Φ.Τ. ΧΑΤΖΗΙΩΑΝΝΟΥ
ΚΑΘΗΓΗΤΟΥ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΑΘΗΝΩΝ

# ΜΑΘΗΜΑΤΑ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

# I

ΑΘΗΝΑ 1978

ΚΕΦΑΛΑΙΟ I

## §1. Σύντομη ἱστορική ἀνασκόπηση καί κριτική τῆς Φυσικῆς, μέχρι τίς ἀρχές τοῦ 20οῦ αἰῶνα.

Μυθολογία .... Ἀριστοτέλης (384-322), .... ὁ χῶρος ἔχει ἀπόλυτη ὑπόσταση. Ὡς πρός τόν ἀπόλυτο χῶρο, πού θεωρεῖται Εὐκλείδειος, τά ἐλεύθερα ὑλικά σώματα παραμένουν ἀκίνητα, ἀντί τοῦ « κινοῦνται εὐθυγράμμως καί ἰσοταχῶς » τοῦ Γαλιλαίου.

Ὁ Galileo - Galilei (1564-1642) ἔβαλε τόν θεμέλιο λίθο - ΝΟΜΟΣ ΤΗΣ ΑΔΡΑΝΕΙΑΣ - στό οἰκοδόμημα, πού ὀνομάζουμε σήμερα « Κλασσική Μηχανική ».
Ἡ θέση ἑνός ὑλικοῦ σημείου καθορίζεται σέ σχέση μέ ἄλλα σώματα, ὡς πρός σύστημα ἀναφορᾶς, πού μπορεί νά ~~κινεῖται~~ έχει και το ίδιο ταχύτητα. Ὁ χῶρος ~~[illegible]~~ γίνεται περισσότερο σχετικός:
1 * Ἕνα ἐλεύθερο ὑλικό σημεῖο μακριά ἀπό ἄλλο σώματα, εύλογα νά υποθέτουμε ότι ὥστε ἡ δύναμη πού ἐξασκεῖται πάνω σ' αὐτό νά εἶναι μηδέν, κινεῖται εὐθυγράμμως καί ἰσοταχῶς ὡς πρός ἕνα ἀδρανειακό σύστημα ἀναφορᾶς ~~ή τυχαίο άλλο σύστημα που~~ κινείται ευ, π.χ. τούς ἀπλανεῖς το αδρανειακό σύστημα που καθορίζεται ἀστέρας. Ὁ νόμος αὐτός ἀποτελεῖ καί τόν ὁρισμό τοῦ ἀδρανειακοῦ συστήματος. Ἐξ' ἄλλου κάθε σύστημα ἀναφορᾶς πού κινεῖται εὐθυγράμμως καί ἰσοταχῶς ὡς πρός ἕνα ἀδρανειακό σύστημα εἶναι καί αὐτό ἀδρανειακό. Ὅπως διδασκόμαστε στή Μηχανική αὐτό ἐκφράζει τήν ὁμογένεια καί ἰσοτροπία τοῦ χώρου ὡς πρός τούς γενικούς μετασχηματισμούς τοῦ Γαλιλαίου καί ἔχει σάν συνέπεια τούς νόμους διατηρήσεως τῆς ὁλικῆς ὁρμῆς καί στροφορμῆς.

Ὁ κυριότερος ἀρχιτέκτωνας τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς ὑπῆρξε ὁ Sir Isaak Newtom (1642-1722) (ΝΟΜΟΙ

$$\mu_i \ddot{\vec{x}}_i(t) = \vec{F}_i$$

όπου $\mu_i$ η μάζα του $i$ σωματίου, ~~[illegible]~~ $\vec{F}_i(t)$ η δύναμη που ασκείται σ' αυτό τη χρον. στιγμή $t$

ΤΗΣ ΚΙΝΗΣΕΩΣ, ΕΛΞΗ ΤΩΝ ΜΑΖΩΝ (βαρύτης)). Ἀργότερα τό οἰκοδόμημα αὐτό συμπληρώθηκε καί διακοσμήθηκε μέχρι τελειότητος ἀπό τούς Lagrange, Hamiltom, Jacobi (ἐξισώσεις κινήσεως, ἀγκύλες Poissom κ.λ.π)

Ὅταν περίπου στά μέσα τοῦ 19ου αἰώνα ὁ J. C. Maxwell ἔδωσε καί τίς θεμελιώδεις ἐξισώσεις τῆς Ἠλεκτρομαγνητικῆς θεωρίας, φάνηκε ὅτι εἴχαμε φθάσει στό τελικό ὁρόσημο. Ὁ "ὑπερέγκέφαλος" τοῦ Laplace θά μποροῦσε, κατ' ἀρχήν, νά ἐπιλύσει ὅλα τά προβλήματα, κίνηση τῶν οὐρανίων σωμάτων, ὀπτικά φαινόμενα κ.λ.π καί μέ μιά παρατήρηση τοῦ σύμπαντος σέ μιά χρονική στιγμή νά προβλέψει ὅλο τό μέλλον, μέχρι καί τῆς λεπτομεριακῆς κινήσεως κάθ' ~~ἑκάστου~~ μορίου, καί νά διαβάσει τό παρελθόν. Οἱ Φυσικοί τῶν ἐπομένων γενεῶν εἶχαν καταδικαστεῖ γιά πάντα σέ ἀριθμητικές μηχανές.

Πρός τό τέλος ὅμως τοῦ 19ου καί στίς ἀρχές τοῦ 20οῦ αἰῶνα μέ τήν βοήθεια καί τῆς τεχνολογικῆς ἐξελίξεως, παρατηροῦνται διάφορα φαινόμενα πού δέν εἶναι δυνατόν νά ἐξηγηθοῦν μέ τίς κλασσικές θεωρίες καί ὁδηγοῦν σέ ἀδιέξοδο. Ἡ δραματική ἀνάλυση τοῦ ἀδιέξοδου αὐτοῦ ὁδήγησε σέ μιά νέα περίοδο τῆς ἀνθρώπινης γνώσεως τῆς Φυσικῆς μέ δύο βασικά ὑπόβαθρα:

(1) Τήν Θεωρία ~~τῆς~~ Σχετικότητας τοῦ Einsteim. Κυρίως ~~Εἰδικότερα~~ τήν καλουμένη Θεωρία τῆς Εἰδικῆς Σχετικότητας *2, πού γεννήθηκε ἀπό τήν κριτική ανάλυση τοῦ ἀδιέξοδου, στο οποίο ~~πού~~ ἔφθασε ἡ Κλασσική Φυσική ἀπό τήν ἀρνητική ἔκβαση τῶν κλασσικῶν

και $\vec{x}_i(t)$ η θέση του σωματίου τη χρον. στιγμή $t$ με μοναδική λύση ~~[illegible]~~ = ~~[illegible]~~ συνάρτηση της αρχικής θέσης $\vec{x}(0)$ και αρχικής ταχύτητας $\dot{\vec{x}}(0)$.



πειραμάτων μετρήσεως τῆς ταχύτητας τοῦ φωτός (πειράματα Michelsom-Morley κ.λ.π).

(Σχετικότητα του Einstein) Σ' αὐτή τήν νέα θεωρία τῆς Σχετικότητας ὁ χῶρος καί ὁ χρόνος δέν εἶναι ἀνεξάρτητα συνεχῆ ὅπως προηγούμενα (στη Σχετικότητα του Γαλιλαίου), ἀλλά εἶναι στενά συνδεμένα μαζί σέ ἕνα κοινό ψευδοευκλείδειο συνεχές

$$(\Delta t)^2 - \frac{(\Delta x)^2}{c^2} = \text{σταθερό}.$$

Ἡ θεωρία αὐτή εἶναι ἀπαραίτητη γιά τήν κατανόηση τῶν φυσικῶν φαινομένων, ὅταν οἱ ταχύτητες τῶν σωμάτων πλησιάζουν τήν ταχύτητα τοῦ φωτός. Όταν οι ταχύτητες των σωματίων είναι πολύ μικρότερες απ' αυτή του φωτός, η Μηχανική που προκύπτει ταυτίζεται με αυτή του Γαλιλαίου που ονομάζεται "μη Σχετικιστική Μηχανική" *

Ἡ καλουμένη "Γενική Θεωρία τῆς Σχετικότητας" εἶναι οὐσιαστικά θεωρία τῶν πεδίων βαρύτητας.

(2) Τήν Κβαντομηχανική. Ἡ εἴσοδος τῆς Κβαντομηχανικῆς στή Φυσική τοποθετεῖται τό ἔτος 1900 ὅταν ὁ Max-Planck, μπροστά στήν ἀδυναμία τῆς Ἠλεκτρομαγνητικῆς θεωρίας καί Στατιστικῆς νά ἑρμηνεύσουν τήν ἀκτινοβολία τοῦ μέλανος σώματος, εἰσάγει τήν ἔννοια τοῦ κβάντου (quantum). Ἡ Κβαντομηχανική ~~[illegible]~~ η οποία θά αποτελέσει το ~~[illegible]~~ κυρίως θέμα στά παρακάτω μαθήματα, ἀποτελεῖ τό βασικό θεωρητικό ὑπόβαθρο γιά τήν ἑρμηνεία τῶν φαινομένων τοῦ μικρόκοσμου.

Πρίν νά μποῦμε στήν ἐξέταση τῶν φαινομένων αὐτῶν, θά κάνουμε μιά σύντομη ἀνακεφαλαίωση τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς.

## §2 Κλασσική Μηχανική

### 1. Γενικά

Όπως αναφέρθηκε
Μετά τόν Galileo ὁ Newton δίνει τήν θεμελιώδη ἐξίσωση τῆς κινήσεως τῶν ὑλικῶν σημείων,

$$\mu \frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{x},t)\,, \qquad (1)$$

ὅπου $\vec{x}$ τό διάνυσμα θέσεως τοῦ ὑλικοῦ σημείου σέ καρτεσιανές συντεταγμένες ὡς πρός ἕνα ἀδρανειακό σύστημα ἀναφορᾶς, $\mu$ ἡ μᾶζα τοῦ ὑλικοῦ σημείου καί $\vec{F}(\vec{x},t)$ ἡ δύναμη πού ἐξασκεῖται πάνω σ' αὐτό καί πού εἶναι συνάρτηση συνήθως τῆς θέσεως $\vec{x}$ καί τοῦ χρόνου $t$.

Ὅταν ἡ δύναμη $\vec{F}$ προκύπτει ἀπό μιά συνάρτηση $V(\vec{x})$, τοῦ δυναμικοῦ, ὥστε $\vec{F} = -\vec{\nabla} V(\vec{x})$, τό σύστημα λέγεται συντηρητικό.

Μέ ὁλοκλήρωση τῆς ἐξισώσεως (1) προκύπτει ἡ τροχιά

$$\vec{x} = \vec{x}\left[t, \vec{x}(0), \frac{d\vec{x}}{dt}(0)\right]$$

συναρτήσει τοῦ χρόνου $t$ καί τῶν ἀρχικῶν συνθηκῶν, τῆς θέσεως $\vec{x}(0)$ καί τῆς ταχύτητας $\frac{d\vec{x}}{dt}(0)$ τοῦ ὑλικοῦ σημείου στήν ἀρχική στιγμή $t_0$, συμβατικά $t_0=0$

Πειραματική ἐπιβεβαίωση τῶν νόμων τοῦ Νεύτωνα εἶναι ἡ κίνηση τῶν μακροσκοπικών σωμάτων πάνω στή γῆ καί ἡ κίνηση τῶν πλανητῶν. (Οὐράνιος Μηχανική).

Ἀργότερα οἱ Lagrange, Hamilton, Jacobi γενικεύουν τίς ἐξισώσεις κινήσεως. Ἡ κατάσταση ἑνός μηχανικοῦ συστήματος ἐκφράζεται σάν συνάρτηση τῶν γενικευμένων συντεταγμένων τοῦ συστήματος $q = (q_1, q_2, \ldots, q_s)$, ὅπου $s$ ὁ βαθμός ἐλευθερίας τοῦ μηχανικοῦ συστήματος (ὁ ἐλάχιστος ἀριθμός μεταβλητῶν, πού καθορίζουν τήν τοποθέτηση του στόν χῶρο) καί τῶν γενικευμένων ταχυτήτων $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_s)$,



ὅπου $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$, $(i = 1, 2, \ldots, s)$.

Στή συνέχεια ὁρίζονται οἱ γενικευμένες δυνάμεις:

$$Q_i = \sum_j \vec{F}_j \cdot \frac{\partial \vec{x}_j}{\partial q_i} \qquad (2)$$

Μέ τήν βοήθεια τῶν γενικευμένων δυνάμεων οἱ ἐξισώσεις τῆς κινήσεως παίρνουν τήν μορφή:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial T}{\partial q_i} = Q_i$$

ὅπου $T$ ἡ κινητική ἐνέργεια τοῦ συστήματος.

Στήν περίπτωση συντηρητικῶν συστημάτων, ὅπου οἱ δυνάμεις ἐκφράζονται μέ τήν βοήθεια τοῦ δυναμικοῦ $V$,

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_i V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots)$$

οἱ ἐξισώσεις τῆς κινήσεως παίρνουν εὔκολα τή μορφή

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0\,, \qquad (3)$$

ὅπου $L = T - V$, ἡ διαφορά κινητικῆς καί δυναμικῆς ἐνέργειας.

Οἱ ἐξισώσεις αὐτές λέγονται ἐξισώσεις τοῦ Lagrange καί ἡ $L$, Lagrangian. Γενικώτερα ἡ Lagrangian ὁρίζεται σάν μιά συνάρτηση $L(q, \dot{q}, t)$ τῶν θέσεων $q$, τῶν ταχυτήτων $\dot{q}$ καί τοῦ χρόνου $t$ τέτοια ὥστε οἱ ἐξισώσεις (3) νά μας δίνουν τις ἐξισώσεις τῆς κινήσεως. ἡ ισοδύναμα την (1).

## 2. Ἀρχή τῆς ἐλαχίστης δράσεως

Ἔστω $L = L(q, \dot{q}, t)$ μια συνάρτηση των θέσεων, ταχυτήτων και του χρόνου για κάποιο σύστημα. Θα δείξουμε ὅτι οἱ ἐξισώσεις (3) ἀποτελοῦν τήν ἀναγκαία συνθήκη ὥστε τό "ὁλοκλήρωμα"

$$I = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t)\, dt \qquad (4)$$

να είναι ἀκρότατο ($\delta I = 0$ σε πρώτη τάξη ως προς $\delta q$) στίς μεταβολές τῆς τροχιᾶς $q_i(t)$ δηλαδή $q_i(t) \to q_i'(t) = q_i(t) + \delta q_i(t)$ με τον περιορισμό $\delta q_i(t_0) = \delta q_i(t_1) = 0$

~~Θερά άκρα q(t₁) και q(t₀)~~ ;

Πραγματικά: Ας θεωρήσουμε για απλότητα σύστημα ενός βαθμού ελευθερίας κινήσεως και έστω

$q(t) \longrightarrow q'(t) = q(t) + \delta q(t)$, όπου $\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0$.

Τό $\delta q$, πού είναι συνάρτηση του $t$, καλείται συναρτησιακό διαφορικό.

Σύμφωνα με τόν ορισμό αυτό τό συναρτησιακό διαφορικό της ταχύτητας είναι $\delta\dot q(t) = \dot q'(t) - \dot q(t) = \frac{d}{dt}\delta q(t)$. (4′)

Γιά νά είναι τό ολοκλήρωμα της δράσεως ακρότατο θά πρέπει $\delta I = 0$.

Έχουμε

$$\delta I = \int_{t_0}^{t_1} \delta\left[L(q,\dot q,t)\right]dt = \int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta \dot q\right]dt .$$

Με ολοκλήρωση κατά μέρη του παραπάνω όρου και λαμβάνοντας υπόψη ~~[illegible]~~ ότι εξ ορισμού $\delta q(t_1) = \delta q(t_0) = 0$ έχουμε

πιο αναλυμένα

$$\int_{t_0}^{t_1}\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta\dot q\,dt \overset{(4')}{=} \int_{t_0}^{t_1}\frac{\partial L}{\partial \dot q}\frac{d}{dt}\delta q\,dt = -\int_{t_0}^{t_1}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\delta q\,dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q\right]_{t_0}^{t_1} =$$

$$= -\int_{t_0}^{t_1}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\delta q\,dt + 0 ,$$

Δηλαδή

$$\delta I = \int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right]\delta q(t)\,dt \qquad (4'')$$

Γιά νά έχουμε ακρότατο, $\delta I = 0$ γιά οποιοδήποτε $\delta q(t)$ πρέπει (Βλ. άσκ. 2) $\frac{d}{dt}\frac{\partial L(q,\dot q,t)}{\partial \dot q(t)} - \frac{\partial L(q,\dot q,t)}{\partial q(t)} = 0$ για κάθε $t_0 \le t \le t_1$

~~Μπορούμε να το δούμε αυτό [illegible]~~ οποιοδήποτε [illegible] (βλ. άσκ. 3)

Ώστε οι εξισώσεις της κινήσεως με την μορφή του Lagrange μπορούν νά εκφραστούν με την αρχή της



ξεχωριστά γραμμένο.

Αν L είναι η Lagrangian

ελαχίστης δράσεως: Οι τροχιές $q(t)$ κάνουν τό ολοκλήρωμα $I = \int L dt$ της δράσεως ακρότατο ~~σε~~ σε μεταβολές των τροχιών με σταθερά άκρα"

Η Lagrangian δεν είναι μονοσήμαντα ορισμένη. Πράγματι αν στην ~~[illegible]~~ Lagrangian ~~[illegible]~~ προστεθεί το τέλειο διαφορικό ~~[illegible]~~ μιας αυθαιρ. συναρτ. $\Phi(q,t)$ ~~[illegible]~~),

δηλαδή $L \longrightarrow L'(\bar q, \dot{\bar q}, t) = L(q,\dot q,t) + \frac{d}{dt}\Phi(q,\bar q,t)$

~~[illegible]~~ το ολοκλήρωμα της δράσης δεν αλλάζει σε μεταβολές των τροχιών με σταθερά άκρα και ~~[illegible]~~ οι εξισώσεις του Lagrange παραμένουν αναλλοίωτες (Βλ. άσκ. 3)

*1 ~~[illegible]~~ ~~Ερμηνεία T−V στην L~~ * Η Lagrangian ~~οφείλει απλά και μόνο να δίνει τις εξισώσεις της κινήσεως~~ τις οποίες πρέπει να γνωρίζουμε για να ... με την Lagrangian. ~~Πάντως σε πολλές περιπτώσεις είναι χρήσιμη και δικαιολογείται η πρακτική σύνταξη L = T − V.~~

3. Κανονικές εξισώσεις Hamilton.

Οι εξισώσεις του Lagrange περιγράφουν την χρονική εξέλιξη ενός μηχανικού συστήματος με βάση την Lagrangian, πού είναι εκφρασμένη συναρτήσει των θέσεων $q_i$, ταχυτήτων $\dot q_i$, ενδεχομένως του χρόνου $t$. Θά δώσουμε πιό κάτω τις εξισώσεις κινήσεως με άλλη μορφή ~~[illegible]~~ γνωστή με το όνομα του Hamilton. Με γενίκευση της συνηθισμένης ορμής ορίζονται οι ~~[illegible]~~ κανονικές ορμές $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot q_i}$ (ξεχωριστά) (5⁻) συζυγείς των θέσεων $q_i$.

~~Η συνάρτηση του Hamilton ορίζεται τώρα ως $H(p_i, q_i, t) = \sum_i p_i \dot q_i(q_i,p_i) - L(q_i,\dot q_i,t)$~~ (5)

*4 ~~Όπου~~ Η Hamiltonian θα θεωρείται συνάρτηση των θέσεων ~~[illegible]~~ $q_i$, των συζυγών ορμών $p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot q_i}$ και ίσως

~~Δηλαδή στο δεξί μέρος της (5) υποθέτουμε ότι τα $\dot{q}_i$ είναι συνάρτηση των $q_k$ και $p_i$ από τη λύση της -8- (5") Αλλάζοντας τις μεταβλητές από $q_i, \dot{q}_i$ σε $q_i, p_i$ λύνονται το σύστημα ($p_i = \partial L(q,\dot{q})/\partial \dot{q}_i$ και λύνεται~~

~~και του~~ χρόνου.

Η στιγμιαία κατάσταση ενός συστήματος με ν βαθμούς ελευθερίας, περιγράφεται τώρα από ν ζεύγη συζυγών μεταβλητών, αντί των ν ζευγών $(q_i, \dot{q}_i)$, $i = 1, 2, \dots, \nu$, που εμφανίζονται στη Lagrangian.

*5 Η $H(p_i, q_i, t)$ αντιστοιχεί στη φυσική με το άθροισμα της κινητικής και δυναμικής ενεργείας του συστήματος, δηλαδή με την ολική ενέργεια του συστήματος.

Με τυπική διαφόριση των δύο μελών της εξισώσεως (5) και γνωρίζοντας τον ορισμό της κανονικής ορμής και τις εξισώσεις του Lagrange, βρίσκουμε ~~φθάνουμε στις κανονικές εξισώσεις του Hamilton:~~

*6 $$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \cancel{\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t}} \qquad \cancel{(6)}$$

*7 ## 4. Αγκύλες του Poisson

Ας θεωρήσουμε μια δυναμική μεταβλητή $A(p, q, t)$ ενός μηχανικού συστήματος, που είναι συνάρτηση των γενικευμένων συντεταγμένων $q$ και $p$ και γενικά των γενικευμένων συντεταγμένων $q$ και $p$ και ίσως και του χρόνου $t$. Ώστε η ολική χρονική παράγωγος αυτής είναι

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left[ \frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Βάζοντας μέσα σ' αυτή και τις εξισώσεις (6) έχουμε

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] + \frac{\partial A}{\partial t} . \qquad (7)$$

Την ποσότητα $\sum_i \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\}$ την συμβολίζουμε με $\{A, H\}$ και την ονομάζουμε αγκύλη του Poisson για τα μεγέθη $A, H$. Γενικά η αγκύλη του



Poisson $\{A, B\}$ δύο δυναμικών μεγεθών ορίζεται με το

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) .$$

Ειδικώτερα για τα ζεύγη των κανονικών μεταβλητών $(p, q)$, έχουμε τις θεμελιώδεις αγκύλες του Poisson

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

Μετά από όλα αυτά η εξίσωση (7) γράφεται

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} . \qquad (8)$$

Η διαφορική εξίσωση (8), που αντικαθιστά τις εξισώσεις του Newton, εκφράζει την χρονική εξέλιξη του μεγέθους A και είναι βασικής σημασίας. Όπως θα δούμε αργότερα αποτελεί την συνδετική έκφραση για την μετάβαση από την Κλασσική Μηχανή στην Κβαντομηχανική.

Συνήθως ενδιαφερόμαστε για δυναμικές μεταβλητές, που δεν είναι συναρτήσεις του χρόνου, δηλαδή $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$, και γι' αυτές έχουμε

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \qquad (8a)$$

Ειδικώτερα αν η A είναι και σταθερά της κινήσεως ενός μηχανικού συστήματος $\left(\frac{dA}{dt} = 0\right)$, τότε

$$\{A, H\} = 0 \qquad (9)$$

Η αγκύλη Poisson μιας σταθεράς της κινήσεως με την Hamiltonian είναι μηδέν.

## § 3. Κλασσική ηλεκτρομαγνητική Θεωρία

Όπως ~~...~~ είπαμε στην εισαγωγή το άλλο βασικό σκέλος της Κλασσικής Φυσικής είναι η Ηλεκτρομαγνητική Θεωρία.

~~Ως~~ γνωστό τη Η/Μ πεδίο περιγράφεται μέσω των ανυσματικών. Αυτή έχει σάν δυναμικό θεμέλιο τις εξισώσεις Maxwell.

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=0\ , \quad \vec{\nabla}\times\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}=0 \qquad (10)$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{D}=\rho\ , \quad \vec{\nabla}\times\vec{H}-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{D}}{\partial t}=\vec{J}$$

όπου $\vec{B}=\mu\vec{H}$ ή μαγνητική επαγωγή, μ ή μαγνητική διαπερατότης, $\vec{D}=\varepsilon\vec{E}$ ή διηλεκτρική μετατόπιση και ε ή διηλεκτρική σταθερά.

Οι εξισώσεις (10) καθορίζουνε την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}$ και του μαγνητικού πεδίου $\vec{H}$ σέ συνάρτηση μέ τις πηγές, την πυκνότητα του φορτίου $\rho=\frac{dq}{dV}$ και την πυκνότητα εντάσεως ρεύματος $\vec{J}$. Η ένταση $i$ του ηλεκτρικού ρεύματος πού διαρρέει μιά επιφάνεια $S$ είναι

$$i=\int_S \vec{J}\,d\vec{S}=\frac{dq}{dt}\ , \quad q=\int\rho\,dV .$$

Ο Ηλεκτρομαγνητισμός συνδέεται μέ την Μηχανική μέ τόν τύπο του Lorentz,

$$\vec{F}=q\left(\vec{E}+\frac{\vec{v}\times\vec{B}}{c}\right),$$

πού εκφράζει την αλληλεπίδραση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου μέ την ύλη. $\vec{F}$ είναι ή δύναμη πού εξασκείται πάνω στό φορτίο $q$ πού κινείται μέ ταχύτητα $\vec{v}$ μέσα στό πεδίο $\vec{E},\vec{B}$. Οι εξισώσεις αυτές έχουν σάν αποτέλεσμα τόν γνωστό νόμο του Coulomb, πού δίνει την δύναμη μεταξύ δύο στατικών φορτίων, τούς νόμους της επαγωγής και γενικώτερα τούς νόμους όλων των μακροσκοπικών ηλεκτρομαγνητικών φαινομένων. Τό φως είναι ηλεκτρομαγνητικό κύμα και τα φαινόμενα περιθλάσεως και συμβολής βρίσκουν άμεση φυσική



εξήγηση στην κυματική αυτή φύση του φωτός. Η εκπομπή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας οφείλεται στην επιταχυνόμενη κίνηση των ηλεκτρικών φορτίων. Έτσι π.χ ηλεκτρικό φορτίο πού εκτελεί κίνηση αρμονικού ταλαντωτή (ή απλά ισοταχή κυκλική κίνηση), εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.

Η ερμηνεία όλων αυτών των μακροσκοπικών ηλεκτρομαγνητικών φαινομένων, αποτελεί θρίαμβο της θεωρίας του Maxwell.

## §4. Κλασσικές Στατιστικές Θεωρίες

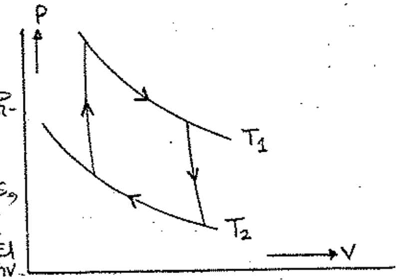
### 1. Κλασσικές Στατιστικές Φυσικές Θεωρίες (Θερμοδυναμική)

Η Θερμοδυναμική ~~αποτελεί τό~~ φαινομενολογικό υπόβαθρο πού καλούνται οι στατιστικές θεωρίες νά εξηγήσουν.

Όπως είναι γνωστό ή Θερμοδυναμική κυριαρχείται από δύο νόμους:

1ος Νόμος : Θερμότης = Ενέργεια (α' θερμοδυναμικός νόμος)

2ος Νόμος : Δέν μπορούμε νά μετατρέψουμε σέ έργο ολόκληρο τό θερμικό περιεχόμενο ενός αποκλεισμένου συστήματος, δηλαδή είναι αδύνατο τό αεικίνητο δευτέρου είδους.



Σχ. 1 Κύκλος Carnot,

Μια ~~[illegible]~~ θερμική μηχανής, ~~[illegible]~~ απορροφάει θερμότητα από μια δεξαμενή θερμότητας, θερμοκρασίας $T_1$, μετατρέπει σέ έργο ένα ποσοστό και ~~[illegible]~~ εκβάλει την υπόλοιπη θερμότητα σέ άλλη δεξαμενή, θερμοκρασίας $T_2<T_1$. Η απόδοση θερμικής μηχανής $E_1-E_2/E_1$ ακόμη και για μια ιδανική μηχανή είναι μικρότερη της μονάδας.

Η απόδοση της ιδανικής μηχανής είναι συνάρτηση μόνο των θερμοκρασιών των δεξαμενών παροχής $T_1$ και εκβολής $T_2$.

~~α~~ $\frac{E_1-E_2}{E_1}=a_0<1$. (Σε πραγματικές μηχανές η από-

$$\frac{E_1-E_2}{E_1} \equiv \frac{T_1-T_2}{T_1} \qquad (12)$$

Αὐτό ἀποτελεῖ ταυτόχρονα καί τόν ὁρισμό τῆς ἀπόλυτης θερμοκρασίας T Kelvin ($T = 0^\circ K = -273^\circ C$).

2. Κλασσικές Στατιστικές Θεωρίες (Κλασσική Στατιστική Μηχανική)

Οἱ κλασσικές στατιστικές θεωρίες ἔχουν σκοπό να ερμηνεύσουν αυτά τα φαινόμενα ~~της~~ θερμοδυναμικής. Στά φαινόμενα ~~της θερμοδυναμικής~~ ἔχουμε πάντοτε ἕνα τεράστιο ἀριθμό ἀλληλοεπιδρόντων σωματιδίων (ἀτόμων, μορίων κ.λ.π) καί οἱ ἀρχικές συνθῆκες τοῦ συστήματος εἶναι γνωστές μόνο κατά πιθανότητα. Γι' αὐτό ἐκτός ἀπό τήν Κλασσική Μηχανική καί τήν Ἠλεκτρομαγνητική Θεωρία χρειαζόμαστε καί τήν βοήθεια τῆς Θεωρίας τῶν Πιθανοτήτων.

3. Στατιστικό σύνολο Gibbs (1839-1903)

Ἔστω ένα, σύνολο G ἀπό ἄπειρα ὅμοια δυναμικά συστήματα. Οἱ καταστάσεις κάθε ἑνός δυναμικοῦ συστήματος θά χαρακτηρίζονται μέ ἕνα δείκτη i. Τό πλήθος των καταστάσεων ἀνάλογα μέ τήν περίπτωση μπορεῖ νά εἶναι πεπερασμένο, ἀριθμήσιμο ἄπειρο ή μη αριθμήσιμο άπειρο. Αντίστοιχα ο δείκτης i θα'ναι διάκριτος ή συνεχής.

Ἄς πάρουμε μιά δειγματοληψία N συστημάτων ἀπό τό G καί ἔστω m(i) ὁ ἀριθμός τῶν συστημάτων πού βρίσκονται στήν κατάσταση i. Τό m(i) λέγεται ἀριθμός καταλήψεως (occupation number) τῆς καταστάσεως i στη συγκεκριμένη δειγματοληψία. Προφανῶς,

$$\sum_i m(i) = N. \qquad (13)$$

Ἄν τό σύνολο τῶν δεικτῶν εἶναι συνεχές, ἀντί τοῦ ἀθροίσματος θά ἔχουμε κάποιο ὁλοκλήρωμα.



$$\cancel{\int m(q)\, dV(q) = N} \qquad (14)$$

Ἡ συνάρτηση

$$\Pi(i) = \lim_{N\to+\infty} \frac{m(i)}{N} \qquad (15)$$

λέγεται κατανομή (distribution), και περιγράφει τη σχετική συχνότητα νά βρίσκεται τό σύστημα σέ μιά κατάσταση i (τόν βρίσκεται μέ δειγματοληψία ἀπό τό G). Προφανώς $\sum \Pi(i)=1$

*Ἡ Θεωρία τῶν Πιθανοτήτων χρησιμοποιούμε ως μέτρο της τύχης μιας στατιστικής πρόβλεψης την ποσότητα

$$S \equiv \sum_i \pi(i) \ln \frac{1}{\pi(i)} \;\cancel{\equiv \int \pi(q) \ln \frac{1}{\pi(q)}\, dV(q)} \qquad (16)$$

~~δίνει τό "μέτρο τῆς τύχης" μιᾶς στατιστικῆς προβλέψεως~~

Ἡ πιο πιθανή κατανομή την οποία θα καλούμε κατανομή πιθανότητας είναι εκείνη

Ἀξίωμα τοῦ Χάους: ~~Ἡ στατιστική κατάσταση ἰσορροπίας ἀντιστοιχεῖ στό μέγιστο τῆς τύχης.~~ πού κάνει τό μέτρο τῆς τύχης μέγιστο.

~~Θά ὀνομάζουμε τήν κατανομή αὐτή κανονική καί θά τήν συμβολίζουμε μέ τό γράμμα π(q)~~ κανονική κατανομή για ένα σύνολο Gibbs

Συνήθως θέλουμε νά βροῦμε ένα σύστημα σε θερμική ἰσορροπία, δηλαδή να βρούμε την κατανομή πιθανότητας π(i), με δοσμένη τη μέση τιμή $\bar E$ τῆς ἐνέργειας: $Q = \sum E(i)\pi(i) = Q(T)$, ὅπου E(i) ἡ ἐνέργεια τοῦ συστήματος, ὅταν αὐτό βρίσκεται στήν κατάσταση i. *2

δοσμένη θερμ[illegible] (για δοσμένη θερμοκρασία)

~~Τό ὁλοκλήρωμα μπορεῖ νά λέει π.χ ὅτι τό θερμικό περιεχόμενο μιᾶς ποσότητας ἀερίου μέσα σέ θερμική δεξαμενή σταθερῆς θερμοκρασίας, εἶναι σταθερό. Στατιστικό σύνολο σέ ἰσορροπία, ὅταν δίνεται τό $\bar E = E_0$ (μέση ἐνέργεια),~~ ένα τέτοιο σύστημα λέγεται κανονικό σύνολο Gibbs (Gibb's canonical ensemble). ~~Ἀκόμα εἶναι δυνατόν νά ἔχουμε καί μιά σύνθετη Νορμ-~~

~~λισμού: $N \equiv \int \pi(q)\, dV(q) = N_0$~~
~~Συνήθως βάζουμε $N_0 = 1$, σάν μέτρο της ολικής πιθανότητας (Βλέπε τύπο (18)).~~

Κανονική κατανομή πιθανότητα

Βρίσκουμε εύκολα την ~~[illegible]~~ κατανομής $\pi(q)$ ενός κανονικού συνόλου του Gibbs, άν χρησιμοποιήσουμε την γνωστή μέθοδο των πολλαπλασιαστών του Lagrange γιά νά βρούμε τό μέγιστο του $S$ ~~[illegible]~~ #3. Τό μέτρο της τύχης σύν τούς πολλαπλασιαστές του Lagrange,
$S - \lambda(\bar{E} - E_0) - \mu(N - N_0)$, θά πρέπει νά είναι ακρότατο γιά οποιαδήποτε συναρτησιακή μεταβολή $\delta\pi(q)$ ή μεταβολή $\delta\lambda, \delta\mu$. Δηλαδή

$$\delta\left(S - \lambda(\bar{E} - E_0) - \mu(N - N_0)\right) = \frac{\delta S}{\delta \pi(q)}\delta\pi(q) - (\bar{E} - E_0)\delta\lambda - (N - N_0)\delta\mu = 0,$$

ή

$$\int \left\{ \ln\frac{1}{\pi(q)} - 1 - \lambda E(q) - \mu \right\} \delta\pi(q)\, dV(q) = 0$$

$$\int E(q)\pi(q)\, dV(q) = E_0, \quad \int \pi(q)\, dV(q) = N_0 .$$

Η λύση των εξισώσεων αυτών δίνει:

$$\ln\frac{1}{\pi(q)} = 1 + \mu + \lambda E(q),$$

ή $\pi(q) = C e^{-\lambda E(q)}$, όπου $C = e^{-(\mu+1)}$ ή σταθερά νορμαλισμού.

Η αριθμητική τιμή του λ προσδιορίζεται από τά $E_0/N_0$ και τις συναρτήσεις $E(q)$, $V(q)$. Στη συνέχεια γιά τό μ χρειαζόμαστε και τό $N_0$.

Η Φυσική εξήγηση του λ

Άς θεωρήσουμε δύο σύνολα Gibbs $A_1$ και $A_2$ που



χαρακτηρίζονται από τις ενέργειες $E_1(q)$, $E_2(q)$ και βρίσκονται σέ θερμική ισορροπία.
Έστω $\pi_1(q) = N_1 e^{-\lambda_1 E_1(q)}$ και $\pi_2(q) = N_2 e^{-\lambda_2 E_2(q)}$
οι αντίστοιχες συναρτήσεις κατανομής. Άν φέρουμε τά δύο συστήματα σέ επαφή, δηλαδή θεωρήσουμε τό σύστημα $A = A_1 \cup A_2$
τότε γιά νά μήν ταραχτεί ή στατική ισορροπία θά πρέπει $\pi_1(q)\pi_2(q) = N_1 N_2 e^{-\lambda_1 E_1 - \lambda_2 E_2} = \pi(q) = N e^{-\lambda(E_1+E_2)}$, όπου λ και N χαρακτηρίζουν την κατάσταση ισορροπίας του A. Δηλαδή

$$\lambda_1 E_1 + \lambda_2 E_2 = \lambda(E_1 + E_2),$$

ή

$$\lambda = \lambda_1 \frac{\left(E_1 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} E_2\right)}{E_1 + E_2} = \lambda_2 \frac{\left(E_2 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2} E_1\right)}{E_1 + E_2}$$

Άν $\lambda_1 > \lambda_2$ τότε, $\lambda_2 < \lambda < \lambda_1$ ή $\frac{1}{\lambda_1} < \frac{1}{\lambda} < \frac{1}{\lambda_2}$

Αλλά αυτό έχει σάν αποτέλεσμα ότι $\bar{E}_1 < \bar{E} < \bar{E}_2$ δηλαδή θά έχουμε ροή ενεργείας από τό σύστημα 2 στό σύστημα 1. Αυτό δείχνει ότι πρέπει νά εξηγηθεί τό $\frac{1}{\lambda}$ σάν θερμοκρασία. Ακριβέστερα ορίζουμε $\frac{1}{\lambda} \overset{\text{ορ}}{\equiv} KT$, όπου T ή απόλυτη θερμοκρασία και K ή σταθερά Boltzmann.

Έτσι τελικά

$$\pi(q) = \frac{e^{-E(q)/KT}}{\int e^{-E(q)/KT}\, dV(q)} \qquad (18)$$

Η συνάρτηση

$$P(T) = \int e^{-E(q)/KT}\, dV(q) \qquad (19)$$

λέγεται συνάρτηση διαμερισμού (partition function) και μέ αυτήν μπορούμε νά υπολογίσουμε όλα τά θερμοδυναμικά μεγέθη. Ἔτσι π.χ. μέ τήν βοήθεια της παραπάνω συναρτήσεως διαμερισμοῦ βρίσκουμε ὅτι τό θερμικό περιεχόμενο

$$Q(T) \equiv \bar{E} = \frac{d \ln P(T)}{d\left(-\frac{1}{kT}\right)} \qquad (20)$$

Ἡ ἐντροπία

$$S = k \ln P(T) + \frac{Q(T)}{T}, \qquad (21)$$

ὅπου $S(T) = k \int \pi(q) \ln \frac{1}{\pi(q)} \, dV(q)$ (22)

τό μέτρο τοῦ «χάους» της «ἀταξίας».

