κεφάλαιο

7

Ο ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

Εισαγωγή

Ο αρμονικός ταλαντωτής είναι, βεβαίως, το πιο «κλασικό» από όλα τα προβλήματα της κλασικής μηχανικής. Η σχετική θεωρία είναι πολύ απλή. Αν ένα σώμα μάζας m υπόκειται σε μια δύναμη

$$F = -kx \tag{7.1}$$

που είναι ανάλογη της απομάκρυνσης από το ελκτικό κέντρο στο $x = 0$, τότε η εξίσωση του Νεύτωνα θα γράφεται ως

$$m\ddot{x} = -kx \;\Rightarrow\; \ddot{x} + \omega^2 x = 0, \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

και η λύση της θα έχει την ημιτονική μορφή

$$x(t) = A\,\cos(\omega t + \phi) \tag{7.2}$$

που αντιπροσωπεύει μια *αρμονική ταλάντωση* του σωματιδίου με συχνότητα $\omega = \sqrt{k/m}$ και περίοδο

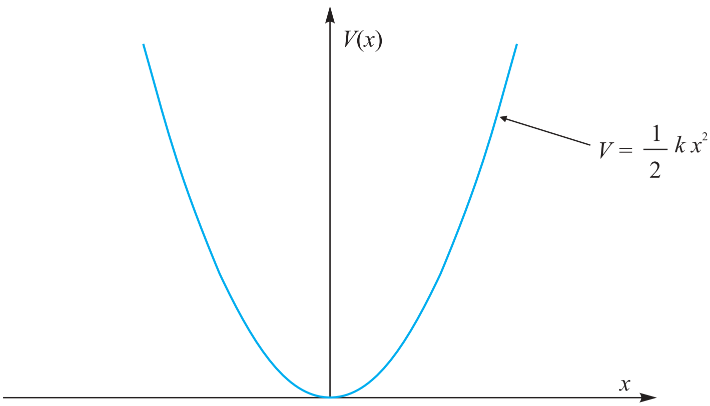
$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$$

που είναι ανεξάρτητη από το *πλάτος* της ταλάντωσης, δηλαδή τη σταθερά A στη λύση (7.2).

Η δύναμη (7.1) απορρέει από ένα δυναμικό $V(x)$ που προσδιορίζεται από τη γνωστή σχέση

$$F = -kx = -\frac{dV}{dx} \;\Rightarrow\; V = \frac{1}{2}kx^2$$

και είναι γνωστό ως *παραβολικό δυναμικό* ή *δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή* και με χαρακτηριστική μορφή όπως αυτή του Σχήματος 7.1.



ΣΧΗΜΑ 7.1: Το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή.

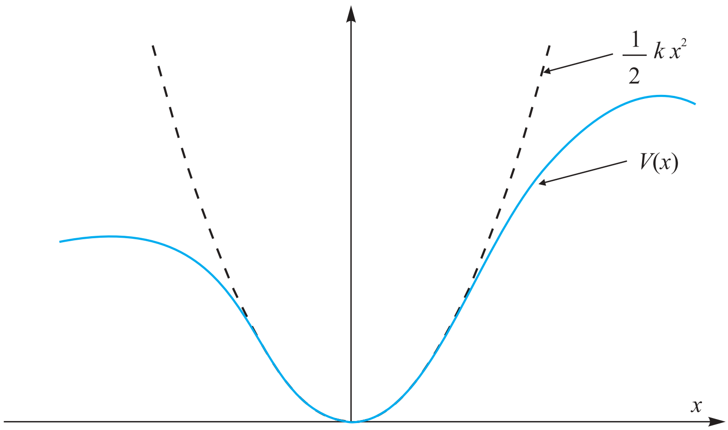
Η σπουδαιότητα του παραβολικού δυναμικού οφείλεται στο γεγονός ότι αποτελεί μια πολύ καλή προσέγγιση ενός τυχόντος δυναμικού στη *γειτονιά ενός σημείου ευσταθούς ισορροπίας του*. Πράγματι, υποθέστε ότι μας δίνεται ένα τυχόν μονοδιάστατο δυναμικό $V(x)$ που έχει ένα *ελάχιστο*, δηλαδή ένα *σημείο ευσταθούς ισορροπίας*, στο $x = 0$ στο οποίο επιλέξαμε να τοποθετήσουμε και την αρχή του σχετικού άξονα. Αν αναπτύξουμε τώρα τη συνάρτηση $V(x)$ σε δυναμοσειρά Taylor γύρω από το $x = 0$, θα έχουμε

$$V(x) = V(0) + V'(0)x + \frac{1}{2}V''(0)x^2 + \cdots \tag{7.3}$$

Όμως αφού το $x = 0$ είναι σημείο ισορροπίας, θα είναι $V'(0) = 0$ ενώ θα είναι επίσης $V''(0) = k > 0$ αφού πρόκειται για ένα τοπικό ελάχιστο της $V(x)$. Επιπλέον, μια και η στάθμη αναφοράς της δυναμικής ενέργειας μπορεί να επιλεγεί κατά βούληση, τη διαλέγουμε έτσι ώστε να είναι $V(0) = 0$, οπότε η (7.3) γράφεται τελικά ως

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \cdots$$

όπου οι ανώτερες δυνάμεις στο ανάπτυγμα μπορούν να αμεληθούν για μικρά x —δηλαδή για *μικρές ταλαντώσεις* γύρω από το σημείο ισορροπίας— και έτσι επιζεί τελικά μόνο ο «παραβολικός όρος» και μας παρέχει μια ικανοποιητική προσέγγιση του αρχικού δυναμικού στη γειτονιά του ελαχίστου του (Σχ. 7.2).



Σχημα 7.2: Στη γειτονιά του ελαχίστου του κάθε δυναμικό $V(x)$ μπορεί να προσεγγιστεί από το δυναμικό ενός αρμονικού ταλαντωτή.

Η *παραβολική προσέγγιση* –όπως είναι εύλογο να αποκληθεί η παραπάνω διαδικασία– βρίσκει άμεση αξιοποίηση στη μελέτη της *δονητικής κίνησης* των διατομικών μορίων, όπως θα δούμε αργότερα.

1. *Λύση της εξίσωσης Schrödinger*

Για τον κβαντομηχανικό χειρισμό του αρμονικού ταλαντωτή η εξίσωση του Νεύτωνα θα αντικατασταθεί, βεβαίως, από την *εξίσωση Schrödinger*

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

η οποία για $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ παίρνει τη μορφή

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi = 0 \tag{7.4}$$

και το αναμενόμενο αποτέλεσμα από τη λύση της είναι η *κβάντωση της ενέργειας*, εφόσον και στο αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα η κίνηση είναι πάντα *δέσμια*. Θα παρουσιάσουμε τη διαδικασία επίλυσης της (7.4) σε *τέσσερα* βασικά βήματα.

ΒΗΜΑ 1: *Διαστατική απλοποίηση της εξισώσεως*

Ένα πρώτο βασικό βήμα για τη λύση τής (7.4) είναι να απλοποιήσουμε τη μορφή της χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της *διαστατικής ανάλυσης*. Η βασική ιδέα είναι απλή. Εφόσον οι αριθμητικές τιμές των τριών παραμέτρων $\hbar, m$ και ω εξαρτώνται από το σύστημα των τριών βασικών μονάδων L, M, T που χρησιμοποιούμε, μπορούμε πάντα –με κατάλληλη εκλογή αυτών των βασικών μονάδων– να τους δώσουμε οποιαδήποτε αριθμητική τιμή θέλουμε και, ειδικότερα, *μπορούμε να τις κάνουμε και τις τρεις μονάδα*. Μπορούμε δηλαδή να θέσουμε στην εξίσωση Schrödinger

$$\hbar = m = \omega = 1$$

και αφού τη λύσουμε σε αυτή την απλοποιημένη –και *αδιάστατη* πλέον– γραφή να επαναφέρουμε την εξάρτηση από τα $\hbar, m$ και ω στα τελικά αποτελέσματα.

Ας αφήσουμε όμως εκκρεμές για την ώρα το θέμα της «διαστατικής αποκατάστασης» και ας δούμε πώς λύνεται η διαστατικά απλοποιημένη εξίσωση Schrödinger

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0 \tag{7.5}$$

της οποίας η μορφή είναι –αν μη τι άλλο– πολύ «φιλικότερη» από την αρχική.

ΒΗΜΑ 2: *Αναζήτηση των λύσεων που μηδενίζονται στο άπειρο: Η «αφαίρεση» του ασυμπτωτικού παράγοντα*

Δεδομένου ότι αναζητούμε λύσεις που μηδενίζονται στο $\pm\infty$, το αναγκαίο επόμενο βήμα είναι να μελετήσουμε την (7.5) στη γειτονιά του απείρου για να δούμε πώς συμπεριφέρεται η λύση εκεί και να επιλέξουμε εκείνη την τοπική λύση –σίγουρα κάποιο φθίνον εκθετικό– που θα μας εξασφαλίσει τον επιζητούμενο μηδενισμό. Πράγματι για μεγάλα x –όπου το $2E$ είναι αμελητέο μπροστά στο x^2– η (7.5) παίρνει την *ασυμπτωτική μορφή*

$$\psi''_\infty - x^2\psi_\infty = 0 \tag{7.6}$$

όπου ο δείκτης ∞ στο ψ είναι για να μας θυμίζει ότι πρόκειται όχι για την πλήρη λύση ψ αλλά για την οριακή μορφή της για μεγάλα x.

Θεωρώντας εύλογο ότι η λύση της (7.6) –για μεγάλα x πάντα– θα είναι ένα *εκθετικό*, το απλούστερο που μπορούμε να σκεφτούμε είναι το

$$\psi_\infty = e^{-\lambda x^2} \tag{7.7}$$

το οποίο, λόγω του x^2 στον εκθέτη, μας εξασφαλίζει ότι η λύση θα μηδενίζεται τόσο στο $+\infty$ όσο και στο $-\infty$. Με αυτό το σκεπτικό θα μπορούσαμε, βεβαίως, να επιλέξουμε μια τυχούσα άρτια δύναμη του x στο εκθετικό, αλλά η x^2 είναι όχι μόνο η απλούστερη αλλά και η *σωστή*, όπως θα δούμε αμέσως. Γι' αυτόν τον σκοπό εισάγουμε την (7.7) στην (7.6) και παίρνουμε την εξίσωση

$$(4\lambda^2 x^2 - 2\lambda)e^{-\lambda x^2} - x^2 e^{-\lambda x^2} = 0,$$

η οποία όμως δεν οφείλει να ικανοποιείται για όλα τα x αλλά μόνο για τα μεγάλα x εφόσον μόνο εκεί απαιτούμε να είναι λύση η (7.7).

Όμως για μεγάλα x είναι $4\lambda^2 x^2 \gg 2\lambda$ και έτσι η εξίσωση καταλήγει στην

$$(4\lambda^2 x^2 - x^2)e^{-\lambda x^2} = 0$$

που ικανοποιείται αν $\lambda = \pm 1/2$ με προφανή φυσική εκλογή την $\lambda = 1/2$ αφού η αρνητική τιμή του λ αντιστοιχεί σε λύση $-\psi_\infty = e^{x^2/2}-$ που όχι μόνο δεν μηδενίζεται στο άπειρο αλλά αυξάνεται απεριόριστα εκεί.

Με δεδομένο τώρα ότι οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή θα παίρνουν στη γειτονιά του απείρου την εκθετικά φθίνουσα μορφή

$$\psi_\infty(x) = e^{-x^2/2}$$

η λογικά επόμενη «κίνηση» είναι να γράψουμε τη ζητούμενη *πλήρη λύση* $\psi(x)$ ως ένα *γινόμενο* της μορφής

$$\psi(x) = \psi_\infty(x)H(x) = e^{-x^2/2}H(x) \tag{7.8}$$

στο οποίο ο πρώτος παράγοντας –το *ασυμπτωτικό εκθετικό*– θα εξασφαλίζει τον επιζητούμενο μηδενισμό της λύσης στο $\pm\infty$ ενώ ο δεύτερος όρος –η *συμπληρωματική συνάρτηση* $H(x)$– θα της δίνει την αναμενόμενη *κυματοειδή μορφή*. Δηλαδή αυτή που αρμόζει σε δέσμιες καταστάσεις, εκ των οποίων η θεμελιώδης πρέπει να έχει *μηδέν κόμβους*, η πρώτη διεγερμένη *έναν*, η δεύτερη *δύο* και ούτω καθεξής μέχρι την τυχούσα νιοστή διεγερμένη κατάσταση που πρέπει να έχει *n κόμβους*. Επιπλέον, η συνάρτηση $H(x)$ θα πρέπει να μην αυξάνεται στο άπειρο πιο γρήγορα από ό,τι φθίνει το ασυμπτωτικό εκθετικό $e^{-x^2/2}$ ώστε να μην ακυρωθεί εκ των υστέρων ο επιζητούμενος μηδενισμός της λύσης στο άπειρο. Η πιο προφανής περίπτωση συναρτήσεως $H(x)$ που ανταποκρίνεται σε αυτές τις προδιαγραφές –να μην «εξουδετερώνει» το ασυμπτωτικό εκθετικό για μεγάλα x και να έχει έναν δεδομένο αριθμό *ριζών* ίσο με n– είναι, βεβαίως, ένα *πολυώνυμο βαθμού n*. Κάνουμε λοιπόν την υπόθεση (απολύτως εύλογη από φυσικής πλευράς) ότι η συμπληρωματική συνάρτηση $H(x)$ στην (7.8) θα είναι τελικά ένα *πολυώνυμο* $H_n(x)$ του οποίου ο βαθμός n θα παίρνει όλες τις τιμές από $n = 0$ (θεμελιώδης στάθμη) έως $n = \infty$, εφόσον αναμένουμε –λόγω της μορφής του δυναμικού– ότι το πρόβλημα θα έχει ένα *άπειρο πλήθος δέσμιων καταστάσεων*.

Από μαθηματικής πλευράς, βεβαίως, η (7.8) δεν είναι παρά μια *αλλαγή εξαρτημένης μεταβλητής* –με παλιά μεταβλητή την $\psi(x)$ και νέα την $H(x)$– η οποία θα πρέπει να εισαχθεί στην αρχική εξίσωση (7.5) για να μας δώσει μια νέα εξίσωση για τη νέα άγνωστη συνάρτηση $H(x)$. Πράγματι, κάνοντας αυτή την αντικατάσταση, παίρνουμε

$$H'' - 2x\,H' + (2E-1)H = 0 \tag{7.9}$$

και απομένει να διερευνήσουμε αν αυτή η εξίσωση διαθέτει όντως πολυωνυμικές λύσεις –όπως υποθέσαμε– ή όχι.

ΒΗΜΑ 3: *Αναζήτηση πολυωνυμικών λύσεων*

Για τον αναγνώστη που έχει παρακολουθήσει ένα εισαγωγικό μάθημα διαφορικών εξισώσεων, η «θέα» μιας εξισώσεως όπως η (7.9) θα του προκαλέσει μάλλον ανάμικτα αισθήματα. Θα διαπιστώσει κατ' αρχάς ότι πρόκειται για μια *γραμμική* (και ομογενή) *εξίσωση*, το οποίο είναι σίγουρα καθησυχαστικό δεδομένου ότι οι *μη γραμμικές εξισώσεις* μόνο σε ελάχιστες περιπτώσεις μπορούν να επιλυθούν ακριβώς και με έναν συστηματικό τρόπο.

Αμέσως μετά, όμως, θα παρατηρήσει ότι το καλύτερο δεν έχει συμβεί! Παρ' ότι γραμμική, η (7.9) *δεν είναι* μια εξίσωση με σταθερούς συντελεστές που θα μπορούσε να λυθεί αμέσως με τη γνωστή μέθοδο της *εκθετικής αντικατάστασης*. Είναι μια εξίσωση με *μεταβλητούς συντελεστές* και –δυστυχώς (!)– η μόνη γενική μέθοδος λύσης τέτοιων εξισώσεων είναι η *μέθοδος των δυναμοσειρών*. Όπου το «δυστύχημα» έγκειται στην εμπειρική διαπίστωση ότι ελάχιστοι φοιτητές (και όχι μόνο) αισθάνονται ότι μπορούν πράγματι να χρησιμοποιήσουν αυτή τη μέθοδο για τη λύση ενός προβλήματος έστω και λίγες βδομάδες μετά τη διδασκαλία του σχετικού μαθήματος!

