλλά και φυσικής γενικότερα).
35) hhttp://www.unifiedreality.com
(θέματα κβαντομηχανικής αλλά και φυσικής γενικότερα).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1) Κβαντική Φυσική και πραγματικότητα (John Gribbin)
2) Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (Feynman)
3) Η θεωρία των πάντων-Υπερχορδές (Paul Davies)
4) Το χρονικό του χρόνου (St. Hawking)
5) Το είναι και το γίγνεσθαι (Ευτ. Μπιτσάκη)
6) Μαθήματα Μηχανικής (Κ.Η.Σύρος)
7) Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική (Αντ. Στρέκλας)
8) Quantum Mechanics (Jasprit Singh)
9) Σύντομη Κβαντική Μηχανική (Γ. Βουδούρη-Α. Μπαλτά)
10) Μαθηματική θεμελίωση της Κβαντομηχανικής (Α.Δ. Γιαννούση)
11) Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική (Χρ.Γ. Γεωργαλά)
12) Μαθήματα Ατομικής Φυσικής-Φασματοσκοπίας (Αλ. Γ. Θεοδοσίου)
13) Θεωρητική Μηχανική (Α.Σ. Κυριάκης)
14) Theory of Quanta (Iwo Bialynicki-Birula)
15) Μαθήματα Αναλυτικής Μηχανικής (Γ.Α. Κατσιάρη)
16) Κβαντομηχανική Ι,ΙΙ (Στεφ. Τραχανάς)
17) K.W. Ford (Κλασσική και Σύγχρονη Φυσική)
18) Halliday-Resnick (Φυσική)
19) Σύγχρονη Φυσική (A. Beiser)
20) Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική (Γ.Ι. Ανδριτσόπουλος)
21) Μοριακή Κβαντική Φυσική (P.W. Atkins)

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Σελ.