## 4. Ἐφαρμογές.

### 4.1 Κλασσική κατανομή τῶν τελείων ἀερίων, κατανομή Maxwell-Boltzmann.

Γιά τόν ὑπολογισμό τῶν θερμοδυναμικῶν μεγεθῶν χρειάζονται καί ~~φθάνουν~~ αρκούν βασικά δύο στοιχεῖα, όπως είδαμε, ἡ συνάρτηση ἐνεργείας $E(q)$ καί τό στοιχεῖο ὄγκου στο κώρο των καταστάσεων $dV(q)$, ~~[illegible]~~ $*_1$

Ας εφαρμόσουμε τα παραπάνω γιά τέλειο ή εκτεταμένο ἀέριο ἀπό ἄτομα μάζας m. ὅ Ἡ ἐνέργεια E ~~[illegible]~~ κάθε ατόμου, ἰσοῦται μέ τήν κινητική ἐνέργεια, ~~εἶναι~~

$$E = \frac{1}{2} m \vec{v}^2, \quad \text{ὅπου } \vec{v} \text{ ἡ ταχύτητα τοῦ ἀτόμου.}$$

Ἑπομένως ἡ συνάρτηση Gibbs ἔχει τήν μορφή:

$$\pi(E) = N e^{-mv^2/kT} \qquad (23)$$

Γιά τόν ὑπολογισμό τοῦ στοιχείου ὄγκου $dV(q)$ θυμίζουμε, ὅτι οἱ καταστάσεις τῶν ἀτόμων στήν Κλασσική Μηχανική χαρακτηρίζονται ἀπό τήν θέση $\vec{q}$ καί τήν ταχύτητα $\vec{v}$ ἤ τήν θέση $\vec{q}$ καί τήν ὁρμή $\vec{p}$ στόν χῶρο τῶν φάσεων $(\vec{q}, \vec{p})$, ($\vec{q}$ ἡ θέση, $\vec{p} = m\vec{v}$ ἡ συζυγής ὁρμή). Εἶναι εὔκολο νά ὑποθέσουμε

$$dV(q) = d^3x \, d^3p = m^3 dV \, dv_1 \, dv_2 \, dv_3 \qquad (24)$$



ὅπου $dV$ ὁ ὄγκος.

Ἔχουμε τώρα ὅλα τά στοιχεῖα γιά τόν ὑπολογισμό τῶν διαφόρων θερμοδυναμικῶν μεγεθῶν τῶν τελείων ἀερίων. Ἡ συνάρτηση διαμερισμοῦ (partition function)

$$P(T) = \int \pi(E) dV(q) = N \cdot V \int e^{-mv^2/2kT} dv_1 \, dv_2 \, dv_3 =$$

$$= 8 N \cdot V \left[ \int_0^{+\infty} e^{-mv_1^2/2kT} dv_1 \right]^3 = N \cdot V \cdot \left( \frac{2\pi kT}{m} \right)^{3/2}, \qquad (25)$$

μέ τήν βοήθεια τοῦ γνωστοῦ ὁλοκληρώματος τοῦ Euler,

$$\int_0^{+\infty} e^{-a^2x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^2}} .$$

Παραπάνω V εἶναι ὁ ὄγκος πού ἀντιστοιχεῖ σέ ἕνα ἄτομο ἀερίου. Ἡ σταθερά νορμαλισμοῦ

$$C = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \cdot \frac{1}{V} \qquad (26)$$

Ἡ μέση τιμή $\bar{E}(T)$ της ἐνεργείας γιά κάθε ἄτομο εἶναι

$$\bar{E} = \frac{\int E(q) \pi(E) dV(q)}{\int \pi(E) dV(q)} = \frac{d}{d\left(-\frac{1}{kT}\right)} \ln P(T) = \frac{3}{2} kT \qquad (27)$$

Παρατηροῦμε ὅτι σέ κάθε θερμοδυναμικό βαθμό ἐλευθερίας ἀντιστοιχεῖ ἐνέργεια $\frac{1}{2} kT$

Ἡ ἐντροπία

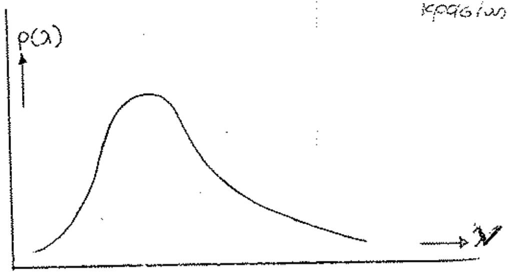
$$S = \frac{3}{2} k \ln \frac{2\pi kT}{m} + \frac{Q(T)}{T} + c \qquad (28)$$

### 4.2 Ἀκτινοβολία τοῦ μέλανος σώματος (ἀέριο φωτονίων).

Σ' αὐτήν τήν παράγραφο θά κάνουμε μιά σύντομη ἀνασκόπηση καί κριτική τῶν κλασσικῶν θεωριῶν ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος, τοῦ πρώτου φαινομένου πού ὁδήγησε στήν Κβαντομηχανική. Συγχρόνως θά ἔχουμε

τήν εὐκαιρία νά δοῦμε καί μιά ὡραιότατη ἐφαρμογή τῆς Στατιστικῆς σέ κλασσικές καί κβαντικές Θεωρίες.
Θυμίζουμε ὅτι σάν μέλαν σῶμα μποροῦμε νά θεωρήσουμε μιά κοιλότητα ~~μέ ἀπολύτως ἀπορροφητικά τοιχώματα~~; στήν οποία η ~~θερμοκρασίας~~ ἠλεκτρομαγνητική ἀκτινοβολία βρίσκεται σέ θερμική ἰσορροπία μέ τά τοιχώματα θερμοκρασίας T.

Ἡ πειραματική συνάρτηση κατανομῆς ἀκτινοβολίας δίνεται στό Σχ. 2. Τό $\rho(\nu)d\nu$ παριστάνει τό ποσό τῆς ἠλεκτρομαγνητικῆς ἐνέργειας ἀνά μονάδα ὄγκου, μήκους κύματος ἀπό $\nu$ ἕως $\nu+d\nu$. Τό $\rho(\nu)d\nu$ = =(ἀριθμό καταστάσεων στό διάστημα $(\nu, \nu+d\nu)$) × (τήν μέση τιμή $\bar{E}(\nu)$ τῆς ἐνεργείας κάθε καταστάσεως μήκους κύματος λ)




Σχ. 2. Γραφική παράσταση τῆς πειραματικῆς συναρτήσεως κατανομῆς τοῦ μέλανος σώματος σέ συνάρτηση μέ τό μῆκος κύματος.

## 4.3 Κλασσική Θεωρία Rayleigh - Jeans

Μέ ἁρμονική ἀνάλυση (ἀνάλυση Fourier), τό ἠλεκτρομαγνητικό πεδίο μπορεῖ νά θεωρηθεῖ σάν σύνολο ἁρμονικῶν κυμάτων

$$\vec{E}(\vec{x},t) = \sum_n \vec{E}(\vec{k}_n)\cdot e^{i(\vec{k}_n\cdot\vec{x} - \omega_n t)} \qquad (29)$$

ὅπου $\vec{E}$ ἡ ἔνταση τοῦ ἠλεκτρικοῦ πεδίου, $\vec{k}$ τό κυματάνυσμα (propagation vector) συνδέεται μέ τό μῆκος κύματος λ μέ τόν τύπο $\frac{2\pi}{|\vec{k}_n|} = \lambda_n$, $\omega_n = 2\pi\nu_n$ ἡ κυκλική συχνότητα, $\nu_n$ ἡ συχνότητα, $\lambda\cdot\nu_n = c$ ἡ ταχύτητα τοῦ φωτός. Ἀνάλογη ἀνάλυση ἰσχύει καί γιά τήν ἔνταση



$\vec{H}(\vec{x},t)$ τοῦ μαγνητικοῦ πεδίου.
Ἡ ἐνέργεια δίνεται ἀπό τόν τύπο

$$\sum_n \left(|\vec{E}(\vec{k}_n)|^2 + |\vec{H}(\vec{k}_n)|^2\right). \qquad (30)$$

Ἡ ἔκφραση (30) θυμίζει ἄθροισμα ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν. Πραγματικά, ἡ Hamiltonian ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ δίνεται ἀπό τόν τύπο:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\lambda^2\vec{q}^2}{2} \qquad \left[\vec{p} \text{ ὁρμή}, \lambda^2 \text{ σταθερά ἐλατηρίου}, \vec{F} = -\lambda^2\vec{q}\right]. \qquad (31)$$

Ὥστε μέ τήν ἀντιστοιχία,

$$\vec{E}(\vec{k}_n) \longleftrightarrow \frac{\vec{p}}{\sqrt{2m}}, \quad \vec{H}(\vec{k}_n) \longleftrightarrow \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\vec{x}, \quad \omega_n = ck_n = \frac{\lambda}{\sqrt{m}},$$

ἡ κοιλότητα μέλανος σώματος θερμοκρασίας T, εἶναι θερμοδυναμικά ἰσοδύναμη μέ σύνολο ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν τῆς ἴδιας θερμοκρασίας T.
Εἴμαστε τώρα ἕτοιμοι νά ὑπολογίσουμε τό $\rho(\lambda)$;
Κάθε κατάσταση ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ χαρακτηρίζεται τέλεια μέ τήν ἐνέργεια. Ὥστε μποροῦμε νά πάρουμε $q = E$, $dV(q) = dE$ καί $\pi(E) = c\,e^{-E/kT}$. Δουλεύοντας στόν χῶρο τῶν φάσεων $d^3q\,d^3p$,

$$P(T) \sim \int e^{-(p^2+q^2)/kT}\, d^3q\, d^3p = \left(\int e^{-p^2/kT} d^3p\right)^2 = (4\pi kT)^3$$

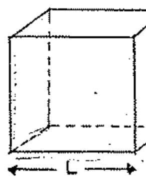
καταλήγουμε στό ἴδιο ἀποτέλεσμα. Ἡ μέση τιμή $\bar{E}$ τῆς ἐνεργείας ἑνός κανονικοῦ συνόλου Gibbs ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν:

$$\bar{E} = \frac{\int E\pi(E)dE}{\int \pi(E)dE} = \frac{d}{d(-\frac{1}{kT})} \ln\int_0^\infty \pi(E)dE = \frac{d}{d(-\frac{1}{kT})}\ln kT = kT \qquad (32)$$

Στό μεταξύ ἔχουμε δείξει ὅτι στήν περίπτωση τοῦ θεωρήματος ἰσοκατανομῆς: « σέ κάθε θερμοδυναμικό βαθμό ἐλευθερίας ἀντιστοιχεῖ μέση ἐνέργεια $\frac{1}{2}kT$ ». Ὁ ἁρμονικός ταλαντωτής ἔχει δύο θερμοδυναμικούς βαθμούς ἐλευθερίας.

Ἡ Hamiltonian τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή περιέχει τά τετράγωνα δύο κανονικῶν μεταβλητῶν $\vec{p}$ καί $\vec{q}$. Στήν περίπτωση τοῦ τελείου ἀερίου ἔχουμε $\frac{3}{2}kT$ = μέση τιμή τῆς κινητικῆς ἐνέργειας $H=\frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2+p_3^2)$.

Γιά νά ~~βροῦμε τό~~ $\rho(\lambda)$ μένει τώρα ὁ ὑπολογισμός τοῦ ἀριθμοῦ τῶν καταστάσεων. Γιά ἁπλότητα θεωροῦμε, ὅτι ἡ κοιλότητα μέσα στήν ὁποία πάλλεται τό ἠλεκτρομαγνητικό πεδίο θερμοκρασίας Τ εἶναι κύβος ἀκμῆς L (Σχ. 3) καί ἀναλύουμε τό πεδίο σέ ~~καρτεσιανές συντεταγμένες~~ ἐπίπεδα κύματα διαδιδόμενα κατά μῆκος των ακμών του κύβου. Οἱ διάφορες καταστάσεις τοῦ πεδίου, ~~τά στάσιμα κύματα~~ πού ἔχουν διανύσματα διαδόσεως $\vec{K}=(k_1,k_2,k_3)$, συνδέονται μέ τις διαστάσεις τῆς κοιλότητας μέ τις σχέσεις




Σχ. 3

$$k_i L_i = \pi n_i , \qquad (33)$$

ὅπου n ἀκέραιος μή ἀρνητικός ἤ $n_i = \frac{2Lv_i}{c}$. (34)

Προφανῶς τό πλῆθος τῶν καταστάσεων συχνότητας ἀπό ν ἕως ν+dν εἶναι:

$$\sum \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = 8L^3 \sum \frac{1}{\lambda_1^2\lambda_2^2\lambda_3^2}\delta\lambda_1\delta\lambda_2\delta\lambda_3 = \ldots$$

$$= 8L^3 \int \frac{1}{\lambda_1^2\lambda_2^2\lambda_3^2} d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 =$$

$$= 8L^3 \int \frac{v_1^2 v_2^2 v_3^2}{c^6}\left[\frac{dv_1 dv_2 dv_3}{v_1^2 v_2^2 v_3^2}\right] c^3 =$$

~~σε πολικές συντ/νες~~

ή

$$= \frac{L^3}{\pi^3}\int dk_x dk_y dk_z = \frac{L^3}{\pi^3} d^3k$$

Σε πολικές συντεταγμένες

$$\sum \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{L^3}{\pi^3}\int k^2 dk\, d\Omega_k \frac{1}{8}$$ ὅπου $d\Omega_k$ ἡ στερεά γωνία

$$= \frac{L^3}{\pi^3}\int \frac{4\pi k^2 dk}{8} = \frac{L^3}{c^3}4\pi\int v^2 dv . \qquad (35)$$

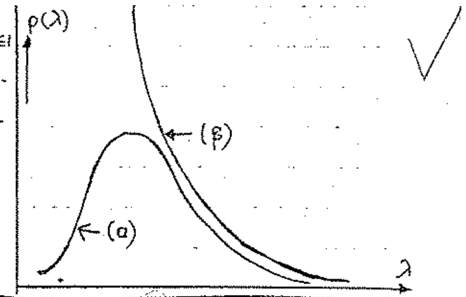
Ὅταν οἱ διαστάσεις τῆς κοιλότητας εἶναι ἀρκετά μεγάλες ὡς πρός τό μῆκος κύματος, ὁ ἀριθμός αὐτός δέν ἐξαρτᾶται ἀπό τό σχῆμα τῆς κοιλότητος.

Στόν παραπάνω ὑπολογισμό θεωρήσαμε βαθμωτά, ἐπίπεδα κύματα. Τά ἠλεκτρομαγνητικά κύματα εἶναι ἐγκάρσια, σέ κάθε $\vec{K}$ ἀντιστοιχοῦν δύο καταστάσεις πολώσεως, κύμα κυκλικά πολωμένο δεξιόστροφα ἤ ἀριστερόστροφα, ὥστε ὁ ἀριθμός τῶν καταστάσεων τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ κύματος μέσα στήν κοιλότητα πού ἔχουν συχνότητα ἀπό ν ἕως ν+dν, εἶναι $\frac{8\pi V}{c^3}v^2 dv$ ὅπου V ὁ ὄγκος τῆς κοιλότητας.

Ἔτσι τελικά καταλήγουμε στόν τύπο Rayleigh-Jeans τῆς κατανομῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος.

$$\frac{P}{V}dv = \frac{8\pi v^2 kT}{c^3}dv = \ldots \qquad (36)$$

Στό Σχ. 4 ἔχουμε παραστήσει γραφικά τήν κατανομή Rayleigh-Jeans ὅπως καί τήν πειραματική κατανομή τῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος.




Σχ. 4. Γραφική παράσταση συναρτήσεως κατανομῆς μέλανος σώματος. (α) πειραματική, (β) θεωρητική κατά Rayleigh-Jeans

~~Παρατηροῦμε ὅτι~~ Ὅπως παρατηροῦμε ὁ τύπος Rayleigh-Jeans περιγράφει μέ ἐπιτυχία τά πειραματικά δεδομένα μόνο στήν περιοχή τῶν μικρῶν συχνοτήτων (μεγάλων μηκῶν κύματος). Στήν περιοχή τῶν μεγάλων συχνοτήτων (μικρῶν μηκῶν κύματος),

$$v > \frac{kT}{h} ,$$

ἀποτυχαίνει δραματικά. έχει και μια αλληλοδυσκολία καθαρά θεωρητική: Σύμφωνα μ'αυτόν η εσωτερική ενέργεια της κοιλότητας είναι άπειρη

(β) Ὁ τύπος Rayleigh-Jeans. ~~τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου.~~

$$\dot{U} = 2kT\, V \int_0^\infty \frac{4\pi\nu^2}{c^3}\, d\nu$$ *1

Δηλαδή γιά νά μεγαλώσουμε τήν θερμοκρασία κοίλης μεταλλικής σφαίρας κατά ἕνα βαθμό θερμοκρασίας χρειάζεται ἄπειρη ἐνέργεια!! Καί ἡ καθαρά θεωρητική αὐτή ἀποτυχία τῆς θεωρίας αὐτῆς προέρχεται ἀπό τήν περιοχή μικρῶν μηκῶν κύματος. Ὁ ἡμιφαινομενολογικός τύπος τοῦ Wiem $\rho = \frac{c_1}{\lambda^5} e^{-c_2/kT}$, (38)

ὅπου $c_1$, $c_2$ παράμετρες πού προσδιορίζονται πειραματικά, ἔδινε καλή περιγραφή μόνο γιά πολύ μικρά μήκη κύματος.

Ἔτσι βρισκόμαστε σε πλήρες ἀδιέξοδο τῶν κλασσικῶν θεωριῶν.

4.4 Θεωρία τοῦ Max-Planck - Γέννηση τοῦ κβάντου

Μετά ἀπό κριτική μελέτη τῶν παραπάνω δυσκολιῶν ὁ φυσικός Max-Planck προτείνει τήν ἑξῆς ὑπόθεση, «ἀπό μηχανῆς θεός»: "Ἡ ἐνέργεια του κάθε ἁρμονικού που προέκυψε απ' την ανάλυση των ηλ/κων ταλαντώσεων κατά Fourier ταλαντωτή, ~~δηλαδή κάθε συνιστώσας τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου~~, δέν ~~εἶναι συνεχής~~ παίρνει ο ποιαδήποτε τιμή, ἀλλά μακέραια πολλαπλάσια του hν $E = nh\nu$, $n = 1, 2, \ldots$ *2 μιᾶς ἐλάχιστης ποσότητας κβάντου (quantum) ἐνεργείας $h\nu$, ὅπου $\nu$ ἡ συχνότητα τοῦ ταλαντωτή καί $h$ ἡ παγκόσμια σταθερά". Ἐπειδή ἡ σταθερά $h = \frac{E}{\nu} = \frac{E\cdot\lambda}{c} = E\cdot t$ ἔχει διαστάσεις δράσεως, λέγεται ἐπίσης σταθερά τῆς ἐλάχιστης δράσεως καί ἡ δέ ἀριθμητική της τιμή, μετρούμενη πειραματικά, εἶναι $h = 6{,}610\cdot 10^{-27}$ erg·sec.

Ἄς ὑπολογίσουμε τώρα τήν συνάρτηση κατανομῆς ἀκτι-



νοβολίας τοῦ μέλανος σώματος κατά Max-Planck. ~~Δηλαδή~~ τό ἐνεργειακό φάσμα κάθε ταλαντωτή εἶναι τώρα ἀσυνεχές. Τά ὁλοκληρώματα τοῦ τύπου (31), (32) τα ἀντικαταστοῦμε μέ ἀθροίσματα. Ἔχουμε *3

$$\pi(E_n) = e^{-nh\nu/kT} \quad (39)$$

καί

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu\, e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} \pi(E_n)} = \frac{d}{d\left(-\frac{1}{kT}\right)} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \pi(E_n) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}, \quad (40)$$

ἐπειδή $\sum_{n=0}^{\infty} \pi(E_n) = \frac{1}{1-e^{-h\nu/kT}}$ (ἄθροισμα γεωμετρικῆς προόδου λόγου $e^{-h\nu/kT}$).

Ὥστε ~~Δηλαδή~~ ἡ συνάρτηση κατανομῆς τῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος κατά τόν Max-Planck εἶναι:

$$\rho\, d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}\, d\nu = \frac{8\pi ch}{\lambda^5}\frac{1}{e^{ch/\lambda kT}-1}\, d\lambda. \quad (41)$$

~~Κριτική - Παρατηρήσεις~~

1) Ἡ κατανομή Planck (41) συμφωνεῖ με τά πειραματικά δεδομένα. Γιά μικρές συχνότητες ἤ ὑψηλές θερμοκρασίες, ἀκριβέστερα γιά $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$, ἡ κατανομή Planck συμπίπτει ἀσυμπτωτικά μέ τήν κατανομή Rayleigh-Jeans (R.J). $\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3(e^{h\nu/kT}-1)} \xrightarrow{h\nu \ll kT} \frac{8\pi h\nu^2 d\nu}{c^3 (h\nu/kT)} = \frac{8\pi kT\nu^2}{c^3}$

Γιά μεγάλες συχνότητες ἤ χαμηλές θερμοκρασίες $\left[\frac{h\nu}{kT} \gg 1\right]$ ἡ κατανομή Planck εἶναι τῆς μορφῆς (42)

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3(e^{h\nu/kT}-1)} \rightarrow \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3} e^{-h\nu/kT}$$ *4

ἐνῶ αὐτή πού ἀποδείχτηκε ἀπό τόν Wiem $\frac{c_1}{\lambda^5} e^{-c_2/kT}$ (43)

Ἐπίσης οἱ τιμές τῶν παραμέτρων $c_1$, $c_2$ πού προσδιορίζονταν φαινομενολογικά, τώρα δίνονται ἀπό τήν θεωρία.

2) Δίνει πεπερασμένη εἰδική θερμότητα τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου.

3) Τό θεώρημα τῆς ἰσοκατανομῆς δηλαδή " ἡ μέση τιμή τῆς ἐνέργειας $\bar{E} = \frac{1}{2}KT$ γιά κάθε θερμοδυναμικό βαθμό ἐλευθερίας " δέν ἰσχύει παρά μόνον ἀσυμπτωτικά σέ ὑψηλές θερμοκρασίες ἤ μεγάλα μήκη κύματος.

## 4.6 Ἄλλες κατανομές

Ἡ κατανομή Μ.Ρ προκαλεί το ενδιαφέρον και για άλλες κατανομές. Γιά νά τό κάνουμε αὐτό πιό φανερό διατυπώνουμε τήν ὑπόθεση Max-Planck λέγοντας ότι: " Κάθε ἁρμονικός ταλαντωτής - κάθε κατάσταση διεγέρσεως τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου - μπορεῖ νά περιέχει ὁποιοδήποτε θετικό ἀκέραιο ἀριθμό, n, κβάντων ἠλεκτρομαγνητικῆς ἐνέργειας (φωτονίων). Τά φωτόνια δέν εἶναι διακρίσιμα μεταξύ τους ἀφοῦ κάθε κατάσταση χαρακτηρίζεται τελείως ἀπό τόν ἀριθμό n ". Ὥστε ~~ἐκτός ἀπό τήν ἀσυνέχεια τῶν ἐνεργειακῶν σταθμῶν~~ στήν κατανομή Μ.Ρ, θεωρούμενη τώρα σαν στατιστική ὁμοίων σωματιδίων (φωτονίων) μπαίνουν καί δύο ἄλλες νέες ὑποθέσεις: (i) Τά σωμάτια-φωτόνια δέν εἶναι διακρίσιμα μεταξύ τους. Αὐτό εἶναι νέα ἰδιότητα πού δέν την είχαμε στήν περιγραφή ἑνός κλασσικοῦ συστήματος ὁμοίων ὑλικῶν σωματιδίων. Ὅπως εἴδαμε στήν κλασσική στατιστική Maxwell-Boltzmann, γιά νά περιγράψουμε τελείως μιά κατάσταση ἐκτός ἀπό τόν ἀριθμό n τῶν σωματιδίων χρειάζεται νά ποῦμε καί ποιό σωματίδιο βρίσκεται σέ ποιά θέση. (βλ. σελ. 22) Η έλλειψη ἐπωνυμίας (δελτίον ταυτότητας) κάθε σωματιδίου εἶναι, ὅπως θά δοῦμε ἀργότερα, κβαντομηχανικό



χαρακτηριστικό. Στήν κατανομή R-J, ἄν καί κλασσική, τό πρόβλημα δέν φάνηκε γιατί κάθε κατάσταση θεωρήθηκε σάν ἕνας τρόπος ταλάντωσης, συχνότητας ν, καί ὄχι n σωμάτια-φωτόνια, συχνότητας ν, τους διάφορους τρόπους ταλάντωσης τους ξεχωρίζει με το $\vec{k}$.

(ii) Στην κάθε κατάσταση (ἤ κυψελίδα τοῦ χώρου τῶν φάσεων) μπορεῖ νά χωρέσει ὁποιοσδήποτε ἀριθμός (ἀριθμός κατάληψης) n σωματιδίων-φωτονίων (βλ. σελ. 27). Αὐτό ἰσχύει καί γιά τίς κλασσικές θεωρίες, προκειμένου περί υλικών σημείων.

Μιά κατανομή πού βασίζεται στίς ἰδιότητες (i) καί (ii) λέγεται στατιστική <u>Bose-Einstein</u>. Στη φύση φαίνεται ότι τή στατιστική αὐτή τήν ἀκολουθοῦν σωμάτια ἀκέραιας ἰδιοστροφορμῆς (spin) 0, 1, 2, 3, ... Τά φωτόνια π.χ. έχουν spin 1 όπως θα δοῦμε. Θα μπορούσε να ισχύει η (i) ἀλλά ὄχι ἡ (ii), ὅπως π.χ. στήν στατιστική <u>Fermi-Dirac</u> ὅπου κάθε κατάσταση δέν μπορεῖ νά καταληφθεῖ ἀπό περισσότερα τοῦ ἑνός σωματιδίου. Ὁ ἀριθμός καταλήψεως n εἶναι ἤ 0, ἤ 1. Τήν στατιστική αὐτή ἀκολουθοῦν τά ἠλεκτρόνια, τα πρωτόνια (spin $\frac{1}{2}$) καί γενικά σωμάτια ἡμιπεριττοῦ spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ †1

~~Σάν ἐφαρμογή τῆς στατιστικῆς Fermi-Dirac μποροῦμε~~

Ας θεωρήσουμε " ἀέριο " ενός ἐλεύθερου ἠλεκτρονίου μέσα σ' ἕνα μέταλλο θερμοκρασίας T καί ας ὑπολογίσουμε τήν συνάρτηση $\bar{n}(E)$, πιθανότητα κατάληψη από το ηλεκτρόνιο της κατάστασης E, εξαρτάται τη θερμ. T. Γιά τήν ἐνεργειακή κατάσταση $E_i$ ἡ συνάρτηση πιθανότητας εἶναι

$$\pi(E_i) = e^{-(E_i-\mu)/KT} \Big/ \sum_i e^{(E_i-\mu)/KT} \qquad (44)$$

ὅπου μ τό χημικό δυναμικό, ~~(πού ἁπλῶς παριστάνει τήν ἐνεργειακή στάθμη δυναμικοῦ τῶν ἐλευθέρων ἠλεκτρονίων)~~ ~~καί N ἡ σταθερά Νορμαλισμοῦ.~~

Ἔχοντας σάν δεδομένο σύμφωνα μέ τήν ἀπαγορευτική ἀρχή τοῦ Pauli, ὅτι τό πολύ ἕνα ἠλεκτρόνιο μπορεῖ νά

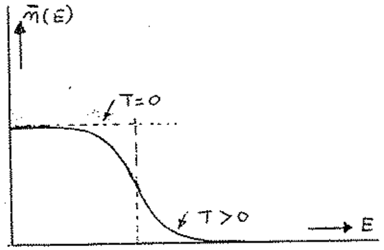
†1 Το ποιά στατιστική ακολουθούν τα σωμάτια ανάλογα με το spin αποτελεί σήμερα ένα βαθύ θεώρημα τη θεωρίας πεδίου που στηρίζεται και στη σχετικότητα του Einstein

η πιθανότητα κατάληψης ~~.....~~ είναι ότι ~~.....~~

βρίσκεται σέ μιά δοσμένη κατάσταση, έχουμε

$$\bar{n}(E) = \frac{\pi(E_m)}{\cancel{\pi(E_m)}} = \frac{e^{-(E-E_0)/KT}}{1+e^{-(E-E_0)/KT}} = \frac{1}{1+e^{(E-E_0)/KT}} \qquad (45)$$

Επί πλέον κβαντικοί αριθμοί όπως γραμμική ορμή καί spin δέν μπήκαν στήν έκφραση (45), πού ώστόσο είναι ακριβής γιά όλες τις περιπτώσεις.




Σχ 5. Κατανομή Dirac

Ἡ κατανομή αὐτή δίνεται γραφικά στό Σχ. 5. Ἡ θερμοκρασία $T_0 = \frac{E_0}{K}$ λέγεται θερμοκρασία Fermi. Γιά νά ὑπολογισθοῦν καί ἄλλα θερμοδυναμικά μεγέθη χρειάζεται γενικά καί ἡ ἔκφραση τοῦ στοιχειώδη ὄγκου $dV(q)$ ἤ τό διαφορικό $dN$ τοῦ ἀριθμοῦ τῶν καταστάσεων μέσα στόν χῶρο τῶν φάσεων. Ὁ κλασσικός χῶρος τῶν φάσεων στήν κβαντομηχανική διαιρεῖται σέ στοιχειώδεις κυψελίδες. Γιά τό θεωρούμενο τέλειο κβαντικό ἀέριο, σωματίων spin $\frac{1}{2}$, μέσα σέ ὄγκο V μέ περιοδικές συνοριακές συνθῆκες (Βλέπε Κεφ. II § 4.1.1) ἔχουμε

$$dN = \frac{2V}{\hbar^3 (2\pi)^3}\, d^3\vec{p} = \frac{V}{\hbar^3 \pi^2}\, p^2 dp .$$

---

✓ Στήν θερμοκρασία τοῦ ἀπόλυτου μηδένς δοσμένου τοῦ ὁλικοῦ ἀριθμοῦ N τῶν ἠλεκτρονίων μέσα στόν ὄγκο V, ὅλες οἱ ἐνεργειακές στάθμες κάτω ἀπό τήν $E_0$ είναι κατειλημμένες

Η βάση του τύπου $E = P^2/2m$ οι καταστά- ~~.....~~ σε ορμή ~~ἤ~~ στ

ἤ σάν νά λέμε οἱ καταστάσεις πού ἡ ὁρμή τους βρίσκεται στό ἐσωτερικό τῆς σφαίρας ἀκτίνας $P_{T=0} = \sqrt{2mE_{T=0}}$ τοῦ χώρου τῶν φάσεων, είναι πιασμένες. Ἡ $P_{T=0}$ λέγεται ἀκτίνα Fermi.



✓ Γιά μεγάλες θερμοκρασίες ($T \gg T_F$) ἡ κατανομή Fermi συμπίπτει ἀσυμπτωτικά μέ τήν κατανομή Maxwell-Boltzmann. (Βλέπε ...) Αὐτό ὀφείλεται βασικά στό ὅτι γιά μεγάλες θερμοκρασίες ὁ ἀριθμός τῶν προσφερομένων καταστάσεων εἶναι πολύ μεγάλος. Οι αριθμοί κατάληψης ~~.....~~ $\bar{n}(E)$ είναι πολύ μικρότεροι της μονάδας και ~~.....~~. Ἐπομένως ~~δέν ὑπάρχει τό πρόβλημα~~ η πιθανότητα νά ~~.....~~ έχουμε περισσότερα ἀπό ἕνα ἠλεκτρόνια στήν ἴδια κατάσταση είναι αμελητέα, ώστε η απαγορ. αρχή του Pauli μένει ~~οὔτε νά διακρίνουμε τό ἕνα ἠλεκτρόνιο ἀπό τό ἄλλο~~ ανενεργός. Ταυτόχρονα δεν υπάρχει δυσκολία να διακρίνουμε τα ηλεκτρόνια μεταξύ τους αφού αυτά επικαλύπτουν χώρο φάσεων. Λόγω τοῦ περιορισμοῦ χώρου καί τοῦ σκοποῦ αὐτοῦ τοῦ βιβλίου, δέν θ' ἀσχοληθοῦμε περισσότερο μέ τίς στατιστικές θεωρίες. Κάνοντας μιά σύντομη ἀνασκόπηση σ' αὐτό τό κεφάλαιο γνωρίσαμε τίς ἑξῆς κατανομές.

(1) Κατανομή Maxwell-Boltzmann: Διάκριση τῶν στοιχειωδῶν σωματίων μεταξύ τους, ἀπεριόριστη χωρητικότητα κάθε (κυψελίδας) καταστάσεως. Ἡ κατανομή ἐφαρμόζεται μέ ἐπιτυχία στά κλασσικά σωμάτια ὅταν τά κβαντικά φαινόμενα μποροῦν νά παραλειφθοῦν. Στήν κατανομή αὐτή ἀνήκει καί ἡ κατανομή Rayleigh-Jeans, σ' αὐτήν ὅμως δέν μπαίνει ἡ ἔννοια τῆς διακρίσεως τῶν σωματίων ἐπειδή χρησιμοποιεῖται ἡ ἔννοια τοῦ κύματος.

(2) Κατανομή Bose-Einstein: Τά σωμάτια δέν μποροῦμε νά τά ξεχωρίσουμε καί σέ κάθε κατάσταση μποροῦν νά ὑπάρχουν ἄπειρα σωμάτια. Αὐτή τήν κατανομή ἀκολουθοῦν τά σωμάτια πού ἔχουν spin 0, 1, 2, ... ὅπως τά φωτόνια (spin 1). Τέτοιας μορφῆς κατανομή εἶναι τοῦ Max-Planck.

(3) Κατανομή Fermi-Dirac: Τά σωμάτια δέν μποροῦμε νά τά ξεχωρίσουμε, κάθε κατάσταση ἔχει 0 ἤ 1 σωμάτιο. Τήν κατανομή αὐτή ἀκολουθοῦν σωμάτια πού ἔχουν ἡμιπεριττό spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ (π.χ τά ἠλεκτρόνια).

σύνδεση φωτόνιο → σωμάτιο
σωμάτια → κύμα.



## §5 Ατομική δομή

... Δημόκριτος (460-370 π.Χ.): υποδιαιρώντας την ύλη φτάνουμε στα βασικά της συστατικά, τα άτομα, που είναι αδύνατον να ~~διαιρεθούν (χωριστούν) παραπάνω~~ τμηθούν, αλλά σε απλούστερα συστατικά. Οι σύγχρονες ποσοτικές ατομικές θεωρίες αρχίζουν με τους Dalton (1766-1844), „νόμος των πολλαπλών αναλογιών" και Proust (1785-1850), „ο δομικός λίθος των ατόμων είναι το άτομο του Υδρογόνου". Το ατομικό βάρος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του ατομικού βάρους του υδρογόνου.

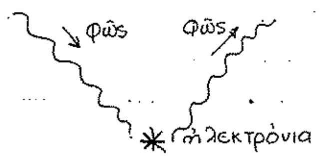
### 1. Το άτομο κατά Thomson

Το άτομο αποκτά και αυτό γρήγορα δομή. Ο J. J Thomson (1897) ανακαλύπτει το ηλεκτρόνιο. Το ηλεκτρόνιο είναι σωμάτιο αρνητικού ηλεκτρικού φορτίου $e = 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ Cb και μάζας $m_e \simeq \frac{1}{2.000} M_H$, όπου $M_H$ η μάζα του ατόμου του υδρογόνου. Το ηλεκτρόνιο είναι συστατικό του ατόμου. Με πειράματα σκεδάσεως του φωτός πάνω σε άτομα - σκέδαση Thomson (Thomson scattering) - μετρείται ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανά άτομο.

Η ολική ενεργή διατομή ελαστικής σκεδάσεως του φωτός με ηλεκτρόνιο υπολογίζεται σε

$$\sigma_{o\lambda} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m_e^2 c^4} N, \qquad (46)$$

όπου N ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου. *1




Σχ. 6. Σκέδαση Thomson

Μετρώντας την ενεργό διατομή $\sigma_{o\lambda}$ βρίσκουμε το N και επομένως τον αριθμό ηλεκτρονίων Z ανά άτομο. ~~Οι πρώτες μετρήσεις έδωσαν ότι ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανά άτομο ήταν περίπου ίσος με τον ατομικό αριθμό. Αργότερα ο Barkla (1911) δίνει $Z \simeq \frac{1}{2} A$~~

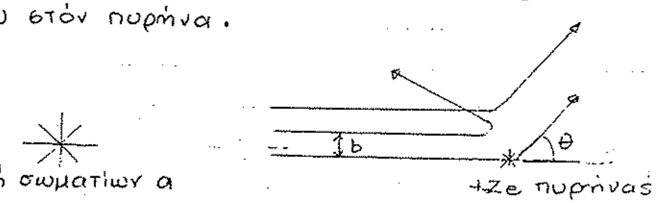
*1 (Η εξάρτηση του τύπου (46) απ'το φορτίο και τη μάζα είναι αναμενόμενη σύμφωνα με όσα είδα-



~~(A το ατομικό βάρος). Σήμερα γνωρίζουμε ότι το Z είναι ίσο με τον ατομικό αριθμό.~~ Επειδή τα άτομα είναι ηλεκτρικά ουδέτερα, θα πρέπει να βρίσκεται μέσα σ' αυτά και ένας βαρύς πυρήνας, θετικά φορτισμένος με μάζα, πρακτικά, όλη την μάζα του ατόμου και συνολικό φορτίο +Ze. ~~Τα θετικά φορτία του πυρήνα θα είναι συνδεδεμένα με σωμάτια πολύ βαρύτερα από τα ηλεκτρόνια, ώστε να μην προσφέρουν στην σκέδαση Thomson.~~ *1 ~~Οι διαστάσεις του ατόμου του Thomson είναι της τάξεως μεγέθους του 1 Angström ($1\,Å = 10^{-8}$ cm). Ώστε κατά τον Thomson το άτομο είναι περίπου μιά μικρή σφαίρα ακτίνας 1 Å. Στην σφαίρα αυτή βρίσκονται $Z \simeq \frac{1}{2} A$ ηλεκτρόνια.~~

### 2. Άτομο του Rutherford (1911)

Η διερεύνηση της δομής του ατόμου αρχίζει με τον Rutherford. Ο Rutherford χρησιμοποιεί την σκέδαση σωματιδίων α. Τα σωμάτια α είναι ο θετικός πυρήνας των ατόμων του Ηλίου 4 ($^4_2He$), δηλαδή Ηλίου που έχει απογυμνωθεί από τα ηλεκτρόνια του. Τα σωμ. α έχουν θετικό φορτίο +2e και μάζα περίπου $4M_H$ ($1M_H \simeq 1$ GeV). Σωμάτια α που προέρχονται από ραδιενεργές ουσίες (πηγή σωματίων α π.χ ουρανίου) σκεδάζονται ελαστικά πάνω στον πυρήνα.