Ενόψει των παραπάνω, μια αλλαγή τακτικής είναι μάλλον αναγκαία. Θα καλέσουμε τον αναγνώστη να επιχειρήσει τη λύση της (7.9) με την αρχαιότερη όλων των μεθόδων. Τη μέθοδο της *μέγιστης αθωότητας*! Εκείνη που χρησιμοποιούν ανέκαθεν οι άνθρωποι όταν δεν ξέρουν τίποτα για ένα πρόβλημα αλλά πρέπει, παρ' όλα αυτά, να το λύσουν!

Μας δίνεται λοιπόν η εξίσωση (7.9) και το μόνο που γνωρίζουμε γι' αυτήν είναι ότι *ενδέχεται* να έχει πολυωνυμικές λύσεις, όπως φαίνεται εύλογο από φυσικής πλευράς. Τι θα κάναμε για να διερευνήσουμε αυτό το ενδεχόμενο με τον πιο απλοϊκό τρόπο; Απλούστατα θα δοκιμάζαμε αν όντως η (7.9) έχει λύσεις τέτοιου τύπου αρχίζοντας με την απλούστερη από όλες που είναι το πολυώνυμο μηδενικού βαθμού, δηλαδή μια σταθερά. Ας θέσουμε λοιπόν $H_0 = c =$ σταθερά στην (7.9) και ας δούμε τι γίνεται. Θα είναι

$$0 - 2x \cdot 0 + (2E-1)\cdot c = 0$$

και δεδομένου ότι $c \neq 0$ η εξίσωση αυτή ικανοποιείται μόνο αν

$$E = E_0 = 1/2$$

ενώ η αντίστοιχη λύση, βάσει της (7.8), θα γράφεται ως

$$\psi_0(x) = ce^{-x^2/2}$$

όπου η σταθερά c έμεινε, βεβαίως, απροσδιόριστη διότι τόσο η εξίσωση (7.9) όσο και η αρχική εξίσωση (7.5) είναι *ομογενείς* και επομένως οι λύσεις τους αναμένεται να περιέχουν μια αυθαίρετη *πολλαπλασιαστική σταθερά*. Η οποία όμως υπολογίζεται αμέσως από τη *συνθήκη κανονικοποίησης* $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ και το αποτέλεσμα (για $\lambda = 1$) −γνωστό ήδη από το Κεφ. 3, σελ. 130− είναι $c = \pi^{-1/4}$, οπότε η *κανονικοποιημένη λύση* θα γράφεται ως

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-x^2/2}.$$

Ο αναγνώστης ίσως να μην έχει συνειδητοποιήσει ακόμα ότι με *πρακτικά μηδενική προσπάθεια* έχει στα χέρια του ένα σπουδαίο φυσικό αποτέλεσμα. Έχει ήδη βρει τόσο την ενέργεια ($E_0 = 1/2$) όσο και την κυματοσυνάρτηση ($\psi_0 = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}$) της πιο σημαντικής από όλες τις καταστάσεις τού αρμονικού ταλαντωτή: της θεμελιώδους καταστάσεώς του!

Ενθαρρυμένοι από αυτή την επιτυχία ας πάμε λοιπόν στο επόμενο βήμα. Να δοκιμάσουμε μήπως η (7.9) διαθέτει ως λύση και ένα πολυώνυμο πρώτου βαθμού, δηλαδή της μορφής $H_1(x) = ax + b$, όπου a, b αυθαίρετες σταθερές. Η (7.9) θα δίνει τώρα

$$0 - 2x \cdot a + (2E - 1)(ax + b) = 0 \tag{7.10}$$
$$\Rightarrow \quad (2E - 1)b + (2E - 3)ax = 0 \tag{7.11}$$

που ικανοποιείται μόνο αν[(*)]

$$(2E - 1)b = 0, \qquad (2E - 3)a = 0,$$

από όπου προκύπτει αμέσως ότι πρέπει να είναι $E = 3/2$, $b = 0$ και a τυχόν. (Το ενδεχόμενο να είναι $b \neq 0 \Rightarrow E = 1/2$ απορρίπτεται γρήγορα διότι τότε η δεύτερη εξίσωση θα έδινε $a = 0$ και το πολυώνυμο δεν θα ήταν πρώτου βαθμού, όπως υποθέτουμε, αλλά μηδενικού. Θα παίρναμε δηλαδή ξανά την προηγούμενη λύση.)

Βρήκαμε λοιπόν ότι αν η ενέργεια του σωματιδίου παίρνει την τιμή

$$E_1 = \frac{3}{2},$$

[(*)] Υπενθυμίζουμε ότι ένα πολυώνυμο μηδενίζεται εκ ταυτότητος μόνο όταν οι συντελεστές όλων του των δυνάμεων μηδενίζονται. Η ικανοποίηση εξισώσεων όπως η (7.10) επιβάλλει λοιπόν να φέρουμε μαζί −όπως στην (7.11)− όλους τους σταθερούς όρους, όλα τα x, όλα τα x^2 κ.ο.κ., και να εξισώσουμε με μηδέν τους συντελεστές τους.

τότε η εξίσωση (7.9) διαθέτει μια πολυωνυμική λύση πρώτου βαθμού –την $H_1(x) = ax$– με αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση την

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\, xe^{-x^2/2}$$

στην οποία η αυθαίρετη σταθερά a υπολογίστηκε από τη συνθήκη κανονικοποίησης και βγήκε ίση με $a = \sqrt{2/\sqrt{\pi}}$.

Το γεγονός ότι δοκιμάσαμε ως λύση το τυχόν πρωτοβάθμιο πολυώνυμο $H_1 = ax + b$ και προέκυψε υποχρεωτικά από την εξίσωση ότι θα είναι $b = 0$ ($\Rightarrow H_1(x) = ax$), δεν πρέπει να περάσει απαρατήρητο. Διότι πρόκειται για ένα αποτέλεσμα που θα έπρεπε να αναμένεται, αφού το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή έχει *κατοπτρική συμμετρία* και επομένως οι λύσεις του θα είναι *εναλλάξ άρτιες και περιττές*, όπως ήδη σημειώσαμε στο πέμπτο κεφάλαιο, σελ. 229. Και δεδομένου ότι ο εκθετικός παράγοντας στις κυματοσυναρτήσεις είναι άρτιος, η εναλλαγή του τύπου συμμετρίας θα πραγματοποιείται μέσω των πολυωνύμων $H_n(x)$ τα οποία, επομένως, θα πρέπει να είναι άρτια ή περιττά ανάλογα με τον βαθμό τους: Τα άρτιου βαθμού θα είναι άρτια και τα περιττού περιττά. Το οποίο σημαίνει πρακτικά ότι τα άρτιου βαθμού πολυώνυμα ($n = 0, 2, 4, \ldots$) θα περιέχουν μόνο τις άρτιες δυνάμεις του x και τα περιττού βαθμού ($n = 1, 3, \ldots$) μόνο τις περιττές. Έτσι, λοιπόν, στην περίπτωση που εξετάσαμε πριν ($n = 1$), θα μπορούσαμε να είχαμε πει εξαρχής ότι θα είναι $H_1(x) = ax$ –αφού το πολυώνυμο πρέπει να περιέχει μόνο περιττές δυνάμεις– και επίσης να θέσουμε $a = 1$, για λόγους απλότητας, αφού η εξίσωσή μας είναι ομογενής και επομένως δεν αναμένεται να προσδιορίσει τη σταθερά a. Θέτοντας $H_1 = x$ στην (7.9) παίρνουμε

$$0 - 2x \cdot 1 + (2E - 1)x = 0 \;\Rightarrow\; (2E - 3)x = 0 \;\Rightarrow\; E = E_1 = 3/2,$$

από όπου βλέπετε αμέσως ότι η εκ των προτέρων χρήση της συμμετρίας του προβλήματος δίνει τη ζητούμενη δεύτερη ιδιοτιμή σε λιγότερο από μία γραμμή.

Η εξέταση μιας ακόμα περιπτώσεως –της $n = 2$– θα απομακρύνει κάθε αμφιβολία ότι οι λύσεις που ψάχνουμε θα είναι πάντα του πολυωνυμικού τύπου. Για $n = 2$ λοιπόν θα είναι υποχρεωτικά

$$H_2(x) = x^2 + a \tag{7.12}$$

όπου –πέρα από τη συμμετρία του πολυωνύμου, που επιτρέπει μόνο τις άρτιες δυνάμεις του x– χρησιμοποιήσαμε και το γεγονός ότι η εξίσωσή μας είναι ομογενής για να θέσουμε τον συντελεστή τού x^2 ίσο με τη μονάδα διαιρώντας με τον συντελεστή που τυχόν υπήρχε. Εισάγοντας την (7.12) στην (7.9) παίρνουμε

$$
\begin{aligned}
& 2-2x(2x)+(2E-1)(x^2+a)=0 \\
\Rightarrow\quad & (2E-5)x^2+\big((2E-1)a+2\big)=0 \\
\Rightarrow\quad & 2E-5=0, \qquad (2E-1)a+2=0 \\
\Rightarrow\quad & E=\frac{5}{2}, \qquad a=-\frac{2}{2E-1}=-\frac{1}{2} \\
\Rightarrow\quad & H_2(x)=x^2-\frac{1}{2}\sim 2x^2-1 \\
\Rightarrow\quad & \psi_2(x)=N(2x^2-1)e^{-x^2/2}
\end{aligned}
$$

όπου στα δύο τελευταία βήματα κάναμε ξανά χρήση του γεγονότος ότι οι εξισώσεις μας είναι ομογενείς, ώστε να γράψουμε το πολυώνυμο H_2 στην απλούστερη μορφή $2x^2-1$, αντί της $x^2-(1/2)$, αλλά και να εισαγάγουμε στην τελική μορφή της λύσης ψ_2 έναν παράγοντα κανονικοποίησης N ο οποίος θα προσδιοριστεί βεβαίως από την ομώνυμη συνθήκη.

Δεν χρειάζεται περισσότερο από μία ματιά στις ιδιοτιμές που βρήκαμε

$$
E_0=\frac{1}{2}, \qquad E_1=\frac{3}{2}, \qquad E_2=\frac{5}{2}
$$

για να μπει κανείς στον πειρασμό να υποθέσει ότι για τυχόν n —επαναλαμβάνουμε ότι το n είναι ο βαθμός του αντίστοιχου πολυωνύμου— θα είναι

$$
E_n=\frac{\text{περιττός}}{2}=\frac{2n+1}{2}=n+\frac{1}{2}, \qquad n=0,1,2,\ldots. \tag{7.13}
$$

Αν δεχτούμε ως *γεγονός* ότι η (7.9) έχει πράγματι πολυωνυμικές λύσεις οποιουδήποτε βαθμού n, τότε είναι απλούστατο να αποδείξουμε ότι αυτό μπορεί να συμβεί μόνο αν η παράμετρος E που εμφανίζεται στην εξίσωση παίρνει τη διάκριτη ακολουθία τιμών (7.13). Η ιδέα είναι πολύ απλή. Έστω ότι η εξίσωση (7.9), δηλαδή η

$$
H''-2xH'+(2E-1)H=0 \tag{7.14}
$$

ικανοποιείται από ένα πολυώνυμο βαθμού n της γενικής μορφής

$$
H(x)=a_0+\cdots+a_nx^n.
$$

Αφού όμως η εξίσωση αυτή ικανοποιείται από το πολυώνυμο $H(x)$ *για κάθε* x, θα ικανοποιείται σίγουρα και για μεγάλα x όπου θα είναι

$$
H(x)\sim x^n \qquad (\text{μεγάλα } x)
$$

αφού στην περιοχή αυτή οι χαμηλότερες δυνάμεις τού x είναι *αμελητέες μπροστά στη* x^n. Λέμε δηλαδή ότι μια προφανής *αναγκαία συνθήκη* για να έχει η εξίσωσή μας μια πολυωνυμική λύση βαθμού n είναι να ικανοποιείται η εξίσωση, για μεγάλα x, από τη *μέγιστη δύναμη* x^n αυτής της πολυωνυμικής λύσης. Δεν έχουμε λοιπόν παρά να εισαγάγουμε στην (7.14) τη δύναμη x^n και να απαιτήσουμε να ικανοποιείται η εξίσωση *για μεγάλα* x. Όπου η συνθήκη *«για μεγάλα* x*»* σημαίνει, βεβαίως, ότι όταν εισαγάγουμε το x^n στην (7.14) θα πρέπει να κρατήσουμε μόνο τη *μεγαλύτερη* από τις εμφανιζόμενες δυνάμεις τού x διότι αυτή είναι που *θα κυριαρχήσει* σε αυτό το όριο. Πράγματι, θέτοντας $H \sim x^n$ στην (7.14) θα έχουμε

$$n(n-1)x^{n-2} - 2nx^n + (2E-1)x^n = 0$$

και αγνοώντας τη δύναμη x^{n-2} –ως αμελητέα για μεγάλα x μπροστά στη x^n– παίρνουμε

$$\big(-2n + (2E-1)\big)x^n = 0 \;\Rightarrow\; E = n + \frac{1}{2}$$

όπως ακριβώς θέλαμε να δείξουμε.

Στην πραγματικότητα, η εφαρμογή αυτής της *αναγκαίας συνθήκης* –να ικανοποιείται η εξίσωση από τη μέγιστη δύναμη του πολυωνύμου, για μεγάλα x– είναι τόσο απλή, ώστε μετά από λίγη *εξοικείωση* μπορεί να υπολογίζει κανείς τις ζητούμενες *ιδιοτιμές* με *απλή εποπτεία της εξίσωσης*. Η εξοικείωση συνίσταται απλώς στην «καλή συνήθεια» να εντοπίζει κανείς από την αρχή τους όρους της εξίσωσης που θα δώσουν τη μέγιστη δύναμη του x και να αντικαθιστά το x^n μόνο σε αυτούς. Στην παρούσα περίπτωση, παραδείγματος χάριν, είναι φανερό ότι η μέγιστη δύναμη θα προέλθει μόνο από τους όρους $-2xH'$ και $(2E-1)H$, οπότε η αντικατάσταση $H \sim x^n$ θα δώσει το ζητούμενο αποτέλεσμα «διά γυμνού οφθαλμού».

Τα αποτελέσματα στα οποία καταλήξαμε μπορούν να συνοψιστούν ως εξής: Στο σύστημα μονάδων όπου $\hbar = m = \omega = 1$ –το λεγόμενο *φυσικό σύστημα μονάδων του προβλήματος*– οι *ενεργειακές ιδιοτιμές* του αρμονικού ταλαντωτή θα δίνονται από τον τύπο

► $$E_n = n + \frac{1}{2}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

και οι αντίστοιχες *ιδιοσυναρτήσεις* από τον τύπο

► $$\psi_n(x) = e^{-x^2/2} H_n(x)$$

όπου $H_n(x)$ πολυώνυμα βαθμού n, άρτια ή περιττά ανάλογα με τον βαθμό τους. Σύμφωνα με τα προηγούμενα, τα πολυώνυμα $H_n(x)$ ικανοποιούν την εξίσωση

► $$H_n'' - 2xH_n' + 2nH_n = 0$$

που είναι γνωστή στη βιβλιογραφία ως *εξίσωση Hermite* με αντίστοιχη ονομασία για τις πολυωνυμικές λύσεις της (*πολυώνυμα Hermite*).

Το ότι πρόκειται για μια *επώνυμη εξίσωση* –με αντίστοιχες *επώνυμες λύσεις*– δεν έχει, βεβαίως, για μας καμιά σημασία αφού μόλις αποδείξαμε ότι μπορούμε να την αντιμετωπίσουμε εκ των ενόντων χωρίς καμιά προηγούμενη σχετική γνώση.

Τέλος, για διευκόλυνση του αναγνώστη, ας συγκεντρώσουμε σε έναν πίνακα τις πέντε πρώτες *κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις* του αρμονικού ταλαντωτή αφήνοντας στον ίδιο την επαλήθευση της ορθότητάς τους.

ΠΙΝΑΚΑΣ 7.1. *Οι πέντε πρώτες ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή*

$\psi_0(x) = \dfrac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\, e^{-x^2/2}$
$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\dfrac{4}{\pi}}\, x e^{-x^2/2}$
$\psi_2(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}\,\sqrt[4]{\pi}}\,(2x^2-1)e^{-x^2/2}$
$\psi_3(x) = \dfrac{1}{\sqrt{3}\,\sqrt[4]{\pi}}\,(2x^3-3x)e^{-x^2/2}$
$\psi_4(x) = \dfrac{1}{2\sqrt{6}\,\sqrt[4]{\pi}}\,(4x^4-12x^2+3)e^{-x^2/2}$

ΒΗΜΑ 4: *Αποκατάσταση των διαστάσεων*

Ας αρχίσουμε με την έκφραση των ενεργειακών ιδιοτιμών

$$E_n = n + \frac{1}{2}$$

η οποία στις συνήθεις μονάδες δεν μπορεί παρά να παίρνει τη μορφή

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\epsilon$$

όπου ϵ η *φυσική μονάδα ενέργειας του προβλήματος*, δηλαδή ο μοναδικός εκείνος συνδυασμός των $\hbar, m$ και ω που έχει διαστάσεις ενέργειας. Το ότι υπάρχει όντως ένας τέτοιος συνδυασμός και είναι μοναδικός απορρέει, βεβαίως, από το γνωστό «θεμελιώδες θεώρημα» της διαστατικής ανάλυσης που λέει ότι:

Από τρία, διαστατικώς ανεξάρτητα, φυσικά μεγέθη μπορεί πάντα να κατασκευαστεί μονοσήμαντα ένα οποιοδήποτε άλλο με αυθαιρεσία μιας αδιάστατης πολλαπλασιαστικής σταθεράς.

Στην περίπτωσή μας ο συνδυασμός των $\hbar, m$ και ω με διαστάσεις ενέργειας –και πολλαπλασιαστική σταθερά ίση με τη μονάδα– είναι, βεβαίως, ο

$$\epsilon = \hbar\omega,$$

οπότε, σύμφωνα με τα παραπάνω, η έκφραση των ενεργειακών ιδιοτιμών στις συνήθεις μονάδες θα είναι η

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Θα επανέλθουμε στα ερωτήματα που ίσως έχουν γεννηθεί στον αναγνώστη, αφού αποκαταστήσουμε τις συνήθεις μονάδες και στην έκφραση των κυματοσυναρτήσεων. Όπως θα εξηγήσουμε αμέσως, η αποκατάσταση αυτή θα γίνει με την αντικατάσταση

$$\psi(x) \to \frac{1}{\sqrt{a}}\,\psi\!\left(\frac{x}{a}\right) \tag{7.15}$$

όπου $\psi(x)$ η αδιάστατη μορφή που έχουμε βρει και a το *χαρακτηριστικό* (ή φυσικό) *μήκος του προβλήματος*, δηλαδή ο μοναδικός εκείνος συνδυασμός των $\hbar, m$ και ω με διαστάσεις μήκους. Πράγματι, η αντικατάσταση (7.15) εκφράζει αφ' ενός το γεγονός ότι μια μονοδιάστατη κυματοσυνάρτηση έχει φυσική διάσταση $L^{-1/2}$ –εξ ου και ο παράγοντας $1/\sqrt{a}$– και αφ' ετέρου τη γενική απαίτηση να είναι αδιάστατες οι μεταβλητές όλων των μαθηματικών συναρτήσεων –π.χ. $\sin, \cos, \exp$ κ.λπ.– που εμφανίζονται στους φυσικούς τύπους. Το οποίο επιβάλλει, βεβαίως, την αντικατάσταση του x με το x/a.

Όπως πάντα, ο συνδυασμός με τις ζητούμενες διαστάσεις μπορεί να κατασκευαστεί είτε με τη γνωστή συστηματική μέθοδο(*) είτε με συνδυασμό γνωστών τύπων που περιέχουν τα δεδομένα μεγέθη $\hbar, m, \omega$ και το ζητούμενο, δηλαδή εδώ το μήκος a. Ακολουθώντας τη δεύτερη μέθοδο εξισώνουμε τις ομοδιάστατες ποσότητες

$$\hbar\omega = \textit{ενέργεια}, \quad \text{και} \qquad \frac{p^2}{2m} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} = \textit{ ενέργεια}$$

(*) Δηλαδή γράφοντας $a = \hbar^\mu m^\nu \omega^\lambda$ και υπολογίζοντας τους εκθέτες μ, ν, λ από το σύστημα των τριών εξισώσεων που προκύπτουν από την απαίτηση να έχει το δεύτερο μέλος την επιθυμητή διάσταση, π.χ. την $L^1 M^0 T^0 =$ μήκος.

και παίρνουμε $\hbar\omega = \hbar^2/ma^2$, οπότε, λύνοντας ως προς a, θα έχουμε για το ζητούμενο *χαρακτηριστικό μήκος του προβλήματος* την έκφραση

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Ως μια απλή εφαρμογή, ας αποκαταστήσουμε τις συνήθεις μονάδες στην κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης για την οποία βρήκαμε ότι είναι

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\, e^{-x^2/2} \tag{7.16}$$

και επομένως –σύμφωνα με τα προηγούμενα–

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}\, e^{-x^2/2a^2}$$

ή, ισοδύναμα,

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\, e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \tag{7.17}$$

Στην πραγματικότητα, η αποκατάσταση των διαστάσεων στις κυματοσυναρτήσεις όχι μόνο δεν είναι αναγκαία αλλά μάλλον δυσχεραίνει τους υπολογισμούς που είναι πολύ απλούστερο να γίνονται στην αδιάστατη μορφή και να αποκαθίστανται οι συνήθεις μονάδες στα τελικά αποτελέσματα. Ένα σχετικό πρόβλημα είναι το εξής:

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1: Υπολογίστε τις αβεβαιότητες θέσης και ορμής στη θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή.

Λύση: Χρησιμοποιώντας την αδιάστατη μορφή (7.16) –που είναι, βεβαίως, αισθητά απλούστερη της (7.17)– ο υπολογισμός των Δx και Δp είναι απλούστατος και οδηγεί στο αποτέλεσμα

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad \Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

του οποίου η μορφή στις συνήθεις μονάδες δεν μπορεί παρά να είναι η

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}}a, \qquad \Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}}p_0$$

όπου $a(= \sqrt{\hbar/m\omega})$ η *μονάδα μήκους του προβλήματος* και p_0 η αντίστοιχη *μονάδα ορμής*, η οποία κατασκευάζεται πολύ εύκολα ως εξής:

$$p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow p_0 = \frac{\hbar}{a}.$$

Θα είναι, λοιπόν, τελικά

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \qquad \Delta p = \frac{p_0}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$$

ενώ εύκολα μπορεί να διαπιστώσει ο αναγνώστης ότι τα υπολογιστικά πλεονεκτήματα της αδιάστατης γραφής των λύσεων γίνονται πολύ μεγαλύτερα όσο προχωρούμε προς τις ανώτερες ιδιοσυναρτήσεις, των οποίων η μορφή στις συνήθεις μονάδες είναι κυριολεκτικά «αφόρητη».

Απομένει να συζητήσουμε μια απορία που ίσως έχει μείνει αναπάντητη από τα προηγούμενα. Την εξής: κατά την αποκατάσταση των διαστάσεων στις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις μέσω των αντικαταστάσεων

$$E_n \to E_n \epsilon, \qquad \psi_n(x) \to \frac{1}{\sqrt{a}}\, \psi_n\Big(\frac{x}{a}\Big)$$

είχαμε χρησιμοποιήσει ως μονάδες ενέργειας και μήκους τις

$$\epsilon = \hbar\omega \qquad \text{και} \qquad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{7.18}$$

που είναι οι μοναδικοί συνδυασμοί των $\hbar, m$ και ω με τις αντίστοιχες διαστάσεις αλλά και με την πρόσθετη επιλογή να είναι μονάδα ο *αριθμητικός συντελεστής* που θα μπορούσε να συνοδεύει τη σχετική έκφραση. Και το ερώτημα είναι το εξής: γιατί να δώσουμε σε αυτόν τον αριθμητικό συντελεστή την τιμή μονάδα και όχι μια οποιαδήποτε άλλη; Γιατί, παραδείγματος χάριν, να μην επιλέξουμε ως μονάδες ενέργειας και μήκους τις

$$\tilde{\epsilon} = 2\hbar\omega \qquad \text{και} \qquad \tilde{a} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{h}{m\omega}} \tag{7.19}$$

αντί των (7.18); Η απάντηση είναι πολύ απλή. Αν χρησιμοποιούσαμε τις εκφράσεις (7.19) αντί των (7.18), τότε για τις ενεργειακές ιδιοτιμές π.χ. θα είχαμε

$$\widetilde{E}_n = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\, \tilde{\epsilon} = \Big(n + \frac{1}{2}\Big) 2\hbar\omega$$

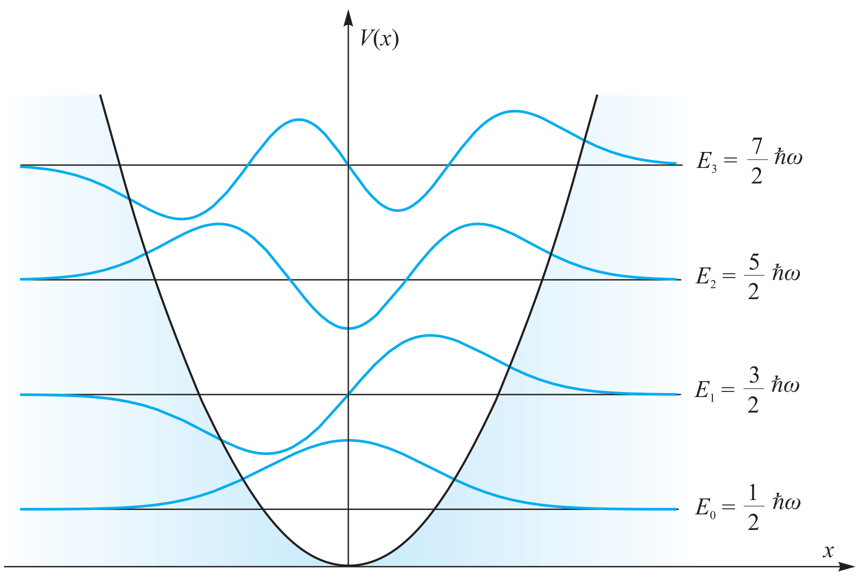
και το αποτέλεσμα αυτό είναι *προφανώς λάθος* διότι για $\hbar = m = \omega = 1$ δίνει $\widetilde{E}_n = 2\big(n + \frac{1}{2}\big)$, το οποίο δεν συμπίπτει με εκείνο που βρήκαμε λύνοντας την εξίσωση Schrödinger γι' αυτές τις «ειδικές» τιμές των παραμέτρων της. Το συμπέρασμα είναι τελείως γενικό: κατά την αποκατάσταση των διαστάσεων οι εκφράσεις των χαρακτηριστικών μονάδων που επιλέγουμε πρέπει να έχουν αριθμητικό συντελεστή ίσο με τη μονάδα ώστε τα αποτελέσματά μας να συμπίπτουν με εκείνα που είχαμε βρει λύνοντας την εξίσωση Schrödinger για μοναδιαίες τιμές τριών βασικών παραμέτρων της.

2. Συζήτηση των αποτελεσμάτων

Κατά την καθιερωμένη πλέον «συνήθειά» μας θα επιχειρήσουμε τώρα μια συστηματική ανάλυση των προηγούμενων αποτελεσμάτων ώστε να αναδειχθεί η φυσική τους σημασία και τα γενικά ή ειδικά χαρακτηριστικά τους. Και αρχίζουμε με τη μορφή των ιδιοσυναρτήσεων.

- *Η μορφή των ιδιοσυναρτήσεων: Συμμετρία κατοπτρισμού και το θεώρημα των κόμβων*

Δεν χρειαζόταν, φυσικά, να έχουμε λύσει το πρόβλημα για να προβλέψουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις θα έχουν τη γενική μορφή του Σχήματος 7.3. Δηλαδή, ότι θα είναι *εναλλάξ άρτιες και περιττές* και ο αριθμός των κόμβων τους θα



Σχημα 7.3: *Οι τέσσερις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή.* Η πρώτη ιδιοσυνάρτηση είναι άρτια με μηδέν κόμβους, η δεύτερη περιττή με έναν κόμβο, η τρίτη πάλι άρτια με δύο κόμβους κ.ο.κ.

αυξάνεται κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από την κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης (μηδέν κόμβοι) προς τις ανώτερες.

Από καθαρά φυσικής πλευράς, η συμμετρία κατοπτρισμού των ιδιοσυναρτήσεων –το γεγονός δηλαδή ότι είναι άρτιες ή περιττές– είναι τελείως εύλογη. Όπως έχουμε τονίσει και αλλού, εφόσον το δυναμικό είναι το ίδιο για θετικά και αρνητικά x, το ίδιο θα πρέπει να συμβαίνει και για φυσικά μετρήσιμες ποσότητες όπως η πυκνότητα πιθανότητας θέσης $P(x)$. Προκειμένου για τις ιδιοσυναρτήσεις ενός τέτοιου προβλήματος, δεν υπάρχει κανένας λόγος να είναι διαφορετική η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στα θετικά ή τα αρνητικά x. Θα πρέπει επομένως να είναι

$$P(-x) = P(x) \;\Rightarrow\; \left|\psi(-x)\right|^2 = \left|\psi(x)\right|^2 \;\Rightarrow\; \psi(-x) = \pm\,\psi(x),$$

δηλαδή οι κυματοσυναρτήσεις πρέπει να είναι άρτιες ή περιττές. Όμως εκτός από τη συμμετρία τους, και ο αριθμός των κόμβων των κυματοσυναρτήσεων έχει απλή φυσική εξήγηση. Όπως είχαμε τονίσει και στην περίπτωση του μονοδιάστατου κουτιού (Κεφ. 5, σελ. 229-30), οι διαδοχικές ιδιοσυναρτήσεις του σωματιδίου έχουν τη χαρακτηριστική μορφή των *στάσιμων κυμάτων* μιας ταλαντευόμενης χορδής. Η πρώτη ιδιοσυνάρτηση αντιστοιχεί στην τοποθέτηση ενός ημικύματος μέσα στο κουτί, η δεύτερη στην τοποθέτηση δύο ημικυμάτων κ.ο.κ. για τις ακόμα υψηλότερες καταστάσεις. Όπως φαίνεται από το Σχήμα 7.3, αυτή η γενική εικόνα ισχύει και για τις ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή με τις εξής εύλογες τροποποιήσεις: α) Οι ιδιοσυναρτήσεις δεν τερματίζονται στα όρια της κλασικά επιτρεπόμενης περιοχής (δηλαδή εκεί που η σχετική στάθμη «κόβει» την καμπύλη του δυναμικού) αλλά έχουν και εκθετικά φθίνουσες «ουρές» που εκτείνονται, θεωρητικά, ώς το άπειρο. β) Τα διάφορα «ημικύματα» που «σχηματίζουν» την κυματοσυνάρτηση μέσα στο κλασικά επιτρεπόμενο διάστημα δεν έχουν πια την απλή ημιτονοειδή μορφή του μονοδιάστατου κουτιού διότι το δυναμικό εξαρτάται τώρα από το x, οπότε το ίδιο θα ισχύει και για το μήκος κύματος του σωματιδίου. Πράγματι –λόγω διατήρησης της ενέργειας– θα είναι

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E \;\Rightarrow\; p = p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

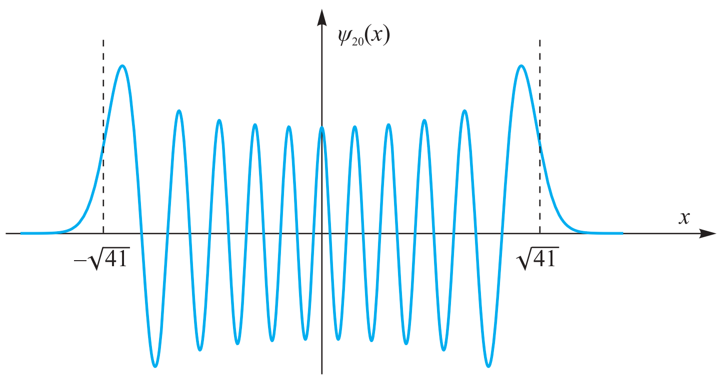
και επομένως

$$\lambda = \lambda(x) = \frac{h}{p(x)} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V(x))}},$$

οπότε οι ιδιοσυναρτήσεις σε ένα μεταβαλλόμενο δυναμικό $V(x)$ θα έχουν την αναμενόμενη κυματοειδή μορφή αλλά με μήκος κύματος που αλλάζει με το x.