Σχ. 7. Σκέδαση Rutherford. Σε μικρές παράμετρες κρούσεως, όταν το βήμα προσεγγίζει πολύ τον πυρήνα, αντιστοιχούν μεγάλες γωνίες σκεδάσεως.

*1 ...τα ηλεκτρόνια συνεισφέρουν σ'αυτή

Ἡ ἐνεργὴ διατομή $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, ἀνὰ μονάδα στερεᾶς γωνίας $\Omega$ δίνεται πιστὰ ἀπὸ τὸν τύπο

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}\left[\frac{ZZ'e^2}{2E}\right]^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \qquad (47)$$

~~που περιγράφει κλασσική σκέδαση σημειακών φορτίων μέσα στο πεδίο Coulomb σημ. πυρήνα.~~

ὅπου $Z \cdot e$ τὸ φορτίο τοῦ πυρήνα, $Z'e$ τὸ φορτίο τῶν σωματίων α, θ ἡ γωνία σκεδάσεως καὶ E ἡ ἐνέργεια τῶν σωματίων α. Ὁ τύπος (47) περιγράφει κλασσικὴ σκέδαση ὑλικῶν σημειακῶν φορτίων μέσα στὸ πεδίο Coulomb σημειακοῦ πυρήνα. Τὰ πειραματικὰ δεδομένα δείχνουν, ὅτι ὁ θετικὸς πυρήνας τῶν ἀτόμων εἶναι σχεδὸν σημειακός. Ἀκριβέστερα ὁ πυρήνας ἔχει διαστάσεις τῆς τάξεως τοῦ $10^{-14}$ cm. Γιὰ παράμετρες κρούσεως $\leq 10^{-13}$ cm, ἡ ἀντίστοιχα μεγάλες γωνίες σκεδάσεως ($\theta \simeq 180°$), ὁ τύπος (47) δὲν δίνει πιὰ τὰ πειραματικὰ δεδομένα. Ἔτσι καταλήγουμε στὸ παρακάτω κλασσικὸ ὑπόδειγμα τοῦ ἀτόμου κατὰ Rutherford:

Τὸ ἄτομο ἀποτελεῖται ἀπὸ ἕνα βαρὺ σημειακὸ πυρήνα (διαστάσεων $\leq 10^{-13}$ cm), ποὺ ἔχει φορτίο $+Ze$ καὶ τὰ γύρω ἀπὸ αὐτὸ ἠλεκτρόνια, ποὺ κινοῦνται σὰν πλανῆτες γύρω ἀπὸ τὸν ἥλιο, ἀπὸ τὴν ἐπενέργεια τῶν δυνάμεων Coulomb, σὲ τροχιὲς τῆς τάξεως μεγέθους τῶν $10^{8}$ cm.

3. <u>Θεωρητικὲς δυσκολίες τῶν κλασσικῶν ὑποδειγμάτων ἀτόμου.</u>

Σύγχρονα μὲ τὴν ἐπιτυχία, τὸ ἄτομο τοῦ Rutherford ἀντιμετωπίζει ἀμέσως σοβαρὲς δυσκολίες. Συγκεκριμένα δὲν μπορεῖ νὰ ἐξηγήσει δύο βασικὰ δεδομένα.

α) Εὐστάθεια τῶν ἀτόμων. Τὸ ἄτομο εἶναι ἕνα ἐνεργειακὰ σταθερὸ σύστημα. Ἡ ἐνέργειά του παραμένει σταθερή, ὅταν αὐτὸ δὲν ἔχει ἐξωτερικὲς ἐπιδράσεις. Ἀντίθετα, σύμφωνα μὲ τὸ κλασσικὸ ὑπόδειγμα τοῦ Rutherford, ἡ ἐπιταχυνόμενη κίνηση τῶν ἠλεκτρονίων θὰ πρέπει, σύμφωνα μὲ τὴν κλασσικὴ Ἠλεκτρομαγνητικὴ Θεωρία, νὰ συνοδεύεται ἀπὸ ἐκπομπὴ ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας, ποὺ θὰ ἐλαττώνει συνέχεια τὸ ἐνεργειακὸ περιεχόμενο τοῦ ἀτόμου μέχρις ὅτου το ηλεκτρόνιο να πέσει στον πυρήνα.



β) Φασματοσκοπία - Συνδυαστικὴ ἀρχὴ Ritz-Rydberg.

Ὅπως εἶναι γνωστὸ τὰ φάσματα ἐκπομπῆς ἢ ἀπορροφήσεως φωτὸς τῶν ατόμων ἀποτελοῦνται ἀπὸ ἕνα πλῆθος φασματικῶν γραμμῶν. Οἱ συχνότητες τῶν γραμμῶν αὐτῶν ἀκολουθοῦν τὸν πειραματικὸ κανόνα Ritz-Rydberg, σύμφωνα μὲ τὸν ὁποῖο κάθε συχνότητα $\nu_{mn}$ μπορεῖ νὰ ἐκφραστεῖ σὰν διαφορὰ δύο «φασματικῶν ὅρων»

$$\nu_{mn} = \nu_m - \nu_n \,.$$

Γιὰ νὰ ἐξηγήσει τὰ φαινόμενα τῆς ἀτομικῆς ἀκτινοβολίας τοῦ φωτὸς ἡ Κλασσικὴ Φυσικὴ δέχεται, ὅτι ἡ ἀκτινοβολία αὐτὴ εἶναι ἠλεκτρομαγνητικὴ ποὺ προέρχεται ἀπὸ περιοδικὲς (Βλ. σελ. 37) ταλαντώσεις τῶν ἠλεκτρονίων μέσα στὸ ἄτομο. Ἔτσι ἀναλύοντας τὴν κίνηση τῶν ἠλεκτρονίων σὲ σειρὰ Fourier περιμένουμε, ὅτι τὸ φάσμα θὰ ἀποτελεῖται ἀπὸ ὁρισμένες βασικὲς συχνότητες καὶ τὶς ἀνώτερες ἁρμονικές τους, δηλαδὴ ἀκέραια πολλαπλάσια τῶν βασικῶν συχνοτήτων. Αὐτὸ ὅμως βρίσκεται σὲ ἀντίθεση μὲ τὰ φασματοσκοπικὰ πειραματικὰ δεδομένα. Γιὰ νὰ διασώσουμε τὴν κλασσικὴ θεωρία θὰ πρέπει νὰ ὑποθέσουμε, ὅτι γιὰ κάποιο λόγο παρουσιάζονται μόνο οἱ βασικὲς συχνότητες. Ἀλλὰ αὐτὸ προϋποθέτει ἕνα μεγάλο ἀριθμὸ βαθμῶν ἐλευθερίας κινήσεως τῶν ἠλεκτρονίων, ἀντίστοιχο μὲ τὸ πλῆθος τῶν φασματικῶν γραμμῶν, πού νά ὁδηγεῖ σέ πολύ μεγάλες εἰδικές θερμότητες.

Μπροστά σ' αὐτό τό ἀδιέξοδο τῆς Κλασσικῆς Φυσικῆς, ὁ N. Bohr προτείνει τό παρακάτω κβαντικό ὑπόδειγμα δομῆς τῶν ~~ἀτόμων~~.

## 4. Ἄτομο κατά Niels Bohr.

### 4.1 Οἱ κβαντικοί κανόνες τῶν Bohr-Sommerfeld-Wilson

Ὁ Bohr ἔχει σάν ἀφετηρία τήν ὑπόθεση τοῦ Max-Planck, την οποία ~~πού καί~~ ἐπιχειρεῖ νά γενικεύσει και να εφαρμόσει ~~στό κλασσικό ἀτομικό ὑπόδειγμα τοῦ Rutherford. Συγκεκριμένα ὁ Bohr ὑποθέτει ὅτι:~~ σ'όλα τα δυναμικά συστήματα

(α) Τά ἠλεκτρόνια τῶν ἀτόμων κινοῦνται πάνω σέ κλασσικές ἐνεργειακά στάσιμες τροχιές, χωρίς ἡ κίνησή τους νά συνοδεύεται ἀπό ἐκπομπή ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας. Ἡ ἐκπομπή ἤ ἀπορρόφηση τῆς ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας, κατά Bohr, ὀφείλεται σέ ἀλλαγή ~~τῆς~~ της τροχιάς και συνεπώς της ἐνεργειακῆς καταστάσεως τοῦ ἀτόμου, (σύμφωνα πρός τήν ἀρχή διατηρήσεως τῆς ἐνεργείας), ακολουθώντας δέ ~~κατά κβάντα ἐνεργείας~~ την

$$\Delta E = E - E' = h\cdot\nu \qquad (48)$$

σύμφωνα μέ τήν ὑπόθεση τοῦ Planck.

Παραπάνω $E$ καί $E'$ εἶναι οἱ ἐνέργειες τῶν δύο θεωρουμένων καταστάσεων τοῦ ἀτόμου, $\nu$ ἡ συχνότητα τῆς ἀκτινοβολίας καί $h$ ἡ σταθερά ἐλαχίστης δράσεως.

Μέ αὐτόν τόν τρόπο δέν ἔχουμε τό πρόβλημα τῆς εὐσταθείας τῶν ἀτόμων.

Γιά νά ἐξηγηθεῖ καί τό παρατηρούμενο γραμμικό φάσμα τῆς ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας, χρειάζονται καί ἄλλοι κβαντικοί κανόνες γιά τήν κβάντωση τῶν ἐνεργεια-



κῶν καταστάσεων τοῦ ἀτόμου, ὥστε τό φάσμα ἀπό συνεχές, κατά τήν Κλασσική Μηχανική, νά μετατραπεῖ σέ γραμμικό. Οἱ κανόνες αὐτοί, γνωστοί σάν κβαντικοί κανόνες τῶν Bohr-Sommerfeld-Wilson, δίνονται παρακάτω.

(β) Γιά κάθε περιοδικό μηχανικό σύστημα (π.χ ἄτομο), τά κλειστά ὁλοκληρώματα δράσεως $\oint p_q\,dq$ ὅπου $q$ καί $p$ συζυγῆ ζεύγη γενικευμένων μεταβλητῶν, εἶναι κβαντισμένα:

$$\oint p_q\,dq = n_q h\,, \quad n_q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \qquad (49)$$

Ὁ κανόνας (49) ὁρίζει τίς κβαντικά ἐπιτρεπόμενες καταστάσεις καί μετατρέπει τό συνεχές κλασσικό ἐνεργειακό φάσμα τοῦ ἀτόμου σέ γραμμικό.

### 4.2 Τό ἄτομο τοῦ Ὑδρογόνου

*1 Τό ἄτομο τοῦ Ὑδρογόνου ἀποτελεῖται ἀπό ἕνα βαρύ θετικό πυρήνα, τό πρωτόνιο, μάζας $M_p = 1{,}6724\cdot 10^{-24}$ gr, ἠλεκτρικοῦ φορτίου $e$ καί ἑνός ἠλεκτρονίου, πού κατά τούς Rutherford-Bohr γυρίζει γύρω ἀπό τόν πυρήνα σέ ἐλλειπτικές «κεπλερίους» τροχιές. Ἐπειδή ἡ μάζα τοῦ ἠλεκτρονίου εἶναι πολύ μικρότερη ἀπό τήν μάζα τοῦ πρωτονίου ($m_e \simeq \frac{1}{2000} M_p$), σέ πρώτη προσέγγιση μποροῦμε νά παραλείψουμε τήν κίνηση τοῦ πρωτονίου καί νά θεωρήσουμε, ὅτι τό ἠλεκτρόνιο κινεῖται μέσα στό στατικό δυναμικό Coulomb $V = -\frac{e^2}{r^2}$ γύρω ἀπό τό ἀκίνητο, «ἀπείρου μάζης» πυρήνα. *2-

Ἀλλιῶς Κατά τά γνωστά θεωροῦμε τό ἰσοδύναμο πρόβλημα μέ μάζα $\mu$: $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{M_p}$, τήν ἀνηγμένη μάζα.

Οἱ δυνάμεις εἶναι κεντρικές, ἐπομένως ἡ στροφορμή διατηρεῖται καί ἡ κίνηση εἶναι ἐπίπεδη. Τό ἐπίπεδο τῆς κινήσεως εἶναι κάθετο πρός τό διάνυσμα τῆς στροφορμῆς $\vec{\mathcal{L}} = \vec{r}\times m\vec{v}$, πού συμβατικά τό θεωροῦμε παράλληλο πρός τόν ἄξονα τῶν z. Σέ ἐπίπεδες πολικές συντεταγμένες $(r, \phi)$ μέσα στό ἐπίπεδο τῆς κινήσεως καί μέ ἀρχή τῶν ἀξόνων τήν θέση τοῦ πρωτονίου, ἡ Lagrangian L τοῦ συστήματος εἶναι

$$L = \frac{1}{2} m_e\left[\frac{d\vec{r}}{dt}\right]^2 + \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2} m_e\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2\right] + \frac{e^2}{r}, \quad (50)$$

ὅπου $\vec{r} = \vec{r}(r,\phi)$ ἡ θέση τοῦ ἠλεκτρονίου. Οἱ συζυγεῖς ὁρμές τῶν $r$ καί $\phi$, εἶναι ἀντίστοιχα

$$P_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m_e\frac{dr}{dt} \quad \text{καί} \quad P_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m_e r^2\frac{d\phi}{dt}$$

3* → Ἐφαρμόζοντας τίς ἐξισώσεις τοῦ Lagrange (3) ἔχουμε τώρα

$$\frac{d}{dt}\left[\cancel{m_e}\mu\, r^2 \frac{d\phi}{dt}\right] = 0 \quad (51a)$$

$$\frac{d}{dt}\left[\cancel{m_e}\mu \frac{dr}{dt}\right] - \cancel{m_e}\mu\, r\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 = -\frac{e^2}{r^2} \quad (51b)$$

Ἡ (51a) ἐκφράζει τήν διατήρηση τῆς στροφορμῆς

$$\vec{\mathcal{L}} = m_e r^2\frac{d\phi}{dt}\vec{n} = P_\phi\cdot\vec{n} = \text{σταθερό}, \quad (52)$$

ὅπου $\vec{n}$ τό μοναδιαῖο διάνυσμα κατά τόν ἄξονα τῶν z (δηλαδή κάθετο στό ἐπίπεδο τῆς κινήσεως) καί $\mathcal{L} = P_\phi = |\vec{\mathcal{L}}|$.

Ἄρα

$$\mathcal{L} = \mu_e r^2\frac{d\phi}{dt} \quad (53)$$

εἶναι ἡ σταθερή ὁλική στροφορμή. Ἔχουμε καί μιά ἄλλη γνωστή σταθερά, ὁλοκλήρωμα τῆς κινήσεως, τήν ὁλική ἐνέργεια $E$,

$$E = \frac{1}{2} m_e\left[\frac{dr}{dt}\right]^2 + \frac{1}{2m_e}\frac{\mathcal{L}^2}{r^2} - \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2m_e}\left[P_r^2 + \frac{\mathcal{L}^2}{r^2}\right] - \frac{e^2}{r}, \quad (54)$$



Για κλειστή τροχιά (ελλειπτική) ολική ενέργεια E είναι αρνητική.

~~ὅπου θέλαμε E = −W, ὥστε τό W νά εἶναι θετικό σέ περίπτωση κλειστῆς τροχιᾶς, δέσμιας καταστάσεως~~

Γιά νά βροῦμε τήν τροχιά $r = r(\phi)$ ἀπαλείφουμε τόν χρόνο μεταξύ τῶν σχέσεων (53) καί (54):

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\phi}\cdot\frac{d\phi}{dt} = \frac{\mathcal{L}}{\mu r^2}\frac{dr}{d\phi}$$

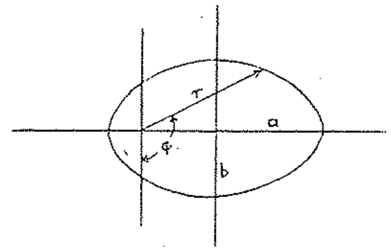
καί

$$\frac{1}{2}\mu\frac{\mathcal{L}^2}{\mu^2 r^4}\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 = E - \frac{1}{2\mu}\frac{\mathcal{L}^2}{r^2} + \frac{e^2}{r} \quad (55)$$

Μέ ὁλοκλήρωση τῆς σχέσεως (55) παίρνουμε τελικά,

$$\boxed{r(\phi) = \frac{a(1-\varepsilon^2)}{1+\varepsilon\sin\phi}} \quad (56)$$

Ἡ τροχιά αὐτή εἶναι ἐλλειπτική μέ ἡμιάξονες $a = \frac{e^2}{-2E}$,




$$b = \frac{\mathcal{L}}{\sqrt{-2\mu E}} \quad (57)$$

καί ἐκκεντρότητα

$$\varepsilon = \sqrt{1-\frac{b^2}{a^2}} = \sqrt{1+\frac{2E\mathcal{L}^2}{\mu e^4}}. \quad (58)$$ 4* –

Σχ. 8 Ἔλλειψη

*5 → Τελικά ἡ ἐνέργεια E δίνεται ἀπό τόν τύπο

$$E = -\frac{(1-\varepsilon^2)\mu e^4}{2\mathcal{L}^2} \quad (59)$$

Τό ἐνεργειακό αὐτό φάσμα (χωρίς τήν ἐφαρμογή τῶν κβαντικῶν κανόνων Bohr-Sommerfeld-~~Wilson~~), εἶναι τό συνεχές φάσμα τῆς Κλασσικῆς Φυσικῆς καί δέν ἐξηγεῖ τό παρατηρούμενο γραμμικό ἠλεκτρομαγνητικό φάσμα τοῦ ἀτόμου. Γιά τήν κβάντωση τῶν ἐνεργειακῶν σταθμῶν χρησιμοποιοῦμε τούς κβαντικούς κανόνες (49).

Οι κανονικές ορμές συζυγείς των r και φ είναι αντίστοιχα

$$p_r = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot r} = \mu\dot{r} \quad p_\phi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\phi} = \mu r^2\dot\phi$$

Για κλειστή τροχιά έχουμε



~~Από τον~~ ~~κβαντικό κανόνα που~~ $\oint P_\varphi d\varphi = \ell h$ που συνεπάγεται ~~...~~ κβάντωση της στροφορμής

$$\mathcal{L} = \frac{\ell h}{2\pi} = \ell\hbar , \qquad (60)$$

όπου $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .

*6 →

*7 → Για τον υπολογισμό της ενέργειας ~~σύμφωνα με τον τύπο~~ και του κβαντικό κανόνα $\oint P_r dr = n_r h$ ~~που~~ αφορά την ακτινική συνιστώσα ~~(59)~~, χρειαζόμαστε ~~και την εκκεντρότητα της έλλειψης.~~

~~Γι' αυτό χρησιμοποιούμε την ακτινική κβαντική συνθήκη~~

$$\cancel{\oint P_r dr = n_r h} \qquad (61)$$

Ο $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ λέγεται ακτινικός κβαντικός αριθμός.

Έχουμε

$$\oint P_r dr = m_e \oint \frac{dr}{dt} dr = m_e \oint \left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2 \frac{d\varphi}{dt} d\varphi =$$

$$= m_e \oint \frac{\mathcal{L}}{m_e r^2}\left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2 d\varphi = \varepsilon^2 \mathcal{L} \oint \frac{1}{r^2} \frac{a^2(1-\varepsilon^2)^2\cos^2\varphi}{(1+\varepsilon\sin\varphi)^4} d\varphi =$$

$$= \varepsilon^2 \mathcal{L} \oint \frac{\cos^2\varphi}{(1+\varepsilon\sin\varphi)^2} d\varphi = 2\pi\mathcal{L}\left[\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 1\right] = n_r h .$$

Άρα $\quad \frac{\mathcal{L}^2}{1-\varepsilon^2} = (n_r + \ell)^2 \hbar^2 = n^2\hbar^2$ ,

όπου $n \equiv n_r + \ell$ . Ο ακέραιος $n$ λέγεται κύριος κβαντικός αριθμός, επειδή τελικά η ενέργεια εξαρτάται μόνο από το $n$:

$$E_n = - \frac{m_e (e^{\cancel{2}}/4\pi)^2}{2n^2\hbar^2} = -\frac{R}{n^2} hc = -\frac{e^2}{2n^2 a_0} , \qquad (62)$$

όπου $R = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3 c} = 1,09677 \cdot 10^5 \, cm^{-1}$ η σταθερά του Rydberg και $a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0,52 \, Å$ η ακτίνα του Bohr.

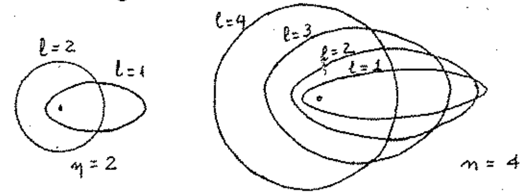
Αν το φορτίο του πυρήνα είναι $+Ze$ , τότε

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0} = -Z^2 \frac{R}{n^2} hc \qquad (63)$$



Από τους τύπους (57), (60), (62) βγαίνει εύκολα, ότι τα μήκη των ημιαξόνων των ελλειπτικών ηλεκτρονικών τροχιών δίνονται από τις σχέσεις

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} n^2 , \quad b = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} n\ell . \qquad (64)$$




Σχ. 9. Τροχιές του ηλεκτρονίου του ατόμου του Υδρογόνου για διάφορες τιμές του κύριου κβαντικού αριθμού.

Το "περιήλιο" της τροχιάς δίνεται από τον τύπο

$$\text{περιήλιο} = \frac{n(n-\sqrt{n^2-\ell^2})}{Z} a_0 ,$$

ώστε για δοσμένο $n$, όσο το $\ell$ είναι μικρότερο, τόσο οι τροχιές θά πλησιάζουν περισσότερο πρός τον πυρήνα. Για τέτοιες τροχιές τό σημειακό δυναμικό Coulomb δέν θά είναι καλή προσέγγιση και θά έχουμε παραμόρφωση των γραμμών.

## 4.3 Φασματοσκοπία

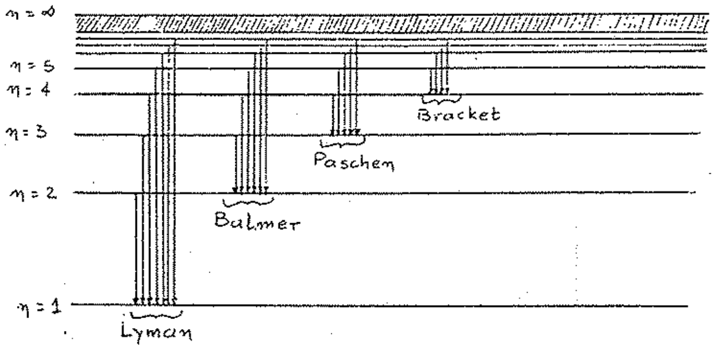
*1

Είμαστε τώρα σέ θέση νά εξηγήσουμε βασικά τό ~~...~~ υδρογονικό φάσμα. Πράγματι από τις σχέσεις (48) και (63) έχουμε

$$h\nu_{nn'} = -Z^2 Rhc\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad \text{ή}$$

$$\nu_{nn'} = RcZ^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right) \qquad (65)$$

Οι γραμμές του φάσματος ταξινομούνται σέ ομάδες πού χαρακτηρίζονται ἀπό τό $n$, τίς γνωστές σάν γραμμές Lyman ($n=1$), Balmer ($n=2$), Paschen ($n=3$), Brackett ($n=4$) κ.λ.π σύμφωνα μέ τά ὀνόματα τῶν ἐρευνητῶν, πού τίς παρατήρησαν πρῶτοι.




Σχ. 10 Στάθμες Ἐνεργείας τοῦ ἀτόμου τοῦ ὑδρογόνου

Ἡ συνδιαστική ἀρχή τῶν Ritz - Rydberg εἶναι ἐπίσης φανερή.

Ὁ τύπος (65) μπορεῖ νά ἐφαρμοστεῖ μέ ἀρκετά καλή προσέγγιση καί γιά ἄτομα μέ περισσότερα ἠλεκτρόνια, παραλείποντας σέ πρώτη προσέγγιση τήν ἀλληλεπίδραση Coulomb τῶν ἠλεκτρονίων μεταξύ τους.

Γιά τά ἐξωτερικά ἠλεκτρόνια μέ μεγάλο $l$, ὁ πυρήνας δρᾶ φυσικά μέ ἕνα ἐνεργό φορτίο $q$ μικρότερο τοῦ $+Ze$ ἐξ' αἰτίας τῆς παρεμβολῆς τῶν ἠλεκτρονίων τῶν ἐνδιαμέσων στοιβάδων, πού προασπίζουν τό φορτίο τοῦ πυρήνα.

## 4.4. Κβάντωση κατευθύνσεων

Στά παραπάνω ὑποθέσαμε, ὅτι ἡ κίνηση τοῦ ἠλεκτρονίου γινότανε σύμβατικά στό ἐπίπεδο $xOy$.

Οἱ κβαντικές συνθῆκες ὅμως ἐπιβάλλουν περιορισμούς



σχετικά μέ τούς προσανατολισμούς τοῦ ἐπιπέδου κινήσεως περιορίζοντας την τιμή τῆς προβολή τῆς στροφορμῆς σέ ἕνα τυχαῖο ἄξονα διευθύνσεως $\vec{n}$. Πραγματικά ἄν $\phi$ τό ἀζιμούθιο τοῦ διανύσματος θέσεως $\vec{r}$ τοῦ ἠλεκτρονίου ὡς πρός τυχαῖο προσανατολισμό τοῦ συστήματος ἀναφορᾶς θά πρέπει $\oint P_\phi d\phi = mh$,

$$\text{ἤ} \quad \vec{L}\cdot\vec{n} = m\hbar \;, \quad \text{ὅπου } m = \pm 1, \pm 2, \ldots \pm l \qquad (66)$$

Τό $m$, ἡ $z$ συνιστῶσα τῆς στροφορμῆς, λέγεται ἐπίσης καί μαγνητικός ~~κβαντικός~~ ἀριθμός επειδή για σωμάτιο μάζας $\mu$ και φορτίου $q$ το $ql/2\mu$ συμπεριφέρεται σαν μαγν δίπ ροπ. Γιά δοσμένο $l$, σύμφωνα με τους κβαντικούς κανόνες, τό $m$ μπορεῖ νά παίρνει $2l+1$ τιμές, $-l, -l+1, \ldots$ $\ldots l-1, l$. ~~Ἡ τιμή $m=0$ ἀπορρίπτεται μέ κλασσικά ἐπιχειρήματα, ὅπως καί τό $l=0$ (Γιά $l=0$, στροφορμή μηδέν, ἡ τροχιά τοῦ ἠλεκτρονίου θά περνάει ἀπό τό κέντρο τοῦ πυρήνα).~~ Ἔτσι γιά δοσμένο $n$ ἔχουμε $\sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = n^2$ καταστάσεις τῆς ἴδιας ἐνέργειας.

~~Ἡ βασική κατάσταση τοῦ ἀτόμου τοῦ ὑδρογόνου περιγράφεται μέ $l=1$, $m=\pm 1$. (Ὅπως θά δοῦμε ἡ παληά κβαντομηχανική δέν εἶναι ἐδῶ τελείως σωστή περιγραφή)~~

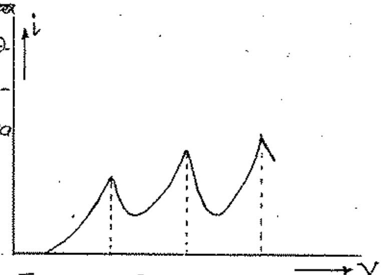
Μέ την προσθήκη καί τῆς ἀπαγορευτικῆς ἀρχῆς τοῦ Pauli, ὁδηγούμαστε τώρα κατά τά γνωστά (βλ. Ἀτομική καί Πυρηνική Φυσική Κ. Ἀλεξόπουλου) σέ μιά πρώτη ἐξήγηση τοῦ περιοδικοῦ πίνακος τῶν στοιχείων καί τῶν χημικῶν ἰδιοτήτων τους. Ἔτσι ἡ παληά Κβαντομηχανική δίνει τήν πρώτη ἱκανοποιητική ἐξήγηση τῆς δομῆς τῶν ἀτόμων, τῶν χημικῶν καί τῶν φασματοσκοπικῶν τους ἰδιοτήτων.

Σχόλιον. Παρά τήν μεγάλη ἐπιτυχία της ἡ κβάντωση των κατευθύνσεων της παλαιάς κβαντομηχανικής, αντιμετωπίζει μια βασική θεωρητική δυσκολία. Την παραβίαση της *2 σφαιρικής συμμετρίας. Επειδή η συνθήκη κβαντώσεως ισχύει μόνο ως πρός ωρισμένους άξονες, οι διευθύνσεις στο χώρο δεν είναι όλες ισοδύναμες. Θα δούμε αργότερα *3 πως η νέα θεωρία της κβαντομηχανικής, εξηγεί τα παραπάνω φαινόμενα και αποφεύγονται όλες οι παραπάνω δυσκολίες.

5. Άλλα πειράματα πού δείχνουν κβάντωση φυσικών μεγεθών.

5.1 Πείραμα Franck-Hertz, κβάντωση ενέργειας

Εκτός από τα φασματοσκοπικά πειράματα ~~φωτοστατικά~~ η κβάντωση των ενεργειακών σταθμών επιβεβαιώνεται και με άλλα πειράματα. Αναφέρουμε σαν παράδειγμα το πείραμα Franck-Hertz (1914). Κατά το πείραμα αυτό στέλνουμε δέσμες ηλεκτρονίων μέσα σε ατμούς υδραργύρου και αλλάζοντας την τάση V, μετράμε την ένταση i του ρεύματος πού περνάει.

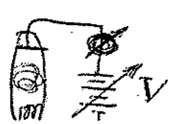



Σχ. 11. Εξάρτηση του ρεύματος i από την τάση V σε πείραμα Franck-Hertz

Όταν το eV, ~~το φορτίο του ηλεκτ~~ η ενέργεια του ηλεκτρονίου ~~τροφοδοτείται στην διαφορά δυναμικού~~, γίνεται ίσο με την ενεργειακή διαφορά των σταθμών, έχουμε μέγιστα εντάσεως ρεύματος (Σχ. 11). Έτσι μπορούμε να έχουμε κατευθείαν ~~μέτρηση~~ καθορισμό των ενεργειακών σταθμών ενός ατόμου.

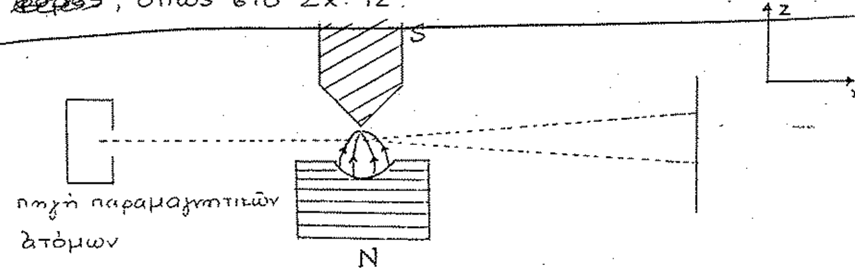
5.2 Κβάντωση στροφορμής: Φαινόμενο Stern-Gerlach

Εάν μία δέσμη παραμαγνητικών ατόμων περάσει μέσα από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο, τότε αυτή θ'αναλυθεί






σε περισσότερες δέσμες αποκλίνουσες μεταξύ τους ~~κατά αντίθετες φορές~~, όπως στο Σχ. 12. *C




Σχ. 12 Πειραματική διάταξη για την επίδειξη του φαινομένου Stern-Gerlach.

Όπως είναι γνωστό Υδρογονοειδές άτομο (Hydrogenline), μπορεί να θεωρηθεί σαν στοιχειώδες μαγνητικό δίπολο ροπής $\vec{\mu} = i S$, (67)

όπου i η ένταση του ρεύματος και S η επιφάνεια, πού περιβάλλεται από την τροχιά του ηλεκτρονίου:

$i = \frac{e}{T} = \frac{e}{\frac{2\pi r}{v}} = \frac{e \cdot v}{2\pi r}$, όπου r η ακτίνα της τροχιάς του ηλεκτρονίου, v η ταχύτης του και $S = \pi r^2$.

Άρα $\mu = |\vec{\mu}| = \frac{e \cdot v r}{2}$ (68)

Εξ' άλλου η στροφορμή $\mathcal{L} = |\vec{\mathcal{L}}| = m_e v r = l\hbar$, (69)

Από τις σχέσεις (68) και (69) παίρνουμε *

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e}\vec{\mathcal{L}} \qquad (70)$$

Το $\frac{he}{4\pi m_e c}$ λέγεται μαγνητόνη του Bohr. Οι μαγνητικές

*Γενικά $\vec{\mu} = g\frac{e}{2m}\vec{S}$, όπου g ο παράγοντας Landé. Προκειμένου για ηλεκτρόνιο, στο spin αντιστοιχεί $g = 2$.

διπολικές ροπές τῶν τροχιῶν τῶν ἠλεκτρονίων, εἶναι ἀκέραια πολλαπλάσια τῆς μαγνητόνης τοῦ Bohr.

Ἀπὸ τὶς παραπάνω σχέσεις προκύπτει εὔκολα ὅτι

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m_e}\, \ell$$

καὶ ἡ συνιστῶσα τῆς μαγνητικῆς ροπῆς κατὰ τὸν ἄξονα z

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e}\, m ,$$

ὅπου m ὁ μαγνητικὸς κβαντικὸς ἀριθμός.

*1 → Ἡ δυναμικὴ ἐνέργεια $V(\vec{x})$ τοῦ στοιχειώδους μαγνητικοῦ διπόλου μέσα σὲ μαγνητικὸ πεδίο ἐντάσεως $\vec{H}$ εἶναι

$$V(\vec{x}) = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}(\vec{x}). \qquad (71)$$

~~Στὴν ἐνέργεια αὐτὴ ὀφείλεται καὶ τὸ γνωστὸ φαινόμενο Zeeman~~ (*)

Μέσα σε ανομοιογ. μαγνητ. πεδίο $\vec{B}$ ἡ δύναμη F, ποὺ ἐξασκεῖται πάνω στὸ δίπολο εἶναι

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}) = (\vec{\mu}\cdot\vec{\nabla})\, \vec{B} =$$

$$= \left[\mu_x \frac{\partial \vec{B}}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial \vec{B}}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial \vec{B}}{\partial z}\right]$$

Λόγω τῆς μορφῆς τοῦ πεδίου, ἡ μὴ μηδενικὴ συνιστῶσα τῆς δυνάμεως εἶναι

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = \vec{\mu}\cdot\hat{z}\, \frac{\partial B_z}{\partial z} =$$

$$= \left[\frac{e\hbar}{2m_e}\frac{\partial B_z}{\partial z}\, m\right] \quad \text{μὲ } |m| \leq \ell \qquad (72)$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω κάθε δέσμη ~~ἀτόμου, στροφορμῆς~~ θὰ χωρίζεται σὲ $2\ell+1$ δέσμες. *2 →

* Στὴν περίπτωση μαγνητικῆς ροπῆς ἐκ περιφορᾶς ἡ ἐνέργεια Zeeman δίνεται ἀπὸ τὴν σχέση:

$$E = \frac{\ell}{4\pi m_e c}\, \vec{L}\cdot\vec{H} = \frac{m h e H}{4\pi m_e c}$$

~~Εκτελείται ανάλογο πείραμα με δέσμη ηλεκτρονίων αντί δέσμη ατόμων~~



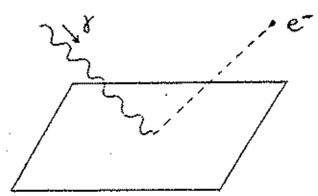
Μὲ τὸ παραπάνω πείραμα μποροῦμε κατ' ἀρχὴν νὰ μετρήσουμε καὶ ἡμιπεριττὲς στροφορμὲς (spin), π.χ νὰ διαπιστώσουμε, ὅτι τὸ πρωτόνιο ἔχει spin $\frac{1}{2}$

√ §6 Σωματιακὲς ἰδιότητες τῆς ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας

Σ' αὐτὴ τὴν παράγραφο θ' ἀσχοληθοῦμε μὲ διάφορα φαινόμενα ποὺ δείχνουν τὴν κβάντωση καὶ τὸν σωματιακὸ χαρακτῆρα τῆς ἠλεκτρομαγνητικῆς ἀκτινοβολίας. ~~Τὰ φαινόμενα αὐτά, ὅπως καὶ ἡ ἀτομικὴ δομή, μᾶς ἐπιβάλλουν νὰ ἀναθεωρήσουμε τὴν Κλασσικὴ Φυσικὴ καὶ θὰ προπαρασκευάσουν τὶς νέες εἰκόνες καὶ ἰδέες γιὰ τὴν κβαντομηχανική.~~ Γνωρίσαμε ἤδη τὴν ἀκτινοβολία τοῦ μέλανος σώματος, ποὺ γιὰ τὴν ἐξήγησή της χρειάστηκε τὴν κβάντωση τῶν ἐνεργειακῶν καταστάσεων τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ κύματος.

6.1 Φωτοηλεκτρικὸ Φαινόμενο

Πειράματα τῶν J.J Thomson καὶ P. Lenard (1889) ἔδειξαν, ὅτι ὑπεριῶδες φῶς προσπίπτοντας πάνω σὲ μέταλλο ἀποσπάει ἠλεκτρόνια. Τὸ φαινόμενο αὐτὸ λέγεται φωτοηλεκτρικό. Ὁ Lenard (1902) έδειξε ὅτι στὸ φαινόμενο




Σχ. 13. Κατὰ τὸ φωτοηλεκτρικὸ φαινόμενο, φωτόνιο γ συγκρούεται μὲ ἕνα ἠλεκτρόνιο e καὶ τὸ ἐκτινάζει ἀπὸ τὸ μέταλλο.

αὐτό:

(α). Ἡ κινητική ἐνέργεια τῶν ἠλεκτρονίων πού ἀποσποῦνται δέν ἐξαρτᾶται ἀπό τήν ἔνταση τοῦ φωτός, ὅπως θά περιμέναμε κλασσικά (Ἄσκηση 35), ἀλλά μόνο ἀπό τήν συχνότητα (ἤ τό μῆκος κύματος) τοῦ φωτός καί τοῦ εἴδους τοῦ μετάλλου (ἀπό τό ἔργο ἐξαγωγῆς W). Γιά συχνότητες μικρότερες μιᾶς ὁρικῆς συχνότητας ~~[illegible]~~ παύει ~~[illegible]~~ ἡ ἐξαγωγή τῶν ἠλεκτρονίων.

(β) Ὁ ἀριθμός τῶν ἠλεκτρονίων πού ἀποσποῦνται (ρεῦμα ἐκπομπῆς) εἶναι ἀνάλογος τῆς ἐντάσεως τοῦ φωτός.

(γ) Ἡ ἀπόσπαση τῶν ἠλεκτρονίων ἀπό τό μέταλλο εἶναι ταυτόχρονη μέ τήν πρόσπτωση τοῦ φωτός, χωρίς χρονική ὑστέρηση.

Οἱ δυσκολίες νά ἐξηγηθεῖ τό φαινόμενο αὐτό κλασσικά, μας εἶναι γνωστές ἀπό τά μαθήματα τῆς Γενικῆς Φυσικῆς.

Τελικά ὁ Einstein (1905) ἔδωσε τήν παρακάτω ἁπλῆ κβαντική ἐξήγηση τοῦ φαινομένου:

Σύμφωνα μέ τήν ὑπόθεση τοῦ Max-Planck, τὸ φῶς συχνότητας ν ἀποτελεῖται ἀπό ἠλεκτρομαγνητικά κβάντα (φωτόνια γ) ἐνεργείας

$$E_\gamma = h\nu$$

Ὁ ἀριθμός τῶν φωτονίων εἶναι μέτρο τῆς ἐνεργειακῆς ροῆς καί ἑπομένως ἀνάλογος τῆς ἐντάσεως τοῦ φωτός.

Ἄν ἕνα φωτόνιο γ ~~ἀπορροφηθεῖ ἀπό ἕνα ἠλεκτρόνιο ἤ ἄλλως~~ συγκρουστεῖ μέ ἕνα ἠλεκτρόνιο, τό ἠλεκτρόνιο θά βγεῖ ἀπό τό μέταλλο μέ κινητική ἐνέργεια

$$\frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - W \quad , \qquad (73)$$

σύμφωνα μέ τήν ἀρχή διατηρήσεως τῆς ἐνεργείας.*

(Τό W παραπάνω, χαρακτηριστική κάθε ἑνός μετάλλου,

Το μεταλλικό πλέγμα όντας πολύ βαρύτερο του ηλεκτρονίου δεν ~~[illegible]~~ μπορεί να απορροφήσει ενέργεια. (βλ. άσκ. 36) ~~[illegible] Η παρουσία του πλέγματος είναι απαραίτητη για την διατήρηση της ορμής.~~



εἶναι ἡ δυναμική ἐνέργεια σύν τήν κινητική ἐνέργεια τοῦ ἠλεκτρονίου μέσα στό μέταλλο.)?

Εἶναι προφανές ὅτι κατά τό κβαντομηχανικό αὐτό παράδειγμα, ὁ ἀριθμός τῶν παραγομένων φωτοηλεκτρονίων θά εἶναι ἀνάλογος τῆς ἐντάσεως τοῦ φωτός.

Ἡ χωρίς χρονική ὑστέρηση ἐλευθέρωσης τῶν ἠλεκτρονίων γίνεται ἐπίσης προφανής, στόν ἁπλό αὐτό μηχανισμό κρούσεως δύο σωματίων, ἑνός φωτονίου καί ἑνός ἠλεκτρονίου.

*1

## 6.2 Φαινόμενο Compton (1924)

Ὅταν ἠλεκτρομαγνητική ἀκτινοβολία (ἀκτῖνες Χ) πέφτει πάνω σέ σύννεφο ἐλευθέρων (ἤ χαλαρά συνδεδεμένων) ἠλεκτρονίων, παθαίνει σκέδαση.

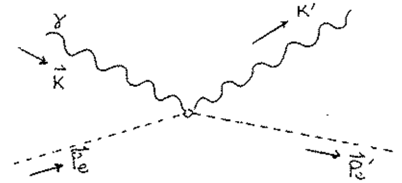
Ἡ σκεδασμένη ἠλεκτρομαγνητική ἀκτινοβολία πού βγαίνει, ἔχει μῆκος κύματος μεγαλύτερο ἀπό τό μῆκος κύματος τῆς ἀκτινοβολίας πού προσπίπτει. Τήν αὔξηση αὐτή τοῦ μήκους κύματος δέν μπορεῖ νά τήν ἐξηγήσει ἡ κλασσική Ἠλεκτρομαγνητική θεωρία, σύμφωνα μέ τήν ὁποία τά ἠλεκτρόνια θά κάνουν ἐξαναγκασμένη ταλάντωση καί ἄρα θά ~~[illegible]~~ ἐκπέμπουν ἀκτινοβολία τοῦ ἴδιου μήκους κύματος μέ αὐτήν πού προσπίπτει. (βλ. και άσκ. 35)

Κβαντομηχανικά το ~~Ἡ μεταβολή τοῦ μήκους κύματος κατά τό~~ φαινόμενο Compton ἔχει ~~ἁπλούστατη κβαντομηχανική~~ απλή ἐξήγηση, θεωρούμενο σαν ~~[illegible] καί αὐτή [illegible]~~ ἐλαστική σκέδαση (κρούση) ἑνός φωτονίου ~~[illegible]~~ με ἕνα ἐλεύθερο ἠλεκτρόνιο (ή πρωτόνιο).

Ἀρκεῖ ~~ἁπλῶς νά [illegible]~~ χρήση τῆς ἀρχῆς ~~τῆς~~ διατηρήσεως τῆς ὁρμῆς καί τῆς ἐνεργείας: Ἐπειδή τό φωτόνιο ἔχει ~~κβαντομηχανικῶς~~ ἐνέργεια $E_\gamma = h\cdot\nu$, θά ἔχει σύμφωνα μέ τήν θεωρία τῆς Σχετικότητας, ὁρμή

$$\vec{p}_\gamma = \frac{h\nu}{c}\hat{e}_k$$

όπου $\vec{c}$ η ταχύτητα διαδόσεως του φωτός. (~~Στην Πυρηνική Φυσική και γενικότερα~~ στην Φυσική των στοιχειωδών σωματίων, η ταχύτητα του φωτός c ~~γίνεται~~ ~~[illegible]~~ λαμβάνεται σαν αδιάστατη σταθερά ίση ~~σαν φυσική μονάδα ταχυτήτων και βάζουμε συνήθως c=1~~) με τη μονάδα. c=1.)




Σχ. 14. ~~Κραυ~~ ~~[illegible] παράδειγμα~~ φαινόμενο Compton. (Ελαστική κρούση φωτονίου ηλεκτρονίου)

~~Φωτόνιο ορμής $\vec{K}_\gamma$ σκεδάζεται ελαστικά πάνω σ' ελεύθερο ηλεκτρόνιο ορμής $\vec{P}_e$. Το φωτόνιο και το ηλεκτρόνιο που βγαίνουν από την κρούση έχουν ορμή αντίστοιχα $\vec{K}_\gamma'$ και $\vec{P}_e'$~~

*2 Θα περιγράψουμε το φαινόμενο

Γιά τό ηλεκτρόνιο θά χρησιμοποιήσαμε τούς τύπους της Κλασσικής Μηχανικής.

Μή σχετικιστικά (γιά $\upsilon << c$) ή κινητική ενέργεια τού ηλεκτρονίου είναι

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{74}$$

καί ή ορμή

$$\vec{p} = m\vec{\upsilon}, \tag{75}$$

ή σχετικιστικά (γιά μεγάλες ταχύτητες)

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\upsilon^2/c^2}} \tag{76}$$

όπου E είναι εδώ ή ολική ενέργεια $E = mc^2 + E_{κιν}$ τού ηλεκτρονίου,

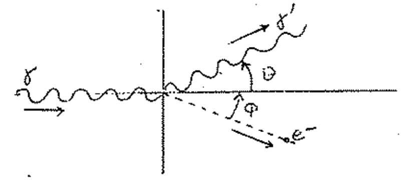
$$\text{καί} \quad \vec{p} = \frac{m\vec{\upsilon}}{\sqrt{1-\upsilon^2/c^2}} \tag{77}$$



Γιά τό φωτόνιο εφαρμόζουμε πάντα τούς σχετικιστικούς τύπους, επειδή αυτό διαδίδεται μέ τήν ταχύτητα τού φωτός (έχει μάζα ηρεμίας μηδέν).

Άς θεωρήσουμε τό φαινόμενο στό σύστημα ηρεμίας τού ηλεκτρονίου (laboratory system of reference).

Από τήν διατήρηση της στροφορμής όλα τά διανύσματα της ορμής $\vec{p}, \vec{p}', \vec{k}, \vec{k}'$ είναι παράλληλα πρός τό ίδιο επίπεδο xOy όπως στό Σχ. 15.




Σχ. 15. Φαινόμενο Compton στό σύστημα ηρεμίας τού ηλεκτρονίου.

Από τήν αρχή της διατηρήσεως της ενεργείας καί ορμής έχουμε:

$$E_\gamma + E_e = E_{\gamma'} + E_{e'} \tag{78}$$

$$\text{καί} \quad \vec{p} + \vec{k} = \vec{p}' + \vec{k}' . \tag{79}$$

Άρα:

(α) Μή σχετικιστικά.

Η αρχή της διατηρήσεως της ενεργείας καί ορμής δίνεται μέ τίς εξισώσεις:

$$h\nu + 0 = h\nu' + \frac{\vec{p}'^2}{2m}$$

$$\frac{h\nu}{c} + 0 = \frac{h\nu'}{c}\cos\theta + |\vec{p}'|\cos\varphi$$

$$0 + 0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\theta - |\vec{p}'|\sin\varphi$$

Από αυτές βρίσκουμε:

$$2mh(\nu-\nu') = \vec{p}'^2 = \frac{h^2}{c^2}\left[(\nu-\nu'\cos\theta)^2+(\nu'\sin\theta)^2\right] =$$

$$= \frac{h^2}{c^2}\left[(\nu-\nu')^2+4\nu\nu'\sin^2\frac{\theta}{2}\right],$$

ἤ

$$\nu-\nu' = \frac{h}{mc^2}\left[\frac{(\nu-\nu')^2}{2}+2\nu\nu'\sin^2\frac{\theta}{2}\right].$$

Γιά $\frac{\delta\nu}{\nu} = \frac{\nu-\nu'}{\nu} << 1$,

$$\nu-\nu' = \frac{2h\nu^2}{mc^2}\sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (80)$$

(β) Σχετικιστικά. (βλέπε καί παράρτημα §1.3)

Στήν Θεωρία τῆς Σχετικότητας ἡ ἐνέργεια $E$ καί ἡ ὁρμή $\vec p$ ἑνός ὑλικοῦ σημείου μάζας $m$, ἀποτελοῦν ἕνα τετράνυσμα $P_\mu = (P_0, P_1, P_2, P_3)$, ὅπου $P_0 = \frac{E}{c}$ καί $P_1, P_2, P_3$ οἱ τρεῖς συνιστῶσες τῆς ὁρμῆς. Τό τετράγωνο τοῦ τετρανύσματος αὐτοῦ

$$\sum_{\mu=0}^{3} P_\mu P^\mu \equiv P_0^2 - \vec p^{\,2} = m^2c^2, \qquad (81)$$

ὅπου $P_0 = \frac{E}{c}$, εἶναι ἀναλλοίωτο στούς μετασχηματισμούς συστημάτων ἀδρανείας (Lorentz) καί ὁρίζει τή μάζα $m$. (Τό ἐσωτερικό γινόμενο $A\cdot B$ δύο τετρανυσμάτων ὁρίζεται μέ τό $A\cdot B = A_0B_0 - \vec A\vec B$). Ἀπό τήν (81) συνεπάγεται ἡ γνωστή σχετικιστική ἔκφραση τῆς ἐνεργείας,

$$E = c\sqrt{m^2c^2+\vec p^{\,2}} = mc^2\sqrt{1+\frac{\vec p^{\,2}}{m^2c^2}} . \qquad (82)$$

Τό φωτόνιο ἔχει μάζα ἠρεμίας μηδέν.

Χρησιμοποιώντας τετρανύσματα, ἡ διατήρηση τῆς ὁρμῆς καί ἐνεργείας ἐκφράζεται μέ τήν διανυσματική ἰσότητα

$$P_\mu + K_\mu = P'_\mu + K'_\mu, \quad \mu=0,1,2,3: \qquad (83)$$



Ἀπό τήν μηδενική συνιστῶσα τῆς σχέσεως (83) ἔχουμε

$$(\varepsilon - m) = h(\nu-\nu'). \qquad (83a)$$

Ἐξ ἄλλου τό τετράγωνο $t$ τῆς μεταφορᾶς τῆς τετρορμῆς

$$(p'-p)_\mu^2 = (k-k')_\mu^2 \quad \text{δίνει:}$$

$$t = (p_\mu - p'_\mu)(p^\mu - p'^\mu) = (k'^\mu - k^\mu)(k'_\mu - k_\mu) = 2m^2 - 2m\varepsilon =$$

$$= -2h^2\nu\nu'(1-\cos\theta) = -4h^2\nu\nu'\sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (84)$$

Ὥστε τελικά ἀπό τίς σχέσεις (83a) καί (84) ἔχουμε

$$\nu-\nu' = \frac{2h\nu\nu'}{mc^2}\sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (85)$$

ἤ $\Delta\lambda = \dots$

Ὁ ἀκριβής καί τελείως σχετικιστικός αὐτός τύπος, συμπίπτει μέ τήν μή σχετικιστική προσέγγιση (80).

Σημείωση

Ἡ κβαντομηχανική ἐπεξεργασία τοῦ φαινομένου Compton στό σύστημα κέντρου μάζας (K.M) $\vec P_\gamma + \vec P_e = 0$ εἶναι ἁπλή. Ἡ διατήρηση τῆς ἐνεργείας καί ὁρμῆς δίνει $(\Delta\nu)_{KM}=0$. Ἀντίθετα ἡ κλασσική Θεωρία στό σύστημα KM πού βρίσαμε παραπάνω προβλέπει $(\Delta\nu)_{KM}\neq 0$, λόγω τοῦ φαινομένου Doppler.

## 6.3. Διπλή φύση τῶν ἠλεκτρομαγνητικῶν κυμάτων

Ἀπό τά φαινόμενα τά ὁποῖα ἀναφέραμε στίς προηγούμενες παραγράφους (ἠλεκτρομαγνητικά κύματα, ἀκτινοβολία μέλανος σώματος, ἀτομική φασματοσκοπία, φωτοηλεκτρικό φαινόμενο καί φαινόμενο Compton), παρατηροῦμε ὅτι τό φωτόνιο παρουσιάζεται μέ τήν ἑξῆς μορφή.

(α) Φωτόνιο σάν κῦμα:

Τό ἠλεκτρικό πεδίο $\vec E(\vec x,t)$ ἀναλύεται σέ κύματα, (βλ.§7)

Ἡ κυματική εἰκόνα ἀποτελεῖ τήν βάση τῶν κλασσικῶν θεωριῶν τοῦ φωτός καί ὁδηγεῖ θριαμβευτικά στήν ἑρμηνεία τῶν κλασσικῶν φαινομένων τῆς συμβολῆς καί περιθλάσεως τοῦ φωτός καί γενικά τῆς μακροσκοπικῆς συμπεριφορᾶς τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου (κύματα ραδιοφώνου, τηλεόρασης κ.λ.π).

(β) Τό φωτόνιο σάν σωμάτιο:

Στούς "κβαντικούς κανόνες" πού χρησιμοποιήθηκαν στήν ἐξήγηση τῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος, τοῦ φωτοηλεκτρικοῦ φαινομένου καί τοῦ φαινομένου Compton, τό φῶς ἀποτελεῖται ἀπό φωτόνια, κβάντα ἐνεργείας $E=h\nu$ καί ὁρμῆς $\vec{P} = \frac{h\nu}{c}\frac{\vec{c}}{c} = \frac{h}{\lambda}\cdot\frac{\vec{c}}{c}$, δηλαδή σωματίων μηδενικῆς μάζας. Οἱ δύο αὐτές ταυτόχρονες εἰκόνες κατά τήν κλασσική Φυσική εἶναι ἀσυμβίβαστες.

§7. <u>Κύματα ὕλης</u> (L. de Broglie, 1923).

Πρίν ἀκόμα παρατηρηθοῦν οἱ κυματικές ἰδιότητες ὑλικῶν σωματίων στά πειράματα Davisson - Germer (1927) καί Thomson (1928), ὁ L. de Broglie προτείνει τήν κυματική θεωρία τῶν ὑλικῶν σωματίων. Ἡ θεωρία τοῦ de Broglie εἶχε σκοπό νά ἑνοποιήσει τήν περιγραφή τῶν ἠλεκτρομαγνητικῶν κυμάτων καί τῆς σωματιακῆς ὕλης. Τά ὑλικά σωμάτια θά εἶναι κατά τόν de Broglie καλά ἐντοπισμένες κυματομάδες.

Ὅταν τά μήκη κύματος εἶναι ἀμελητέα, ἡ κυματική εἰκόνα τῆς ὕλης θά ἔχει ὅριο τήν Κλασσική Μηχανική, ἀκριβῶς ὅπως ἡ Κυματική Ὀπτική ἔχει ὅριο τήν Γεωμετρική Ὀπτική, ὅταν $\lambda \to 0$. Στό ὅριο αὐτό, στά σωμάτια ἤ τό φῶς ἀντιστοιχοῦν σαφεῖς τροχιές.



7.1 <u>Κυματομάδες καί φυσική ἐξήγηση κυματικῶν μεγεθῶν</u>

Ἄς θεωρήσουμε μιά ἁπλότητα μονοδιάστατη κυματομάδα

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k)\, e^{-i[\omega(k)t - kx]}\, dk, \qquad (86)$$

πού ἀποτελεῖται ἀπό ἐπαλληλία μονοχρωματικῶν κυμάτων. Τά πλάτη κύματος $\tilde{f}(k)$ συνδέονται μέ τήν $f(x,t)$ μέ τόν μετασχηματισμό Fourier

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x,t)\, e^{i[\omega(k)t - kx]}\, dx.$$

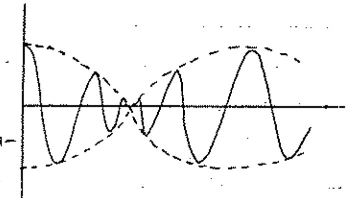
Τό μῆκος κύματος $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, θεωρεῖται συνάρτηση τοῦ $\omega$, π.χ. προκειμένου γιά ἠλεκτρομαγνητικά κύματα εἶναι $\lambda\nu = \frac{c}{n}$, ὅπου $n$ ὁ δείκτης διαθλάσεως τοῦ μέσου διαδόσεως. Ἀπό αὐτήν προκύπτει ἀμέσως ὅτι $k = \frac{n\omega}{c}$. Στήν παραπάνω σχέση (86) τό $\varphi = kx - \omega t$ εἶναι ἡ φάση ἑνός μονοχρωματικοῦ κύματος, μιᾶς συνιστώσας τῆς κυματομάδας. Ἡ ταχύτητα διαδόσεως φάσεως, φασική ταχύτητα (phase velocity) $v_\varphi$ μονοχρωματικοῦ κύματος εἶναι ἐξ' ὁρισμοῦ:

$$v_\varphi = \left(\frac{dx}{dt}\right)_{\varphi=\sigma\tau\alpha\theta.} = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \lambda\nu. \qquad (87)$$

Ἄς θεωρήσουμε τώρα μιά ἁπλούστατη κυματομάδα, πού εἶναι ἐπαλληλία δύο ἐπιπέδων κυμάτων τοῦ ἴδιου πλάτους 1 καί κυκλικῶν συχνοτήτων καί διανυσμάτων διαδόσεως $\omega_0 - \Delta\omega$, $\omega_0 + \Delta\omega$ καί $k_0 - \Delta k$, $k_0 + \Delta k$ ἀντίστοιχα:

$$e^{-i[(\omega_0-\Delta\omega)t-(k_0-\Delta k)x]} + e^{-i[(\omega_0+\Delta\omega)t-(k_0+\Delta k)x]} = 2e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)}\cos(\Delta\omega\cdot t - \Delta k\cdot x).$$

Ἄν ὑποθέσουμε ὅτι $\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \ll 1$ καί $\frac{\Delta k}{k_0} \ll 1$, τό συνιστάμενο αὐτό κῦμα μπορεῖ νά θεωρηθεῖ σάν μονοχρωματικό κυκλικῆς συχνότητας $\omega_0$ καί χρονικά μεταβαλλόμενου πλάτους $\cos(\Delta\omega \cdot t - \Delta k \cdot x)$ (Σx.16). Τό $\frac{\Delta\omega}{\Delta k}$ παριστάνει τήν ταχύτητα διαδόσεως τοῦ «κέντρου μάζας» τοῦ πλάτους τῆς κυματομάδας καί λέγεται ταχύτητα ὁμάδας (group velocity). Γενικότερα γιά μιά κυματομάδα, πού γενικά ἀποτελεῖται ἀπό ἐπαλληλία κυμάτων, κυματικῶν ἀριθμῶν πού βρίσκονται στήν περιοχή ἑνός $k_0$, ἡ ταχύτητα ὁμάδας δίνεται ἀπό τόν τύπο:



Σx. 16

$$v_g = \left.\frac{d\omega(k)}{dk}\right|_{k=k_0} , \qquad (88)$$

ἤ σέ συνάρτηση μέ τό μῆκος κύματος

$$v_g = \frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)} \qquad (89)$$

Ἡ ταχύτητα ὁμάδας εἶναι μέτρο τῆς ταχύτητας τῆς κυματομάδας σάν σύνολο. Ὡστόσο ἐπιθυμοῦμε νά παρατηρήσουμε, ὅτι τόσο ἡ φασική ταχύτητα ὅσο καί ἡ ταχύτητα ὁμάδος, δέν συμπίπτουν πάντα μέ τήν ταχύτητα διαδόσεως ἐνεργείας ἤ φυσικοῦ συστήματος μέσα στό μέσο διαδόσεως καί ἔτσι δέν ὑποβάλλονται στόν περιορισμό ἀπό τήν Εἰδική Θεωρία τῆς Σχετικότητας νά εἶναι $\leq c$.

## 7.2 Κβαντομηχανική ἀντιστοιχία κυματικῶν καί σωματιακῶν ἰδιοτήτων τῆς ὕλης.

Σύμφωνα μέ τήν ὑπόθεση τοῦ Max-Planck καί τήν Θεωρία τῆς Σχετικότητος τοῦ Einstein γιά ἕνα φωτόνιο - ἠλεκτρομαγνητικοῦ κύματος - ἔχουμε τίς σχέσεις:



$E = h\nu = \hbar\omega$ καί $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, πού συνδέουν κβαντομηχανικά τήν ἐνέργεια $E$ καί τήν ὁρμή $\vec{p}$ τοῦ φωτονίου μέ τήν συχνότητα καί τό διάνυσμα διαδόσεως $\vec{k}$ τοῦ ἀντίστοιχου ἠλεκτρομαγνητικοῦ κύματος. Ἔτσι λόγω τῶν σχέσεων αὐτῶν στό ἠλεκτρομαγνητικό κῦμα τοῦ Maxwell $e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}$, ἀντιστοιχεῖ τό κβαντομηχανικό κῦμα $e^{i/\hbar(Et - \vec{p}\vec{x})}$. Ἡ δεύτερη ἔκφραση πού εἶναι συνάρτηση τῆς ἐνεργείας καί τῆς ὁρμῆς προσφέρεται ἄμεσα καί γιά τήν περιγραφή κυμάτων ὕλης. Γι' αὐτό δέν ἔχουμε παρά νά ἐφαρμόσουμε τίς ἀντίστοιχες ἐκφράσεις ἐνεργείας καί ὁρμῆς τῆς Μηχανικῆς, $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ ἤ $E = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2}$, σχετικιστικά καί παίρνουμε τά κύματα κατά de Broglie.

Ἡ ὁμαδική ταχύτητα τῆς κυματομάδας, πού περιγράφει ὑλικό σημεῖο μάζας $m$, πού διαδίδεται στόν ἐλεύθερο χῶρο εἶναι:

$$\vec{v}_g = \vec{\nabla}_p E = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}_{κλασσική} , \quad δηλαδή$$

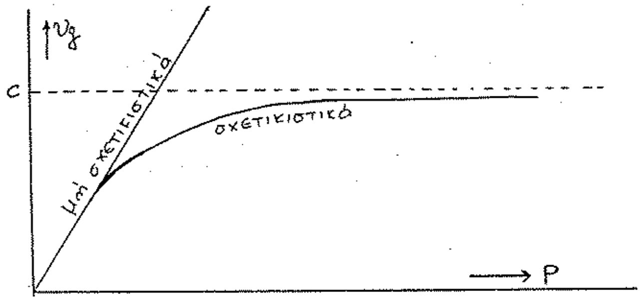
$$\boxed{\vec{v}_g = \vec{v}_{κλ.}} \qquad (90)$$

ἤ σχετικιστικά

$$\vec{v}_g = \vec{\nabla}_p E = \vec{\nabla}_p c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2} = \frac{c\vec{p}}{\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2}} = \vec{v}_{κλασσική} \qquad (91)$$

Ὥστε ἡ ταχύτητα ὑλικῆς κυματομάδας τοῦ de Broglie, εἶναι ἴση μέ τήν κλασσική ταχύτητα τοῦ ὑλικοῦ σωματίου, πού περιγράφει ἡ κυματομάδα.

Ἡ γραφική παράσταση τῶν σχέσεων (90) καί (91) δίνεται στό (Σx 17.).




Σχ. 17. Γραφική παράσταση τοῦ $v_g(P)$ σχετικιστικό καί μή σχετικιστικό.

Γιά τήν φασική ταχύτητα ἔχουμε τίς τιμές:

$$v_\varphi = \frac{E}{|\vec{p}|} = \begin{cases} \text{Μή σχετικιστικά}, \ \dfrac{|\vec{p}|}{2m} = \dfrac{1}{2} v_{\kappa\lambda} & (92) \\ \text{Σχετικιστικό}, \ c\sqrt{1+\dfrac{m^2c^2}{|\vec{p}|^2}} & (93) \end{cases}$$

Ὅπως παρατηροῦμε ἡ φασική ταχύτητα εἶναι πάντα συνάρτηση τῆς συχνότητας. Ἄρα γιά τά κύματα ὕλης, ὑπάρχει πάντα διασκεδασμός, ἀκόμα καί κατά τήν διάδοση στό κενό.

## 7.3. Δείκτης διαθλάσεως γιά ὑλικά κύματα

Κατά τήν κίνηση ὑλικοῦ σημείου μάζας $m$ μέσα σέ δυναμικό ἔχουμε:

$$E = \frac{1}{2}\frac{\vec{p}^2}{m} + V(x) \quad \text{ή} \quad E = c\sqrt{m^2c^2+\vec{p}^2} + V(x),$$

$$\vec{v}_g = \vec{\nabla}_p E = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\sqrt{2m[E-V(x)]}}{m}\,\frac{\vec{p}}{p}.$$

καί $\vec{v}_\varphi = \dfrac{E}{p}\cdot\dfrac{\vec{p}}{p} = \dfrac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}\,\dfrac{\vec{p}}{p}$.

Σέ ἀναλογία μέ τήν κυματική Ὀπτική, ὅταν πρόκειται



γιά ὑλικά κύματα, ὁρίζουμε τόν δείκτη διαθλάσεως μέ τήν σχέση

$$n = \frac{v_0 \ (\text{Φασική ταχύτητα στό κενό})}{v_\varphi \ (\text{Φασική ταχύτητα μέσα σέ δυναμικό})},$$

ὅπου $v_0$ καί $v_\varphi$ οἱ φασικές ταχύτητες στό κενό καί μέσα σέ δυναμικό, ἑνός μονοχρωματικοῦ κύματος – σωματίου ὁλικῆς ἐνέργειας $E$.

Ἄρα

$$n = \sqrt{\frac{E-V}{E}} \qquad (94)$$

Ἀπό τήν παραπάνω ἐξάρτηση τοῦ δείκτη διαθλάσεως παρατηροῦμε, ὅτι στήν περίπτωση ἑλκτικοῦ δυναμικοῦ (ὁπότε $V(x)<0$) ὁ δείκτης διαθλάσεως εἶναι μεγαλύτερος τῆς μονάδας, ἐνῶ στήν περίπτωση ἀπωστικοῦ δυναμικοῦ (ὁπότε $V(x)>0$) ὁ δείκτης διαθλάσεως εἶναι μικρότερος τῆς μονάδας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΙ

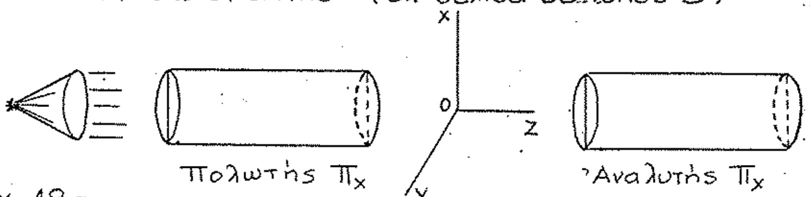
# ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRODINGER

## §0. ΤΟ ΦΩΤΟΝΙΟ ΣΑΝ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ

Αἴνιγμα

« Ἀλήθεια λέω, σάν εἶναι στό κενό
λεύτερο, αἰώνια νά τρέχει ἐπιμένει·
μή πλησιάσεις νά τό δεῖς,
στή πρώτη σου ματιά πεθαίνει.
Ἡ ζωή του εἶναι μόνο μιά στιγμή »

(α) Ἐλεύθερη διάδοση, παρατήρηση φωτονίων, Πείραμα 1.
Ἄς θεωρήσουμε μιά πηγή ἐπίπεδα πολωμένων «μονοχρωματικῶν» φωτονίων (βλ. σχ. 18α). Κάθε φωτόνιο εἶναι ἕνας ἀρκετά μακρύς συρμός κύματος, κυματοπακέτο σχεδόν μονοχρωματικό (βλ σελίδα 66 τύπος 3)




Σχ. 18α
Σχηματική διάταξη γιά τήν ἐπίδειξη τοῦ κβαντικοῦ χαρακτήρα τοῦ φωτονίου.

Τά φωτόνια πού βγαίνουν ἀπό τόν πολωτή $\Pi_x$ εἶναι ἐπίπεδα πολωμένο, παράλληλα μέ τό μοναδιαῖο διάνυσμα $\vec{e}_x$ καί διαδίδονται πρός τά δεξιά κατά μῆκος τοῦ ἄξονα z. Θά τά συμβολίζουμε $|\psi_{\vec{E}_x}\rangle$ ἤ $|\vec{E}_x\rangle$. Ἄν ἡ πηγή εἶναι ἀρκετά ἀσθενής τά φωτόνια, σέ καλή προσέγγιση, θά περνοῦν ξεχωριστά, χωρίς ν'ἀλληλεπιδροῦν καί μποροῦμε νά τά παρακολουθοῦμε ἕνα-ἕνα. Αὐτό δέ [illegible]
[illegible]...



Δεξιά ἀπό τόν πολωτή παρεμβάλλουμε ἕνα «ἀναλυτή» πολώσεως. Ἄν τό χαρακτηριστικό ἐπίπεδο τοῦ ἀναλυτή εἶναι παράλληλο πρός τό ἐπίπεδο τοῦ πολωτή, τό φωτόνιο περνάει ἀνενόχλητο καί συνεχίζει τήν πορεία του. Θά συμβολίζουμε ἕναν τέτοιο ἀναλυτή ξανά μέ $\Pi_x$, ὅπως καί τόν πολωτή. Ἄν στρέψουμε κατά 90° τό ἐπίπεδο τοῦ ἀναλυτή ὥστε νά γίνει κάθετο πρός τό ἐπίπεδο τοῦ πολωτή, (τόν συμβολίζουμε $\Pi_y$), τότε τό φωτόνιο $|\psi_{\vec{E}_x}\rangle$ ἤ $|\vec{E}_x\rangle$ ἀπορροφᾶται καί τό σύστημά μας καταστρέφεται. Ὁ ἀναλυτής $\Pi_y$ μπορεῖ νά χρησιμοποιειθεῖ σάν μετρητής φωτονίων $|\vec{E}_x\rangle$, μέ ἀπόδοση 100%. Πολωτής καί ἀναλυτής θεωροῦνται ἐδῶ ἀπεριορίστου μήκους, ὥστε νά μποροῦν νά χωρέσουν ὁλόκληρο τόν «μονοχρωματικό συρμό». Στήν παράγραφο (γ) αὐτοῦ τοῦ κεφαλαίου θά ἀσχοληθοῦμε μέ τά προβλήματα πού προκύπτουν ἀπό τόν περιορισμό τοῦ φωτονίου στόν χῶρο καί τόν χρόνο. Στή ~~αὐτή~~ πρώτη τήν παράγραφο, γιά ἁπλότητα, θέλουμε νά ἀγνοήσουμε τούς βαθμούς ἐλευθερίας μορφῆς καί μετατοπίσεως τοῦ φωτονίου στόν χῶρο καί νά περιοριστοῦμε μόνο στίς δύο καταστάσεις του ὡς πρός τήν πόλωση. Ἔτσι τό σύστημά μας ἀπό σύστημα ἀπείρων βαθμῶν ἐλευθερίας, μετατρέπεται σέ σύστημα μέ ~~ἕνα~~ βαθμό ἐλευθερίας τήν πόλωση. $|\vec{E}_\alpha\rangle$, ὅπου $0 \leq \alpha \leq 2\pi$, μέ γραμμικά ἀνεξάρτητες δύο μόνο πολώσεις $|\vec{E}_x\rangle$ καί $|\vec{E}_y\rangle$.
Τά μόνα φυσικά μεγέθη τοῦ συστήματος, ~~εἶναι~~ εἶναι οἱ πολώσεις ~~[illegible]~~ πού φθοροῦν μή νά μπροῦν [illegible]

Μὲ τὴν νοητὴ πειραματικὴ διάταξη ποὺ περιγράψαμε, μποροῦμε νὰ βεβαιώσουμε ὅτι στὸ κενὸ ἕνα φωτόνιο μόνο του θὰ διαδίδεται αἰώνια καὶ δὲν θὰ καταστραφεῖ ἂν δὲν τὸ παρατηρήσουμε, οὔτε καὶ θὰ ἀλλάξει κατάσταση (πόλωση, μῆκος κύματος, διεύθυνση διαδόσεως).

Ἡ διακύρηξη στὸ αἴνιγμα, ὅτι τὸ φωτόνιο ζεῖ μόνο μιὰ στιγμή, ἀναφέρεται στὸ ὅτι ὁ ἰδιοχρόνος τοῦ φωτονίου ἀπὸ τὴν στιγμὴ $t_1$ τῆς δημιουργίας του ὡς τὴν στιγμὴ τῆς ἀπορροφήσεως του $t_2$, εἶναι μηδέν:

$$\tau = \int_{t_1}^{t_2} \left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right)^{1/2} dt = 0 \quad ,$$

ἐπειδὴ τὸ φωτόνιο τρέχει μὲ τὴν ταχύτητα $u = c$.

Τὰ συμπεράσματα τοῦ παραπάνω πειράματος μποροῦν νὰ διατυπωθοῦν σὲ μαθηματικὴ γλῶσσα ὡς ἑξῆς:

$$\Pi_x \, |\vec{E}_x\rangle = |\vec{E}_x\rangle \quad , \quad \Pi_x \, |\vec{E}_\psi\rangle = 0 \quad ,$$

$$\Pi_\psi \, |\vec{E}_x\rangle = 0 \quad , \quad \Pi_\psi \, |\vec{E}_\psi\rangle = |\vec{E}_\psi\rangle ,$$

$$\Pi_x^2 = \Pi_x \quad , \quad \Pi_\psi^2 = \Pi_\psi \quad , \quad \Pi_x \cdot \Pi_\psi = \Pi_\psi \cdot \Pi_x = 0 \; .$$

Οἱ τελεστὲς $\Pi_x$, $\Pi_\psi$ εἶναι προβολικοὶ τελεστὲς στὸν διανυσματικὸ χῶρο τῶν κυματικῶν καταστάσεων τοῦ φωτονίου. Αὐτὸ θὰ τὸ δοῦμε σαφέστερο καὶ στὶς ἑπόμενες παραγράφους.



## (b) ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ ΕΠΑΛΛΗΛΙΑ - ΠΕΙΡΑΜΑ 2.

### I. Ἀνάλυση τοῦ φωτονίου σὲ συνιστῶσες.

Ἂν στὴ διάταξη 1 στρέψουμε τὸν ἀναλυτὴ ὥστε τὸ χαρακτηριστικό του ἐπίπεδο νὰ σχηματίζει γωνία $\alpha$ μὲ τὸ ἐπίπεδο τῶν εἰσερχομένων φωτονίων, παρατηροῦμε ὅτι κάθε εἰσερχόμενο φωτόνιο (τύπου $|E_x\rangle$) ποὺ προσπίπτει στὸν ἀναλυτή, εἴτε ἐξέρχεται ἀπ' αὐτὸν ἀκέραιο (μὲ ὅλη του τὴν ἐνέργεια $h\nu$ σὰν φωτόνιο $|E_a\rangle$) καὶ συνεχίζει τὴν πορεία του ἐλεύθερο πρὸς τὰ δεξιά, εἴτε ἀπορροφιέται ὁλόκληρο μέσα στὸν ἀναλυτή. Ἡ ἐνέργεια διατηρεῖται. Τὰ δύο αὐτὰ ἐνδεχόμενα γίνονται τυχαῖα. Μετρῶντας τὴν πιθανότητα γιὰ τὸ κάθε ἐνδεχόμενο βρίσκουμε πειραματικά:

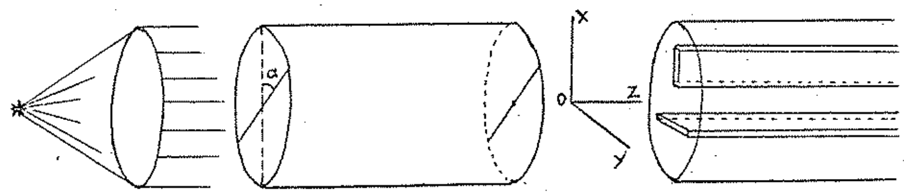
Πιθανότητα τὸ εἰσερχόμενο ~~[illegible]~~ φωτόνιο $|E_x\rangle$ νὰ ἐξέλθει σὰν $|E_a\rangle$, ~~[illegible]~~ $\cos^2 a = \cos^2(E_x \cdot E_a)$. ὅπου $\alpha$ ἡ γωνία μεταξὺ $\vec{E}_x, \vec{E}_\alpha$.