• *Η μορφή των ιδιοσυναρτήσεων για μεγάλα n: Το κλασικό όριο*

Μια άμεση συνέπεια των παραπάνω είναι ότι, καθώς απομακρυνόμαστε από την αρχή, τα διαδοχικά ημικύματα μιας ενεργειακής ιδιοσυνάρτησης θα τείνουν να γίνονται πιο «ανοικτά» αφού η τοπική ορμή θα μειώνεται και άρα το αντίστοιχο τοπικό μήκος κύματος θα μεγαλώνει. Αυτό είναι ήδη φανερό από τις δύο τελευταίες ιδιοσυναρτήσεις του Σχήματος 7.3 αλλά γίνεται τελείως έκδηλο στους μεγάλους κβαντικούς αριθμούς όπως, παραδείγματος χάριν, για $n = 20$, οπότε η γραφική παράσταση θα είναι όπως στο σχήμα 7.4.



Σχημα 7.4: *Η γραφική παράσταση της ιδιοσυναρτήσεως του αρμονικού ταλαντωτή με κβαντικό αριθμό* $n = 20$. Το τοπικό μήκος κύματος των διαδοχικών ημικυμάτων προφανώς αυξάνεται καθώς απομακρυνόμαστε από την αρχή ενώ αυξάνεται ταυτόχρονα και το αντίστοιχο «ύψος» τους ώστε να αναπαράγεται, στο όριο των μεγάλων n, η κλασική συμπεριφορά που προβλέπει αυξημένη πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου εκεί που η τοπική ταχύτητα είναι μικρή. Δηλαδή κοντά στα ακραία σημεία της κλασικής ταλάντωσης.

Από το παραπάνω σχήμα είναι επίσης φανερό ότι οι διαδοχικές κυματοκορφές της κυματοσυνάρτησης ψ_{20} γίνονται ολοένα και ψηλότερες καθώς πλησιάζουμε τα σημεία αντιστροφής της κλασικής κίνησης, στα οποία η τοπική ταχύτητα μηδενίζεται. Και ο λόγος γι' αυτό είναι επίσης απλός. Στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών −και το $n = 20$ ασφαλώς δεν είναι μικρό− η κβαντική κυματοσυνάρτηση πρέπει να αναπαράγει χονδρικά την κλασική συμπεριφορά σύμφωνα με την οποία το σωματίδιο ξοδεύει πολύ περισσότερο χρόνο εκεί που η ταχύτητά του είναι μικρή και επομένως εκεί θα υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα ανεύρεσής του. Είναι αναμενόμενο, λοιπόν, ότι καθώς πλησιάζουμε τα ακραία σημεία της κλασικής ταλάντωσης οι ιδιοσυναρτήσεις μεγάλου n θα έχουν όχι μόνο *«ευρύτερες»* αλλά και διαρκώς *ψηλότερες* κυματοκορφές.

Η σχέση μεταξύ κλασικής κίνησης και των ιδιοσυναρτήσεων μεγάλου n γίνεται ακόμα πιο εμφανής αν σχεδιάσουμε μαζί την κβαντική πυκνότητα πιθανότητας $P_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ και την αντίστοιχη κλασική ποσότητα

$$P_{\rm cl}(x)\,dx = \frac{2dt}{T} = \frac{2(dx/v(x))}{T} \tag{7.20}$$

$$\Rightarrow \quad P_{\rm cl}(x) = \frac{2}{Tv(x)} \tag{7.21}$$

η οποία –παρ' ότι, βεβαίως, η κλασική κίνηση είναι πλήρως ντετερμινιστική– περιγράφει, υπό μορφήν πιθανότητας, τον *βαθμό παραμονής* του σωματιδίου σε κάθε στοιχειώδη περιοχή του διαστήματος ταλάντωσης. Ο βαθμός παραμονής ισούται με το *ποσοστό του χρόνου*, σε σχέση με την πλήρη περίοδο, που «ξοδεύει» το σωματίδιο στην εν λόγω περιοχή. (Ο παράγοντας 2 στην (7.20) εκφράζει, προφανώς, το γεγονός ότι στη διάρκεια μιας περιόδου, το σωματίδιο περνάει *δύο φορές* από την ίδια περιοχή.)

Στο αδιάστατο σύστημα μονάδων στο οποίο δουλεύουμε, είναι $T = 2\pi/\omega = 2\pi$ και

$$v(x) = \left.\sqrt{\frac{2(E - V(x))}{m}}\right|_{m=1,\,V=x^2/2} = \sqrt{2E - x^2},$$

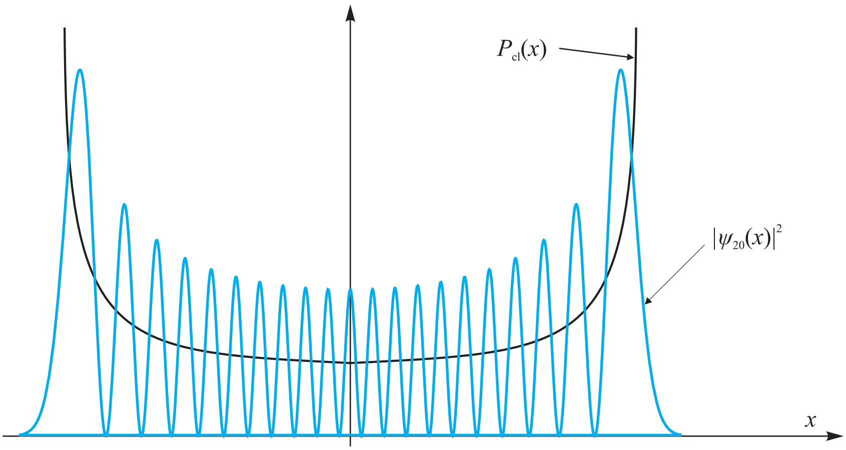
οπότε, σύμφωνα με τον (7.21), θα είναι

$$P_{\rm cl}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{2E - x^2}} \qquad \left(-\sqrt{2E} < x < \sqrt{2E}\right)$$

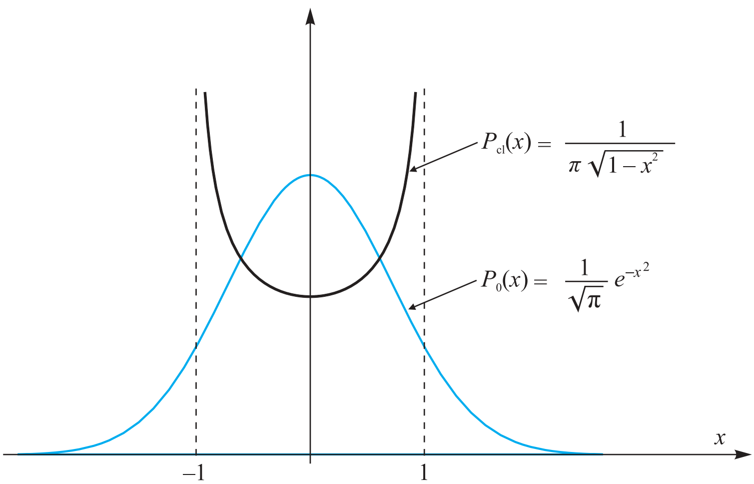
και η σύγκριση με την κβαντική κατανομή πιθανότητας για $n = 20$ ($\Rightarrow\ 2E = 41$) απεικονίζεται καθαρά στο Σχήμα 7.5.

• *... και το ακραίο αντικλασικό όριο της θεμελιώδους καταστάσεως*

Όμως στον ίδιο βαθμό που είναι εύλογο να προσεγγίζουν οι κβαντικές κυματοσυναρτήσεις μεγάλου n την κλασική συμπεριφορά, άλλο τόσο θα πρέπει να αναμένεται ότι οι αποκλίσεις από αυτή τη συμπεριφορά θα είναι τόσο πιο έντονες όσο κατεβαίνουμε προς τα μικρότερα n, δηλαδή στις χαμηλότερες ιδιοκαταστάσεις. Δεν αποτελεί λοιπόν καθόλου έκπληξη ότι η πιο αντικλασική συμπεριφορά εμφανίζεται στη θεμελιώδη κατάσταση του ταλαντωτή, όπως φαίνεται καθαρά στο Σχήμα 7.6.



Σχημα 7.5: *Σύγκριση κβαντικής και κλασικής πυκνότητας πιθανότητας για την κατάσταση $n = 20$ του αρμονικού ταλαντωτή.* Η κβαντική κατανομή ταλαντεύεται συμμετρικά γύρω από την αντίστοιχη κλασική καμπύλη η οποία μπορεί να θεωρηθεί έτσι ως ένα είδος *μέσου όρου* της πρώτης, στο όριο των μεγάλων n όπου οι κβαντικές ταλαντώσεις παύουν να είναι παρατηρήσιμες.



Σχημα 7.6: *Σύγκριση κβαντικής και κλασικής πυκνότητας πιθανότητας για τη θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή.* Τελείως αντίθετα με ό,τι συμβαίνει στην κλασική περίπτωση, το κβαντικό σωματίδιο είναι πολύ πιθανότερο να βρεθεί στη γειτονιά της αρχής παρά στα όρια της κλασικής ταλάντωσης. Στη θεμελιώδη του κατάσταση το σωματίδιο συμπεριφέρεται με τον πιο ακραίο αντι-κλασικό τρόπο.

- *Η διείσδυση στις κλασικά απαγορευμένες περιοχές: Τι ποσοστό της «ζωής» του περνάει το σωματίδιο στην «παρανομία»;*

Μετά και τις σχετικές συζητήσεις του προηγούμενου κεφαλαίου η *διείσδυση στις κλασικά απαγορευμένες περιοχές* θα πρέπει πλέον να θεωρείται ως ένα είδος «κβαντικού κεκτημένου» όπως η *κβάντωση του ενεργειακού φάσματος* (στην περιοχή των δέσμιων καταστάσεων) ή η *κβαντική αντίσταση στον εντοπισμό* η οποία προκαλεί την ανύψωση της θεμελιώδους στάθμης πάνω από τον πυθμένα του αντίστοιχου δυναμικού. Στην τωρινή περίπτωση η διείσδυση είναι, βεβαίως, προφανής εφόσον η κυματοσυνάρτηση εκτείνεται σε όλο τον πραγματικό άξονα ενώ το κλασικά επιτρεπόμενο διάστημα είναι μόνο το $[-a, a]$ όπου a το ακραίο δεξιό σημείο της κλασικής ταλάντωσης, που προσδιορίζεται από τη γνωστή συνθήκη

$$V(a) = E \;\Rightarrow\; \frac{1}{2}a^2 = E \;\Rightarrow\; a = \sqrt{2E} = \sqrt{2n+1}.$$

Για τη θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή ($n = 0$) το κλασικά επιτρεπόμενο διάστημα θα είναι λοιπόν το $[-1, 1]$, οπότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή $|x| > 1$ θα δίνεται από την έκφραση[(*)]

$$\begin{aligned} P\big[|x| > 1\big] &= 1 - P\big[|x| < 1\big] \\ &= 1 - \int_{-1}^{1} \big|\psi_0(x)\big|^2\, dx. \end{aligned} \tag{7.22}$$

Θα είναι δηλαδή συμπληρωματική της πιθανότητας να το βρούμε στο κλασικά επιτρεπόμενο διάστημα $|x| < 1$.

Σε ένα πρόβλημα στο τέλος του κεφαλαίου (Πρόβλημα Β.7) θα σας υποδείξουμε έναν απλό τρόπο να υπολογίσετε προσεγγιστικά το ολοκλήρωμα του δεύτερου μέλους της (7.22) και να καταλήξετε στο αριθμητικό αποτέλεσμα

$$P\big[|x| > 1\big] \simeq 1 - \sqrt{1 - e^{-1}} \simeq 0{,}205 \equiv 20{,}5\%$$

το οποίο είναι αρκετά κοντινό στην πολύ ακριβέστερη τιμή

$$P\big[|x| > 1\big] = 0{,}157 \equiv 15{,}7\%$$

που παίρνει κανείς από ένα πρόγραμμα συμβολικών υπολογισμών. Μπορούμε λοιπόν να πούμε ότι στη θεμελιώδη κατάσταση ενός αρμονικού ταλαντωτή το σωματίδιο *περνά το 15,7% της ζωής του στην... παρανομία*! Με ένα πρόγραμμα

(*) Υπενθυμίζουμε ότι ο συμβολισμός P [διάστημα τιμών τού x] δηλώνει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο μέσα στο υποδεικνυόμενο διάστημα.

ΠΙΝΑΚΑΣ 7.2. *Πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή για διάφορες καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή*

Κατάσταση	*Πιθανότητα*
$n = 0$	15,7%
$n = 1$	11,2%
$n = 2$	9,5%
$n = 3$	8,5%
$n = 4$	7,9%

Κατάσταση	*Πιθανότητα*
$n = 5$	7,4%
$n = 6$	7,0%
$n = 7$	6,7%
$n = 8$	6,4%
$n = 9$	6,2%

συμβολικών υπολογισμών είναι επίσης τετριμμένο να υπολογίσουμε το αντίστοιχο «ποσοστό παρανομίας» και για όσες άλλες καταστάσεις του ταλαντωτή επιθυμούμε. Τα αποτελέσματα για τις δέκα πρώτες από αυτές δίνονται στον Πίνακα 7.2. Όπως αναμενόταν, η πιθανότητα ανεύρεσης του σωματιδίου στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή μειώνεται αυξανομένου του n εφόσον η πιθανότητα αυτή θα πρέπει να τείνει στο μηδέν για μεγάλα n όπου ισχύει πλέον η κλασική φυσική. Εντούτοις είναι αξιομνημόνευτο ότι η μείωση αυτή είναι *πολύ βραδεία*, όπως επιβεβαιώνεται και από περαιτέρω δεδομένα που μπορεί να πάρει κανείς από τον υπολογιστή του. Παραδείγματος χάριν, για $n = 30$ η πιθανότητα διείσδυσης έχει μειωθεί μόλις στο 4,2% ενώ για $n = 50$ είναι ακόμα 3,2%!

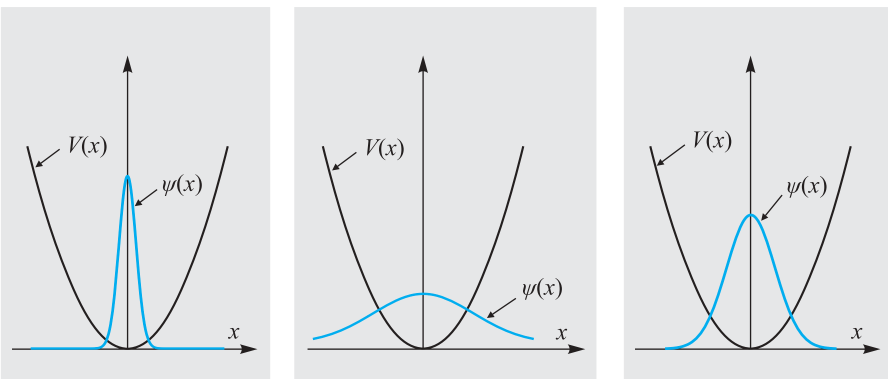
Σημειώστε, τέλος, ότι όλες οι προηγούμενες πιθανότητες –όντας *αδιάστατες* ποσότητες– δεν εξαρτώνται καθόλου από τις παραμέτρους $\hbar, m$ και ω του ταλαντωτή. Οι τιμές τους είναι οι ίδιες όποια και αν είναι η μάζα του σωματιδίου, η κλασική συχνότητα ω του ταλαντωτή ή η σταθερά του Planck! Μπορείτε να εξηγήσετε γιατί αυτό είναι αξιοπερίεργο και να επιχειρήσετε κάποια ερμηνεία του;

• *Ένας κβαντικός ταλαντωτής δεν ηρεμεί ποτέ: Η «ενέργεια μηδενικού σημείου»*

Ο κβαντικός ταλαντωτής αποτελεί επίσης το πρότυπο πρόβλημα επίδειξης της κβαντικής αντίστασης στον εντοπισμό, η οποία επιβάλλει στο σωματίδιο να κινείται ακόμα και στην κατάσταση μέγιστης... ηρεμίας, δηλαδή την κατάσταση ελάχιστης ολικής ενέργειας. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα που βρήκαμε, η ελάχιστη αυτή ενέργεια του σωματιδίου –γνωστή και ως *ενέργεια μηδενικού σημείου* (zero point energy)– θα δίνεται από τον τύπο

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$$

ο οποίος ικανοποιεί, βεβαίως, τις απαιτήσεις τόσο του *κλασικού ορίου* ($E_0 \to 0$ για $\hbar \to 0$ ή $m \to \infty$) όσο και του *ισχυρού κβαντικού ορίου* που επιβάλλει να αυξάνεται η ελάχιστη επιτρεπόμενη ενέργεια καθώς αυξάνεται η σταθερά του Planck ή μικραίνει η μάζα του σωματιδίου. Η προέλευση της ενέργειας μηδενικού σημείου μάς είναι βεβαίως γνωστή. Οφείλεται στην αρχή της αβεβαιότητας, η οποία καθιστά αδύνατη την ακινητοποίηση του σωματιδίου στο σημείο ελάχιστης δυναμικής ενέργειας –εν προκειμένω στο $x = 0$– διότι τότε ελαχιστοποιείται μεν η δυναμική ενέργεια αλλά αυξάνεται μέχρι απειρισμού η κινητική. Έτσι, η ολική ενέργεια του σωματιδίου όχι μόνο δεν ελαχιστοποιείται με αυτόν τον τρόπο αλλά, τουναντίον, γίνεται άπειρη. Τα τρία «σενάρια» του Σχήματος 7.7 μας δείχνουν καθαρά τον τρόπο με τον οποίο το σωματίδιο «αναζητεί» –και, τελικά, «βρίσκει»– την κατάσταση της μέγιστης δυνατής ηρεμίας του!