Πιθανότητα τὸ εἰσερχόμενο ~~[illegible]~~ φωτόνιο $|E_x\rangle$ νὰ ἀπορροφηθεῖ σὰν $|E_{\phi}\rangle = \sin^2 a = \sin^2(E_x \cdot E_{xa})$.

$|\vec{\xi}_\alpha\rangle$ = φωτόνιο [illegible] ⊥ [illegible]

### II. Διανυσματικὴ ἀνάλυση καὶ σύνθεση (συμβολή) καταστάσεων ἑνὸς φωτονίου.

Στρέφουμε τώρα τὸν πολωτὴ κατὰ γωνία $\alpha$ ὥστε νὰ γίνει $\Pi_a$ καὶ τὰ εἰσερχόμενα φωτόνια $|E_a\rangle$. Τὸν ἀναλυτὴ τὸν ἀντικαταστοῦμε μὲ ἕνα πιὸ σύνθετο




Σχ. 18.6

ἀναλυτὴ « δύο ὁδῶν διόδου » (βλ. σχ. 18β)
Ὁ ἀναλυτὴς αὐτὸς ἔχει δύο διαδρόμους διόδου (δύο θυρίδες) ἕναν δx ὅπως παλμὰ καὶ ἕναν δψ κάθετο στὸ πρῶτο. Μέσα ἀπὸ τὸν δψ τὰ φωτόνια $|\varepsilon_\psi\rangle$ περνοῦν ἐλεύθερα ἐνῶ τὰ $|\varepsilon_x\rangle$ ἀπορροφοῦνται 100%. Οἱ δύο διάδρομοι (θυρίδες διόδου) εἶναι ἀνεξάρτητοι μεταξύ τους, δὲν ἐπικοινωνοῦν. Ἂν ὁ διάδρομος δx ἢ ὁ δψ εἶναι κλειστὸς ἡ διάταξή μας ταυτίζεται προφανῶς μὲ τὴν παλμὰ διάταξη (I).
Ἀνοίγοντας καὶ τοὺς δύο διαδρόμους, ἡ νέα διάταξη μᾶς ἐπιτρέπει νὰ μελετήσουμε καὶ φαινόμενα ἀναλύσεως καὶ συνθέσεως (συμβολῆς) φωτονίων. Στὴν ἔξοδο τῆς διατάξεως ἔχουμε φαινόμενα ~~συμβολῆς τῶν φωτονίων ποὺ ἔρχονται ἀπὸ τὸν διάδρομο δx μὲ αὐτὰ ποὺ ἔρχονται ἀπὸ τὸν διάδρομο δψ.~~ Ἡ συμβολὴ αὐτὴ εἶναι συμβολὴ ἑνὸς φωτονίου μὲ τὸν ἑαυτό του. Ἀφοῦ ἡ κάθε κυματομάδα περιέχει μόνο ἕνα φωτόνιο. Τὸ φωτόνιο συμπεριφέρεται σὰν νὰ πέρασε μὲ πλάτος πιθανότητας cosa ἀπὸ τὸ διάδρομο δx καὶ μὲ πλάτος πιθανότητας sina ἀπὸ τὸ διάδρομο δψ. Κι' ὅμως τὸ φωτόνιο δὲν μπορεῖ νὰ κόπηκε σὲ δύο κομμάτια, δύο φωτόνια, ἀφοῦ τὸ φωτόνιο διατηρεῖ ὅλη του τὴν ἐνέργεια hν.
Ἂν κλείσουμε τὸν ἕνα διάδρομο μιὰ στιγμή, ὥστε νὰ ἀπορροφηθεῖ τὸ φωτόνιο στὸν ἕναν ἢ στὸν ἄλλο διάδρομο, θὰ βροῦμε ἐνέργεια hν στὸ ἐσωτερικὸ τοῦ ἑνὸς ἀπὸ τοὺς διαδρόμους καὶ μηδὲν στὸν ἄλλο.
Ὅλα αὐτὰ μᾶς εἶναι ἐντελῶς ἀκατανόητα μὲ τὴν Κλασσικὴ Φυσικὴ ὅπου περιμένουμε καθοριστικὰ (ντετερμινιστικὰ) ἀπὸ τὴν ἀνάλυση τοῦ ...



ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου σὲ δύο συνιστῶσες, συνεχὴ δίοδο ἐνεργείας $\cos^2 a$ καὶ $\sin^2 a$ ἀπὸ τοὺς δύο διαδρόμους ἀντίστοιχα. Ἡ πρόβλεψη ~~τῆς~~ κβαντικῆς ~~[illegible]~~ πρέπει νὰ ἔχει ταυτόχρονα καὶ στατιστικὸ χαρακτήρα καὶ νὰ ἐπιτρέπει τὰ ~~καθοριστικὰ~~ φαινόμενα συμβολῆς (ἐπαλληλίας?) τῶν φωτονίων. Τὸ πλάτος πιθανότητας τοῦ φωτονίου ἀπὸ κάθε διάδρομο πρέπει νὰ προστίθεται ~~καθοριστικὰ~~ στὸ πλάτος ~~τοῦ~~ ἄλλου διαδρόμου, ἀλλιῶς δὲν μπορεῖ νὰ ἐξηγ[illegible] ~~[illegible]~~ τὸ φαινόμενο τῆς συμβολῆς ~~– ἀσύμφωνες στατικὰ τυχαῖες πηγὲς φωτὸς δὲν συμβάλλουν μεταξύ τους~~.
Ἔτσι ὁδηγηθήκαμε στὴν παρακάτω εἰκόνα. Τὸ φωτόνιο (ἡ κάθε κατάσταση τοῦ συστήματός μας) μπορεῖ νὰ ἀναλύεται διανυσματικὰ σὲ ἄλλες καταστάσεις τῶν φωτονίων, ὅπως τὸ ἠλεκτρικὸ πεδίο ἀναλύεται σὲ συνιστῶσες:

$$\cancel{\psi|a\rangle = \cos a\, \psi|\varepsilon_x\rangle + \sin a\, \psi_{\varepsilon_\psi}},$$

$$|\vec{E}\rangle = \cos a\,|\vec{\varepsilon}_x\rangle + \sin a\,|\vec{\varepsilon}_\psi\rangle .$$

Αὐτὴ εἶναι ἡ ἀρχὴ τῆς ἐπαλληλίας τῶν κβαντομηχανικῶν καταστάσεων, βασικὸ ἀξίωμα τῆς κβαντομηχανικῆς. Οἱ συντελεστὲς cosa καὶ sina δὲν δίνουν τὶς συνιστῶσες x, ψ τοῦ ἠλεκτρικοῦ πεδίου γιὰ κάθε φωτόνιο συγκεκριμένα, ἀλλὰ πλάτη πιθανότητας νὰ βρεθεῖ τὸ φωτόνιο σὲ μιὰ κατάσταση $|\vec{\varepsilon}_x\rangle$, $|\vec{\varepsilon}_\psi\rangle$, ἢ $|\vec{\varepsilon}_a\rangle$.
Ἡ πιθανότητα εἶναι:

$$|\text{πλάτος πιθανότητας}|^2 .$$

Στὴν προκειμένη δὲ περίπτωση εἶναι $\cos^2 a$, $\sin^2 a$, 1.
Τὰ πλάτη πιθανότητας αὐτὰ μποροῦμε νὰ τὰ ἐκφράσουμε καὶ μὲ τὴν μορφὴ ἐσωτερικῶν γινομένων.
Π.χ

$$\cos a = \cancel{(\psi_{\vec{E}_x}, \psi_{\vec{E}_a})} = (\vec{E}_x | \vec{E}_a) ,$$

$$\sin a = \cancel{(\psi_{\vec{E}_\psi}, \psi_{\vec{E}_a})} = (\vec{E}_\psi | \vec{E}_a) ,$$

$$1 = \cancel{(\psi_{\vec{a}} | \psi_{\vec{a}})} = (\vec{E}_a | \vec{E}_a) .$$

Τά πλάτη πιθανότητας, οἱ συντελεστές τῶν ἐσωτερικῶν γινομένων, δέν εἶναι ἀπαραίτητο νά εἶναι πραγματικοί ἀριθμοί. Στήν περίπτωση στροφικά πολωμένων φωτονίων π.χ (βλ. ἄσκ. 2) εἶναι μιγαδικά $(\varepsilon_a, \varepsilon_+) = \cos a + i \sin a$. Οἱ πιθανότητες βέβαια εἶναι πραγματικές.

Οἱ $\left\langle \frac{\vec{E}_x + i\vec{E}_\psi}{\sqrt{2}} \middle/ \frac{\vec{E}_x + i\vec{E}_\psi}{\sqrt{2}} \right\rangle = (\varepsilon_+^*, \varepsilon_+) = 1$ (i)

$\left\langle \frac{\vec{E}_x - i\vec{E}_\psi}{\sqrt{2}} \middle/ \frac{\vec{E}_x + i\vec{E}_\psi}{\sqrt{2}} \right\rangle = (\varepsilon_-^*, \varepsilon_+) = 0$ (ii)

ὅπου $\vec{E}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{E}_x \pm i \vec{E}_\psi)$

Ἡ νέα σύνταξη εἶναι ὅτι τό ἐσωτερικό γινόμενο $(\psi_a | \psi_b)$ δίνεται ὅπως καί παλιά στά γνωστά μας Εὐκλείδεια ἐσωτερικά γινόμενα μέ τή μόνη διαφορά ὅτι τώρα στό ἀριστερό διάνυσμα θά ἀντικαθιστοῦμε τό συζυγές μιγαδικό

$$(\psi_a, \psi_b) = (\psi_a^*, \psi_b)$$

* Τά ἐσωτερικά αὐτά γινόμενα στή μαθηματική γλῶσσα ἔχουν ὄνομα, ἑρμιτιανά ἐσωτερικά γινόμενα*(HERMITE). ~~Θά τά συναντᾶμε συχνά στήν κβαντομηχανική πού ἀποτε-~~λοῦν βασικό ἐργαλεῖο. Δεχόμενοι τήν ἐπαλληλία τῶν φωτονίων μέ τή νέα της μορφή σάν ἀξίωμα πού θά ἐξασφαλίσει τίς κυματικές ἰδιότητες ἀναλύσεως καί συνθέσεως (συμβολῆς) τῶν φωτονίων, ὁδηγούμεθα στούς ἑξῆς κανόνες (βλέπε ἐπίσης σελ 76 τύπος 8.α)

* βλέπε κεφ. ΙΙΙ § 1

τοῦ Ερμιτικοῦ ἐσωτ. γινομένου,



$$(\psi, a\psi') = a(\psi, \psi')$$
$$(a\psi, \psi') = \bar{a}(\psi, \psi')$$
$$\overline{(\psi, \psi')} = (\psi', \psi)$$

ὅπου $\bar{a}$ ὁ συζυγής μιγαδικός τοῦ $a$ καί $\overline{(\psi,\psi')}$ ὁ συζυγής μιγαδικός τοῦ ἀριθμοῦ $(\psi,\psi')$. (1)

(β) Ὑπόθεση: Στόν γραμμικό χῶρο τῶν κυματικῶν συναρτήσεων τά μετρήσιμα παρατηρήσιμα (OBSERVABLES) φυσικά μεγέθη Λ, ἀντιστοιχοῦν σέ ἑρμιτιανούς γραμμικούς τελεστές ~~(Στό ἁπλοποιημένο σύστημά μας οἱ συνιστῶσες πολώσεως, τά $\Pi_x, \Pi_\psi, \Pi_a$~~, γιά τήν μέτρησή τους ~~ἡ κβαντομηχανική προβλέπει τίς πιθανότητες~~ ἤ ἰσοδύναμα τίς ἀναμενόμενες ~~μέσες τιμές~~. Γιά κάθε φυσικό μέγεθος Λ, ὑπάρχουν καταστάσεις γιά τίς ὁποῖες εἴμαστε βέβαιοι ὅτι τό μέγεθος Λ ἔχει τήν τιμή λ (μετρώντας τό Λ σ' αὐτές θά βροῦμε τήν τιμή λ 100%). Ἔτσι π.χ ἡ κατάσταση $|E_x\rangle$ ἔχει πόλωση $E_x$ 100%. Τίς καταστάσεις αὐτές θά τίς συμβολίζουμε μέ $|\lambda\rangle$ καί θά τίς λέμε ἰδιοκαταστάσεις τοῦ τελεστή Λ, ἀντίστοιχες στήν ἰδιοτιμή λ. Οἱ ἰδιοκαταστάσεις θεωροῦνται νορμαλισμένες, $(\langle\lambda|, |\lambda\rangle) = 1$.

Ἰδιοκαταστάσεις πού ἀντιστοιχοῦν σέ διαφορετικές ἰδιοτιμές εἶναι κάθετες μεταξύ τους. απ' τη θεωρία των Herm. τελεστ.

$$(\lambda, \mu) = \delta_{\lambda\mu} = \begin{cases} 1 & \text{ἄν } \lambda = \mu \\ 0 & \text{ἄν } \lambda \neq \mu \end{cases}$$

ΟΡΘΟΜΟΝΑΔΟΠΟΙΗΣΗ
ORTHONORMALITY ΤΩΝ ΙΔΙΟΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

(2)

~~Τό σύνολο τῶν ἰδιοκαταστάσεων $|\lambda\rangle$ ὑποθέτουμε ὅτι εἶναι ἀρκετό γιά~~ τήν ἀνάπτυξη κάθε κατάστασης $|a\rangle$ σέ ~~γραμμικό ἄθροισμα τῶν $|\lambda\rangle$~~. Πληρότητα της

ιδιοσυναρτήσεων Ερμιτιανών τελεστών

$$\cancel{\sum |\lambda\rangle\langle\lambda| = I}$$

Τόλι $\int_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\alpha\rangle$ βρ. Κεφ III



$$|a\rangle = \int_\lambda c_a^\lambda |\lambda\rangle = \cancel{\int_\lambda |\lambda\rangle\langle a|\lambda\rangle} =$$

$$= \int_\lambda \lambda \langle a|\lambda\rangle\langle\lambda|a\rangle = \langle a| \int_\lambda \lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|a\rangle$$

(3')

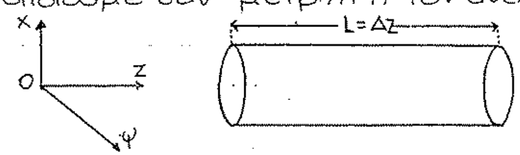
Είναι φυσικό ν' αντιστοιχήσουμε το ~~φυσικό~~ μέγεθος Λ, στον γραμμικό τελεστή $\Lambda = \int_\lambda \lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|$.
Τότε η μέση τιμή του Λ γράφεται συνοπτικά σε συμπαγή μορφή

$$(\Lambda)_a = \langle a|\Lambda|a\rangle.$$

Στο απλουστευμένο σύστημα του φωτονίου που θεωρούμε, οι ιδιότητες των μεγεθών μας ήταν $\lambda = +1$ ή 0 και οι μετρήσεις μας μπόρεσαν να διατυπωθούν με ΝΑΙ-ΟΧΙ πειράματα. Αυτό δεν είναι περιορισμός, όλες οι φυσικές μετρήσεις μπορούν, κατ' αρχήν, να διατυπωθούν μ' αυτό τον τρόπο. Θα το δούμε αυτό σαφέστερα αργότερα.

ΠΕΙΡΑΜΑ 3. ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ ΑΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΤΙΑ ΣΤΗ ΜΕΤΡΗΣΗ ΘΕΣΕΩΣ-ΟΡΜΗΣ, ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ-ΧΡΟΝΟΥ.

Προηγουμένως για ν' απλουστεύσουμε τα πράγματα παραβλέψαμε τους βαθμούς ελευθερίας μετατοπίσεως των φωτονίων στο χώρο κατά την πάροδο του χρόνου.
Έστω τώρα ότι πέρα από την απαρίθμηση των φωτονίων $|\langle a|e_n\rangle|$ κατά ~~μέτρηση της πολώσεώς τους~~ επιθυμούμε να μετρήσουμε και άλλα χαρακτηριστικά του μεγέθη. Τη θέση του $\vec{x}$ στο χώρο, την ορμή του $\vec{P}$, την ενέργειά του E κατά τον χρόνο T. Αρχίζουμε με την μέτρηση της θέσεως. Εξακολουθούμε να χρησιμοποιούμε σαν μετρητή τον αναλυτή (βλ. σχ 18.γ).




Σχ. 18.γ



Ο μετρητής αυτός με τις διαστάσεις της τάξεως του L κατά μήκος της διαδρομής του φωτονίου εντοπίζει και τη θέση του φωτονίου, προκύπτει έτσι μια αβεβαιότητα (Δz) ως προς τη θέση του φωτονίου.

$$(\Delta z) \sim L$$

Το φωτόνιο μπορεί ν' απορροφήθηκε στην αρχή, κάπου στη μέση ή στο τέλος του μετρητή ~~και στο εσωτερικό του~~ χωρίς εμείς να ξέρουμε φυσικά πού. Θέλοντας να μικρύνουμε το (Δz) μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μετρητές με μικρό L. Δυστυχώς λόγω του κυματικού χαρακτήρα του φωτονίου, αυτό συνεπάγεται αύξηση της αβεβαιότητας στη μέτρηση των άλλων μεγεθών. Εντοπισμός του κύματος στο χώρο, σύμφωνα με το θεώρημα ανάλυσης κατά FOURIER συνεπάγεται διασπορά στο κυματικό διάνυσμα (Κεφ. ΙΙΙ, §5 τυπ. 30)

$$(\Delta K) \geq 1/(\Delta z).$$

Συνδυάζοντας τους δύο τύπους έχοντας και το $P = \hbar K$ έχουμε:

$$(\Delta z)(\Delta P_j) \gtrsim \hbar.$$

Μικραίνοντας το μήκος L του μετρητή για να ελαττωθεί η αβεβαιότητα (Δz) στη μέτρηση της θέσεως του φωτονίου, μεγαλώνει το εύρος επιλογής ορμής του μετρητή και η αβεβαιότητα $(\Delta P_j)$ της ορμής κατά τον άξονα z αυξάνεται κατά τρόπο ώστε:

$$(\Delta P_j)(\Delta z) \gtrsim \hbar.$$

Αυτή είναι η γνώριμη σχέση απροσδιοριστίας θέσεως και ορμής των κβαντομηχανικών σωματίων. Θα την γνωρίσουμε σύντομα και για τα υλικά σωμάτια μη μηδενικής μάζας $m \neq 0$. Οι σχέσεις απροσδιοριστίας θέσης και ορμής θα πρέπει να ισχύουν φυσικά και για τις άλλες συνιστώσες

$$(\Delta x)(\Delta P_x) \gtrsim \hbar$$

$$(\Delta \psi)(\Delta P_\psi) \gtrsim \hbar$$

Μέτρηση ἐνεργείας καὶ χρόνου – κβαντομηχανικὴ ἀπροσδιοριστία στὴ μέτρηση.

Τὸν ἀναλυτὴ ὅταν τὸν χρησιμοποιοῦμε σὰν ἀπαριθμητὴ τῶν φωτονίων, μποροῦμε νὰ τὸν συνδέσουμε καὶ μὲ ἕνα χρονόμετρο ὥστε νὰ καταγράφουμε καὶ τὸν χρόνο T ποὺ γίνεται κάθε μέτρηση. ~~Ἀρχίζουμε μὲ τὴν ἐνέργεια E = hν (1)~~

Ἡ μέτρηση τῆς ἐνεργείας ἰσοδυναμεῖ μὲ τὴν μέτρηση τῆς συχνότητας ν τοῦ φωτονίου μὲ κάποια διάταξη μετρήσεως στὸ ἐσωτερικὸ τοῦ μετρητῆ, π.χ μετρήσεως τοῦ μήκους κύματος.

Θὰ ἀναζητήσουμε τώρα νὰ διερευνήσουμε τοὺς κβαντομηχανικοὺς περιορισμοὺς σὲ μέτρηση τοῦ χρόνου T, περιορίζεται ἀπὸ τὴ διάσταση L τοῦ μετρητῆ κατὰ μῆκος τῆς διαδρομῆς τοῦ φωτονίου

$$(\Delta T) \sim \frac{L}{c} \qquad (2)$$

Τὸ φωτόνιο σὰν σωμάτιο μπορεῖ νὰ ἀπορροφηθεῖ στὴν ἀρχὴ ἢ στὸ τέλος τῆς διαδρομῆς του στὸ ἐσωτερικὸ τοῦ μετρητῆ χωρὶς ἐμεῖς νὰ τὸ γνωρίζουμε. Θέλοντας νὰ μικρύνουμε τὸ ΔT πρέπει νὰ μικρύνουμε τὸ L. Ἂς ἀναζητήσουμε τοὺς περιορισμοὺς στὴ μέτρηση καὶ τῆς ἐνεργείας. Ὁ μετρητὴς θὰ ἀλληλεπιδρᾶ μὲ τὸ φωτόνιο στὸ χρόνο $\Delta T \sim L/c$. Αὐτὸ σύμφωνο μὲ τὸν τύπο τοῦ FOURIER, συνεπάγεται διασπορὰ συχνότητας ...

$$(\Delta\nu) \sim 1/\Delta T \gtrsim c/L \qquad (3)$$

Συνδιάζοντας τοὺς δύο τύπους (1) καὶ (3) ἔχουμε:

$$(\Delta E)(\Delta T) \gtrsim h .$$

Παρατηρεῖστε ὅτι (a) ἂν τὸ φωτόνιο βρίσκεται στὴν κατάσταση πολώσεως $|\varepsilon_i\rangle$, ἡ μέση τιμὴ $\overline{P_x}$ στὴ μέτρηση τῆς συνιστώσας $\varepsilon_x$ τῆς πολώσεως ἰσοῦται μὲ τὴν πιθανότητα νὰ βροῦμε τὸ φωτόνιο $|i\rangle$ στὴν κατάσταση $|\varepsilon_x\rangle$ δηλαδή



$$\overline{P_x} = |(\varepsilon_x, i)|^2$$

Π.χ Ἂν $|\psi_i\rangle = |\varepsilon_x\rangle$ ἔχουμε πιθανότητα 1 νὰ βροῦμε τὸ φωτόνιο στὴν κατάσταση $|\varepsilon_x\rangle$ καὶ μηδὲν πιθανότητα στὴν κατάσταση $|\varepsilon_\psi\rangle$. (Ἡ μέση τιμὴ τοῦ στὴ περίπτωση αὐτὴ εἶναι μηδέν, ποτὲ δὲν θὰ βροῦμε τὸ φωτόνιο $|\varepsilon_x\rangle$ μὲ πόλωση $|\varepsilon_\psi\rangle$).

(b) $P_x = |\varepsilon_x\rangle\langle\varepsilon_x|$ (βλέπε ἄσκηση (a)).

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

(a) Δεῖξτε ὅτι ἡ πιθανότητα $\overline{P_x}$ νὰ βροῦμε ἕνα φωτόνιο $|\psi_i\rangle$ στὴ κατάσταση $\psi_{\varepsilon_x}$ εἶναι: $\overline{P_x} = (\psi_i, P_x \psi_i)$.

(b) Δικαιολογεῖστε τοὺς τύπους (i), (ii) π.χ ὁ

$$\left\langle \frac{\psi_{\vec{\varepsilon}_x} + i\,\psi_{\vec{\varepsilon}_\psi}}{\sqrt{2}}_{\text{εἰσερ.}},\ \frac{\psi_{\vec{\varepsilon}_x} + i\,\psi_{\vec{\varepsilon}_\psi}}{\sqrt{2}}_{\text{ἐξερχ}} \right\rangle = 1$$

ἐκφράζει ὅτι ἕνα ἐλεύθερο φωτόνιο, δεξιόστροφα πολωμένο φωτόνιο θὰ ἐξακολουθεῖ νὰ παραμένει δεξιόστροφο.

Ὁ

$$\left( \frac{\psi_{\vec{\varepsilon}_x} - i\,\psi_{\vec{\varepsilon}_\psi}}{\sqrt{2}},\ \frac{\psi_{\vec{\varepsilon}_x} + i\,\psi_{\vec{\varepsilon}_\psi}}{\sqrt{2}} \right) = 0$$

λέει ὅτι ὁ διάδρομος διόδου ἀριστερόστροφων φωτονίων καταστρέφει ὅλα τὰ δεξιόστροφα φωτόνια κ.λ.π.

[illegible]

α) Βρεῖτε τον τελεστή A που η μέση τιμή του $\langle \varepsilon_i | A | \varepsilon_i \rangle$ μας δίνει την πιθανότητα $|\langle \varepsilon_i, \varepsilon_x \rangle|^2$ να βρούμε [illegible]

[illegible]

## § 1. Ἐξίσωση τοῦ Schrödinger

Ἡ διαφορικὴ ἐξίσωση ποὺ ἐπαληθεύουν τὰ ὑλικὰ κύματα de Broglie ποὺ ἀντιστοιχοῦν σὲ ὑλικὸ σημεῖο μάζας $m$, ποὺ κινεῖται στὸν ἐλεύθερο χῶρο καὶ ποὺ γνωρίσαμε στὸ προηγούμενο κεφάλαιο, εἶναι:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{x},t), \qquad (1)$$

ὅπου $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ ὁ γνωστὸς τελεστὴς τοῦ Laplace.

Ὁ τελεστὴς $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ἀντιστοιχεῖ στὴν ἐνέργεια $E$ τοῦ σωματίου καὶ ὁ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2 = \frac{1}{2m}\vec{\mathbb{P}}^2$, ὅπου $\vec{\mathbb{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ὁ τελεστὴς τῆς ὁρμῆς πρὸς τὴν κλασσικὴ Χαμιλτονιανὴ $H_0 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2$ τοῦ ἐλεύθερου ὑλικοῦ σημείου κατὰ τὴν ἀντιστοιχία:

$$\vec{p} \longleftrightarrow \vec{\mathbb{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}.$$

Γενίκευση, παρουσία δυναμικοῦ $V(\vec{x})$, τῆς κυματικῆς ἐξισώσεως (1) διατηρώντας τὶς βασικὲς ἀπαιτήσεις γιὰ τὴν ἀρχὴ τῆς ἐπαλληλίας, δηλαδὴ τὴν γραμμικότητα καὶ ὁμογένεια ὡς πρὸς $\Psi(\vec{x},t)$, δίνει τὴν ἐξαρτημένη ἀπὸ τὸν χρόνο ἐξίσωση τοῦ Schrödinger:

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

Ὁ τελεστὴς $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ἀντιστοιχεῖ πάλι στὴν ἐνέργεια, ὁ δὲ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})$ στὴν Χαμιλτονιανὴ $H = \frac{\vec{\mathbb{P}}^2}{2m} + V(\vec{x})$.
Ἄρα ἡ ἐξίσωση (2) μπορεῖ νὰ γραφτεῖ καὶ σάν:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) = H\Psi(\vec{x},t). \qquad (4)$$



Μὲ τὴν νέα αὐτὴ μορφή, ἡ ἐξίσωση τοῦ Schrödinger μπορεῖ νὰ ἐφαρμοστεῖ γιὰ τὴν περιγραφὴ γενικότερων κβαντομηχανικῶν συστημάτων. Γι' αὐτό, ἀπὸ τὴν κλασσικὴ Χαμιλτονιανή, $H_{κλ}(p_i, q_i)$, συνάρτηση $N$ ζευγῶν κανονικῶν μεταβλητῶν $p_i, q_i$ μὲ $i = 1, 2, \dots N$, ποὺ περιγράφει ἕνα μηχανικὸ σύστημα, κατασκευάζουμε τὸν τελεστὴ τῆς κβαντομηχανικῆς Χαμιλτονιανῆς μὲ τὴν ἀντιστοιχία:
$H(p_i, q_i) \longleftrightarrow H(\mathbb{P}_i, q_i)$, ὅπου $\mathbb{P}_i = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}$. Ἡ ἀντιστοιχία αὐτὴ δὲν ὁρίζει μονοσήμαντα τὴν κβαντομηχανικὴ Χαμιλτονιανή, γιατὶ οἱ γραμμικοὶ (βλέπε παρακάτω) τελεστὲς $\mathbb{P}$ καὶ $\mathbb{q} = q$ δὲν μετατίθονται.
$\mathbb{P}\mathbb{q} - \mathbb{q}\mathbb{P} = -i\hbar \neq 0$. Ὥστε ὅταν στὴν κλασσικὴ Χαμιλτονιανὴ παρουσιάζονται γινόμενα τῶν $p$ καὶ $q$, πρέπει νὰ καθορίσουμε συνήθως καὶ τὴν διάταξη τους, ἀφοῦ στὴν Κβαντομηχανικὴ δὲν ἰσχύει ἡ μεταθετικότητα τῶν γινομένων. Ἡ διάταξη αὐτὴ ὁρίζεται ἀκριβῶς ἀπὸ πρόσθετες ἀπαιτήσεις ὅπως π.χ. ἀπὸ τὴν ἑρμιτιανότητα τοῦ $H$, ὅπως θὰ δοῦμε ἀργότερα.
Ὥστε, γενικότερα ἡ ἐξίσωση τοῦ Schrödinger ἔχει τὴν μορφή:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q,t) = H(\mathbb{P}, \mathbb{q})\Psi(q,t), \qquad (5)$$

ποὺ μὲ ὁλοκλήρωση δίνει

$$\Psi_t(q) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi_{t=0}(q) \qquad (6).$$

Ἐδῶ μὲ τὸ $q$ συμβολίζουμε συνοπτικὰ τὸ σύνολο $q = (q_1, q_2, \dots q_N)$ τῶν γενικευμένων συντεταγμένων, ποὺ χρειάζονται γιὰ τὴν περιγραφὴ θέσεως τοῦ δυναμικοῦ συστήματος στὸν θεσεογραφικὸ χῶρο (configuration space): Ὁ τελεστὴς τῆς Hamiltonian (Χαμιλτονιανῆς) εἶναι ἕνας γραμμικὸς τελεστής, καὶ γι' αὐτὸ ἰσχύει:

$H(\psi_1+\psi_2) = H\psi_1 + H\psi_2$ καὶ $H(a\psi) = aH\psi$, ὅπου $\psi_1$ καὶ $\psi_2$ εἶναι αὐθαίρετες συναρτήσεις καὶ $a$ αὐθαίρετη σταθερά. Ἡ κατάσταση ἑνὸς συστήματος N-ὑλικῶν σημείων, ποὺ στὴν Κλασσικὴ Μηχανικὴ περιγράφεται ἀπὸ τὶς $[p(t), q(t)]$, περιγράφεται τώρα ἀπὸ μιὰ συνάρτηση $\psi_t(q) \equiv \psi(q,t)$. Ἡ $\psi$ μπορεῖ νὰ θεωρηθεῖ σὰν ἕνα διάνυσμα (ἐξ' αἰτίας τῆς γραμμικότητος) σ' ἕνα χῶρο ἀπείρων διαστάσεων. Τὸ $q$, κατὰ κάποιον τρόπο, ἀποτελεῖ ἐδῶ ἕνα συνεχὴ δείκτη ἀντίστοιχο τοῦ δείκτη $i$ τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς. Ἐπειδὴ ἡ ἐξίσωση (5) εἶναι πρωτοβάθμια ὡς πρὸς τὸν χρόνο, στὴν Κβαντομηχανικὴ ὁ χῶρος τῶν φυσικῶν καταστάσεων ἔχει τὸ ἴδιο πλῆθος διαστάσεων μὲ τὸν θεσεογραφικὸ χῶρο (συνήθως τὸ πλῆθος τῶν φυσικῶν ἀριθμῶν).

Ἡ ἐξίσωση (5) ἔρχεται ν' ἀντικαταστήσει τὶς ἐξισώσεις (τοῦ Νεύτωνα) τῆς κινήσεως τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς.

Οἱ βασικότερες ἰδιότητες τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger εἶναι οἱ ἑξῆς:

α) Ἡ ἐξίσωση εἶναι γραμμικὴ καὶ ὁμογενὴς ὡς πρὸς $\psi$. Ὥστε γιὰ τὶς καταστάσεις τοῦ συστήματος ἰσχύει ἡ ἀρχὴ τῆς ἐπαλληλίας, δηλαδὴ ἂν $\psi_1$ καὶ $\psi_2$ εἶναι δύο καταστάσεις τοῦ δυναμικοῦ συστήματος, τότε ἡ $C_1\psi_1 + C_2\psi_2$, ὅπου $C_1$ καὶ $C_2$ εἶναι ἀριθμοί, εἶναι μιὰ δυνατὴ κατάσταση τοῦ ἴδιου συστήματος.

β) Ἡ διαφορικὴ ἐξίσωση εἶναι πρώτου βαθμοῦ ὡς πρὸς τὸν χρόνο $t$. Ἡ χρονικὴ ἐξέλιξη ἐξαρτᾶται μόνο ἀπὸ μιὰ ἀρχικὴ συνθήκη, ~~τῆς~~ τῆς κυματικῆς συναρτήσεως σὲ κάποια χρονικὴ στιγμὴ ~~χρόνο~~ $t_0$ ~~= 0~~, $\psi_{t=0}(q)$, βλέπε ἐξίσωση (6).

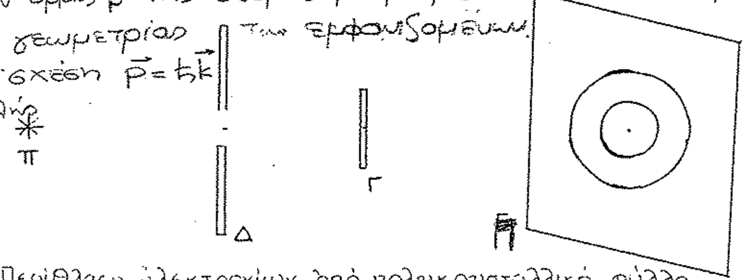


## §2. Στατιστικὴ ἐξήγηση τῶν κυματικῶν καὶ σωματιακῶν ἐκδηλώσεων τῆς ὕλης καὶ Σχέσεις Ἀβεβαιότητος

### 1. Πείραμα ποὺ δείχνει τὴ δυαδικὴ συμπεριφορὰ (σωματιακὴ καὶ κυματικὴ) τῆς ὕλης.

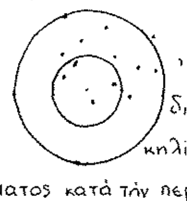
~~Ἂς~~ Θεωρ~~ήσ~~οῦμε μιὰ ἐπίπεδη δέσμη ἠλεκτρονίων ὁρμῆς $\vec{p}$ καὶ ~~ποὺ~~ περνάει μέσα ἀπὸ ἕνα πολυκρυσταλλικὸ φύλλο. Πάνω στὸ πέτασμα Ε καταγράφονται τὰ ἠλεκτρόνια ποὺ προσπίπτουν. Παρατηροῦμε μιὰ κεντρικὴ κηλίδα, ποὺ περιβάλλεται ἀπὸ ὁμοκεντρικοὺς δακτύλιους (σχ. 19) χαρακτηριστικοὺς τῆς περιθλάσεως. ~~Δηλαδὴ ἐκδηλώνεται κυματικὴ συμπεριφορὰ τῶν ἠλεκτρονίων~~. κυμάτων.

Αλλάζοντας την ορμή $\vec{p}$ της δέσμης μπορούμε να διαπιστώσουμε από την αλλαγή της γεωμετρίας των εμφανιζομένων κροσσών, τη σχέση $\vec{p}=\hbar\vec{k}$




Σχ. 19 Περίθλαση ἠλεκτρονίων ἀπὸ πολυκρυσταλλικὸ φύλλο. Π = πηγὴ ἠλεκτρονίων, Δ = διάφραγμα, Γ = πολυκρυσταλλικὸ φύλλο, Ε = πέτασμα.

Ἐὰν ἐλαττώσουμε ἀρκετὰ τὴν ~~ἔνταση~~ ροὴ τῶν ἠλεκτρονίων ποὺ προσπίπτουν, πάνω στὸ πέτασμα Ε στὴν θέση τῶν ~~δακτυλίων~~ κροσσῶν (σχ. 20) ἐμφανίζονται διακεκριμμένες κηλίδες, ποὺ κάθε μιὰ ὀφείλεται ~~στὴ διάδοση~~ σε ἑνὸς μόνο ἠλεκτρονίου (σωματιακὴ συμπεριφορά). Ἡ πυκνότητα τῶν κηλίδων εἶναι ἀνάλογη τοῦ ἀνα-



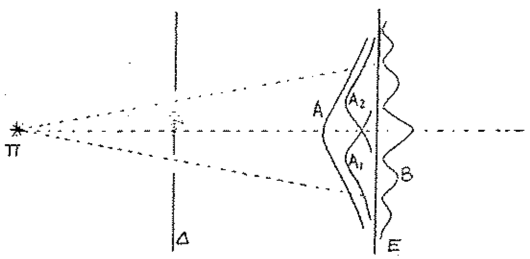
Σχ. 20 Ἐμφάνιση διακεκριμμένων κηλίδων ἐπὶ τοῦ πετάσματος κατὰ τὴν περίθλαση ἠλεκτρονίων (ἐλαττωμένης ἔντασης) ἀπὸ πολυκρυσταλλικὸ φύλλο.

μενόμενου πλάτους ~~τοῦ ἀντίστοιχου κροσσοῦ~~ συμβολῆς. Δηλαδή ὅπου περιμέναμε μεγάλο πλάτος, ὁ ἀριθμός τῶν κηλίδων εἶναι μεγάλος.

Ἔτσι καταλήγουμε στὴν ἁπλὴ ὑπόθεση, ὅτι ~~τὸ~~ κυματικό πλάτος ~~εἰκόνα~~ ἀφορᾶ τὴν πιθανότητα τῆς παρουσίας καθ' ἑνὸς διακεκριμμένου ἠλεκτρονίου. στη θέση $\vec{x}$ στο χρόνο $t$. $|\psi(\vec{x},t)|$

2. <u>Πείραμα ~~τῶν~~ δύο ὀπῶν</u>

Ἂς φανταστοῦμε ἕνα διάφραγμα Δ ἀδιαπέραστο ἀπό τὰ ἠλεκτρόνια, στό ὁποῖο ὑπάρχουν δύο ὀπές (σχ.21).




Σχ 21.

Πείραμα τῶν δύο ὀπῶν: Π = πηγή, Ε = πέτασμα, Α = κλασσική σωματιακή τροχιά, Β = κυματική τροχιά, Δ = διάφραγμα μὲ ὀπές.

Κλείνοντας την μια οπή

~~Παρατηρώντας τὴν δέσμη τῶν ἠλεκτρονίων μέσα ἀπὸ μιά ὀπή, ἐνῶ ἡ ἄλλη εἶναι κλειστή,~~ παρατηροῦμε στό πέτασμα (Ε) μιὰ κατανομὴ τῆς ἐντάσεως $A_1$ (Σχ.21). Μὲ τὸν ἴδιο τρόπο, ἀλλὰ κλείνοντας τὴν πρώτη καὶ ἔχοντας ἀνοιχτὴ τὴν δεύτερη ὀπή, παίρνουμε τὴν κατανομή $A_2$ (Σχ. 21). Ἐπαναλαμβάνοντας τὸ πείραμα μὲ τίς δύο ὀπὲς ἀνοιχτές, παρατηροῦμε τοὺς χαρακτηριστικούς κροσσοὺς συμβολῆς.

Κλασσικά, κάθε ἠλεκτρόνιο πού κινεῖται πάνω σέ γεωμετρική τροχιά, περνάει μέσα ἀπὸ μιά ὀπή καὶ δὲν ἐπηρεάζει τὰ ἄλλα ἠλεκτρόνια, πού περνᾶνε μέσα ἀπό τὴν ἄλλη ὀπή. Ἔτσι θὰ ἔπρεπε νὰ περιμένουμε σὰν ἀπο-



τέλεσμα τὸ ἄθροισμα τῶν δύο κατανομῶν καὶ ὄχι τὴν χαρακτηριστική ~~φάσμα~~ εἰκόνα συμβολῆς. Τό ἀποτέλεσμα ἑπομένως τοῦ πειράματος τῶν δύο ὀπῶν δὲν συμβιβάζεται μὲ τὴν κλασσική σωματιακή εἰκόνα ὅτι τὰ ἠλεκτρόνια κινοῦνται σὲ καθορισμένες τροχιές.

Ἐλαττώνοντας τώρα τὴν ~~ἔνταση~~ ροή τῶν ἠλεκτρονίων πού προσπίπτουν, ὥστε ἕνα μόνο ἠλεκτρόνιο νὰ περνάει ἀπό τὸ διάφραγμα Δ σέ ὡρισμένο χρονικό διάστημα, παρατηροῦμε πάλι ὅτι τό φαινόμενο συμβολῆς χαρακτηρίζει τὴν συχνότητα ἢ πιθανότητα κατανομῆς τῶν ἠλεκτρονίων πού προσπίπτουν στὸ πέτασμα. Ὥστε τὸ φαινόμενο αὐτό τῆς συμβολῆς δὲν ὀφείλεται στὴν συμβολὴ δύο ἠλεκτρονίων, ἕνα πού περνάει ἀπὸ τὴν μιά ὀπή καὶ ἄλλο ἀπό τὴν ἄλλη, ἀλλά εἶναι φαινόμενο συμβολῆς ~~κάθε ἑνὸς ἠλεκτρονίου~~. της κυματοσυνάρτησης ενός μόνο ηλεκτρονίου.

~~Ἀπό τὰ παραπάνω δύο πειράματα καταλήγουμε στὴν ἁπλὴ ὑπόθεση ὅτι οἱ καταστάσεις τῶν ἠλεκτρονίων περιγράφονται ἀπό κυματικές συναρτήσεις, τίς λύσεις τῆς ἐξισώσεως (5), πού μποροῦν νά συμβάλλουν καὶ μὲ τὴν βοήθειά τους νὰ ἔχουμε τὴν πιθανότητα κατανομῆς τῶν ἠλεκτρονίων στὸν χῶρο.~~

3. <u>Ἐξίσωση συνεχείας — Ἀκριβὴς ἔκφραση καὶ φυσική ἐξήγηση τῆς πιθανότητας.</u>

Ὅπως εἴδαμε στὴν προηγούμενη παράγραφο, ἡ πιθανότητα πρέπει νά συνδεθεῖ μὲ τὴν κυματική συνάρτηση. Τά παραπάνω παραδείγματα δείχνουν τὴν σύνδεση τῆς πιθανότητας P μέ μιά αὔξουσα συνάρτηση τοῦ πλάτους τῆς κυματοσυναρτήσεως $P = f(|\psi|)$. Η συνάρτηση πιθανότητας θά πρέπει ἐπίσης ν' ἀποτελεῖ

[illegible] $|\psi(x,t)|$ [illegible]

[illegible] καὶ $E = E_k$ (Βλ. σελ. 1) [illegible] μιά σταθερά τῆς κινήσεως, ἀφοῦ $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\,dx = 1$. Γιά νά βροῦμε τήν ἀκριβῆ μορφή τῆς συναρτήσεως πιθανότητας μέ τίς παραπάνω ἰδιότητες, καταφεύγουμε στήν ἐξίσωση τοῦ Schrödinger.

Ἄς θεωρήσουμε τήν ἐξίσωση τοῦ Schrödinger καί τήν μιγαδική συζυγή της:

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

καί $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V(\vec{x})\Psi^* = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*$$

(Ὑποθέτουμε τό δυναμικό πραγματικό).

Μέ πολλαπλασιασμό ἀπό ἀριστερά τῆς πρώτης ἀπό αὐτές μέ $\Psi^*$ καί τῆς δεύτερης μέ $\Psi$ καί στή συνέχεια ἀφαιροῦντες κατά μέλη ἔχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right)$$

ἤ λόγω τῆς σχέσεως $\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^* = \vec{\nabla}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right)$,

$$\vec{\nabla}\cdot\left\{\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right)\right\} + \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right) = 0,$$

ἤ $$\vec{\nabla}\cdot\vec{J} + \frac{\partial}{\partial t}P = 0 \qquad (7)$$

ὅπου $$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right) \qquad (7a)$$

καί $$P = \Psi^*\Psi = |\Psi|^2 \qquad (7b).$$

Ἡ ἐξίσωση αὐτή εἶναι ἀνάλογη τῆς κλασσικῆς ἐξισώσεως τῆς συνέχειας. Ὁλοκληρώνοντας αὐτήν καί ἐφαρμόζοντας τό θεώρημα τοῦ Gauss ἔχουμε:

$$\int_V \vec{\nabla}\vec{J}\,dV + \int_V \frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\,dV = 0,$$

ἤ $$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2\,dV = -\int_S \vec{J}\,d\vec{S}$$



Ἄν θεωρήσουμε σάν φυσικά παραδεκτές τίς λύσεις ἐκεῖνες πού μηδενίζονται ἀρκετά γρήγορα στό ἄπειρο, (αὐτό εἶναι φανερό ἀφοῦ οἱ λύσεις αὐτές περιγράφουν φυσικές καταστάσεις κατά τίς ὁποῖες τό σωμάτιο εἶναι ἐντοπισμένο μέσα στόν πεπερασμένο χῶρο), τότε τό ὅριο $V \to \infty$ μέ τό ὁποῖο περιλαμβάνουμε «ὅλο τόν χῶρο» ἔχουμε
$\int_S \vec{J}\,d\vec{S} = 0$ καί $\frac{d}{dt}\int |\Psi(\vec{x},t)|^2\,dV = 0$.

Τά παραπάνω δείχνουν σάν ἀκριβῆ μορφή τῆς πυκνότητας πιθανότητας τό $|\Psi|^2$. Ὁποιαδήποτε ἄλλη συνάρτηση τοῦ $|\Psi|$ π.χ $|\Psi|^3$ ἤ $|\Psi|^5$ δέν πληροῖ τήν διατήρηση τῆς πιθανότητας. Ἔτσι τό ὁλοκλήρωμα $\int_V |\Psi|^2\,dV$ δίνει τήν πιθανότητα νά βρίσκεται τό σωμάτιο στόν χῶρο V, μέ φυσική συνθήκη νορμαλισμοῦ $\int_{\text{ὅλος ὁ χῶρος}} |\Psi|^2\,dV = 1$, πού ἐκφράζει ὅτι τό δυναμικό σύστημα πού θεωρήσαμε ἀποτελεῖται ἀπό ἕνα σωμάτιο.

Τό διάνυσμα $\vec{J}$ μπορεῖ νά ἐξηγηθεῖ σάν διάνυσμα πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας (probability current density vector). Τό ὁλοκλήρωμα τοῦ $\vec{J}$ πάνω σέ μιά ἐπιφάνεια εἶναι ἡ πιθανότητα ~~τοῦ~~ νά διαπεράση τό σωμάτιο τήν ἐπιφάνεια αὐτή στήν μονάδα τοῦ χρόνου.

Κατά τά παραπάνω ἡ ἔκφραση τῆς ὁλικῆς πιθανότητας $\int |\Psi|^2\,dV$ ὁρίζει στόν γραμμικό χῶρο τῶν κυματοσυναρτήσεων μιά χρονικά σταθερή norm:

$$N\{\Psi(\vec{x})\} = \|\Psi\|^2 = \int \Psi^*\Psi\,dV = \int |\Psi|^2\,dV. \qquad (8)$$

Ἔτσι καταλήγουμε στόν ὁρισμό ἑνός (ἑρμιτιανοῦ) ἐσωτερικοῦ γινομένου *,

$$(\psi_1,\psi_2) \equiv \frac{\|\psi_1+\psi_2\|^2-\|\psi_1-\psi_2\|^2}{4} + \frac{\|\psi_1+i\psi_2\|^2-\|\psi_1-i\psi_2\|^2}{4} =$$

$$= \int \psi_1^*(\vec{x},t)\,\psi_2(\vec{x},t)\,d^3x . \qquad (8.a)$$

Τὸ ἐσωτερικὸ γινόμενο ποὺ ὁρίστηκε ἔτσι, ὅταν $\psi_1$ καὶ $\psi_2$ εἶναι λύσεις τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger, προφανῶς διατηρεῖται χρονικὰ σταθερό.

## 4. Μέτρηση φυσικῶν μεγεθῶν – Διασπορά

Λόγῳ τῆς στατιστικῆς ἑξήγησης τῆς κυματοσυναρτήσεως $\psi$ ἡ Κβαντομηχανική προβλέπει μόνο μέσες τιμὲς τῶν φυσικῶν μεγεθῶν.

Ἂν συμβολίσ[ουμε] μὲ $P_\psi(a_n)$ τὴν πιθανότητα τῆς τιμῆς $a_n$ κατὰ τὴν μέτρηση τοῦ φυσικοῦ μεγέθους $A$, ὅταν τὸ δυναμικὸ σύστημα στὸ ὁποῖο ἀναφέρεται ἡ μέτρηση, βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$, τότε ἡ μέση τιμὴ $\bar{A}$ τοῦ φυσικοῦ μεγέθους $A$ εἶναι: $\bar{A} \equiv \sum a_n P_\psi(a_n)$.
Ἔτσι π.χ γιὰ τὴν μέση τιμὴ $\bar{\vec{x}}$ τῆς θέσεως θὰ ἔχουμε

$$\bar{\vec{x}} = \int \vec{x}\,P(\vec{x})\,d^3x = \int \vec{x}\,|\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \int \psi^*(\vec{x})\,\vec{x}\,\psi(\vec{x})\,d^3x.$$

(Γιὰ συντομία ἔχουμε παραλείψει τὴ χρονικὴ ἐξάρτηση $\psi(\vec{x},t)\to\psi(\vec{x})$) (9)

### Μέση τιμὴ τῆς ὁρμῆς.

Ἡ ἀνάπτυξη τῆς κυματοσυναρτήσεως $\psi$ κατὰ Fourier εἶναι:

$$\psi(\vec{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int \Phi(\vec{p})\,e^{i/\hbar\,\vec{p}\cdot\vec{x}}\,d^3p , \quad \text{ὅπου}$$

$d^3p = dp_x\,dp_y\,dp_z$. Οἱ συντελεστὲς $\Phi(\vec{p})$ εἶναι μετασχηματισμοὶ Fourier τῆς $\psi(\vec{x})$, ποὺ εἶναι

*Τὸ παραπάνω ἐσωτερικὸ γινόμενο συνδέεται μὲ τὴν norm μὲ τὴν βοήθεια τῶν σχέσεων:

$\|\psi_1\pm\psi_2\|^2 = \|\psi_1\|^2+\|\psi_2\|^2 \pm 2\,\mathrm{Re}\,(\psi_1,\psi_2)$,

$\|\psi_1\pm i\psi_2\|^2 = \|\psi_1\|^2+\|\psi_2\|^2 \pm 2\,\mathrm{Im}\,(\psi_1,\psi_2)$.



$$\Phi(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int \psi(\vec{x})\,e^{-i/\hbar\,\vec{p}\cdot\vec{x}}\,d^3x .$$

Σύμφωνα μὲ τὴν θεωρία τοῦ De Broglie τὸ $|\Phi(\vec{p})|\,d^3p$ εἶναι ἡ πιθανότητα γιὰ νὰ ἔχει ἡ ὁρμὴ τιμὴ στὸ διάστημα $\vec{p}$, $\vec{p}+d^3p$.

Ἂς θεωρήσουμε τὴν ἔκφραση: $\int \psi^*(\vec{x})(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x})\,d^3p =$

$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int \Phi^*(\vec{p})\,e^{-i/\hbar\,\vec{p}\cdot\vec{x}}\,(-i\hbar\vec{\nabla})\,\Phi(\vec{p}\,')\,e^{i/\hbar\,\vec{p}\,'\cdot\vec{x}}\,d^3p\,d^3p'\,d^3x = (2\pi\hbar)^{-3}\int \Phi^*(\vec{p})\,e^{i/\hbar\,(\vec{p}\,'-\vec{p})\cdot\vec{x}}\,\vec{p}\,'\,\Phi(\vec{p}\,')\,d^3p\,d^3p'\,d^3x =$$

$$= \int \Phi^*(\vec{p})\,\delta(\vec{p}\,'-\vec{p})\,\vec{p}\,'\,\Phi(\vec{p}\,')\,d^3p\,d^3p' \quad \text{γιατὶ ἰσχύει}$$

$$\delta(\vec{p}\,'-\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3}\int e^{i/\hbar\,(\vec{p}\,'-\vec{p})\,\vec{x}}\,d^3x . \quad \text{Ὥστε εἶναι}$$

$$\int \psi^*(\vec{x})(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x})\,d^3x = \int \vec{p}\,\Phi^*(\vec{p})\,\Phi(\vec{p})\,d^3p .$$

Γιὰ τὴν μέση τιμὴ τῆς ὁρμῆς ἔχουμε λοιπόν:

$$\bar{\vec{p}} = \int \vec{p}\,|\Phi(\vec{p})|^2 d^3p = \int \psi^*(\vec{x})(-i\hbar\vec{\nabla})\,\psi(\vec{x})\,d^3x . \qquad (10)$$

### Μέτρηση ἄλλων φυσικῶν μεγεθῶν.

Σὲ ἀναλογία μὲ ὅσα εἴπαμε παραπάνω γιὰ τὴν θέση καὶ τὴν ὁρμή, βρίσκουμε ὅτι ἡ μέση τιμὴ τῆς ἐνεργείας ἐλευθέρου σωματίου ποὺ βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$ δίνεται ἀπὸ τὸν τύπο:

$$\bar{E} = \int \psi^*(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi(\vec{x},t)\,d^3x .$$

Παρουσία δυναμικοῦ $V$ ὁ τύπος αὐτὸς παίρνει τὴν μορφή

$$\bar{E} = \int \psi^*(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi(\vec{x},t)\,d^3x = (\psi, E\psi) \qquad (11)$$

Οἱ ἐκφράσεις (9), (10) καὶ (11) ὑποδεικνύουν τὴν ἑξῆς γενίκευση: Ὅταν ἕνα δυναμικὸ σύστημα βρίσκεται στὴν

$$(\psi_1, \psi_2) \equiv \frac{\|\psi_1+\psi_2\|^2-\|\psi_1-\psi_2\|^2}{4} + \frac{\|\psi_1+i\psi_2\|^2-\|\psi_1-i\psi_2\|^2}{4} =$$

$$= \int \psi_1^*(\vec{x},t)\,\psi_2(\vec{x},t)\,d^3x . \qquad (8.a)$$

Τὸ ἐσωτερικὸ γινόμενο ποὺ ὁρίστηκε ἔτσι, ὅταν $\psi_1$ καὶ $\psi_2$ εἶναι λύσεις τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger, προφανῶς διατηρεῖται χρονικὰ σταθερό.

## 4. Μέτρηση φυσικῶν μεγεθῶν – Διασπορά

Λόγω τῆς στατιστικῆς ἐξήγησης τῆς κυματοσυναρτήσεως $\psi$ ἡ Κβαντομηχανικὴ προβλέπει μόνο μέσες τιμὲς τῶν φυσικῶν μεγεθῶν.

Ἂν συμβολίσουμε μὲ $P_\psi(a_n)$ τὴν πιθανότητα τῆς τιμῆς $a_n$ κατὰ τὴν μέτρηση τοῦ φυσικοῦ μεγέθους $A$, ὅταν τὸ δυναμικὸ σύστημα στὸ ὁποῖο ἀναφέρεται ἡ μέτρηση, βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$, τότε ἡ μέση τιμὴ $\bar{A}$ τοῦ φυσικοῦ μεγέθους $A$ εἶναι: $\bar{A} \equiv \sum a_n P_\psi(a_n)$.

Ἔτσι π.χ γιὰ τὴν μέση τιμὴ $\bar{\vec{x}}$ τῆς θέσεως θὰ ἔχουμε

$$\bar{\vec{x}} = \int \vec{x}\, P(\vec{x})\, d^3x = \int \vec{x}\,|\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \int \psi^*(\vec{x})\,\vec{x}\,\psi(\vec{x})\,d^3x .$$

(Γιὰ συντομία ἔχουμε παραλείψει τὴ χρονικὴ ἐξάρτηση $\psi(\vec{x},t) \to \psi(\vec{x})$) (9)

### Μέση τιμὴ τῆς ὁρμῆς.

Ἡ ἀνάπτυξη τῆς κυματοσυναρτήσεως $\psi$ κατὰ Fourier εἶναι:

$$\psi(\vec{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \Phi(\vec{p})\, e^{i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{x}}\, d^3p , \quad \text{ὅπου}$$

$d^3p = dp_x\, dp_y\, dp_z$. Οἱ συντελεστὲς $\Phi(\vec{p})$ εἶναι μετασχηματισμοὶ Fourier τῆς $\psi(\vec{x})$, ποὺ εἶναι

---

*Τὸ παραπάνω ἐσωτερικὸ γινόμενο συνδέεται μὲ τὴν νορμ μὲ τὴν βοήθεια τῶν σχέσεων:

$\|\psi_1 \pm \psi_2\|^2 = \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 \pm 2\,\mathrm{Re}\,(\psi_1,\psi_2)$,

$\|\psi_1 \pm i\psi_2\|^2 = \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 \pm 2\,\mathrm{Im}\,(\psi_1,\psi_2)$.



$$\Phi(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \psi(\vec{x})\, e^{-i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{x}}\, d^3x .$$

Σύμφωνα μὲ τὴν θεωρία τοῦ De Broglie τὸ $|\Phi(\vec{p})|\,d^3p$ εἶναι ἡ πιθανότητα γιὰ νὰ ἔχει ἡ ὁρμὴ τιμὴ στὸ διάστημα $\vec{p}$, $\vec{p}+d^3p$.

Ἂς θεωρήσουμε τὴν ἔκφραση: $\int \psi^*(\vec{x})(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x})\,d^3p =$

$$= (2\pi\hbar)^{-3} \int \Phi^*(\vec{p})\, e^{-i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{x}}\, (-i\hbar\vec{\nabla})\, \Phi(\vec{p}')\, e^{i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{x}}\, d^3p\, d^3p'\, d^3x = (2\pi\hbar)^{-3} \int \Phi^*(\vec{p})\, e^{i/\hbar\,(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}}\, \vec{p}'\,\Phi(\vec{p}')\, d^3p\, d^3p'\, d^3x =$$

$$= \int \Phi^*(\vec{p})\,\delta(\vec{p}'-\vec{p})\,\vec{p}'\,\Phi(\vec{p}')\,d^3p\,d^3p' \quad \text{γιατὶ ἰσχύει}$$

$$\delta(\vec{p}'-\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int e^{i/\hbar\,(\vec{p}'-\vec{p})\,\vec{x}}\, d^3x \quad \text{ὥστε εἶναι}$$

$$\int \psi^*(\vec{x})\,(-i\hbar\vec{\nabla})\,\psi(\vec{x})\,d^3x = \int \vec{p}\,\Phi^*(\vec{p})\,\Phi(\vec{p})\,d^3p .$$

Γιὰ τὴν μέση τιμὴ τῆς ὁρμῆς ἔχουμε λοιπόν:

$$\bar{\vec{p}} = \int \vec{p}\,|\Phi(\vec{p})|^2 d^3p = \int \psi^*(\vec{x})\,(-i\hbar\vec{\nabla})\,\psi(\vec{x})\,d^3x . \qquad (10)$$

### Μέτρηση ἄλλων φυσικῶν μεγεθῶν.

Σὲ ἀναλογία μὲ ὅσα εἴπαμε παραπάνω γιὰ τὴν θέση καὶ τὴν ὁρμή, βρίσκουμε ὅτι ἡ μέση τιμὴ τῆς ἐνεργείας ἐλευθέρου σωματίου ποὺ βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$ δίνεται ἀπὸ τὸν τύπο:

$$\bar{E} = \int \psi^*(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi(\vec{x},t)\,d^3x .$$

Παρουσία δυναμικοῦ $V$ ὁ τύπος αὐτὸς παίρνει τὴν μορφή

$$\bar{E} = \int \psi^*(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi(\vec{x},t)\,d^3x = (\psi, E\psi) \qquad (11)$$

Οἱ ἐκφράσεις (9), (10) καὶ (11) ὑποδεικνύουν τὴν ἑξῆς γενίκευση. Ὅταν ἕνα δυναμικὸ σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$, ἡ μέση τιμή $\overline{A}$ ἑνός φυσικοῦ μεγέθους $A(q,p)$, συνάρτηση τῶν κανονικῶν μεταβλητῶν $q$ καί $p$, δίνεται ἀπό τόν τύπο:

$$\overline{A} = (\psi, A\psi) \qquad (12)$$

ἤ μέ τήν βοήθεια τοῦ προβολικοῦ τελεστή $|\psi\rangle\langle\psi|$, (βλέπε μαθηματικό μέρος),

$$\overline{A} = \mathrm{Trace}\left\{ |\psi\rangle\langle\psi| A \right\}.$$

Οἱ παραπάνω τύποι (12) γιά τήν μέση τιμή, φυσικά, δέν ἀποδεικνύονται. Ἀποτελοῦν καί αὐτοί μέρος τῶν ἀξιωμάτων τῆς Κβαντομηχανικῆς καί ἡ τελική δικαίωσή τους ἀφήνεται μόνο στό πείραμα. Παρ' ὅλα αὐτά, πρέπει νά ἐξεταστεῖ, ἄν ἰσχύουν μερικές γενικές ἀπαιτήσεις. Οἱ μετρήσεις ἑνός φυσικοῦ μεγέθους, π.χ τῆς θέσεως, τῆς ὁρμῆς, τῆς ἐνεργείας κ.λ.π σωματίου, πρέπει νά δώσουν πραγματικούς ἀριθμούς. Ἄρα οἱ μέσες τιμές πρέπει νά εἶναι πραγματικοί ἀριθμοί. Αὐτό βέβαια δέν εἶναι προφανές, γιατί ἡ κυματική συνάρτηση εἶναι γενικά μιά μιγαδική συνάρτηση. Γενικά, γιά νά ἐξασφαλιστεῖ τό πραγματικό τῆς μέσης τιμῆς θά πρέπει νά ἰσχύει:

$(\psi, A\psi)^* = (\psi, A\psi)$, δηλαδή ὁ τελεστής $A$ πρέπει νά εἶναι ἑρμιτιανός (Hermitian) (βλέπε μαθηματικό μέρος).

Ἔτσι π.χ γιά τόν τελεστή τῆς ὁρμῆς ἔχουμε:

$$(\psi, P\psi) = \int \psi^* (-i\hbar\vec{\nabla})\psi\, d^3x = -\Big[-i\hbar\psi^*\psi\Big]_{-\infty}^{+\infty} +$$

$$+\int \psi (i\hbar\vec{\nabla})\psi^*\, d^3x = \int \psi\,(i\hbar\vec{\nabla})\psi^* d^3x = \overline{(\psi, P\psi)}$$

(στό ἄπειρο $\psi = 0$)

Γιά τόν τελεστή τῆς θέσεως, δέν ὑπάρχει φυσικά πρόβλημα στήν δοσμένη ἀναπαράσταση.

Διασπορά



Ἐκτός ἀπό τήν μέση τιμή, ἕνα βασικό μέγεθος τῆς Στατιστικῆς Θεωρίας εἶναι ἡ διασπορά $\Delta A$, πού ὁρίζεται ἀπό τίς σχέσεις:

$$(\Delta A)^2 = \overline{(A-\overline{A})^2} = \overline{A^2} - (\overline{A})^2$$

Στήν Κβαντομηχανική, ἡ διασπορά $\Delta A$ εἶναι γενικά διαφορετική ἀπό τό μηδέν ὅπως θά δοῦμε ἀναλυτικότερα παρακάτω.

## 5. Σχέσεις Ἀβεβαιότητας

Εἴδαμε ὅτι ἡ $|\psi(\vec{x},t)|^2 dV$ παριστάνει τήν πιθανότητα νά βροῦμε ἕνα σωμάτιο σέ στοιχειώδη ὄγκο $dV$ στό σημεῖο $\vec{x}$ τήν χρονική στιγμή $t$. ~~Βέβαια~~ ἀνάλογα μέ τήν μορφή τῆς $\psi(\vec{x},t)$ μποροῦμε νά ἔχουμε μεγάλη μεγαλύτερη ἤ μικρότερη πιθανότητα ~~ἀ... ἴση μέ τήν μονάδα~~, νά βρίσκεται τό σωμάτιο μέσα σέ μιά μικρή περιοχή τοῦ χώρου. Μέ αὐτή τήν ἔννοια παρατηροῦμε ὅτι καί στήν Κβαντομηχανική εἶναι δυνατή ἡ ἀκριβής γνώση τῆς θέσεως τοῦ σωματίου μέ ἀπόλυτη ἀκρίβεια ὅπως καί στήν Κλασσική Μηχανική. Π.χ ἄν

$|\psi(x,t)|^2 = \delta(x-x_0)$, $t=0$, τότε προφανῶς:

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x-x_0)\,dx = 1,$$

ὅπου $\varepsilon$ ὁποιοσδήποτε μικρός θετικός ἀριθμός καί ἡ $\psi(x,t)$ περιγράφει στήν χρονική στιγμή $t=0$ σωμάτιο ἐντοπισμένο στή θέση $x_0$, ὅπως καί στήν Κλασσική Μηχανική.

Εἶναι ὅμως δυνατό νά ξέρουμε τήν θέση καί τήν ὁρμή τοῦ σωματίου, συγχρόνως, μέ ἀπόλυτη ἀκρίβεια σέ ἀντιστοιχία μέ τήν Κλασσική Μηχανική;

Στό παράδειγμα πού ἀναφέραμε, ὁ μετασχηματισμός Fourier τῆς $\psi(x,0)$ δίνει

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x,0)\, e^{-ipx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} \delta(x-x_0)\, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

καί ἡ πιθανότητα νά ἔχει τό σωμάτιο ὁρμή μεταξύ $p$ καί $p+dp$ τήν χρονική στιγμή $t=0$ εἶναι

$$|\Phi(p)|^2 dp = \frac{dp}{2\pi}$$

Δηλαδή κάθε τιμή τῆς ὁρμῆς εἶναι τό ἴδιο πιθανή, δηλαδή ἔχουμε πλήρη ἄγνοια γιά τήν ὁρμή τοῦ σωματίου.

Γενικότερα ἄν

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{p_0-\Delta}^{p_0+\Delta} \Phi(p)\, e^{ipx} dp,$$

ὅπου $\Phi(p)$ ὁ μετασχηματισμός Fourier τῆς $\psi(x,t)$, τότε ἀποδεικνύεται εὔκολα ὅτι: $(\Delta x)(\Delta p) \gtrsim h$. ...(13)

Ἡ (13) ἐκφράζει τήν περίφημη σχέση ἀβεβαιότητος τοῦ Heisenberg. Τήν μαθηματική ἀπόδειξη αὐτῆς στά πλαίσια τῆς ἀξιωματικῆς Κβαντομηχανικῆς, θά τήν δοῦμε ἀργότερα στό κεφάλαιο IV.

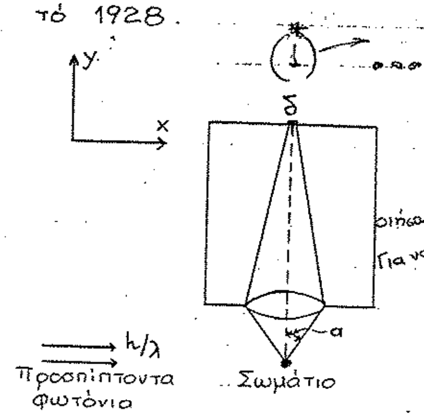
Σύμφωνα μέ τά παραπάνω ἡ κατανομή πιθανότητας στόν χῶρο τῶν θέσεων καί ἡ κατανομή πιθανότητας στόν χῶρο τῶν ὁρμῶν δέν εἶναι ἀνεξάρτητοι, ὅπως σ' ἕνα κλασσικό στατιστικό σύνολο σωματίων, ἀλλά ἡ μία εἶναι συνάρτηση τῆς ἄλλης.

Ἄρα στήν Κβαντομηχανική γιά τήν πλήρη περιγραφή τῆς φυσικῆς καταστάσεως τοῦ συστήματος χρειάζεται καί ἀρκεῖ μόνο ἡ γνώση τῆς μιᾶς ἀπό τίς δύο αὐτές κατανομές τῆς $|\psi(x,t)|^2$, χῶρος τῶν θέσεων, ἤ τῆς $|\Phi(p)|^2$, χῶρος τῶν ὁρμῶν, (ἤ κατάλληλου συνδιασμοῦ τους).

Ἄς δοῦμε μιά ἐπαλήθευση τῆς σχέσεως (13),



σ' ἕνα ἁπλό πείραμα πού ὑποδείχτηκε ἀπό τόν Bohr τό 1928.




Σχ. 22. Πείραμα Μικροσκοπίου τοῦ Bohr.

Ἄς θεωρήσουμε μιά μέτρηση (Σχ. 22), πού ἔχει σκοπό νά προσδιορίσει τήν στιγμιαία θέση ἑνός ηλεκτρονίου. Για μεγαλύτερη ακρίβεια θα χρησιμοποιήσουμε ἕνα μικροσκόπιο. Για να παρατηρηθεί, τό ηλεκτρόνιο πρέπει νά φωτιστεῖ. Ὁ παρατηρητής βλέπει στήν πραγματικότητα τά φωτόνια πού σκεδάζονται πάνω στό ηλεκτρόνιο. Ἡ ἀκρίβεια μέ τήν ὁποία μπορεῖ νά παρατηρηθεῖ τό ηλεκτρόνιο εἶναι συνάρτηση τοῦ διακριτικοῦ ὁρίου δ του μικροσκοπίου, δηλαδή τῶν διαστάσεων τοῦ εἰδώλου ἑνός σημειακοῦ ἀντικειμένου. Ὅπως εἶναι γνωστό ἀπό τήν Κυματική Ὀπτική:

$$\delta \geqslant \frac{\lambda}{\sin a},$$

ὅπου $\lambda$ εἶναι τό μῆκος κύματος τοῦ σκεδασθέντος φωτός καί $a$ εἶναι τό ἥμισυ τῆς γωνίας μεταξύ τοῦ ηλεκτρονίου καί τοῦ ἀντικειμενικοῦ φακοῦ τοῦ μικροσκοπίου. Ἔτσι ἡ ἀβεβαιότητα στήν μέτρηση τῆς θέσεως εἶναι:

$$\Delta x \geqslant \frac{\lambda}{\sin a} \qquad (14)$$

As εκτιμήσουμε τώρα την απροσδιοριστία την ορμής ~~Ὁ παρατηρητής, γιά νά κάνει~~ στην μέτρηση υπεισέρχεται ~~χρειάζεται~~ τουλάχιστον ἕνα σκεδασμένο φωτόνιο. Ἐπειδή ὅμως δέν γνωρίζουμε τήν γωνία σκεδάσεως (τό φωτόνιο μπορεῖ νά ἔχει σκεδαστεῖ παντοῦ μέσα στόν κώνο φακοίσματος), σύμφωνα με τήν ἀρχή τῆς διατηρήσεως τῆς ὁρμῆς, θά

Έχουμε ~~αβεβαιότητα~~ απροσδιοριστία ώς πρός τήν γνώση τής ορμής τοῦ σκεδάζοντος ~~σωματίου~~ ηλεκτρονίου. Άρα, στήν x-~~προβολή~~ συνιστώσα τής ορμής τοῦ ~~φωτονίου~~ ηλεκτρονίου, μετά τήν σκέδαση, ὑπάρχει ~~κάποια αβεβαιότητα κατά~~ απροσδιοριστία

$$\Delta p_x \simeq 2p \sin a = \frac{2h}{\lambda} \sin a \qquad (15).$$

Πολλαπλασιάζοντας ~~τώρα~~ τίς (14) καί (15) ~~προκύπτει~~ έχουμε το γινόμενο απροσδιοριστίας

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim h \qquad (16)$$

~~Τό βασικότερο στοιχείο πάνω στό όποίο στηρίζεται ή παραπάνω ανάλυση είναι ή κβάντωση τής ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Ἡ κβάντωση αὐτή τής ΗΜ ακτινοβολίας επιβάλλει ένα μή μηδενικό ελάχιστο όριο στήν αβεβαιότητα μετρήσεως τής ορμής, γιατί κατά τήν παρατήρηση ένα τουλάχιστον φωτόνιο, ορμής p=h/λ, πρέπει νά σκεδαστεῖ πάνω στό σωμάτιο.~~ Αντίθετα στήν Κλασσική Φυσική ή ορμή μιᾶς φωτεινής δέσμης — ανάλογης τοῦ $\vec{E}\times\vec{B}$, όπου $\vec{E}$ καί $\vec{B}$ ή ένταση τοῦ ηλεκτρικοῦ καί μαγνητικοῦ πεδίου αντίστοιχα — μπορεῖ νά γίνει απεριόριστα μικρή. Έτσι ένας παρατηρητής πού χρησιμοποιεῖ πηγές μέ ασθενή ένταση καί ὑψηλή συχνότητα (μικρό μῆκος κύματος) μπορεῖ νά πετύχει συγχρόνως $p_x, \Delta p_x \to 0$ καί $\Delta x \geq \frac{\lambda}{\sin a} \to 0$. Άρα $(\Delta x \Delta p_x)_{\text{κλασσικά}} \to 0$.

## §3. Θεώρημα τοῦ Ehrenfest – Συσχέτιση μέ τίς εξισώσεις τοῦ Νεύτωνα.

Όπως είδαμε προηγουμένως, ή εξίσωση τής κινήσεως τοῦ Νεύτωνα

$$m\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = \vec{F} = -\vec{\nabla}V(x),$$

τής Κλασσικής Μηχανικής έχει αντικατασταθεῖ στήν Κβαντομηχανική από τήν εξίσωση τοῦ Schrödinger



$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t).$$

Εξ' άλλου σύμφωνα μέ τήν στατιστική εξήγηση, οί προβλέψεις τής Κβαντομηχανικής αφοροῦν μόνο τίς μέσες τιμές τῶν μετρησίμων μεγεθῶν (observables). Δημιουργεῖται λοιπόν τό ερώτημα άν ὑπάρχει συσχέτιση καί ποιά μεταξύ τῶν εξισώσεων πού καθορίζουν τήν χρονική εξέλιξη τῶν μέσων τιμῶν τῶν φυσικῶν μεγεθῶν κατά τήν Κβαντομηχανική.

Γι' αὐτό άς θεωρήσουμε στήν αρχή τήν κβαντομηχανική έκφραση τής ταχύτητας

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{x}} = \frac{d}{dt}\int \psi^*(\vec{x},t)\,\vec{x}\,\psi(\vec{x},t)\,d^3x.$$

Μέ τήν βοήθεια τής εξισώσεως τοῦ Schrödinger, τό δεξιό μέλος τής παραπάνω εκφράσεως γράφεται

$$i\hbar\int\left[\psi^*\vec{x}\,\frac{\nabla^2\psi}{2m} - \frac{\vec{x}\,\psi\,\nabla^2\psi^*}{2m}\right]d^3x =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int \psi^*\left[\vec{x}\,\nabla^2\psi - \nabla^2(\vec{x}\psi)\right]d^3x =$$

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int \psi^*\vec{\nabla}\psi\,d^3x = \frac{1}{m}\int \psi^*(-i\hbar\vec{\nabla})\psi\,d^3x.$$

Δηλαδή τελικά

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{x}} = \frac{1}{m}\overline{\vec{P}}. \qquad (17)$$

Άν τόν τελεστή $\vec{v} = \frac{\vec{P}}{m}$ τόν εξηγήσουμε σάν κβαντομηχανικό τελεστή τής ταχύτητας, ή σχέση (17) αποτελεῖ τόν κβαντομηχανικό ορισμό τής ταχύτητας. «Ἡ ταχύτητα τής μέσης τιμής τής θέσεως, ίσοῦται μέ τήν μέση τιμή τής ταχύτητας.»

Στούς παραπάνω ὑπολογισμούς έγινε χρήση ολοκληρώσεως κατά μέλη καί τοῦ γεγονότος ότι στά όρια ολοκληρώσεως $\psi = 0$.

Μέ ὅμοιο τρόπο βρίσκουμε τό ἀντίστοιχο τῆς ἐξισώσεως τοῦ Νεύτωνα

$$m\frac{d^2}{dt^2}\overline{\vec{x}} = \frac{d}{dt}\overline{\vec{P}} = \frac{d}{dt}\int \psi^*(-i\hbar\vec{\nabla})\psi\, d^3x =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int\Big[\psi^*(-i\hbar\vec{\nabla})\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\Big]\psi - \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\Big]\psi^* \cdot (-i\hbar\vec{\nabla})\psi\Big]\, d^3x .$$

Οἱ ἐξισώσεις (17) καί (18) γνωστές καί σάν θεωρήματα τοῦ Ehrenfest, εἶναι μορφολογικά ὅμοιες μέ τίς ἐξισώσεις τοῦ Νεύτωνα τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς.

Ἐνδιαφέρει νά γνωρίσουμε μέ ποιές προϋποθέσεις τά συμπεράσματα τῆς Κβαντομηχανικῆς μποροῦν νά βγοῦν ἀπό τίς λύσεις τῶν ἐξισώσεων τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς μέ ἀντικατάσταση τῶν δυναμικῶν μεταβλητῶν ἀπό τίς μέσες τιμές. Γι' αὐτό χρειάζεται καί ἡ σχέση:

$$\overline{\vec{F}(\vec{x},t)} = \vec{F}_{\kappa\lambda.}(\overline{\vec{x}},t) \qquad (19)$$

Δυστυχῶς ἡ σχέση (19) ἰσχύει μόνο ὅταν ἡ δύναμη $\vec{F}$ εἶναι γραμμική συνάρτηση τοῦ $\vec{x}$: $F_k = A_{ik}x_k + b_i$.
Αὐτό περιορίζει σημαντικά τήν χρησιμότητα τῶν θεωρημάτων τοῦ Ehrenfest.