ΣΧΗΜΑ 7.7: *Ο τρόπος επίτευξης ελάχιστης ενέργειας στον αρμονικό ταλαντωτή.*

Σενάριο (α): Προκειμένου να βρίσκεται κοντά στον πυθμένα του δυναμικού και να μειώσει έτσι τη δυναμική του ενέργεια, το σωματίδιο «φτιάχνει» μια κυματοσυνάρτηση υπερβολικά εντοπισμένη, οπότε αυξάνεται υπέρμετρα η κινητική του ενέργεια και εξουδετερώνει το όφελος από τη μείωση της δυναμικής.

Σενάριο (β): Προκειμένου να αποφύγει τον υπερβολικό εντοπισμό –και τη συνεπαγόμενη αύξηση της κινητικής του ενέργειας– το σωματίδιο «φτιάχνει» μια πολύ πλατιά κυματοσυνάρτηση η οποία όμως αυξάνει υπέρμετρα τη δυναμική του ενέργεια εφόσον του δίνει μεγάλη πιθανότητα να βρίσκεται μακριά από τον πυθμένα του δυναμικού. Η επίτευξη ελάχιστης ολικής ενέργειας πάλι δεν επιτυγχάνεται.

Σενάριο (γ): Η κατάσταση ελάχιστης ολικής ενέργειας επιτυγχάνεται τελικά με την εξισορρόπηση των ανταγωνιστικών απαιτήσεων δυναμικού και κινητικού όρου. Η πραγματική κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου δεν είναι ούτε πολύ στενή ούτε πολύ πλατιά. Έχει τη βέλτιστη έκταση.

Η χρήση ανθρωποκεντρικών εκφράσεων στις παραπάνω περιγραφές –το σωματίδιο που «ψάχνει» την κυματοσυνάρτησή του!– είναι απόλυτα σκόπιμη. Αποδίδει με έναν ζωντανό τρόπο τη *διαδικασία ελαχιστοποίησης* βάσει της οποίας σχηματίζεται η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους καταστάσεως κάθε κβαντικού συστήματος. Στη συγκεκριμένη περίπτωση αυτή η διαδικασία μπορεί να εκφραστεί και ποσοτικά ως εξής: έστω $\Delta x = a$ η αβεβαιότητα θέσης του σωματιδίου και $\Delta p \simeq \hbar/a$ η αντίστοιχη αβεβαιότητα της ορμής του σύμφωνα με την αρχή του Heisenberg, θεωρούμενη ως προσεγγιστική ισότητα της μορφής $\Delta x \cdot \Delta p \simeq \hbar$. Η μέση ενέργεια του σωματιδίου θα δίνεται τότε από την έκφραση

$$\begin{aligned}\overline{E} = \langle H \rangle &= \left\langle \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle && \text{(A)} \\ &= \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta x)^2 && \text{(B)} \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 && (\Gamma)\end{aligned}$$

όπου από την (A) στη (B) χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι $\langle p \rangle = 0$ και $\langle x \rangle = 0$ για να γράψουμε $\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2$ και $\langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2$. Συναρτήσει του a –δηλαδή της χωρικής έκτασης της κυματοσυνάρτησής του– η μέση ολική ενέργεια του σωματιδίου θα γράφεται λοιπόν ως

$$\overline{E} = \overline{E}(a) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 a^2,$$

δηλαδή ως άθροισμα ενός κινητικού $(\hbar^2/2ma^2)$ και ενός δυναμικού όρου $(m\omega^2 a^2/2)$ με *ανταγωνιστική εξάρτηση* από το μήκος εντοπισμού a. Αν κάνουμε το a μικρότερο θα ελαττωθεί μεν η δυναμική ενέργεια αλλά θα αυξηθεί υπέρμετρα η κινητική, ενώ αν μεγαλώσει το a θα μικρύνει μεν η κινητική ενέργεια αλλά θα αυξηθεί υπερβολικά η δυναμική. Η ελάχιστη ενέργεια θα επιτευχθεί όταν

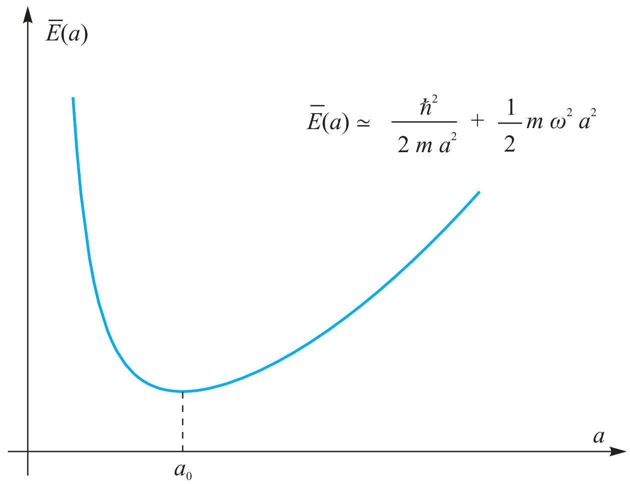
$$\frac{d\overline{E}}{da} = 0 \;\Rightarrow\; a = a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

και η ελάχιστη τιμή της θα είναι τότε η

$$E_{\min} = \overline{E}(a_0) = \hbar\omega$$

που διαφέρει, βεβαίως, από την ακριβή τιμή (κατά έναν παράγοντα *δύο*) για τον πολύ απλό λόγο ότι ο σχετικός υπολογισμός είναι τελείως προσεγγιστικός και αναμένεται να είναι αξιόπιστος μόνο ως *τάξη μεγέθους*.

Όλα τα παραπάνω συμπυκνώνονται πολύ παραστατικά στη γραφική παράσταση του Σχήματος 7.8.



Σχημα 7.8: *Η μέση ολική ενέργεια ενός κβαντικού ταλαντωτή συναρτήσει του «μεγέθους» της κυματοσυνάρτησής του.* Αν η κυματοσυνάρτηση είναι πολύ εντοπισμένη (μικρό a), ελαττώνεται μεν η δυναμική ενέργεια αλλά αυξάνεται υπερβολικά η κινητική. Και αντίστροφα: αν η κυματοσυνάρτηση είναι πολύ εκτεταμένη (μεγάλο a), ελαττώνεται μεν η κινητική ενέργεια αλλά αυξάνεται υπερβολικά η δυναμική. Η ελάχιστη ολική ενέργεια επιτυγχάνεται για μια ενδιάμεση τιμή του a $(=\sqrt{\hbar/m\omega})$ και η αντίστοιχη ελάχιστη ενέργεια είναι τότε ίση με $\hbar\omega$.

- *Ισαπέχουσες ιδιοτιμές και η εκπομπή ακτινοβολίας από έναν κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή*

Τόσο από το Σχήμα 7.3 όσο και κατευθείαν από τον τύπο $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ είναι φανερό ότι οι ιδιοτιμές του αρμονικού ταλαντωτή είναι *ισαπέχουσες* με σταθερή μεταξύ τους απόσταση ίση με $\hbar\omega$. Αυτό είναι ένα πολύ ειδικό χαρακτηριστικό του παραβολικού δυναμικού και αποτελεί, όπως θα δείξουμε, το κβαντικό ανάλογο μιας επίσης πολύ ειδικής ιδιότητας του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος: ότι η περίοδος ταλάντωσης σε ένα παραβολικό δυναμικό είναι *ανεξάρτητη του πλάτους* της *ή της ενέργειας* του σωματιδίου. Όσο μεγάλο ή μικρό και αν είναι το πλάτος της ταλάντωσής του η περίοδος του σωματιδίου θα είναι η ίδια. (Γι' αυτό εξάλλου δουλεύουν τα εκκρεμή ως ρολόγια.) Ως συνέπεια αυτού του γεγονότος, αν το κλασικό σωματίδιο είναι *φορτισμένο* θα εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία της ίδιας πάντα συχνότητας ίσης με τη σταθερή συχνότητα της ταλάντωσής του.

Στο κβαντικό πρόβλημα τώρα, η εκπομπή ακτινοβολίας γίνεται υπό μορφήν αδιαίρετων φωτεινών κβάντων $-$των φωτονίων$-$ κατά τις *κβαντικές μεταβάσεις*[(*)] του φορτισμένου σωματιδίου από μια ανώτερη σε μια κατώτερη ενεργειακή στάθμη. Και, βεβαίως, το εκπεμπόμενο φωτόνιο παίρνει μαζί του την ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δύο σταθμών της μετάβασης. Αν επομένως η μετάβαση γίνεται μεταξύ δύο γειτονικών σταθμών $-$ας πούμε της n και της $n-1-$, τότε η ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου θα είναι ίση με $\hbar\omega$, άρα και η συχνότητά του ίση με ω. Δηλαδή όση και η συχνότητα του κλασικού ταλαντωτή και της αντίστοιχης κλασικής ακτινοβολίας. Υπάρχει έτσι συμφωνία μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής σχετικά με τη συχνότητα του εκπεμπόμενου φωτός. Συμφωνία που δεν είναι, βεβαίως, υποχρεωτική εκτός μόνο από το *όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών*, όπου οι κβαντικές προβλέψεις θα πρέπει να συμπίπτουν με τις αντίστοιχες κλασικές (αρχή της αντιστοιχίας). Το οποίο όμως είναι εξασφαλισμένο μόνο υπό τον πρόσθετο όρο ότι οι κβαντικές μεταπτώσεις υπόκεινται και στην περιοριστική συνθήκη

▶ $$\Delta n = 1$$

που είναι γνωστή ως *κανόνας επιλογής* και δηλώνει ότι

> *στον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή επιτρέπονται μόνο εκείνες οι κβαντικές μεταβάσεις για τις οποίες η αλλαγή του κβαντικού αριθμού n είναι ίση με τη μονάδα. Δηλαδή μόνο οι μεταβάσεις μεταξύ γειτονικών σταθμών.*

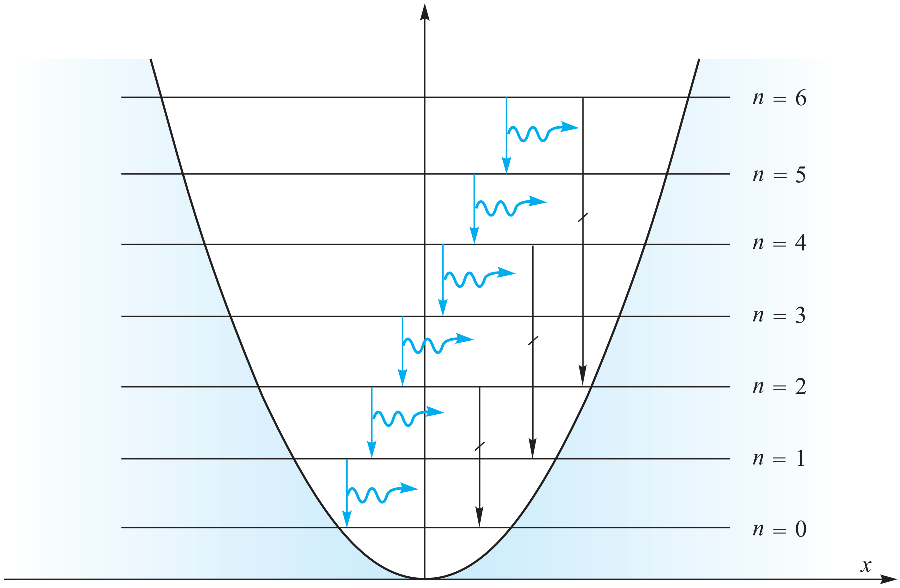
Η αρχή της αντιστοιχίας δεν εμποδίζει, βεβαίως, να συμβαίνουν και μεταβάσεις με $\Delta n > 1$ στην περιοχή των *μικρών κβαντικών αριθμών*, όπου η συμφωνία κβαντικής και κλασικής φυσικής δεν είναι υποχρεωτική. Σε αυτή τη μη κλασική περιοχή θα μπορούσαν, παραδείγματος χάριν, να συμβούν και μεταβάσεις με $\Delta n = 2$ $-$ας πούμε από τη στάθμη $n=3$ στη στάθμη $n=1-$ για τις οποίες η ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου θα ήταν $2\hbar\omega$ και άρα η συχνότητά του ίση με 2ω. Δηλαδή μια συχνότητα που δεν παρατηρείται στο κλασικό φάσμα. Εντούτοις η ακριβής κβαντομηχανική θεωρία της ακτινοβολίας από ένα κβαντικό σύστημα $-$την οποία θα εξετάσουμε στο 15ο Κεφάλαιο του βιβλίου$-$ αποδεικνύει ότι οι μεταβάσεις με $\Delta n > 1$ δεν λαμβάνουν χώρα ούτε στην περιοχή των μικρών κβαντικών αριθμών. *Ο κανόνας επιλογής* $\Delta n = 1$ *ισχύει για όλα τα* n.

Ενόψει των παραπάνω, το γεγονός ότι ο αρμονικός ταλαντωτής έχει ισαπέχουσες ιδιοτιμές είναι πια σχεδόν προφανές. Τουλάχιστον για μεγάλα n

(*) Ο όρος «μεταπτώσεις» χρησιμοποιείται επίσης συχνά για τα «κβαντικά άλματα» των σωματιδίων από τη μια ενεργειακή κατάσταση στην άλλη.

αυτός είναι ο μόνος τρόπος για να συμφωνεί η κβαντική με την κλασική μηχανική, στο πλαίσιο της οποίας ένας αρμονικός ταλαντωτής έχει *μία και μοναδική συχνότητα* ανεξάρτητη από το πλάτος της ταλάντωσής του.

Θα συνοψίσουμε τα παραπάνω συμπεράσματά μας για την εκπομπή ακτινοβολίας από τον κβαντικό ταλαντωτή στο Σχήμα 7.9.



Σχημα 7.9: *Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις στον αρμονικό ταλαντωτή.* Επιτρεπόμενες είναι μόνο οι μεταβάσεις μεταξύ γειτονικών σταθμών ($\Delta n = 1$), ενώ όλες οι άλλες ($\Delta n > 1$) είναι απαγορευμένες και δείχνονται με «διαγραμμένα» γκρίζα βέλη χωρίς ένδειξη εκπεμπόμενου φωτονίου. Επειδή οι στάθμες του ταλαντωτή είναι ισαπέχουσες, οι επιτρεπόμενες μεταβάσεις παράγουν ακτινοβολία μίας και μοναδικής συχνότητας, όπως και ο αντίστοιχος κλασικός ταλαντωτής.