Σάν μερικές περιπτώσεις ἔχουμε: α) τήν κίνηση ἐλευθέρου ὑλικοῦ σημείου ($\vec{F}=0$), β) τήν κίνηση μέσα σέ ὁμογενές πεδίο δυνάμεων ($\vec{F}=$ σταθ.) καί γ) τήν κίνηση μέσα σέ πεδίο $V(x) = \frac{1}{2}\kappa\vec{x}^2$, γραμμικοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ.

## §4 Λύση τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger — Ἁπλά μονοδιάστατα προβλήματα.

Ἄς θεωρήσουμε κατ' ἀρχήν τήν ἐξίσωση (2) τοῦ Schrödinger γιά ἕνα σωμάτιο κινούμενο μέσα σέ στατικό δυ-



ναμικό $V(\vec{x})$. Ἡ ἐξίσωση (2) εἶναι μιά διαφορική ἐξίσωση μέ μερικές παραγώγους ὡς πρός τήν θέση καί τόν χρόνο. Ὅμως, ἡ ἐξάρτηση ἀπό τόν χρόνο εἶναι τόσο ἁπλή, ὥστε νά μπορεῖ ἀμέσως νά διαχωριστεῖ. Γι' αὐτό ἀναζητοῦμε λύσεις $\Psi(\vec{x},t)$ τῆς ἐξισώσεως (2) τῆς μορφῆς, $\Psi(\vec{x},t) = \varphi(t)\psi(\vec{x})$, γινομένου συναρτήσεων $\varphi(t)$ καί $\psi(\vec{x})$ μιᾶς μεταβλητῆς. Στό τέλος πρέπει νά διερευνηθεῖ φυσικά ἄν καί μέ ποιές συνθῆκες ὁ γραμμικός συνδιασμός τέτοιων λύσεων, δίνει τήν γενική λύση τῆς (2).

Ἔστω λοιπόν $\Psi(\vec{x},t) = \varphi(t)\psi(\vec{x})$ εἶναι μιά λύση τῆς διαφορικῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger. Βάζοντας αὐτήν στήν (2) ἔχουμε:

$$\psi(\vec{x})\, i\hbar\frac{d}{dt}\varphi(t) = \varphi(t)\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x}) ,$$

ἤ
$$i\hbar\frac{d}{dt}\log\varphi(t) = \frac{1}{\psi(\vec{x})}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x}) . \qquad (20)$$

Ἡ ἐξίσωση (20) εἶναι συμβιβαστή μόνο ἄν τό ἀριστερό καί τό δεξιό μέλος εἶναι ἴσα μέ μιά σταθερά E ἀνεξάρτητο τοῦ t καί τοῦ $\vec{x}$. Ἔτσι προκύπτουν δύο διαφορικές ἐξισώσεις

$$i\hbar\frac{d}{dt}\varphi(t) = E\varphi(t) , \qquad (21)$$

καί

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \qquad (22)$$

ἀπό τήν λύση τῶν ὁποίων θά βροῦμε τίς $\varphi(t)$ καί $\psi(\vec{x})$.
Ἀπό αὐτά ἡ ἐξίσωση (21) ὁλοκληρώνεται στοιχειωδῶς καί δίνει: $\varphi_E(t) = e^{-iEt/\hbar}$

Ἡ ἐξίσωση (22) λέγεται χρονικά ἀνεξάρτητη ἐξίσωση τοῦ Schrödinger καί ἡ λύση τῆς $\psi_E(\vec{x})$ εἶναι τό κυριότερο μέρος τοῦ προβλήματος. Οἱ συναρτήσεις $\psi_E(\vec{x})$ ποὺ ἱκανοποιοῦν τὴν ἐξίσωση (22) εἶναι ἰδιοσυναρτήσεις τοῦ χαμιλτονιανοῦ τελεστοῦ H, ἀντίστοιχες τῶν ἰδιοτιμῶν αὐτοῦ E.

Γενικώτερα, ἄν A εἶναι τυχὼν τελεστὴς καὶ ἰσχύει $A\psi_a = a\psi_a$ ὅπου $a$ ἕνας ἀριθμός, τότε οἱ $\psi_a$ λέγονται ἰδιοσυναρτήσεις τοῦ τελεστῆ A ἀντίστοιχες τῶν ἰδιοτιμῶν αὐτοῦ $a$ (βλέπε κεφ. III, §4.6).

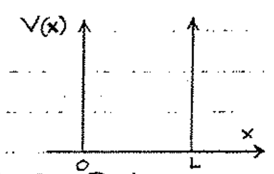
Ἔτσι τελικά:

$$\psi_E(\vec{x},t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\,\psi_E(\vec{x}).$$

Μιὰ λύση τῆς μορφῆς $e^{-i/\hbar Et}\,\psi(\vec{x})$ λέγεται στάσιμη κατάσταση. Ἡ χρονικὴ ἐξάρτηση μιᾶς στάσιμης καταστάσεως ὀφείλεται ἁπλῶς στὴν φάση $e^{-i/\hbar Et}$, ὥστε οἱ μέσες τιμὲς τῶν φυσικῶν μεγεθῶν $A(q,p)$ εἶναι χρονικὰ ἀνεξάρτητες. Κατάσταση ποῦ ἀποτελεῖ ἐπαλληλία στασίμων καταστάσεων δὲν εἶναι στάσιμη γενικά.

<u>Παρατήρηση</u>. Ἐνῶ ἡ χρονικὰ ἐξαρτημένη ἐξίσωση τοῦ Schrödinger (5) ὁδηγεῖ σὲ πρόβλημα ἀρχικῶν τιμῶν (initial value problem), (ὅπως εἴδαμε στὴν §1), ἡ λύση τῆς χρονικὰ ἀνεξάρτητης ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger (22) ὁδηγεῖ σὲ πρόβλημα συνοριακῶν τιμῶν (boundary value problem), ὅπως θὰ δοῦμε παρακάτω.

1. <u>Κουτὶ δυναμικοῦ μὲ ἀπολύτως ἀνακλῶντα τοιχώματα.</u>




Σχ. 23. Φρέαρ δυναμικοῦ μὲ ἄπειρο βάθος.

Ἂς θεωρήσουμε ἕνα σωμάτιο μάζας m μέσα σ' ἕνα μονοδιάστατο κουτὶ δυναμικοῦ μὲ ἀπολύτως ἀνακλῶντα τοιχώματα. Αὐτὸ φυσικὰ εἶναι ἰσοδύναμο μὲ φρέαρ δυναμικοῦ ἄπειρου βάθους, (Σχ. 23). Ὅπως θὰ



δοῦμε παρακάτω, τὸ πρόβλημα αὐτὸ ἔχει ἁπλούστατη μαθηματικὴ δομή, γιατὶ οἱ κυματικὲς συναρτήσεις εἶναι ὅλες νορμαλισμένες καὶ μποροῦμε νὰ διαπραγματευθοῦμε τὸ πρόβλημα στοιχειωδῶς.

Οἱ συνοριακὲς συνθῆκες τοῦ προβλήματος εἶναι οἱ ἑξῆς: Ἐπειδὴ τὰ τοιχώματα τοῦ κουτιοῦ εἶναι ἀπολύτως ἀνακλῶντα, πρέπει τὸ διάνυσμα τοῦ ρεύματος πιθανότητας νὰ μηδενίζεται στὶς θέσεις 0 καὶ L, γιατὶ ἀλλιῶς θὰ εἴχαμε πιθανότητα περάσματος τοῦ σωματίου μέσα ἀπὸ τὰ τοιχώματα. Ἄρα

$$\vec{J}(0) = \vec{J}(L) = 0,$$

αὐτὸ ἐπιβάλλει τὶς συνοριακὲς συνθῆκες

$$\psi_E(0) = \psi_E(L) = 0. \qquad (23)$$

[Πράγματι ἂν θεωρήσουμε ἐπίπεδο κῦμα (ἢ στενὴ κυματομάδα μέσης ὁρμῆς $\vec{p}$) ἔχουμε

$$\vec{J} = |\psi(x)|^2\,\frac{\vec{p}}{m}$$

καὶ ὁ μηδενισμὸς τοῦ ρεύματος ἀπαιτεῖ μηδενισμὸ τῆς κυματικῆς συναρτήσεως].

Ζητᾶμε νὰ βροῦμε τὶς στάσιμες καταστάσεις καὶ τὶς ἀντίστοιχες ἐνεργειακὲς στάθμες. Ἡ ἐξίσωση τοῦ Schrödinger ποὺ πρέπει νὰ λύσουμε, εἶναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + V(x)\,\psi_E(x) = E\,\psi_E(x), \qquad (24)$$

ὅπου $V(x)=0$ γιὰ $0 \le x \le L$.

Στὴν περιοχὴ $0 \le x \le L$ ἡ λύση τῆς ἐξισώσεως (24) εἶναι:

$$\psi_E(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin(kx),$$

ὅπου

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

(Ὁ συντελεστὴς $\sqrt{\frac{2}{L}}$ εἶναι παράγοντας νορμαλισμοῦ ὥστε $\int |\psi_E(x)|^2 dx = 1$).

Σύμφωνα μέ τίς παραπάνω συνοριακές συνθήκες (23) ἔχουμε τίς λύσεις:

$$\psi_{E_n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{L}\,x\right), \qquad 0 \le x \le L \qquad (25a)$$

$$\psi(x) = 0, \qquad x < 0 \ \text{ή}\ x > L \qquad (25b)$$

καί $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad n = 1, 2, \dots$

Ἐπιβεβαιώνεται εὔκολα ὅτι οἱ ἰδιοσυναρτήσεις $\psi_{E_n}$ τοῦ ἐνεργειακοῦ τελεστή, πληροῦν τά ἑξῆς:

α) Οἱ $\psi_{E_n}$ εἶναι ὀρθοκανονικές (ὡς πρός τό ἐσωτερικό γινόμενο πού ὁρίστηκε στό Κεφ. ΙΙ § 3). Πράγματι ἔχουμε,

$$(\psi_{E_n}, \psi_{E_m}) = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)dx = \delta_{mn},$$

ὅπου $\delta_{mn}$ τό δέλτα τοῦ Kronecker.

β) Οἱ $\psi_{E_n}$ ἀποτελοῦν πλήρη βάση γιά τήν ἀνάπτυξη κάθε συναρτήσεως $\psi(x)$, ὁρισμένης στήν περιοχή $0 \le x \le L$, πού ἱκανοποιεῖ τήν συνοριακή συνθήκη $\psi(0) = \psi(L) = 0$ καί

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx < \infty .$$

Πράγματι γιά κάθε μιά $\psi(x)$ ἔχουμε,

$$\psi(x) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right), \quad 0 \le x \le L. \qquad (26)$$

Ὅπου ἡ παραπάνω ἰσότητα θεωρεῖται μέ σύγκλιση κατά τήν νόρμα τοῦ Κεφ. ΙΙ § 3, δηλαδή

$$\lim_{N\to\infty} \left\| \psi - \sum_{m=1}^{N} a_m \psi_{E_m} \right\| = 0 .$$

Ἡ ἔκφραση (26) εἶναι τό γνωστό ἀνάπτυγμα σέ σειρά Fourier. (Βοηθητικά θεωροῦμε τήν $\psi(x)$ ὅτι ἐπεκτείνεται σ' ὅλο τόν ἄξονα τῶν x, σάν περιττή συ-



νάρτηση περιόδου L).

Ἡ παραπάνω ἰδιότητα πληρότητας πού ἀποδείχτηκε μέ τήν βοήθεια τοῦ γνωστοῦ θεωρήματος τῶν μετασχηματισμῶν Fourier, δείχνει συγχρόνως ὅτι βρήκαμε ὅλες τίς ἰδιοσυναρτήσεις.

Οἱ ἰδιότητες α) καί β) τῶν ἰδιοσυναρτήσεων τοῦ ἐνεργειακοῦ τελεστή δέν ἀποτελοῦν ἰδιομορφία τοῦ δυναμικοῦ πού διαλέχτηκε, ἀλλά ὅπως θά δοῦμε ἀργότερα στήν Κβαντομηχανική εἶναι γενικές θεμελιώδεις ἰδιότητες τῶν τελεστῶν πού ἀντιστοιχοῦν σέ φυσικά μεγέθη.

γ) Σέ κάθε ἐνεργειακή στάθμη ἀντιστοιχεῖ μιά καί μόνον κυματοσυνάρτηση, πού ὁρίζεται μονοσήμαντα μέχρι ἑνός παράγοντα φάσεως, δηλαδή δέν ὑπάρχει ἐκφυλισμός τῶν καταστάσεων. Ἡ πρόταση αὐτή ἀποτελεῖ χαρακτηριστική ἰδιότητα τῶν δέσμιων καταστάσεων (bound states), στά μονοδιάστατα προβλήματα.

Πράγματι: Ἔστω ὅτι σέ μιά ἐνεργειακή στάθμη E ἀντιστοιχοῦν δύο κυματοσυναρτήσεις $\psi_1$ καί $\psi_2$. Θά ἀποδείξουμε ὅτι οἱ $\psi_1$ καί $\psi_2$ εἶναι γραμμικό ἐξαρτημένες. Ἀπό τήν ἐξίσωση τοῦ Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n + V(x)\psi_n = E\psi_n, \qquad n = 1, 2,$$

παίρνουμε τήν σχέση

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1\right) = 0,$$

ή $\frac{d}{dx} W(\psi_1, \psi_2) = 0$,

ὅπου $W(\psi_1, \psi_2) \equiv \psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1$ ἡ ὁρίζουσα τοῦ Wronski (Wronskian) γιά τίς συναρτήσεις $\psi_1$ καί $\psi_2$. Ἔχουμε λοιπόν: $W(\psi_1,\psi_2) = σταθ.$

Ὑπολογίζοντας τήν Wronskian στή θέση $x=+\infty$, ὅπου ὑποθέσαμε $\psi(\infty)=0$ βρίσκουμε

$$W(\psi_1,\psi_2) = 0 .$$

Ὁ μηδενισμός τῆς Wronskian ἀποδεικνύει ὅτι οἱ $\psi_1, \psi_2$ εἶναι γραμμικά ἐξαρτημένες, δηλαδή $\psi_1 = σταθ.\, \psi_2$.

1.1 Νορμαλισμός κουτιοῦ

Τό παραπάνω πρόβλημα εἶναι ἰσοδύναμο μέ τόν συνηθισμένο νορμαλισμό κουτιοῦ. Στήν κβαντομηχανική, γιά μιά στοιχειώδη ἀντιμετώπιση μαθηματικῶν δυσκολιῶν, πού προκύπτουν ἀπό τό ὅτι οἱ ἰδιοσυναρτήσεις τῆς κινητικῆς ἐνεργείας δέν εἶναι νορμαλισμένες, θεωροῦμε ὅτι ὁ φυσικός χῶρος εἶναι ἕνα πεπερασμένο κουτί μήκους $L<\infty$, μέ ἀπολύτως ἀνακλῶντα τοιχώματα. Στή συνέχεια παίρνουμε τό ὅριο $L \longrightarrow \infty$.

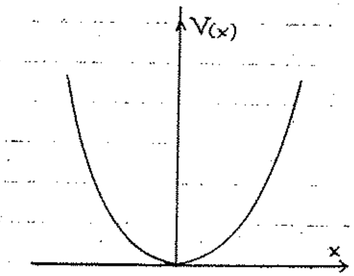
Οἱ συνοριακές συνθῆκες τοῦ παραπάνω νορμαλισμοῦ καταστρέφουν τό ἀναλλοίωτο σέ μετάθεση χώρου καί ἔτσι ἔχουμε ἀπώλεια τῶν ἰδιοσυναρτήσεων τῆς ὁρμῆς. Ἡ δυσκολία αὐτή ἀποφεύγεται ἐξομοιώνοντας τόν χῶρο μέ ἕνα κουτί μέ περιοδικές συνοριακές συνθῆκες, ὅπως π.χ στούς κρυστάλλους.

Περιμένουμε φυσικά ὅτι γιά $L \longrightarrow \infty$ καί οἱ δύο νορμαλισμοί θά ὁδηγοῦν στήν ἀκριβή λύση, ἀνεξάρτητα τοῦ ἀρχικοῦ περιορισμοῦ.

2. ΓΡΑΜΜΙΚΟΣ ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

Ὑλικό σημεῖο μάζας $m$ κινούμενο μέσα σ' ἕνα παραβολικό δυναμικό $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$, (σχ. 24) (πού ἕλκεται π.χ ἀπό ἕνα σημεῖο μέ δύναμη ἀνάλογη τῆς ἀπομακρύνσεως) κλασσικά ἐκτελεῖ ἁπλή ἁρμονική κίνηση $x = A\sin(\omega t+\phi)$,






Σχ. 24: Παραβολικό Δυναμικό.

ὅπου $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = 2\pi\nu$ ἡ κυκλική συχνότητα, δηλαδή γίνεται ἁρμονικός ταλαντωτής.

Ὁ ἁρμονικός ταλαντωτής τόσον κλασσικά, ὅσον καί κβαντομηχανικά ἔχει ἰδιαίτερη σημασία. Στήν θεωρία τῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος γνωρίσαμε ἤδη μιά μεγάλης ἀξίας ἐφαρμογή του στήν ἀνάλυση τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου σέ σύνολο «ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν». Σ' αὐτή τήν παράγραφο θά θεωρήσουμε τόν ἁρμονικό ταλαντωτή κυρίως σάν ὑπόδειγμα μέ τό ὁποῖο ἔχουμε ἁπλή ἀναλυτική λύση. Αὐτό βοηθάει στήν κατανόηση τῶν ἰδιοτήτων τῶν λύσεων τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger γενικά. Τέλος ὑπενθυμίζουμε τήν γνωστή πρακτική χρησιμότητα τοῦ δυναμικοῦ τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή, σάν καλό προσεγγιστικό δυναμικό σέ περιοχές εὐσταθοῦς ἰσορροπίας. Γιά ὅλους τούς παραπάνω λόγους, ὁ ἁρμονικός ταλαντωτής θά μελετηθεῖ παρακάτω μᾶλλον ἐκτεταμένα.

2.1 Ὁ Γραμμικός Ἁρμονικός Ταλαντωτής κατά τήν Κβαντομηχανική.

Ἡ κλασσική Hamiltonian τοῦ γραμμικοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή εἶναι: σε μία διάσταση

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2 .$$

k!

Γιά τήν μελέτη τοῦ προβλήματος θά χρησιμοποιήσουμε τήν ἀναπαράσταση Θέσεως (βλέπε μαθηματικό μέρος), πού εἶναι συνήθως πιό εὔχρηστη, ὅταν δίνεται τό δυναμικό $V = V(x)$ σάν συνάρτηση τῆς Θέσεως (βλέπε ἄσκηση 1).

Ἄρα ὁ ἀντίστοιχος κβαντομηχανικός τελεστής τῆς Hamiltonian εἶναι:

$$H\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2.$$

Λόγω τῆς μορφῆς τοῦ δυναμικοῦ οἱ καταστάσεις τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή εἶναι ἐντοπισμένες στόν χῶρο ὅπως και στην κλας. φυσικη ~~τόσον κλασσικά ὅσον καί κβαντομηχανικά~~. Τό πρόβλημα εἶναι ἀνάλογο μέ τό φρέαρ δυναμικοῦ μέ ἀπολύτως ἀνακλῶντα τοιχώματα. Ἔτσι ὅλες οἱ στάσιμες καταστάσεις (ἰδιοκαταστάσεις τῆς ἐνεργείας), θά εἶναι νορμαλισμένες ἰδιοσυναρτήσεις (δέσμιες καταστάσεις), καί τό ἐνεργειακό φάσμα διάκριτο.

Ὥστε ἄν λύσουμε τήν ἐξίσωση τῶν ἰδιοτιμῶν $H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$, ἡ γενική λύση τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger θά εἶναι,

$$\psi(x,t) = \sum_E C_E \psi_E(x) e^{-iE/\hbar\, t}$$

Ἔχουμε:

$$H\psi_E(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi_E(x) = E\psi_E(x), \qquad (27)$$

Γιά ἁπλοποίηση τοῦ προβλήματος, βάζοντας

$$\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}, \quad \xi = a\cdot x, \quad a^4 = \frac{mk}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{k}\right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega}, \qquad (28)$$

ἡ ἐξίσωση παίρνει τήν μορφή

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi + (\lambda - \xi^2)\psi = 0 \qquad (29)$$



Γιά νά βροῦμε τή λύση τῆς ἐξισώσεως (29) μελετᾶμε αὐτήν κατ' ἀρχήν ἀσυμπτωτικά. Γιά $|\xi| \to +\infty$, βρίσκουμε ἀμέσως ὅτι $\psi = e^{\pm\xi^2/2}$.

Ἐπειδή ἡ κβαντομηχανικά παραδεκτή λύση πρέπει νά εἶναι φραγμένη γιά $|\xi| \to +\infty$, ἀπό τίς δύο ἐκθετικές συναρτήσεις διαλέγουμε τήν $\psi = e^{-\xi^2/2}$.

Ὁ γρήγορος (ἐκθετικός) μηδενισμός τῆς κυματικῆς συναρτήσεως στό ἄπειρο, ἀντιστοιχεῖ στόν μηδενισμό τῶν κυματικῶν συναρτήσεων σωματίου στά πέρατα φρέατος δυναμικοῦ μέ τελείως ἀνακλῶντα τοιχώματα καί ὅπως θά δοῦμε εἶναι ἡ συνοριακή συνθήκη, πού καθορίζει τό ἐνεργειακό φάσμα. Πράγματι τό δυναμικό τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή, εἶναι μιά μορφή φρέατος δυναμικοῦ, "ἄπειρου πλάτους, μέ τελείως ἀνακλῶντα τοιχώματα".

Ἡ ἀσυμπτωτική συμπεριφορά τῆς $\psi(\xi)$ μᾶς ὁδηγεῖ νά ζητήσουμε λύση τῆς ἐξισώσεως (29) μέ τήν μορφή

$$\psi(\xi) = H(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \qquad (30)$$

Ἡ $H(\xi)$ ἱκανοποιεῖ τήν διαφορική ἐξίσωση

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0 \qquad (31)$$

Ἡ διαφορική ἐξίσωση (31) εἶναι τύπου Fucs. Οἱ συντελεστές της εἶναι ἀναλυτικές συναρτήσεις σ' ὁλόκληρο τό πεπερασμένο μιγαδικό ἐπίπεδο $\xi$.

Μποροῦμε ἐπομένως νά ἐκφράσουμε τήν λύση τῆς ἐξισώσεως (31) μέ τήν μορφή δυναμοσειρᾶς

$$H(\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu \qquad (32)$$

Γιά νά βροῦμε τούς συντελεστές $a_\nu$ ἀντικαταστοῦμε τήν δυναμοσειρά (32) στήν ἐξίσωση (31) καί ἐξισώνουμε τούς συντελεστές τῶν δυνάμεων τοῦ ξ μὲ μηδέν, ὁπότε ἔχουμε:

$$2a_2 - (1-\lambda)a_0 = 0$$
$$6a_3 - (3-\lambda)a_1 = 0$$
$$\cdots\cdots\cdots$$

ἢ γενικά:

$$(\nu+1)(\nu+2)a_{\nu+2} - (2\nu+1-\lambda)a_\nu = 0 \quad (33)$$

Ἡ σχέση (33) δίνει ὅλα τὰ $a_\nu$ συναρτήσει τῶν αὐθαίρετων σταθερῶν $a_0 = H(0)$ καὶ $a_1 = H'(0)$, καὶ ἄρα τὴν λύση τῆς ἐξισώσεως (31) συναρτήσει αὐτῶν τῶν σταθερῶν. Δηλαδὴ βρήκαμε τυπικὸ δύο λύσεις, ὅπως τὸ περιμέναμε ἀπὸ διαφορικὴ ἐξίσωση δευτέρας τάξεως. Πρέπει τώρα νὰ ρωτήσουμε ἂν καὶ μὲ ποιές συνθῆκες οἱ λύσεις ποὺ βρήκαμε εἶναι παραδεκτὲς κβαντομηχανικά. Γι' αὐτὸ πρέπει νὰ μελετηθεῖ κατ' ἀρχὴν ἡ σύγκλιση τῆς σειρᾶς (32) καὶ ἡ ἀσυμπτωτικὴ συμπεριφορὰ τῶν λύσεων γιὰ μεγάλα ξ.

Ἂν ἡ δυναμοσειρὰ (32) δὲν τερματίζεται, ἀπὸ τοὺς τύπους (33) ἔχουμε:

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} = \frac{2\nu+1-\lambda}{(\nu+1)(\nu+2)} \xrightarrow[\nu\to\infty]{} \frac{2}{\nu} \longrightarrow 0$$

Ἄρα ἡ δυναμοσειρὰ (32) συγκλίνει γιὰ κάθε ξ.

Ἐξ ἄλλου ὁ λόγος $\frac{a_{\nu+2}\xi^2}{a_\nu}$ δύο διαδοχικῶν ἀρτιων ἢ περιττῶν ὅρων τῆς σειρᾶς συμπεριφέρεται ἀσυμπτωτικὰ γιὰ μεγάλα $|\xi|$, ὅπως ὁ λόγος τῆς σειρᾶς τοῦ ἀναπτύγματος τῆς $e^{\xi^2}$. Ἄρα ἡ κυματοσυνάρτηση $\psi(\xi) = H(\xi)e^{-1/2\,\xi^2}$, θὰ μεγαλώνει ἀνάλογα μὲ τὴν $e^{1/2\,\xi^2}$, καὶ ἡ $H(\xi)$ παραβιάζει τὶς ὁρικὲς συνθῆκες τῆς $\psi(\xi)$ γιὰ μεγάλα $|\xi|$ ἐκτὸς ἂν ἡ δυναμοσειρὰ $H(\xi)$ γίνεται πολυώνυμο.



**Συμπέρασμα.** Γιὰ νὰ ὁδηγηθοῦμε στὴν κβαντομηχανικὰ παραδεκτὴ λύση θὰ πρέπει ἡ δυναμοσειρὰ (32) νὰ σταματάει. Ἂν ἔχουμε $\lambda = 2\nu+1$ γιὰ κάποιο ν ἄρτιο σταματάει ἡ σειρὰ τῶν ἄρτιων ὅρων. Τὸ σύνχρονο σταμάτημα τῆς σειρᾶς ἀρτίων ὅρων καὶ τῆς σειρᾶς περιττῶν ὅρων, δὲν εἶναι δυνατό, παρὰ μόνο ἂν περιορίσουμε ἀπὸ τὴν ἀρχὴ σὲ ἄρτια ἢ περιττὴ λύση. Αὐτὸ ἄλλωστε τὸ περιμένουμε καὶ ἀπὸ γενικότερα φυσικὰ ἐπιχειρήματα: Ἐπειδὴ ἡ Hamiltonian τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτὴ ἔχει κατοπτρικὴ συμμετρία (parity), δηλαδὴ εἶναι ἀναλλοίωτη κατὰ τὸν μετασχηματισμὸ τοῦ κατοπτρισμοῦ $x \longrightarrow -x$, καὶ ἐπειδὴ στὰ μονοδιάστατα προβλήματα οἱ δέσμιες καταστάσεις δὲν παρουσιάζουν ἐκφυλισμὸ ὡς πρὸς τὴν ἐνέργεια, οἱ ἰδιοκαταστάσεις θὰ εἶναι ἄρτιες ἢ περιττές.

Ὥστε τελικά:

ἢ $a_1 = 0$ καὶ $\lambda = 2\nu+1$ γιὰ ν ἄρτιο καὶ ἰδιοσυνάρτηση ἄρτια

ἢ $a_0 = 0$ καὶ $\lambda = 2\nu+1$ γιὰ ν περιττὸ καὶ ἰδιοσυνάρτηση περιττή.

Ἀπὸ τὰ παραπάνω, καὶ μὲ τὴν βοήθεια τῆς

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

συνεπάγεται ὅτι:

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad , \quad n = 0,1,2,\ldots \quad (34)$$

Ἐξ ἄλλου, γιὰ $\lambda = 2n+1$, ἡ ἐξίσωση (31) γίνεται

$$H_n'' - 2H_n' + 2nH_n = 0, \quad (35)$$

μὲ λύσεις $H_n$, τὰ πολυώνυμα n-τάξεως τοῦ Hermite.

Συναρτήσει τῶν $H_n$, οἱ ἰδιοσυναρτήσεις τῆς (27) ἔχουν τὴν μορφὴ

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \quad , \qquad (36)$$

ὅπου $N_n = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!}}$ ἡ σταθερὸ νορμαλισμοῦ.

## 2.2 <u>Γεννήτρια συνάρτηση τῶν πολυωνύμων Hermite</u>

Τὰ πολυώνυμα τοῦ Hermite μποροῦν νὰ ὁρισθοῦν μὲ τὴ βοήθεια τῆς γεννήτριας συναρτήσεως

$$S(\xi,\zeta) = e^{\xi^2-(\zeta-\xi)^2} = e^{-\zeta^2+2\zeta\xi}$$

μὲ τὸ ἀνάπτυγμα,

$$S(\xi,\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \zeta^n . \qquad (37)$$

Πράγματι τὰ πολυώνυμα ποὺ ὁρίζονται ἀπὸ τὴν σχέση (37) ἱκανοποιοῦν τὴν ἐξίσωση (35), δηλαδὴ εἶναι πολυώνυμα τοῦ Hermite.

Παραγωγίζοντας μερικῶς ὡς πρὸς $\xi$ τὴν (37),

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2\zeta e^{-\zeta^2+2\zeta\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\zeta^{n+1}}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{n!} H_n'(\xi)$$

καὶ ἐξισώνοντας τοὺς συντελεστὲς τῶν ἴσων δυνάμεων τοῦ $\zeta$ ἔχουμε

$$H_n' = 2n H_{n-1} \quad . \qquad (38) .$$

Μὲ τὸν ἴδιο τρόπο παραγωγίζοντας μερικῶς ὡς πρὸς $\zeta$,

$$\frac{\partial S}{\partial \zeta} = -(2\zeta+2\xi) e^{-\zeta^2+2\zeta\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-2\zeta+2\xi}{n!} \zeta^n H_n(\xi) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) ,$$

βρίσκουμε ὅτι

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1} \quad , \qquad (39)$$

ἢ παραγωγίζοντας τὴν (39)

$H_{n+1}' = 2\xi H_n' + 2H_n - 2n H_{n-1}'$ . Ἡ ἐξίσωση αὐτὴ



μὲ τὴν βοήθεια τῆς (38) δίνει

$$H_{n+1}' = (2n+1) H_n \quad , \quad H_n'' = 2n H_{n-1}' \quad ,$$

καὶ τελικὰ ?

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0 .$$

Ἄρα ἀποδείχτηκε ὅτι τὰ πολυώνυμα ποὺ ὁρίζονται ἀπὸ τὴν γεννήτρια $S(\xi,\zeta)$, ἱκανοποιοῦν τὴν διαφορικὴ ἐξίσωση τοῦ Hermite. Ἀπομένει μόνο τὸ θέμα νορμαλισμοῦ τους, ποὺ βέβαια στὴν (37) δίνεται ἐξ' ὁρισμοῦ.

Σύμφωνα μὲ τὴν (37) τὰ πολυώνυμα Hermite δίνονται ἐκφρασμένα ἀπὸ τὸν τύπο:

$$H_n = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \qquad n = 0,1,2,\ldots \qquad (40)$$

Ἔτσι π.χ.

$H_0 = 1 \quad , \quad H_1 = 2\xi$

$H_2 = 4\xi^2 - 2 \quad , \quad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$

. . . . . . . . . . . . . . . . .

Ἡ χρησιμοποίηση τῆς γεννήτριας συναρτήσεων εὐκολύνει πολὺ στὴν ἀπόδειξη διαφόρων ἰδιοτήτων τῶν πολυωνύμων $H_n$, ὅπως π.χ στὸν ὑπολογισμὸ ὁλοκληρωμάτων ποὺ περιέχουν τὰ $H_n$. Ἔτσι παρακάτω χρησιμοποιοῦντες τὴν γεννήτρια συνάρτηση, θὰ ἀποδείξω μὲ τὴν ὀρθογωνιότητα τῶν κυματικῶν συναρτήσεων καὶ θὰ καθορίσουμε τὸν νορμαλισμό τους.

<u>Ὀρθογωνιότης καὶ νορμαλισμός</u>

Ἀπὸ τὴν (37) ἔχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(\xi,\zeta) S(\xi,t) e^{-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \frac{\zeta^n t^m}{n! m!} d\xi \qquad (41)$$

Ἀπὸ τὴν $S(\xi,\zeta) = e^{-\zeta^2+2\zeta\xi}$, τὸ πρῶτο μέλος τῆς (41) δίνει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\zeta^2+t^2)} e^{2(\zeta+t)\xi} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} e^{2\zeta t} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n \zeta^n t^n}{n!} \qquad (42)$$

ἔχουν τὴν μορφὴ

$$\psi_n(x) = N_n e^{-a^2x^2/2} H_n(ax) \quad , \qquad (36)$$

ὅπου $N_n = \frac{1}{\pi^{1/4}}\sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!}}$ ἡ σταθερὸ νορμαλισμοῦ.

## 2.2 Γεννήτρια συνάρτηση τῶν πολυωνύμων Hermite

Τὰ πολυώνυμα τοῦ Hermite μποροῦν νὰ ὁρισθοῦν μὲ τὴ βοήθεια τῆς γεννήτριας συναρτήσεως

$$S(\xi,\zeta) = e^{\xi^2-(\zeta-\xi)^2} = e^{-\zeta^2+2\zeta\xi}$$

μὲ τὸ ἀνάπτυγμα,

$$S(\xi,\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\zeta^n . \qquad (37)$$

Πράγματι τὰ πολυώνυμα ποὺ ὁρίζονται ἀπὸ τὴν σχέση (37) ἱκανοποιοῦν τὴν ἐξίσωση (35), δηλαδὴ εἶναι πολυώνυμα τοῦ Hermite.

Παραγωγίζοντας μερικῶς ὡς πρὸς ξ τὴν (37),

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2\zeta e^{-\zeta^2+2\zeta\xi} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{2\zeta^{n+1}}{n!}H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\zeta^n}{n!}H'_n(\xi)$$

καὶ ἐξισώνοντας τοὺς συντελεστὲς τῶν ἴσων δυνάμεων τοῦ ζ ἔχουμε

$$H'_n = 2n H_{n-1} . \qquad (38)$$

Μὲ τὸν ἴδιο τρόπο παραγωγίζοντας μερικῶς ὡς πρὸς ζ,

$$\frac{\partial S}{\partial \zeta} = -(2\zeta+2\xi)e^{-\zeta^2+2\zeta\xi} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{-2\zeta+2\xi}{n!}\zeta^n H_n(\xi) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\zeta^{n-1}}{(n-1)!}H_n(\xi),$$

βρίσκουμε ὅτι

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1} \quad , \qquad (39)$$

ἢ παραγωγίζοντας τὴν (39)

$H'_{n+1} = 2\xi H'_n + 2H_n - 2n H'_{n-1}$ . Ἡ ἐξίσωση αὐτὴ



μὲ τὴν βοήθεια τῆς (38) δίνει

$$H'_{n+1} = (2n+1)H_n \quad , \quad H''_n = 2n H'_{n-1} \; ,$$

καὶ τελικὰ ?

$$H''_n - 2\xi H'_n + 2n H_n = 0 .$$

Ἄρα ἀποδείχτηκε ὅτι τὰ πολυώνυμα ποὺ ὁρίζονται ἀπὸ τὴν γεννήτρια $S(\xi,\zeta)$, ἱκανοποιοῦν τὴν διαφορικὴ ἐξίσωση τοῦ Hermite. Ἀπομένει μόνο τὸ θέμα νορμαλισμοῦ τους, ποὺ βέβαια στὴν (37) δίνεται ἐξ' ὁρισμοῦ.

Σύμφωνα μὲ τὴν (37) τὰ πολυώνυμα Hermite δίνονται ἐκφρασμένα ἀπὸ τὸν τύπο:

$$H_n = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) \qquad n = 0,1,2,\ldots \qquad (40)$$

Ἔτσι π.χ.

$H_0 = 1$ , $H_1 = 2\xi$

$H_2 = 4\xi^2 - 2$ , $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$

. . . . . . . . . . . . . . . . .

Ἡ χρησιμοποίηση τῆς γεννήτριας συναρτήσεων εὐκολύνει πολὺ στὴν ἀπόδειξη διαφόρων ἰδιοτήτων τῶν πολυωνύμων $H_n$, ὅπως π.χ στὸν ὑπολογισμὸ ὁλοκληρωμάτων ποὺ περιέχουν τὰ $H_n$. Ἔτσι παρακάτω χρησιμοποιοῦντες τὴν γεννήτρια συνάρτηση, θὰ ἀποδείξω μὲ τὴν ὀρθογωνιότητα τῶν κυματικῶν συναρτήσεων καὶ θὰ καθορίσουμε τὸν νορμαλισμό τους.

### Ὀρθογωνιότης καὶ νορμαλισμός

Ἀπὸ τὴν (37) ἔχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(\xi,\zeta)\, S(\xi,t)\, e^{-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi)\frac{\zeta^n t^m}{n!\,m!}d\xi \qquad (41)$$

Ἀπὸ τὴν $S(\xi,\zeta) = e^{-\zeta^2+2\zeta\xi}$, τὸ πρῶτο μέλος τῆς (41) δίνει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\zeta^2+t^2)} e^{2(\zeta+t)\xi} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}\, e^{2\zeta t} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n \zeta^n t^n}{n!} \qquad (42)$$

Συγκρίνοντας τήν (42) μέ τό δεύτερο μέλος τῆς (41)

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n t^m}{n!\,m!}\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)\,H_m(\xi)\,e^{-\xi^2}d\xi\ , \qquad (43)$$

ἔχουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty}H_n(\xi)\,H_m(\xi)\,e^{-\xi^2}d\xi = \delta_{nm}\,2^n\,n!\,\sqrt{\pi}\ , \qquad (44)$$

πού ἐκφράζει τήν ὀρθογωνιότητα καί δίνει τήν $N_n$. Τά πολυώνυμα τοῦ Hermite εἶναι ὀρθογώνια πολυώνυμα μέ μέτρο $d\mu(\xi) = e^{-\xi^2}d\xi$. Ὁ παράγοντας $e^{-\xi^2}$ ἐξασφαλίζει τήν ὀρθογωνιότητα τῶν κυματικῶν συναρτήσεων μέ τό φυσικό μέτρο $d\xi$. Δηλαδή δείξαμε ὅτι: τό σύνολο τῶν ἰδιοκαταστάσεων τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή ἀποτελεῖ ἕνα ὀρθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}$ στόν χῶρο τῶν $L_2$ συναρτήσεων $\psi(x)$, $-\infty < x < \infty$ (βλέπε κεφ. III).