3. Μαθηματικός επίλογος: Αναζήτηση των πολυωνυμικών λύσεων με τη συστηματική μέθοδο του αναπτύγματος σε δυναμοσειρά

Με την πρακτική βεβαιότητα ότι το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή έχει λυθεί, ας δούμε τώρα πώς δουλεύει και η «επίσημη» μέθοδος επίλυσής του με ανάπτυξη σε δυναμοσειρά. Υπενθυμίζουμε ότι η εξίσωση που πρέπει να λύσουμε είναι η λεγόμενη *εξίσωση Hermite*

$$H'' - 2xH' + (2E-1)H = 0 \tag{7.23}$$

που είναι μια *γραμμική* και *ομογενής διαφορική εξίσωση* για την οποία, όπως έχουμε ήδη αναφέρει, η μόνη γενική μέθοδος λύσης είναι η *μέθοδος του αναπτύγματος σε δυναμοσειρά*. Η μέθοδος συνίσταται στο να γράψουμε τη ζητούμενη λύση $H(x)$ ως μια απειροσειρά της μορφής

$$H(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \tag{7.24}$$

και αφού την αντικαταστήσουμε στην εξίσωση να δούμε πώς πρέπει να εκλεγούν οι άγνωστοι συντελεστές a_k ώστε η εξίσωση πράγματι να ικανοποιείται. Δεδομένου ότι

$$H' = \sum_k a_k k x^{k-1}\,, \qquad H'' = \sum_k a_k k(k-1)x^{k-2},$$

η αντικατάσταση της (7.24) στην (7.23) θα δώσει

$$\sum_k k(k-1)a_k x^{k-2} - 2x\sum_k k a_k x^{k-1} + (2E-1)\sum_k a_k x^k = 0 \tag{7.25}$$

και η αρχική εξίσωση θα ικανοποιείται όταν ο ολικός συντελεστής b_k της τυχούσας δύναμης x^k στο πρώτο μέλος της (7.25) θα είναι ίσος με το μηδέν. Ο ολικός αυτός συντελεστής θα προκύπτει από τις τρεις επιμέρους σειρές στο πρώτο μέλος της (7.25) ως εξής: η πρώτη σειρά έχει ως γενική δύναμη την x^{k-2} και επομένως ο συντελεστής της δύναμης x^k θα προκύπτει με μετατόπιση κατά 2 του υπάρχοντος συντελεστή $k(k-1)a_k$. Η συμβολή αυτής της σειράς στον ολικό συντελεστή θα είναι λοιπόν η

$$k(k-1)a_k\Big|_{k\to k+2} = (k+2)(k+1)a_{k+2}. \tag{7.26}$$

Στη δεύτερη σειρά της (7.25) ο πολλαπλασιασμός επί x επαναφέρει ως γενική δύναμη την x^k οπότε η συμβολή αυτής της σειράς θα είναι

$$-2ka_k \tag{7.27}$$

ενώ από την τρίτη σειρά θα έχουμε

$$(2E-1)a_k. \tag{7.28}$$

Αθροίζοντας τις (7.26), (7.27) και (7.28) παίρνουμε για τον ολικό συντελεστή b_k την έκφραση

$$b_k = (k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (2E-1)a_k \tag{7.29}$$

η οποία θα πρέπει τώρα να εξισωθεί με μηδέν ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση (7.25). Μηδενίζοντας την (7.29) και λύνοντας ως προς a_{k+2} παίρνουμε την *αναδρομική σχέση*

$$a_{k+2} = \frac{2k-(2E-1)}{(k+1)(k+2)} a_k \tag{7.30}$$

η οποία προσδιορίζει πλήρως τη λύση, εφόσον μας επιτρέπει να υπολογίσουμε όλους τους συντελεστές της σειράς (7.24) με βάση τον πρώτο από αυτούς, ο οποίος όμως μπορεί πάντα να θεωρηθεί ίσος με τη μονάδα αφού η εξίσωση είναι ομογενής. Από την (7.30) είναι επίσης φανερό ότι επειδή η σειρά έχει *βήμα δύο* –«πηδάει» από το k στο $k+2$– θα περιέχει ή *μόνο τις άρτιες* ή *μόνο τις περιττές* δυνάμεις του x ανάλογα με το «σημείο εκκίνησης». Αν ξεκινά με τη μηδενική δύναμη –δηλαδή τον σταθερό όρο a_0– τότε θα περιέχει μόνο τις άρτιες δυνάμεις, ενώ αν ξεκινά με την πρώτη δύναμη –με συντελεστή a_1– τότε θα περιέχει μόνο τις περιττές. Επομένως οι λύσεις θα είναι άρτιες ή περιττές, όπως το περιμέναμε.

Παρατηρώντας τώρα πιο προσεκτικά την αναδρομική σχέση (7.30), διαπιστώνουμε αμέσως ότι αν είναι

$$2E-1 = 2n \;\Rightarrow\; E = E_n = n + \frac{1}{2}, \tag{7.31}$$

τότε θα γράφεται ως

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k \tag{7.32}$$

από όπου είναι αμέσως φανερό ότι η σειρά τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο βαθμού n, αφού για $k=n$ ο αναδρομικός τύπος δίνει μηδέν και έτσι όλοι οι συντελεστές βγαίνουν μηδέν από εκεί και πέρα. Καταλήξαμε έτσι στο ήδη γνωστό αποτέλεσμα αλλά με μια συστηματική διαδικασία που κατοχυρώνει απόλυτα την ορθότητά του.(*) Επιπλέον τώρα έχουμε στη διάθεσή μας και έναν αναδρομικό τύπο που μας επιτρέπει να υπολογίζουμε πολύ εύκολα τους συντελεστές των πολυωνυμικών λύσεων για οποιοδήποτε n. Παραδείγματος χάριν, για το πολυώνυμο δευτέρου βαθμού ($n=2$) η αναδρομική σχέση (7.32) θα ξεκινά με τον σταθερό όρο a_0 –τον οποίο μπορούμε να θεωρήσουμε ίσο με τη μονάδα για τους γνωστούς λόγους–, οπότε θα έχουμε

(*) Είναι χρήσιμο να θυμηθούμε από αυτή την άποψη ότι εκείνο που αποδείξαμε στην προηγούμενη παράγραφο είναι απλώς τούτο: ότι, *αν υπάρχουν* πολυωνυμικές λύσεις της (7.23) βαθμού n, αυτό θα συμβαίνει μόνο αν το E παίρνει τη διάκριτη ακολουθία τιμών (7.31). Όμως –όπως είχαμε τονίσει και τότε– αυτή είναι απλώς μια *αναγκαία συνθήκη* αλλά όχι και ικανή να διασφαλίσει την ύπαρξη πολυωνυμικών λύσεων. Το επιπρόσθετο γεγονός ότι κατασκευάσαμε εκπεφρασμένα τις τρεις πρώτες από αυτές δικαιολογούσε, βεβαίως, την *πρακτική* μας *βεβαιότητα* ότι θα υπάρχουν πολυωνυμικές λύσεις για όλα τα n, αλλά δεν συνιστούσε, προφανώς, απόδειξη.

$$\left(a_{k+2} = \frac{2(k-2)}{(k+1)(k+2)}a_k\right)\Bigg|_{k=0} \Rightarrow a_2 = \frac{2(0-2)}{1\cdot 2}\cdot 1 = -2$$

ενώ όλοι οι συντελεστές $-a_4, a_6, a_8$ κ.λπ.– θα βγαίνουν μηδέν από εκεί και πέρα. Θα είναι λοιπόν

$$H_2 = a_0 + a_2x^2 = 1 - 2x^2 \sim 2x^2 - 1$$

που είναι, βεβαίως, το γνωστό μας αποτέλεσμα.

Εντελώς ανάλογα, για το πολυώνυμο με $n = 5$ η (7.32) θα γράφεται ως

$$a_{k+2} = \frac{2(k-5)}{(k+1)(k+2)}a_k$$

και η διαδικασία εφαρμογής της για $k = 1$ (με $a_1 = 1$) και $k = 3$[(*)] θα δώσει

$$k = 1 \;\Rightarrow\; a_3 = \frac{2(1-5)}{2\cdot 3} = -\frac{4}{3}$$

$$k = 3 \;\Rightarrow\; a_5 = \frac{2(3-5)}{(3+1)(3+2)}\left(-\frac{4}{3}\right) = \frac{4}{15}$$

και επομένως

$$H_5(x) = a_1x + a_3x^3 + a_5x^5 = x - \frac{4}{3}x^3 + \frac{4}{15}x^5 \sim 4x^5 - 20x^3 + 15x \qquad (7.33)$$

που είναι όντως το σωστό αποτέλεσμα, όπως μπορείτε εύκολα να βεβαιωθείτε αντικαθιστώντας το στην (7.23) και ελέγχοντας αν ικανοποιείται ή όχι. Μην εκπλαγείτε όμως αν ζητήσετε από τον συμβολικό σας υπολογιστή να σας δώσει το πολυώνυμο Hermite $H_5(x)$ και η έκφραση που πάρετε δεν συμπίπτει ακριβώς με την (7.33). Και ο λόγος γι' αυτό είναι, βεβαίως, γνωστός. Όντας λύσεις μιας ομογενούς εξίσωσης, τα πολυώνυμα Hermite ορίζονται με αυθαιρεσία μιας πολλαπλασιαστικής σταθεράς –που μπορεί να εξαρτάται από το n– η οποία έχει επιλεγεί στη βιβλιογραφία με βάση κάποια «συνθήκη κανονικοποίησης» που τα ορίζει πλέον με έναν μονοσήμαντο τρόπο· έτσι ώστε όταν χρησιμοποιούμε το συναρτησιακό σύμβολο $H_n(x)$ να αναφερόμαστε όλοι σε μια απολύτως καθορισμένη πολυωνυμική συνάρτηση χωρίς πολλαπλασιαστική αυθαιρεσία. Ποια είναι αυτή η «συνθήκη κανονικοποίησης» και τι ενδιαφέρουσες ιδιότητες έχουν τα έτσι οριζόμενα πολυώνυμα Hermite θα το βρει ο αναγνώστης στο βιβλίο: Σ. Τραχανάς, *Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις*, σ. 446.

(*) Προφανώς, για τα άρτια πολυώνυμα το k θα παίρνει μόνο τις άρτιες τιμές και για τα περιττά μόνο τις περιττές.

Θα τελειώσουμε με ένα βασικό ερώτημα που σίγουρα θα έχει εγερθεί στους πιο ανήσυχους αναγνώστες. Το ερώτημα είναι πολύ απλό. Μπορούν να λυθούν με τη διαδικασία που ακολουθήσαμε στον αρμονικό ταλαντωτή $-$γνωστή ως η *πολυωνυμική μέθοδος*$-$ και άλλα «παρόμοια» δυναμικά; Μπορούμε, παραδείγματος χάριν, να λύσουμε με τον ίδιο τρόπο δυναμικά όπως τα $V = gx^4$ ή $V = gx^6$ που είναι τόσο όμοια με τον αρμονικό ταλαντωτή; Σε πρώτο κοίταγμα θα έλεγε κανείς πως *ναι*. Αν μη τι άλλο διότι η πολυωνυμική μέθοδος, όπως την παρουσιάσαμε πριν, φαίνεται τελείως γενική. Μετά την αναγκαία *διαστατική απλοποίηση* ($\hbar = m = g = 1$) δεν έχουμε παρά να βρούμε την *ασυμπτωτική συμπεριφορά στο άπειρο* $-$σίγουρα ένα εκθετικό της μορφής $\exp(-\lambda x^{\mu})$ με κατάλληλα λ και $\mu-$ και να γράψουμε τη ζητούμενη πλήρη λύση υπό τη γνωστή μορφή

$$\psi(x) = \psi_\infty(x)F(x) = e^{-\lambda x^{\mu}}F(x) \tag{7.34}$$

όπου $F(x)$ η *συμπληρωματική συνάρτηση* για την οποία ευλόγως εικάζουμε ότι θα έχει τη μορφή ενός πολυωνύμου όλων των δυνατών βαθμών ώστε η πλήρης κυματοσυνάρτηση (7.34) να έχει τον απαιτούμενο αριθμό κόμβων, δηλαδή την αναμενόμενη *κυματοειδή μορφή*. Η περίπτωση του δυναμικού $V = \frac{1}{2}gx^6$ $-$το $1/2$ μπήκε για λόγους κατοπινής ευκολίας$-$ προσφέρεται ως ένα καλό παράδειγμα για το «πού μπορεί να κολλήσει» το παραπάνω γενικό σχέδιο. Όπως μπορείτε μόνοι σας να δείτε $-$με κατευθείαν αντικατάσταση στην εξίσωση Schrödinger$-$ ο ασυμπτωτικός παράγοντας σε αυτή την περίπτωση έχει τη μορφή $\psi_\infty(x) = \exp(-x^4/4)$, οπότε η (7.34) θα γράφεται ως

$$\psi(x) = e^{-x^4/4}F(x)$$

και η αντικατάστασή της στην εξίσωση Schrödinger

$$\psi'' + (2E - x^6)\psi = 0 \qquad (\hbar = m = g = 1)$$

θα δώσει τη νέα, ως προς F, εξίσωση

$$F'' - 2x^3F' + (2E - 3x^2)F = 0$$

για την οποία εύκολα θα διαπιστώσει ο αναγνώστης $-$π.χ. δοκιμάζοντας ως υποψήφιες λύσεις τις $F_0 = 1$ ή $F_1 = x-$ ότι *δεν διαθέτει πολυωνυμικές λύσεις*!

Η πολυωνυμική μέθοδος δεν είναι λοιπόν μια μέθοδος γενικής εφαρμοσιμότητας, όπως θα παρασυρόταν να υποθέσει κανείς από την απατηλή γενικότητα της εκφωνήσεώς της. Η μέθοδος «κολλάει» σε αυτό που είναι ο λόγος της ονομασίας της: στην ύπαρξη πολυωνυμικών λύσεων. Η οποία όχι μόνο δεν είναι αυτονόητη, αλλά αποτελεί ένα πολύ σπάνιο «γεγονός» που μπορεί να εμφανιστεί μόνο υπό πολύ ειδικές προϋποθέσεις, οι οποίες περιγράφονται λεπτομερώς σε ένα από τα *συμπληρώματα θεωρίας* που θα βρει ο αναγνώστης στο CD που συνοδεύει το βιβλίο. Γι' αυτό το θέμα μπορείτε να δείτε επίσης το βιβλίο: Σ. Τραχανάς, *Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις*, Κεφ. 9.

Θα πρέπει όμως να πούμε ταυτόχρονα ότι *όλα* τα «κλασικά» προβλήματα της κβαντομηχανικής που επιδέχονται ακριβή λύση –αρμονικός ταλαντωτής, άτομο υδρογόνου, θεωρία στροφορμής κ.λπ.– λύνονται με την πολυωνυμική μέθοδο. Και επειδή με αυτά ακριβώς τα προβλήματα πρόκειται να ασχοληθούμε εδώ, η πολυωνυμική μέθοδος θα είναι το *βασικό*$^{(*)}$ μας εργαλείο ακριβούς επίλυσης της εξίσωσης Schrödinger στη συνέχεια του βιβλίου. Μάλιστα, προκειμένου να πείσουμε τον αναγνώστη ότι η εφαρμογή της μεθόδου –και ο υπολογισμός βασικών αποτελεσμάτων όπως οι *ιδιοτιμές*– είναι κυριολεκτικά τετριμμένη, θα συνεχίσουμε την τακτική που υιοθετήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο και θα αποφύγουμε την αυστηρή εφαρμογή της μεθόδου των δυναμοσειρών. Θα θεωρούμε δηλαδή ως δεδομένο ότι υπάρχουν πολυωνυμικές λύσεις και θα εφαρμόζουμε τη σχετική *αναγκαία συνθήκη* η οποία μας δίνει τις ζητούμενες ιδιοτιμές μέσα σε μια γραμμή. Και, βεβαίως, θα κατασκευάζουμε εκπεφρασμένα τουλάχιστον τα δύο πρώτα πολυώνυμα του κάθε προβλήματος, αφ' ενός για να βεβαιωθούμε ότι όντως οι πολυωνυμικές λύσεις υπάρχουν και, αφ' ετέρου, διότι αντιπροσωπεύουν τις πιο βασικές καταστάσεις του συγκεκριμένου κβαντικού συστήματος: τη θεμελιώδη και την πρώτη ή δεύτερη από τις διεγερμένες του. Με την απλοποιημένη αυτή εκδοχή της πολυωνυμικής μεθόδου η ακριβής επίλυση των «κλασικών» προβλημάτων της κβαντομηχανικής θα αποδειχθεί πολύ ευκολότερη από ό,τι στην κλασική μηχανική!

Α: Αυτοεξέταση πολλαπλής επιλογής

1. Η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή είναι 1 eV. Αν ο ταλαντωτής βρίσκεται στην πέμπτη διεγερμένη στάθμη του η ενέργειά του θα είναι ίση με:

α) 5 eV, β) 11 eV, γ) 9 eV, δ) 11/2 eV.

✔ **2.** Η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή είναι 2 eV. Η ενέργεια του ταλαντωτή όταν η κατάστασή του περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = N(2x^3 - 3x)\, e^{-x^2/2} \quad \text{(φυσικές μονάδες)}$$

θα είναι ίση (σε συνήθεις μονάδες) με:

α) 7 eV β) 12 eV, γ) 14 eV, δ) 10 eV.

(*) Όχι όμως και το μόνο. Στο Συμπλήρωμα θεωρίας Β.16 θα αναπτύξουμε και μια εναλλακτική μέθοδο που βασίζεται όχι σε τεχνικές διαφορικών εξισώσεων αλλά σε καθαρά *αλγεβρικούς χειρισμούς*, εξ ου και η ονομασία της ως η *αλγεβρική μέθοδος*.

*3. Ένα σωματίδιο βρίσκεται στην πέμπτη διεγερμένη στάθμη ενός αρμονικού ταλαντωτή. Η πιθανότητα να το βρούμε οπουδήποτε στο διάστημα $(0,\infty)$ είναι ίση με:

α) $1/4$, β) $1/\sqrt{2}$, γ) $2/3$, δ) $1/2$.

*4. Ένας αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται στην ενεργειακή κατάσταση με $n=3$. Ο αριθμός των κόμβων της αντίστοιχης κυματοσυνάρτησης είναι ίσος με:

α) τρία, β) τέσσερα, γ) δύο, δ) πέντε.

✔*5. Στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου έχει, σε μια ορισμένη στιγμή, τη μορφή

$$\psi(x) = N(x^2+1)\, e^{-x^2/2}.$$

Οι μόνες τιμές που μπορεί να προκύψουν από μετρήσεις της ενέργειάς του είναι οι:

α) $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots$, β) $\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2}, \cdots$, γ) $\frac{5}{2}$, δ) $\frac{1}{2}, \frac{5}{2}$.

*6. Στην κατάσταση του προηγούμενου προβλήματος η μέση ενέργεια του σωματιδίου είναι ίση με:

α) $\langle E\rangle = 3$, β) $\langle E\rangle = 1/3$, γ) $\langle E\rangle = 19/22$, δ) $\langle E\rangle = 5/2$.

✔7. Η ελάχιστη δυνατή ενέργεια ενός κβαντικού σωματιδίου μάζας m που υπόκειται στη δράση του δυναμικού

$$V(x) = V_0 \cosh \lambda x$$

είναι, *περίπου*, ίση με:

α) $\dfrac{\hbar\lambda V_0}{2\sqrt{m}}$, β) $V_0 + \dfrac{1}{2}\hbar\lambda\sqrt{\dfrac{V_0}{m}}$, γ) V_0, δ) $\dfrac{1}{2}\,\hbar\lambda\sqrt{\dfrac{V_0}{m}}$.

*8. Η κυματοσυνάρτηση της δεύτερης διεγερμένης στάθμης του αρμονικού ταλαντωτή έχει τη μορφή:

α) $\psi(x) = N(x^2+x+1)\, e^{-x^2/2}$, γ) $\psi(x) = N(2x^3-x)\, e^{-x^2/2}$,

β) $\psi(x) = N(2x^2-1)\, e^{-x^2/2}$, δ) $\psi(x) = N(2x^2+1)\, e^{-x^2/2}$.

✔*9. Μια μέτρηση της ενέργειας ενός αρμονικού ταλαντωτή έδωσε την τιμή $E=7/2$ ($\hbar = m = \omega = 1$, όπως πάντα). Η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει την κατάσταση του ταλαντωτή αμέσως μετά τη μέτρηση θα έχει τη μορφή:

α) $\psi(x) = N(x^2-1)\, e^{-x^2/2}$, γ) $\psi(x) = N(2x^4-x^2-3)\, e^{-x^2/2}$,

β) $\psi(x) = N(2x^3-3x)\, e^{-x^2/2}$, δ) $\psi(x) = N(x^3+x^2-1)\, e^{-x^2/2}$.

✔10. Ένας αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται σε μια ορισμένη στιγμή στην κατάσταση υπέρθεσης

$$\psi = N(\psi_0 + i\psi_2 + \sqrt{2}\,\psi_4).$$

Ο συντελεστής κανονικοποίησης N πρέπει να ισούται με:

α) $N = 1/2$, β) $N = 1/\sqrt{2}$, γ) $N = 1$, δ) $N = 1/\sqrt{3}$.

✔*11. Στην κατάσταση του προηγούμενου ερωτήματος η μέση θέση του ταλαντωτή είναι ίση με:

α) $\langle x \rangle = \sqrt{2}$, β) $\langle x \rangle = 0$, γ) $\langle x \rangle = -1$, δ) $\langle x \rangle = 2$.

12. Το χαρακτηριστικό μήκος του αρμονικού ταλαντωτή –δηλαδή ο μοναδικός εκείνος συνδυασμός των παραμέτρων $\hbar, m$ και ω με διαστάσεις μήκους– είναι το

α) $a = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$, β) $a = \dfrac{\hbar}{m\omega}$, γ) $a = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$, δ) $a = \dfrac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}$.

✔13. Στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή η αβεβαιότητα ορμής της θεμελιώδους καταστάσεως είναι ίση με $\Delta p = 1/\sqrt{2}$. Στις συνήθεις μονάδες θα είναι:

α) $\Delta p = \sqrt{\dfrac{\hbar m\omega}{2}}$, γ) $\Delta p = \dfrac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}$,

β) $\Delta p = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}$, δ) $\Delta p = \hbar\sqrt{\dfrac{m\omega}{2}}$.

✔14. Στην κατάσταση υπέρθεσης

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_0 + \psi_1\right)$$

η μέση ενέργεια του σωματιδίου είναι ίση με:

α) $\langle E \rangle = 1/2$, β) $\langle E \rangle = 3/2$, γ) $\langle E \rangle = \sqrt{2}$, δ) $\langle E \rangle = 1$.

15. Στην κατάσταση του προηγούμενου ερωτήματος η αβεβαιότητα ενέργειας είναι ίση με:

α) $\Delta E = 1/2$, β) $\Delta E = 1/4$, γ) $\Delta E = 2$, δ) $\Delta E = 1$.

Β: Ασκήσεις και προβλήματα

✔1. Στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή η κατάσταση του σωματιδίου, σε μια ορισμένη στιγμή, περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = N e^{-\lambda x^2/2}.$$

Υπολογίστε την πιθανότητα να προκύψει από μια μέτρηση η ενέργεια $E_0 = 1/2$ της θεμελιώδους στάθμης. Ποια είναι η πιθανότητα να προκύψει από τη μέτρηση η ενέργεια $E_1 = 3/2$ της πρώτης διεγερμένης στάθμης;

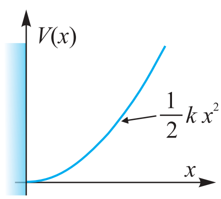
✔2. *Φαινόμενο Stark* ονομάζουμε τη μετατόπιση των ενεργειακών σταθμών ενός κβαντικού συστήματος που προκαλείται από την παρουσία ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου. Η προκαλούμενη μετατόπιση είναι γνωστή ως «μετατόπιση Stark». Η απλούστερη περίπτωση φαινομένου Stark αντιστοιχεί σε έναν φορτισμένο αρμονικό ταλαντωτή που βρίσκεται μέσα σε ένα ομογενές ηλεκτρικό πεδίο κατά τον άξονα της ταλάντωσής του. Το δυναμικό του προβλήματος θα έχει τότε τη μορφή

$$V = \frac{1}{2}\,kx^2 - q\,\mathcal{E}x, \tag{1}$$

όπου q το φορτίο του ταλαντευόμενου σωματιδίου και $\mathcal{E}$ η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου. Δείξτε ότι η παρουσία του πρόσθετου όρου $-q\,\mathcal{E}x$ στην (1) έχει ως αποτέλεσμα να μετατοπιστούν όλα τα ενεργειακά επίπεδα του αρμονικού ταλαντωτή κατά το σταθερό ποσόν

$$\Delta E = -\,\frac{q^2\mathcal{E}^2}{2k}$$

το οποίο αποτελεί (εξ ορισμού) και τη *μετατόπιση Stark* του προβλήματος.

✔ **3.** 

Να βρεθεί η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας για το δυναμικό του παρατιθέμενου σχήματος. Ποιο είναι το πλήρες σύνολο των ιδιοκαταστάσεών του και των αντίστοιχων ιδιοτιμών;

4. Χρησιμοποιήστε την παραβολική προσέγγιση για να υπολογίσετε τις δυο-τρεις πρώτες στάθμες του δυναμικού $V(x) = V_0 e^{\lambda x^2}$. Τι έχετε να πείτε για τα ανώτερα ενεργειακά επίπεδα αυτού του δυναμικού σε σύγκριση με εκείνα του αρμονικού ταλαντωτή;

5. Η κατάσταση ενός αρμονικού ταλαντωτή σε μια ορισμένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την άπειρη επαλληλία ιδιοσυναρτήσεων

$$\psi(x) = N\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^{n/2}}{\sqrt{n!}}\,\psi_n(x)$$

όπου λ ένας δεδομένος, αλλά τυχών, πραγματικός αριθμός.

α) Υπολογίστε τη μέση ενέργεια $\langle E\rangle$ και την αντίστοιχη αβεβαιότητα ΔE του ταλαντωτή.

β) Για μια συγκεκριμένη τιμή του λ –έστω την $\lambda = 2$– βρείτε ποια είναι η πιθανότερη τιμή ενέργειας που μπορεί να προκύψει σε μια μέτρηση και ποια η πιθανότητά της.

✔ **6.** Στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή η κατάσταση του σωματιδίου σε μια ορισμένη στιγμή περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = Nx^2 e^{-x^2/2}. \tag{1}$$

Όλοι οι ισχυρισμοί που ακολουθούν είναι λανθασμένοι. Μπορείτε να εξηγήσετε γιατί, χωρίς να κάνετε κανέναν υπολογισμό;

α) Οι μόνες τιμές ενέργειας που μπορούν να προκύψουν από τις μετρήσεις είναι εκείνες που αντιστοιχούν στις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις. Δηλαδή οι E_0, E_2, $E_4, \ldots$

β) Η μέση ενέργεια του σωματιδίου στην κατάσταση (1) είναι

$$\text{i)}\ \langle E\rangle = 3, \qquad \text{ii)}\ \langle E\rangle = 1/4.$$

γ) Η μέση κινητική ενέργεια του σωματιδίου στην κατάσταση (1) είναι

$$\langle K\rangle = 5/2.$$

δ) Η μέση ορμή του σωματιδίου στην κατάσταση (1) είναι

$$\langle p\rangle = 2.$$

7. Ένα σωματίδιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη ενός αρμονικού ταλαντωτή. Ποια είναι η πιθανότητα να το βρούμε στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή κίνησης;

Υπόδειξη: Για να υπολογίσετε *προσεγγιστικά* το σχετικό ολοκλήρωμα $\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\,dx$ κάντε κάτι ανάλογο όπως και για το $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\,dx$ αλλά αντί του τετραγώνου ολοκληρώστε σε έναν κατάλληλο κύκλο.

8. Υπολογίστε την πυκνότητα πιθανότητας των ορμών ενός αρμονικού ταλαντωτή στη θεμελιώδη του κατάσταση. Ποια είναι η πιθανότητα να βρεθεί ο ταλαντωτής με ορμές που είναι κλασικά απαγορευμένες για τη δεδομένη ενεργειακή κατάσταση;

9. Χρησιμοποιήστε την αρχή της αβεβαιότητας για να εκτιμήσετε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης του δυναμικού $V = gx^4$.

✔ **10.** Ένα σωματίδιο μάζας m εκτελεί τριδιάστατη κίνηση υπό την επίδραση του δυναμικού

$$V = \frac{1}{2}\,kx^2 + \frac{1}{2}\,ky^2 + \frac{1}{2}\,kz^2 = \frac{1}{2}\,m\omega^2(x^2+y^2+z^2),$$

που είναι γνωστό ως ο *τριδιάστατος αρμονικός ταλαντωτής*. Βρείτε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του και δώστε το ενεργειακό διάγραμμα για τις τρεις πρώτες στάθμες, δείχνοντας και τον εκφυλισμό της καθεμιάς. Δουλέψτε στο σύστημα μονάδων όπου $\hbar = m = \omega = 1$.

11. Ένα σωματίδιο μάζας m κινείται υπό την επίδραση του δυναμικού (*ανισότροπος αρμονικός ταλαντωτής*)

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}\,kx^2 + \frac{1}{2}\,ky^2 + 2\,kz^2.$$

Κάντε το ενεργειακό διάγραμμα για τις τέσσερις πρώτες στάθμες του και κατασκευάστε εκπεφρασμένα την ιδιοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης.

✔ **12.** Η κατάσταση ενός ταλαντωτή περιγράφεται, κατά τη χρονική στιγμή $t=0$, από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi = N(2x+1)\,e^{-x^2/2}.$$

Υπολογίστε τη μέση θέση του ταλαντωτή, ύστερα από χρόνο t.

✔**13.** Τα ακόλουθα ερωτήματα μπορούν να απαντηθούν χωρίς κανέναν υπολογισμό:

α) Ένα σωματίδιο βρίσκεται στην πρώτη διεγερμένη στάθμη ενός αρμονικού ταλαντωτή. Ποια είναι η πιθανότητα να το βρούμε στον θετικό ημιάξονα x;

β) Κάποιος ισχυρίζεται ότι η κυματοσυνάρτηση της δεύτερης διεγερμένης στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή δίνεται από την έκφραση

$$\psi_2(x) = N(2x^2 + 1)\, e^{-x^2/2}.$$

Συμφωνείτε;

γ) Σας ζητήθηκε να υπολογίσετε τη μέση ενέργεια ενός αρμονικού ταλαντωτή, με $\hbar = m = \omega = 1$, για μια δεδομένη κυματοσυνάρτηση και βρήκατε $\langle E\rangle = 1/4$. Το αποτέλεσμά σας είναι σίγουρα λάθος. Γιατί;

δ) Ένας αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται στην κατάσταση υπέρθεσης

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\psi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\psi_1.$$

Κάποιος υπολόγισε την αβεβαιότητα ενέργειας ΔE σε αυτή την κατάσταση και τη βρήκε ίση με 3 ($\Delta E = 3$). Πείτε του ότι το αποτέλεσμά του είναι *προφανώς* λαθεμένο.

14. Επανειλημμένες μετρήσεις της ενέργειας στην ίδια φυσική κατάσταση ενός αρμονικού ταλαντωτή έδωσαν μόνο τις δύο τιμές $E_0 = 1/2$ και $E_1 = 3/2$ με συχνότητες $P_0 = 1/3$ και $P_1 = 2/3$.

α) Γράψτε την πιο γενική κατάσταση του ταλαντωτή που ανταποκρίνεται στα δεδομένα αυτών των μετρήσεων.

β) Προσδιορίστε επακριβώς αυτή την κατάσταση αν σας δίνεται επιπλέον ένα από τα ακόλουθα δεδομένα:

i) $\langle x\rangle = 0$, ii) $\langle x\rangle = 1/3$, iii) $\langle p\rangle = 0$, iv) $\langle p\rangle = \sqrt{2}/3$.

15. Είναι γνωστό εκ των προτέρων ότι η κατάσταση ενός αρμονικού ταλαντωτή είναι μια επαλληλία της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης καταστάσεώς του. Προσδιορίστε επακριβώς αυτή την κατάσταση αν σας δίνεται επιπλέον *ένα* από τα ακόλουθα *ζεύγη* δεδομένων:

α) $\langle E\rangle = 1$, $\langle x\rangle = 1/2$,

β) $\langle x\rangle = 1/2$, $\langle p\rangle = 1/2$,

γ) $\langle E\rangle = 5/4$, $\langle p\rangle = 0$.

16. Συμπλήρωμα θεωρίας: Η αλγεβρική μέθοδος λύσης του αρμονικού ταλαντωτή

Στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή ($\hbar = m = \omega = 1$) η χαμιλτονιανή του έχει τη μορφή

$$H = \frac{1}{2}\,p^2 + \frac{1}{2}\,x^2 \equiv \frac{1}{2}\,(x^2 + p^2), \tag{1}$$

η οποία –αν τα x και p ήταν κλασικές (μετατιθέμενες) μεταβλητές– θα μας υπέβαλε την ιδέα να εισαγάγουμε τις νέες μεταβλητές

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(x + ip), \qquad a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(x - ip), \tag{2}$$

βάσει των οποίων η (1) θα έπαιρνε τη –σαφώς απλούστερη– *μορφή γινομένου*

$$H = a^* a \equiv a a^*. \tag{3}$$

Δεν είναι λοιπόν καθόλου «τρελλό» να σκεφτούμε μήπως η εισαγωγή των δύο νέων τελεστών (που, προφανώς, ο ένας είναι συζυγής του άλλου)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(x + ip), \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(x - ip), \tag{4}$$

έχει κάποια χρησιμότητα και στο αντίστοιχο κβαντομηχανικό πρόβλημα. Και πράγματι έχει, όπως θα δείτε ακολουθώντας τα παρακάτω βήματα.

α) Με αφετηρία τη βασική μεταθετική σχέση $[x,p] = i$ δείξτε ότι οι τελεστές a και $a^\dagger$ ικανοποιούν την

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{5}$$

β) Δείξτε ότι η χαμιλτονιανή (1) γράφεται, συναρτήσει των τελεστών a και $a^\dagger$, ως

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}, \tag{6}$$

που διαφέρει από την κλασική έκφραση (3) ως προς τον σταθερό προσθετέο $1/2$. Πού οφείλεται αυτή η διαφορά;

γ) Αποδείξτε ότι οι τελεστές a και $a^\dagger$ ικανοποιούν –με τη χαμιλτονιανή (6)– τις ακόλουθες μεταθετικές σχέσεις:

$$[H, a] = -a, \qquad [H, a^\dagger] = a^\dagger. \tag{7}$$

δ) Βάσει των (7), δείξτε ότι οι τελεστές a και $a^\dagger$ έχουν την ακόλουθη βασική ιδιότητα: Όταν δρουν πάνω σε μια ιδιοσυνάρτηση, ψ_E, της χαμιλτονιανής H με ιδιοτιμή E, ο μεν $a^\dagger$ ανεβάζει την ιδιοτιμή κατά μονάδα, ο δε a την κατεβάζει επίσης κατά μονάδα. Θα πρέπει δηλαδή να δείξετε ότι οι κυματοσυναρτήσεις $a^\dagger\psi_E$ και $a\psi_E$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του H με ιδιοτιμές $E+1$ και $E-1$ αντίστοιχα.
Υπόδειξη: Αφήστε τα δύο μέλη των (7) να δράσουν πάνω στην ιδιοσυνάρτηση ψ_E για την οποία ισχύει, εξ υποθέσεως, ότι $H\psi_E = E\psi_E$.

ε) Όμως, αφού για τυχούσα ιδιοτιμή E οι $E \pm 1$ είναι επίσης ιδιοτιμές, αυτό συνεπάγεται ότι η χαμιλτονιανή H έχει *ισαπέχουσες ιδιοτιμές* με σταθερή μεταξύ τους απόσταση ίση με *ένα*. Αν λοιπόν E_0 είναι η χαμηλότερη από αυτές, τότε όλες οι άλλες θα προκύπτουν από αυτήν, ανεβαίνοντας προς τα πάνω με βήμα *μονάδα*. Το σύνολο των ιδιοτιμών θα δίνεται, επομένως, από τη σχέση

$$E_n = E_0 + n, \tag{8}$$

όπου E_0 η ιδιοτιμή της θεμελιώδους στάθμης. Δείξτε –χρησιμοποιώντας την (6) και το γεγονός ότι η ιδιοσυνάρτηση ψ_0 της θεμελιώδους στάθμης είναι η *χαμηλότερη δυνατή*– ότι $E_0 = 1/2$, οπότε η (8) θα δίνει πράγματι τις γνωστές μας ιδιοτιμές του αρμονικού ταλαντωτή.

στ) Επικαλεστείτε την ιδιότητα της ψ_0 που αναφέραμε πριν, για να γράψετε μια πρωτοτάξια διαφορική εξίσωση βάσει της οποίας η ψ_0 μπορεί να υπολογιστεί αμέσως. Με γνωστή την ψ_0, τι θα κάνατε για να υπολογίσετε και τις ανώτερες ιδιοσυναρτήσεις; Κάντε το τουλάχιστον για τις δύο πρώτες από αυτές.

ζ) Αν ψ_n είναι οι *κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις* του αρμονικού ταλαντωτή, δείξτε ότι η δράση των a και $a^\dagger$ πάνω σε αυτές δίνει

$$a\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}, \qquad a^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}. \tag{9}$$

η) Χρησιμοποιήστε τις (9) για να υπολογίσετε με έναν καθαρά *αλγεβρικό τρόπο* –δηλαδή χωρίς χρήση της εκπεφρασμένης μορφής των ιδιοσυναρτήσεων– τις μέσες τιμές

$$\langle x^2\rangle \equiv (\psi_n, x^2\psi_n), \qquad \langle p^2\rangle \equiv (\psi_n, p^2\psi_n), \qquad \langle x^4\rangle \equiv (\psi_n, x^4\psi_n).$$

Τα αποτελέσματα που πρέπει να βρείτε είναι:

$$\langle x^2\rangle = \langle p^2\rangle = n + \frac{1}{2}, \qquad \langle x^4\rangle = \frac{3}{4}\,(2n^2 + 2n + 1). \tag{10}$$

Για λόγους που πρέπει να σας είναι ήδη φανεροί, οι τελεστές $a^\dagger$ και a είναι γνωστοί ως *τελεστές δημιουργίας* και *καταστροφής* (creation and destruction (ή annihilation) operators) ή επίσης ως *τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης* (raising and lowering operators).

C: Υπολογιστικό εργαστήριο

1. Ορίστε μέσω της *Mathematica* τη συνάρτηση $P(a)$ που δίνει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο οπουδήποτε στο διάστημα $[-a, a]$ στη θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή. Κάντε μετά τη γραφική παράσταση της $P(a)$ και «διαβάστε» από αυτήν τις τιμές του a για τις οποίες η πιθανότητα ανεύρεσης του σωματιδίου είναι: α) 50%, β) 80%, γ) 99%. Πώς θα βρίσκατε αυτές τις τιμές με έναν ακριβέστερο τρόπο; Επαναλάβετε το ίδιο για την κυματοσυνάρτηση $\psi_1(x) = Nxe^{-x^2/2}$ της πρώτης διεγερμένης στάθμης, αφού υπολογίσετε πρώτα –με τη *Mathematica*– την ακριβή τιμή του συντελεστή κανονικοποίησης N.

2. Χρησιμοποιήστε τη *Mathematica* για να υπολογίσετε τις *ακριβείς τιμές* των αβεβαιοτήτων θέσης και ορμής για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή. Το ίδιο και για τη δεύτερη διεγερμένη κατάσταση της οποίας η κυματοσυνάρτηση έχει τη μορφή

$$\psi_2(x) = N(2x^2 - 1)\,e^{-x^2/2}.$$

3. Τα πολυώνυμα Hermite $H_n(x)$ συμβολίζονται στη *Mathematica* ως `HermiteH[n,x]`. Ζητήστε από τη *Mathematica* –με μία εντολή– να σας δώσει τα πέντε πρώτα από αυτά και συγκρίνετε με τις σχετικές εκφράσεις του Πίνακα 7.1.

4. Ορίστε, με μία εντολή, τις κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή και ζητήστε μετά –με μία δεύτερη εντολή– εκείνες που καταγράφονται στον Πίνακα 7.1 ώστε να βεβαιωθείτε ότι ο πίνακας αυτός είναι σωστός.

5. Ορίστε στη *Mathematica* τη συνάρτηση $P(n)$ που δίνει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή όταν η κατάστασή του είναι μία από τις ιδιοκαταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή. Ζητήστε μετά τις τιμές της μέχρι $n = 9$ και βεβαιωθείτε ότι ο Πίνακας 7.2 είναι σωστός.

6. α) Ορίστε στη *Mathematica* τη συνάρτηση $c(\lambda, n)$ που δίνει το πλάτος πιθανότητας να βρούμε το σωματίδιο με ενέργεια E_n όταν η κυματοσυνάρτησή του –στο φυσικό σύστημα μονάδων του αρμονικού ταλαντωτή– έχει τη μορφή

$$\psi(x, \lambda) = \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\, e^{-\lambda x^2/2}. \tag{1}$$

β) Υπολογίστε, ως συναρτήσεις του λ, τις πιθανότητες $P_0(\lambda)$ και $P_2(\lambda)$ να βρεθεί το σωματίδιο που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση (1), στη θεμελιώδη ή τη δεύτερη διεγερμένη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή. Γιατί παραλείψαμε την πιθανότητα $P_1(\lambda)$;

γ) Τι συνάρτηση περιμένετε να ορίζει η εντολή

$$\psi[\mathtt{x\_},\ \lambda\_,\ \mathtt{m\_}]\ \mathtt{:=}\ \mathtt{Sum}[\mathtt{c}[\lambda,\mathtt{n}] * \psi[\mathtt{x},\mathtt{n}],\ \{\mathtt{n},\ 0,\ \mathtt{m}\}]$$

στο όριο $m \to \infty$; Επιβεβαιώστε την πρόβλεψή σας με μερικές γραφικές παραστάσεις.

7. Σχεδιάστε με μία εντολή της *Mathematica* τη γραφική παράσταση του Σχήματος 7.3 και εν συνεχεία την ίδια γραφική παράσταση αλλά με τις πυκνότητες πιθανότητας αντί των κυματοσυναρτήσεων.

(Εργασία • Αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Schrödinger: Η βλητική μέθοδος)

8. Με εξαίρεση τον αρμονικό ταλαντωτή και κάποια άλλα πολύ ειδικά δυναμικά, τα περισσότερα από τα δυναμικά που εμφανίζονται στις εφαρμογές δεν μπορούν να επιλυθούν ακριβώς και τότε η προσφυγή σε αριθμητικές μεθόδους επίλυσης (ή άλλες προσεγγιστικές τεχνικές) είναι αναπόφευκτη. Ειδικά για μονοδιάστατα δυναμικά $V(x)$ μια τέτοια αριθμητική μέθοδος επίλυσης είναι η λεγόμενη *βλητική μέθοδος*. Ακόμα, ειδικότερα για κατοπτρικά συμμετρικά δυναμικά ($V(-x) = V(x)$), η μέθοδος συνίσταται στα εξής βήματα:

α) *Για τις άρτιες λύσεις*: Να λύσουμε (αριθμητικά βεβαίως) την εξίσωση Schrödinger $\psi'' + (\epsilon - U(x))\psi = 0$, για μια αυθαίρετη τιμή της ενέργειας E ή ϵ, και με αρχικές συνθήκες

$$\psi(0) = 1, \qquad \psi'(0) = 0 \ \ \text{(Άρτιες λύσεις)}$$

και να προσπαθήσουμε, αλλάζοντας κατά μικρά βήματα το E, να βρούμε εκείνη την τιμή του για την οποία η λύση $\psi(x, E)$ τείνει να μηδενιστεί για μεγάλα x.

β) *Για τις περιττές λύσεις*: Η ίδια διαδικασία όπως πριν, αλλά με αρχικές συνθήκες

$$\psi(0) = 0, \qquad \psi'(0) = 1 \ \ \text{(Περιττές λύσεις)}$$

οι οποίες προσιδιάζουν, βεβαίως, σε μια περιττή λύση που υποχρεωτικά θα μηδενίζεται στην αρχή ενώ η κλίση της θα μπορεί να οριστεί αυθαίρετα –και έτσι διαλέγουμε $\psi'(0) = 1$– αφού η κανονικοποίηση γίνεται πάντα εκ των υστέρων.

Η «υλοποίηση» της παραπάνω μεθόδου στη *Mathematica* είναι πολύ απλή. Το βασικό βήμα είναι να ορίσουμε, μέσω της εντολής `NDSolve`, τη συνάρτηση $\psi(x, E)$, το οποίο γίνεται πολύ εύκολα με μια αναβλητική εκτέλεση της `NDSolve` για τυχόν E και εν συνεχεία με μια εντολή αντικατάστασης, αφού η «έξοδος» της `NDSolve` έχει μια τέτοια μορφή. (Είναι μια εντολή αντικατάστασης.) Παραδείγματος χάριν, για τον αρμονικό ταλαντωτή –και ειδικότερα για τις άρτιες λύσεις– η λύση $\psi(x, E)$ ορίζεται μέσω των δύο εντολών

```
s[E_] := NDSolve[{ψ''[x] + (2E - x^2) * ψ[x] == 0, ψ[0] == 1, ψ'[0] == 0},
                 ψ, {x, -4, 4}]
ψ[x_, E_] := ψ[x]/.s[E] [[1]]
```

όπου το διάστημα στο οποίο αναζητούμε τη λύση περιορίστηκε στο $[-4, 4]$ διότι, έξω από αυτό, οι περισσότερες ιδιοσυναρτήσεις θα έχουν πρακτικά μηδενιστεί λόγω του ασυμπτωτικού εκθετικού $e^{-x^2/2}$. Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να είχαμε αφήσει το διάστημα αυτό απροσδιόριστο –π.χ., $[-a, a]$– και να ορίζαμε τις συναρτήσεις $s[E, a]$ και $\psi[x, E, a]$ με σκοπό να δούμε εκ των υστέρων μέχρι πού φτάνουν οι λύσεις και επομένως πόσο μικρό ή μεγάλο πρέπει να εκλεγεί το a. Όσο για την παρουσία του συμβόλου [[1]] στη δεύτερη εντολή, υπενθυμίζουμε ότι δηλώνει *επιλογή του πρώτου στοιχείου από μια λίστα* και η σκοπιμότητά του θα σας γίνει φανερή αν δείτε τι μορφή έχει η έξοδος της `s[E]`.

Τα περαιτέρω είναι πλέον πολύ απλά. Οι ιδιοτιμές E_n είναι εκείνες οι τιμές του E για τις οποίες η λύση $\psi(x, E)$ μηδενίζεται στο $\pm\infty$ για το οποίο έχουμε υποθέσει εδώ ότι βρίσκεται λίγο… κοντύτερα, δηλαδή στο ± 4. Οι ιδιοτιμές θα υπολογιστούν λοιπόν από τη συνθήκη

$$\psi(4, E) = 0,$$

η οποία λύνεται ευκολότατα στη *Mathematica* είτε με μια γραφική παράσταση της συναρτήσεως $f(E) = \psi(4, E)$ είτε με χρήση της `FindRoot` όταν απαιτείται μεγαλύτερη ακρίβεια.

Κάντε όλα τα παραπάνω στη *Mathematica* και αφού βρείτε τις ιδιοτιμές –έστω τις δέκα πρώτες από αυτές (άρτιες και περιττές)– σχεδιάστε τις κυματοσυναρτήσεις και τις αντίστοιχες πυκνότητες πιθανότητας. Σκεφτείτε κάποια στιγμή μήπως η θέση του «απείρου» –δηλαδή το 4(!)– πρέπει να μετακινηθεί προς μεγαλύτερα x.

Επαναλάβετε τώρα την προηγούμενη διαδικασία για το δυναμικό $V = gx^4$, για το οποίο δεν υπάρχει ακριβής λύση. Εννοείται ότι θα δουλέψετε στο αδιάστατο σύστημα μονάδων $(\hbar = m = g = 1)$ –αυτονόητο για αριθμητικούς υπολογισμούς– και θα αποκαταστήσετε τις διαστάσεις στα τελικά αποτελέσματα για τις ιδιοτιμές. Ποια βασική διαφορά παρατηρείτε στο ενεργειακό φάσμα σε σχέση με τον αρμονικό ταλαντωτή; Έχετε κάποια θεωρητική εξήγηση γι' αυτό; Σκεφτείτε με βάση και το αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα, λύνοντάς το στη *Mathematica*. Τι συμβαίνει στην κλασική ταλάντωση καθώς αυξάνεται το πλάτος της;