Τό σύνολο αὐτό στόν παραπάνω χῶρο τῶν συναρτήσεων εἶναι πλήρης βάση. Ἡ πληρότητα ἐκφράζεται μέ τήν ταυτότητα

$$\sum_{n=0}^{\infty} N_n^2\, H_n(\xi)\, H_n(\xi')\, e^{-\frac{\xi^2+\xi'^2}{2}} = \delta(\xi-\xi').$$

Κάθε συνάρτηση $\psi(\xi) \in L_2$ νά μπορεῖ ν' ἀναπτυχθεῖ σέ ἄθροισμα νορμαλισμένων κυματοσυναρτήσεων

$$\psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(\xi),$$

ὅπου $a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} N_n\, H_n(\xi)\, \psi(\xi)\, e^{-\xi^2/2}\, d\xi$ .

Ἡ πληρότητα καί ὀρθοκανονικότητα τῶν ἰδιοσυναρτήσεων τοῦ ἐνεργειακοῦ τελεστοῦ εἶναι ~~ὅπως θά δοῦμε στό Κεφ. III~~, βασική ἰδιότητα ὅλων τῶν τελεστῶν πού ἀντιστοιχοῦν σέ παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη, γενικότερα αὐτοσυζυγῶν



τελεστῶν.

## 2.3 Παρατηρήσεις

(α) Οἱ ἐνεργειακές στάθμες τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή στήν Παλαιά Κβαντομηχανική, ἐδίνοντο ἀπό τόν τύπο τοῦ Max-Planck (βλέπε §4.4.4)

$$E_n = n\hbar\omega\ , \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (45)$$

Ὁ τύπος (45) ἔδινε π.χ. τό ἐνεργειακό φάσμα τῶν ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν στούς ὁποίους ἀναλύεται τό ἠλεκτρομαγνητικό πεδίο.

Αὐτός διαφέρει τοῦ (34) κατά $\hbar\omega/2$.

Ἔτσι ἡ ἐνέργεια τῆς βασικῆς καταστάσεως δέν εἶναι τώρα μηδενική, ἀλλά $\hbar\omega/2$. Ἡ ἐνέργεια αὐτή τοῦ μηδενός εἶναι καθαρά κβαντομηχανικό χαρακτηριστικό, πού σχετίζεται μέ τήν κβαντομηχανική ἀπροσδιοριστία. Στήν Παληά Κβαντομηχανική ἡ ἀπροσδιοριστία θέσεως καί ὁρμῆς εἶναι μηδέν. Οἱ τροχιές τῶν σωματίων εἶναι κλασσικές καί οἱ κβαντικοί κανόνες τῶν Bohr-Sommerfeld ἁπλῶς διαλέγουν κλασσικές τροχιές. Ἔτσι κλασσικά, ἕνα σωμάτιο πού βρίσκεται στόν πυθμένα τοῦ δυναμικοῦ μπορεῖ νά ἔχει μηδενική κινητική ἐνέργεια καί συνεπῶς μηδενική ὁλική ἐνέργεια. Κβαντομηχανικά, ὡστόσο, λόγω τῆς ἀπροσδιοριστίας θά ἔχουμε:

$$\bar{E} = \bar{E}_{KIN} + \bar{E}_{\Delta YN} \geq 2\sqrt{\bar{E}_{KIN} + \bar{E}_{\Delta YN}} = \omega\sqrt{\overline{x^2}\,\overline{p^2}} =$$
$$= \omega\Delta x\Delta p \geq \hbar\omega/2 .$$

Ἄς τό δοῦμε αὐτό λεπτομερέστερα.

Κατ' ἀρχήν γιά τόν ἁρμονικό ταλαντωτή πού βρίσκεται στήν n-στή ἐνεργειακή στάθμη, οἱ μέσες τιμές τῆς θέσεως $\bar{x}$ καί τῆς ὁρμῆς $\bar{p}$ εἶναι μηδενικές: $\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx = 0$ , ὁμοίως βρίσκουμε $\bar{p} = 0$.

$p^2 = \frac{p^2}{m}$ , $k^2x^2 = X^2$



Ἐξ' ἄλλου ἡ Hamiltonian τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ εἶναι συμμετρικὴ ὡς πρὸς τὴν κινητικὴ καὶ δυναμικὴ ἐνέργεια. Πράγματι βάζοντας νέες μεταβλητές

$$X = \omega\sqrt{m}\,x \quad \text{καὶ} \quad P = \frac{\cancel{k}}{\cancel{k}\sqrt{m}}\,p$$

ἔχουμε

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{\cancel{2}m} + K^2x^2\right) = \frac{1}{2}\left(P^2 + X^2\right).$$

Ἄρα $\overline{E}_{KIN} = \overline{E}_{\Delta YN}$.

→ Αὐτὸ θὰ μπορούσαμε νὰ τὸ βγάλουμε καὶ σὰν ἕνα ἁπλὸ συμπέρασμα τοῦ κβαντομηχανικοῦ θεωρήματος Virial:

$$2\overline{E}_{KIN} = \overline{x\frac{\partial V}{\partial x}}.$$

Μὲ τὴν βοήθεια τῶν $\overline{E}_{KIN}$ καὶ $\overline{E}_{\Delta YN}$,

$\overline{x^2} = \frac{2}{K^2}E_{\Delta YN}$ , $\overline{p^2} = 2mE_{KIN}$ ,

μποροῦμε τώρα νὰ ὑπολογίσουμε τὸ γινόμενο ἀβεβαιότητας:

$$(\Delta x)^2 = \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} = \frac{2}{K^2}E_{\Delta YN}$$

$$(\Delta p)^2 = \overline{(p-\bar{p})^2} = \overline{p^2} = 2mE_{KIN}.$$

$$\text{καὶ} \quad (\Delta x)(\Delta p) = \frac{E}{\omega} \qquad (46)$$

Ἡ (46) ὅταν συνδιαστεῖ μὲ τὴν $(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}$, δίνει $E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$ ὅ.ἔ.δ.

Μὲ τὴν παραπάνω ἀπόδειξη δείξαμε συγχρόνως, ὅτι ὅταν ὁ ἁρμονικὸς ταλαντωτὴς βρίσκεται στὴν n-οστὴ ἐνεργειακὴ στάθμη, ἔχουμε

$$(\Delta x)(\Delta p) = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Ἀσφαλῶς στὶς ἴδιες τιμὲς καταλήγει κανεὶς καὶ μὲ τὸν ὑπολογισμὸ τῶν ὁλοκληρωμάτων, ποὺ μπαίνουν



στοὺς ὁρισμοὺς τῆς ἀπροσδιοριστίας.

(β) Παρὰ τὰ παραπάνω ἡ ἐνέργεια $\frac{1}{2}\hbar\omega$ τοῦ μηδενός, δὲν εἶναι παρατηρήσιμη. Ὅταν μετρᾶμε ἐνέργεια, μετρᾶμε πάντα ἐνεργειακὲς διαφορὲς καὶ τὸ $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ἀπαλοίφεται. Ἡ ἐνέργεια αὐτὴ παρουσιάζεται φυσικὰ καὶ στὴ χρονικὴ ἐξάρτηση τῶν καταστάσεων τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ. Κάθε ἐνεργειακὴ κατάσταση εἶναι χρονικὰ περιοδικὴ ἀνάλογη τοῦ $e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}$. Ἂν μάλιστα δὲν ὑπῆρχε τὸ $e^{-i\omega t/2}$ ἡ βασικὴ συχνότητα θὰ συνέπιπτε μὲ τὴν κλασσικὴ συχνότητα τοῦ ταλαντωτῆ. Ἀλλὰ πάλι, αὐτὴ ἡ πρόσθετη χρονικὰ ἐξαρτημένη φάση, ποὺ ὀφείλεται στὴν ἐνέργεια τοῦ μηδενὸς δὲν εἶναι φυσικὰ παρατηρήσιμη γιατὶ ἀπαλοίφεται ἀπὸ ὅλα τὰ πλάτη πιθανότητας καὶ τὶς μέσες τιμές,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* A\psi\,dx.$$

Τέλος ἀναφέρουμε ὅτι μποροῦμε καὶ τυπικὰ νὰ ἀπαλλαγοῦμε ἀπὸ τὸ $\frac{1}{2}\hbar\omega$, ἂν ὁρίσουμε γιὰ τὸν ἁρμονικὸ ταλαντωτὴ μιὰ νέα Hamiltonian, $H' = H - \frac{1}{2}\hbar\omega$. Αὐτὸ ἐφαρμόζεται στὴν θεωρία τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου ἂν θέλουμε τὸ κενὸ νὰ μὴν ἔχει ἄπειρη ἐνέργεια, ὅπως π.χ θὰ συνέβαινε ἐξ' αἰτίας τοῦ ἄπειρου πλήθους τῶν ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν στοὺς ὁποίους ἀναλύεται τὸ ἠλεκτρομαγνητικὸ πεδίο.

## 2.4 Ἀλγεβρικὴ μεταχείρηση τοῦ προβλήματος τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ.

Τὸ πρόβλημα τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ μπορεῖ νὰ ἀντιμετωπισθεῖ καὶ μὲ τὴν παρακάτω καθαρὰ ἀλγεβρικὴ μέθοδο, μὲ τὴν ὁποία ἀποφεύγεται ἡ χρήση διαφορικῶν ἐξισώσεων. Γιὰ ἁπλούστευση τῶν ἐκφράσεων θεωροῦμε ἕνα σύστημα μονάδων στό ὁποῖο $m = \hbar = k^2 = 1$ καί ὁρίζουμε τούς τελεστές

$$a = \frac{p - iq}{\sqrt{2}} \quad \text{καί} \quad a^+ = \frac{p + iq}{\sqrt{2}}, \qquad (47)$$

ὁπότε ἡ Hamiltonian τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή γράφεται

$$H = a^+ a \overset{\pm}{+} \frac{1}{2} \qquad (48)$$

Ἡ σχέση μεταθέσεως

$$[q, p] = i\hbar = i \quad (\hbar = 1), \qquad (49)$$

συναρτήσει τῶν $a$ καί $a^+$ παίρνει τήν μορφή

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1. \qquad (50)$$

Ἔστω τώρα $\psi_E$ μιά ἰδιοκατάσταση τῆς Hamiltonian μέ ἐνέργεια (ἰδιοτιμή) $E$, δηλαδή

$$(a^+a + \tfrac{1}{2})\psi_E = E\psi_E,$$

ἤ

$$(a^+a)\psi_E = (E - \tfrac{1}{2})\psi_E.$$

Τό διάνυσμα $a\psi_E$ εἶναι ἡ μηδενικό ἤ ἰδιοκατάσταση τῆς ἐνεργείας μέ ἐνέργεια $E-1$. Πράγματι:

$$(a^+a + \tfrac{1}{2})a\psi_E = (aa^+ - 1 + \tfrac{1}{2})a\psi_E =$$

$$= a(a^+a + \tfrac{1}{2} - 1)\psi_E = (E-1)a\psi_E,$$

ὅπου χρησιμοποιήθηκε ἡ σχέση μεταθέσεως (50).

Ὁ τελεστής $a$, πού καταστρέφει ἕνα quantum ἐνεργείας λέγεται τελεστής ἐκμηδενισμοῦ (annihilation operator).

Ὁμοίως βρίσκουμε ὅτι, γενικότερα, ἄν $\psi_E$ εἶναι ἰδιοδιάνυσμα τῆς ἐνεργείας μέ ἰδιοτιμή $E$ τότε τό $a^n\psi_E$ εἶναι ἡ μηδενικό ἤ ἰδιοδιάνυσμα τῆς ἐνεργείας μέ ἰδιοτιμή $E-n$.

Ἀλλά τό ἐνεργειακό φάσμα πρέπει νά εἶναι φραγμένο ἀπό κάτω. Πράγματι:



$$E = (\psi_E | a^+a + \tfrac{1}{2} | \psi_E) = \tfrac{1}{2}(\psi_E|\psi_E) + (\psi_E|a^+a|\psi_E) =$$

$$= \frac{1}{2} + \| a|\psi_E)\|^2 \geq \frac{1}{2}.$$

Ἄρα ὑπάρχει $\psi_0 \equiv |0)$ ὥστε $a\psi_0 = 0$. Ἡ κατάσταση αὐτή προφανῶς ἔχει τήν ἐλάχιστη ἐνέργεια $\frac{1}{2}$. Τήν λέμε βασική κατάσταση καί τήν παριστάνουμε μέ $|0)$.

Μέ τήν βοήθεια αὐτῆς καί τοῦ τελεστή δημιουργίας $a^+$ (creation operator), μποροῦμε νά οἰκοδομήσουμε ὅλες τίς καταστάσεις. Ἡ κατάσταση $a^+|0) = |1)$ εἶναι ἡ ἰδιοκατάσταση τῆς ἐνεργείας μέ ἐνέργεια $1 + 1/2$.

Πράγματι:

$$(a^+a + \tfrac{1}{2})a^+|0) = a^+(aa^+ + \tfrac{1}{2})|0)$$

$$= a^+\cancel{(a^+a + \tfrac{1}{2})}|0)$$

$$= (1 + \tfrac{1}{2})a^+|0)$$

καί $(0|aa^+|0) = (0|a^+a + 1|0) = (0|H|0) + \frac{1}{2}(0|0)$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.$$

Ὁμοίως βρίσκουμε γενικότερα ὅτι

$$(a^+)^n|0) = \sqrt{n!}\,|n),$$

ὅπου $|n)$ οἱ νορμαλισμένες ἰδιοκαταστάσεις τῆς ἐνεργείας μέ ἐνέργεια $E = n + \frac{1}{2}$. Τά $|n)$ ἀποτελοῦν μιά ὀρθοκανονική βάση στόν χῶρο τοῦ Hilbert τῶν καταστάσεων τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή. Στήν ἀναπαράσταση αὐτή τά $a$ καί $a^+$ ἔχουν τήν μορφή τῶν παρακάτω πινάκων, ἀπείρων διαστάσεων:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \sqrt{4} \;\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \qquad (51)$$

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdots & & & & \end{pmatrix} \qquad (52)$$

Οἱ πίνακες αὐτοὶ ἔχουν ὅλα τὰ στοιχεῖα μηδενικὰ ἐκτὸς ἀπὸ τὰ στοιχεῖα τῶν πρώτων παραλλήλων πρὸς τὴν διαγώνιο.

Προφανῶς στὴν ἀναπαράσταση αὐτή, οἱ τελεστὲς ὁρμῆς $p = \frac{\sqrt{2}}{2}(a + a^+)$ καὶ $q = \frac{\sqrt{2}}{2} i (a^+ - a)$ τῆς θέσεως, δὲν εἶναι διαγώνιοι, ἀλλὰ παριστάνονται μὲ ἑρμιτιανοὺς πίνακες.

Οἱ Φυσικοὶ ἀριθμοὶ $n$ ποὺ μετρᾶνε τὰ κβάντα κάθε κατάστασης λέγονται ἀριθμοὶ καταλήψεως (occupation numbers) καὶ εἶναι ἰδιοτιμὲς τοῦ ὁμώνυμου τελεστὴ $a^+a$. Ἐπειδὴ κάθε στάθμη τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτὴ μπορεῖ νὰ περιέχει περισσότερα ἀπὸ ἕνα κβάντα, τὰ ἐνεργειακὰ αὐτὰ κβάντα ἔχουν χαρακτῆρα μποζονίων (Bosons), ὅπως εἴπαμε καὶ στὴν ἀκτινοβολία τοῦ μέλανος σώματος (βλέπε Κεφ. I § 4.4.6). Στὴν ἀναπαράσταση τοῦ ἀριθμοῦ καταλήψεως οἱ ἰδιοκαταστάσεις τῆς ἐνεργείας τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτὴ παίρνουν τὴν μορφή, $\varphi_n(m) \equiv \langle m|n\rangle = \delta_{nm}$.

Ἀναπαράσταση στὸν χῶρο τῶν θέσεων.

Παραπάνω εἴδαμε ὅτι ἡ βασικὴ ἰδιοκατάσταση τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτὴ $|0)$, ἀντιστοιχεῖ στὴν μηδενικὴ ἰδιοτιμὴ τοῦ ἀριθμοῦ καταλήψεως. Ἡ ἰδιοσυνάρτηση αὐτὴ στὴν βάση τοῦ ἀριθμοῦ καταλήψεως, ἔχει τὴν ἁπλὴ μορφή $\varphi_0(n) \equiv (n|0) = \delta_{0n}$ (βλέπε Κεφ. III)



Γιὰ νὰ ἔρθουμε στὴν ἀναπαράσταση θέσεως, $\varphi_0(q) \equiv (q|0)$, χρησιμοποιοῦμε τὸν ὁρισμὸ τῆς βασικῆς καταστάσεως $a|0) = 0$, ὅπου $a$, ὁ τελεστὴς καταστροφῆς, ἔχει τώρα τὴν μορφή

$$a = \frac{p - iq}{\sqrt{2}} = \frac{-i\frac{\partial}{\partial q} - iq}{\sqrt{2}}$$

Ἄρα $\frac{\partial}{\partial q}\varphi_0(q) + q\varphi_0(q) = 0$,

ἢ $(q|0) \equiv \varphi_0(q) = \pi^{-1/4} e^{-q^2/2}$.

Ἐργαζόμενοι ὁμοίως, βρίσκουμε στὴν ἀναπαράσταση θέσεως καὶ τὶς ἄλλες ἰδιοσυναρτήσεις,

$$\varphi_n(q) \equiv (q|n) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n}\sqrt{n!}}(-i)^n\left(\frac{d}{dq} + q\right)^n e^{-q^2/2},$$

δηλαδὴ βρίσκουμε τὰ πολυώνυμα τοῦ Hermite.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ III

### ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ

### §1. Εὐκλείδειος διανυσματικός χῶρος.

Θεωροῦμε γνωστή τήν ἔννοια τοῦ διανυσματικοῦ χώρου, πού ἔχει ὁριστεῖ ὡς πρός ἕνα σῶμα. Ἔστω ἕνας διανυσματικός χῶρος $E$, πού ὁρίζεται στό σῶμα τῶν μιγαδικῶν ἀριθμῶν $C$. Τά στοιχεῖα (διανύσματα) τοῦ χώρου $E$ θά τά συμβολίζουμε μέ $|\psi)$, δηλαδή $|\psi)\in E$.

Ἔστω μιά συνάρτηση $f$ ὁρισμένη στό $E\times E$ καί μέ τιμές ἀπό τό $C$ δηλαδή:

$$E\times E \ (|\psi_1),|\psi_2)) \xrightarrow{f} z\in \mathbb{C}, \quad z = f(|\psi_1),|\psi_2))$$

Συμβολίζουμε: $(\psi_1|\psi_2) \overset{\text{συμ.}}{=\!=} f(|\psi_1),|\psi_2))$ (1)

Θά λέμε ὅτι ἡ συνάρτηση αὐτή ὁρίζει ἕνα ἐσωτερικό γινόμενο στό χῶρο $E$ τότε καί μόνο τότε, ὅταν ἰσχύουν τά παρακάτω:

(i) $(\psi,\psi) \geq 0$, $\forall |\psi)\in E$ καί $(\psi,\psi)=0$, τότε καί μόνο τότε, ἄν $|\psi)=0$.

(ii) $(\psi_1,\psi_2) = (\psi_2,\psi_1)^* \ \forall |\psi_1), |\psi_2)\in E$.
(Ἑρμιτιανή ἰδιότητα τοῦ ἐσωτερικοῦ γινομένου), ὅπου μέ $*$ θά συμβολίζουμε τόν συζυγή μιγαδικό ἑνός ἀριθμοῦ.

(iii) $(\psi_1, \lambda\psi_2) = \lambda(\psi_1,\psi_2)$, ὅπου $\lambda\in C$ καί $|\psi_1),|\psi_2)\in E$.

(iv) $(\psi_1, \psi_2'+\psi_2'') = (\psi_1,\psi_2') + (\psi_1,\psi_2'')$ (Γραμμικότητα).

ΟΡΙΣΜΟΣ

«Ὁ διανυσματικός χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ ἕνα ἐσωτερικό γινόμενο, λέγεται Εὐκλείδειος διανυσματικός χῶρος».

Μέ τήν βοήθεια τοῦ ἐσωτερικοῦ γινομένου πού ὁρίσαμε παραπάνω, μποροῦμε νά ὁρίσουμε μιά norm στόν χῶρο $E$.



$$\| |\psi) \| \equiv (\psi,\psi)^{1/2} \qquad (2)$$

Προφανῶς ἰσχύουν τά παρακάτω:

(i)' $\| |\psi) \| \geq 0$ καί $\| |\psi) \| = 0 \leftrightarrow |\psi) = 0$.

(ii)' $\| \lambda |\psi) \| = |\lambda| \, \| |\psi) \|$, ὅπου $\lambda \in C$.

(iii)' $\| |\psi) + |\omega) \| \leq \| |\psi) \| + \| |\omega) \|$ (Τριγωνική ἰδιότητα).

Δηλαδή ἡ συνάρτηση $\| \ \|$ πού ὁρίσαμε στό χῶρο $E$ εἶναι πραγματικά μιά norm.

Ὁ χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ αὐτή τήν norm $\| \ \|$, γίνεται ἕνας χῶρος μέ norm καί μπορεῖ νά γίνει ἕνας μετρικός χῶρος, ἄν ἐφοδιαστεῖ μέ μιά κατάλληλη μετρική.

Ἔστω ἡ παρακάτω συνάρτηση:

$\rho(|\psi_1),|\psi_2)) \equiv \| |\psi_1) - |\psi_2) \|$ ὁρισμένη στό $E\times E$ καί νά παίρνει πραγματικές τιμές.

Αὐτή ἱκανοποιεῖ τίς παρακάτω ἰδιότητες:

(i) $\rho(|\psi_1),|\psi_2)) \geq 0$ καί $=0 \leftrightarrow |\psi_1)=|\psi_2)$. (Αὐστηρά θετική).

(ii) $\rho(|\psi_1),|\psi_2)) = \rho(|\psi_2),|\psi_1))$ (συμμετρική).

(iii) $\rho(|\psi_1),|\psi_2)) \leq \rho(|\psi_1),|z)) + \rho(|\psi_2),|z))$
(Τριγωνική ἀνισότητα).

Δηλαδή ἡ $\rho$ ἱκανοποιεῖ ὅλες τίς ἰδιότητες τῆς ἀποστάσεως. Ὁρίζει ἔτσι μιά ἀπόσταση στό χῶρο $E$ καί ὁ χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ αὐτή τήν ἀπόσταση, γίνεται ἕνας μετρικός χῶρος. Μέ τήν ἀπόσταση αὐτή ὁ χῶρος $E$ μπορεῖ νά γίνει καί τοπολογικός χῶρος. Ἐδῶ θά θυμίσουμε μερικά στοιχεῖα ἀπό τήν τοπολογία.

Ἔστω ἕνα μή κενό σύνολο $H \neq \emptyset$. Ἔστω καί ἕνα σύνολο $T$, πού τά στοιχεῖα του $\tau_i$ εἶναι ὑποσύνολα

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ III

### ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ

§1. Εὐκλείδειος διανυσματικός χῶρος.

Θεωροῦμε γνωστή τήν ἔννοια τοῦ διανυσματικοῦ χώρου, πού ἔχει ὁριστεῖ ὡς πρός ἕνα σῶμα. Ἔστω ἕνας διανυσματικός χῶρος $E$, πού ὁρίζεται στό σῶμα τῶν μιγαδικῶν ἀριθμῶν $C$. Τά στοιχεῖα (διανύσματα) τοῦ χώρου $E$ θά τά συμβολίζουμε μέ $|\psi)$, δηλαδή $|\psi) \in E$.

Ἔστω μιά συνάρτηση $f$ ὁρισμένη στό $E \times E$ καί μέ τιμές ἀπό τό $C$ δηλαδή:

$$E \times E \ (|\psi_1), |\psi_2)) \xrightarrow{f} z \in C, \ z = f(|\psi_1), |\psi_2))$$

Συμβολίζουμε: $(\psi_1|\psi_2) \overset{\text{συμ.}}{=} f(|\psi_1), |\psi_2))$ (1)

Θά λέμε ὅτι ἡ συνάρτηση αὐτή ὁρίζει ἕνα ἐσωτερικό γινόμενο στό χῶρο $E$ τότε καί μόνο τότε, ὅταν ἰσχύουν τά παρακάτω:

(i) $(\psi, \psi) \geq 0, \ \forall |\psi) \in E$ καί $(\psi,\psi) = 0$, τότε καί μόνο τότε, ἄν $|\psi) = 0$.

(ii) $(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^* \ \forall |\psi_1), |\psi_2) \in E$.
(Ἑρμιτιανή ἰδιότητα τοῦ ἐσωτερικοῦ γινομένου), ὅπου μέ $*$ θά συμβολίζουμε τόν συζυγή μιγαδικό ἑνός ἀριθμοῦ.

(iii) $(\psi_1, \lambda\psi_2) = \lambda(\psi_1, \psi_2)$, ὅπου $\lambda \in C$ καί $|\psi_1), |\psi_2) \in E$.

(iv) $(\psi_1, \psi_2' + \psi_2'') = (\psi_1, \psi_2') + (\psi_1, \psi_2'')$ (Γραμμικότητα).

ΟΡΙΣΜΟΣ

«Ὁ διανυσματικός χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ ἕνα ἐσωτερικό γινόμενο, λέγεται Εὐκλείδειος διανυσματικός χῶρος».

Μέ τήν βοήθεια τοῦ ἐσωτερικοῦ γινομένου πού ὁρίσαμε παραπάνω, μποροῦμε νά ὁρίσουμε μιά norm στόν χῶρο $E$.



$$\| |\psi) \| \equiv (\psi, \psi)^{1/2} \qquad (2)$$

Προφανῶς ἰσχύουν τά παρακάτω:

(i)' $\| |\psi) \| \geq 0$ καί $\| |\psi) \| = 0 \leftrightarrow |\psi) = 0$.

(ii)' $\| \lambda |\psi) \| = |\lambda| \, \| |\psi) \|$, ὅπου $\lambda \in C$.

(iii)' $\| |\psi) + |\omega) \| \leq \| |\psi) \| + \| |\omega) \|$ (Τριγωνική ἰδιότητα).

Δηλαδή ἡ συνάρτηση $\| \ \|$ πού ὁρίσαμε στό χῶρο $E$ εἶναι πραγματικά μιά norm.

Ὁ χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ αὐτή τήν norm $\| \ \|$, γίνεται ἕνας χῶρος μέ norm καί μπορεῖ νά γίνει ἕνας μετρικός χῶρος, ἄν ἐφοδιαστεῖ μέ μιά κατάλληλη μετρική.

Ἔστω ἡ παρακάτω συνάρτηση:

$\rho(|\psi_1), |\psi_2)) \equiv \| |\psi_1) - |\psi_2) \|$ ὁρισμένη στό $E \times E$ καί νά παίρνει πραγματικές τιμές.

Αὐτή ἱκανοποιεῖ τίς παρακάτω ἰδιότητες:

(i) $\rho(|\psi_1), |\psi_2)) \geq 0$ καί $= 0 \leftrightarrow |\psi_1) = |\psi_2)$. (Αὐστηρά θετική).

(ii) $\rho(|\psi_1), |\psi_2)) = \rho(|\psi_2), |\psi_1))$ (συμμετρική).

(iii) $\rho(|\psi_1), |\psi_2)) \leq \rho(|\psi_1), |z)) + \rho(|\psi_2), |z))$
(Τριγωνική ἀνισότητα).

Δηλαδή ἡ $\rho$ ἱκανοποιεῖ ὅλες τίς ἰδιότητες τῆς ἀποστάσεως. Ὁρίζει ἔτσι μιά ἀπόσταση στό χῶρο $E$ καί ὁ χῶρος $E$ ἐφοδιασμένος μέ αὐτή τήν ἀπόσταση, γίνεται ἕνας μετρικός χῶρος. Μέ τήν ἀπόσταση αὐτή ὁ χῶρος $E$ μπορεῖ νά γίνει καί τοπολογικός χῶρος. Ἐδῶ θά θυμίσουμε μερικά στοιχεῖα ἀπό τήν τοπολογία.

Ἔστω ἕνα μή κενό σύνολο $H \neq \emptyset$. Ἔστω καί ἕνα σύνολο $T$, πού τά στοιχεῖα του $\tau_i$ εἶναι ὑποσύνολα τού Η. Τό σύνολο Τ θά λέμε ότι αποτελεί μιά τοπολογία, άν καί μόνο άν ικανοποιεί τίς παρακάτω ιδιότητες:

α') Τό κενό υποσύνολο $\emptyset \in T$ καί $T \in H$.

β') $\bigcup_{i\in I} A_i \in T$ άν $A_i \in T \ \forall i \in I$ δηλαδή ή οποιαδήποτε ένωση συνόλων από τό Τ είναι ένα σύνολο από τό Τ.

γ') $\bigcap_{j\in J} A_j \in T$ άν $A_j \in T \ \forall j \in J$, όπου J είναι πεπερασμένο. Δηλαδή ή τομή πεπερασμένου αριθμού συνόλων πού ανήκουν στό Τ είναι σύνολο πού ανήκει στό Τ.

<u>ΟΡΙΣΜΟΣ</u>: Τό σύνολο Η εφοδιασμένο μέ τήν τοπολογία Τ λέγεται τοπολογικός χώρος.

<u>Έννοια ανοιχτού καί κλειστού συνόλου</u>:

Έστω (Η,Τ) ένας τοπολογικός χώρος. Δίνουμε τούς παρακάτω ορισμούς:

<u>ΟΡΙΣΜΟΣ Ι</u>: Ένα σύνολο $N \subseteq H$ λέγεται ανοιχτό $\overset{ορσ}{\iff} N \in T$

<u>ΟΡΙΣΜΟΣ ΙΙ</u>: Ένα σύνολο $Q \subseteq H$ λέγεται κλειστό $\overset{ορσ}{\iff}$ τό συμπλήρωμα τού Q δηλαδή τό $Q^c$ είναι ανοιχτό.

Παρατηρούμε ότι τά σύνολα $\emptyset$ καί Η είναι συνχρόνως ανοιχτά καί κλειστά.

<u>Έννοια ανοιχτής περιοχής.</u>

Ανοιχτή περιοχή ενός σημείου x λέγεται κάθε ανοιχτό υποσύνολο τού Α πού περιέχει τό x.

<u>Έννοια τής συγκλίσεως.</u>

Έστω (Η,Τ) ένας τοπολογικός χώρος, καί μιά ακολουθία $x_n$, $n=1,2,\dots$ στό Η.

Δίνουμε τόν παρακάτω ορισμό:

<u>ΟΡΙΣΜΟΣ ΙΙΙ</u>: Ή ακολουθία $x_n$ συγκλίνει στό $x \in A$ δηλ. $x_n \to x \overset{ορσ}{\iff}$ γιά κάθε περιοχή $V(x)$ τού x υπάρχει



$N(V(x))$ τέτοιο ώστε $x_n \in V(x)$ γιά όλα τά $n \geq N(V(x))$.

<u>Έννοια συνεχείας συναρτήσεως.</u>

Έστω δύο τοπολογικοί χώροι (Α,Τ) καί (Β,Τ') καί μιά συνάρτηση $f: A \to B$, έστω δέ καί σημείο $x_0 \in A$. Δίνουμε τόν παρακάτω ορισμό:

<u>ΟΡΙΣΜΟΣ</u>: Ή f είναι συνεχής στό $x_0 \in A \overset{ορσ}{\iff}$ γιά κάθε περιοχή V' τού $f(x_0)$ τό $f^{-1}(V')$ είναι μιά περιοχή τού $x_0$.

<u>Ανοιχτές σφαίρες σέ μετρικό χώρο.</u>

Έστω (Y,d) ένας μετρικός χώρος, έστω δέ $r \in \mathbb{R}$ (πραγματικός). Τότε τό παρακάτω σύνολο, όπου $y_0 \in Y$

$$S_r(y_0) = \{ y \in Y : d(y, y_0) < r \}$$

λέγεται ανοιχτή σφαίρα κέντρου $y_0$ καί ακτίνας r.

Αποδεικνύεται ότι, άν έχω τό σύνολο όλων τών ανοιχτών σφαιρών ενός μετρικού χώρου, τότε τό σύνολο αυτό είναι μιά βάση γιά κάποια τοπολογία τού μετρικού αυτού χώρου. Δηλαδή ή τοπολογία αυτή αποτελείται από στοιχεία, πού είναι ενώσεις καί πεπερασμένες τομές ανοιχτών σφαιρών.

Μέ όσα είπαμε παραπάνω καταλαβαίνουμε ότι ένας μετρικός χώρος (Y,d) μπορεί νά γίνει ένας τοπολογικός χώρος $(Y, T_d)$.

Έστω ένας διανυσματικός χώρος Ε (Ευκλείδειος διανυσματικός χώρος), καί δύο διανύσματά του $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in E$, θά λέμε ότι τά $|\psi_1\rangle$ καί $|\psi_2\rangle$ είναι κάθετα μεταξύ τους $|\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle$ τότε καί μόνο τότε, όταν $(\psi_1, \psi_2) = 0$.

Αποδεικνύεται τό παρακάτω:

«Ορθογώνια διανύσματα είναι γραμμικά ανεξάρτητα».

(Τά υποθέτουμε $\neq 0$). Πραγματικά: Έστω ένα σύνολο ορθογωνίων διανυσμάτων $|\varphi_i)$, $i=1,2,\dots m$.
Τότε από τις σχέσεις:
$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i |\varphi_i) = 0$ έχουμε $(\varphi_k, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i |\varphi_i)) = 0$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{m} (\varphi_k, \lambda_i |\varphi_i)) = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (\varphi_k, \varphi_i) = 0 \rightarrow \lambda_k = 0$$

και αυτό θά ισχύει, γιά κάθε $k=1,2,\dots$, άρα $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_m = 0$, δηλαδή τά $|\varphi_i)$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

ΟΡΙΣΜΟΣ: « Ένα διάνυσμα $|\omega) \in E$ λέγεται μοναδιαίο, όταν έχει νόρμη ίση πρός τήν μονάδα.»

Έστω ένα διάνυσμα $|\psi)$ μέ $\| |\psi) \| \neq 0$ τότε τό διάνυσμα $\dfrac{|\psi)}{\| |\psi)\|}$ είναι μοναδιαίο γιατί

$$\left\| \frac{|\psi)}{\| |\psi)\|} \right\| = \frac{\| |\psi)\|}{\| |\psi)\|} = 1 .$$

Προβολή διανύσματος ώς πρός διεύθυνση. Ανισότητα του Schwartz.

Έστω $|z) \in E$ ένα τυχαίο διάνυσμα και $\dfrac{|\psi)}{\| |\psi)\|}$ μιά τυχαία διεύθυνση (μοναδιαίο διάνυσμα). Μπορούμε νά αναλύσουμε τό $|z)$ σέ δύο συνιστώσες:

$$|z) = \left\{ |z) - \frac{|\psi)(\psi,z)}{(\psi,\psi)} \right\} + \frac{(\psi,z)|\psi)}{(\psi,\psi)} = |a) + |b)$$

όπου $|a) = |z) - \dfrac{|\psi)(\psi,z)}{(\psi,\psi)}$ και $|b) = \dfrac{|\psi)(\psi,z)}{(\psi,\psi)}$.

(και λόγω και από αξίωμα)

Προφανώς τό $|a) \perp |\psi)$ και τό $|b)$ είναι παράλληλο (πολλαπλάσιο του $|\psi)$) πρός τό διάνυσμα $|\psi)$.
Παίρνοντας τό τετράγωνο της νόρμη του $|a)$ έχουμε:



$$0 \leq \| |a)\|^2 = \| |z)\|^2 - \frac{|(\psi,z)|^2}{(\psi,\psi)}$$

$$\rightarrow \| |z)\| \, \| |\psi)\| \geq |(\psi,z)| , \qquad (3).$$

δηλαδή προκύπτει ή ανισότητα του Schwartz.
(Γιά $\| |\psi)\| = 0$ ή ανισότητα είναι συνηθισμένη).
Μέ τήν βοήθεια της ανισότητας του Schwartz αποδεικνύεται εύκολα ότι τό εσωτερικό γινόμενο $(z,\psi)$ είναι συνεχής συνάρτηση κάθε μιας από τις μεταβλητές $|z)$ και $|\psi)$. Έτσι, π.χ ή συνέχεια ώς πρός $|z)$ στό $|z_0)$ αποδεικνύεται ώς εξής:

$$|(z,\psi_0) - (z_0,\psi_0)| = |(z-z_0,\psi_0)| \leq \| |z) - |z_0) \| \, \| |\psi_0)\| .$$

Άν πάρουμε ένα τυχαίο $\varepsilon$ και γιά $\| |\psi_0)\| \neq 0$ διαλέγω $\delta(\varepsilon) = \dfrac{\varepsilon}{\| |\psi_0)\|}$ όπότε γιά $\| |z) - |z_0)\| < \delta(\varepsilon)$

$$\rightarrow \| |z) - |z_0)\| \, \| |\psi_0)\| < \varepsilon \rightarrow |(z-z_0, \psi_0)| < \varepsilon ,$$

Γιά $\| |\psi)\| = 0$ ή συνέχεια είναι προφανής ο.έ.δ.

## §2. Χώρος Hilbert.

### 1. Γενικά γιά τόν χώρο Hilbert

Ένας πλήρης Ευκλείδειος διανυσματικός χώρος E λέγεται χώρος του Hilbert και συμβολίζεται μέ τό H.
Θυμίζουμε ότι ένας χώρος λέγεται πλήρης όταν κάθε βασική ακολουθία στοιχείων του χώρου, έχει όριο στοιχείο του χώρου. Στήν περίπτωσή μας άν $\| |x_n) - |x_m)\| \xrightarrow[n,m \to +\infty]{} 0$ τότε $|x) \in H$ ώστε $\| |x) - |x_n)\| \xrightarrow[n \to +\infty]{} 0$.

Προφανώς τό όριο όταν υπάρχει, είναι μοναδικό.
Διακρίνουμε δύο είδη χώρων του Hilbert:

α. Διαχωριστοί (separable) χώροι του Hilbert.
Ένας χώρος H λέγεται διαχωριστός $\overset{\text{ορσ.}}{\Longleftrightarrow}$ $\exists$ αριθμήσιμο υποσύνολό του $m$ πυκνό στό H δηλαδή $\overline{m} = H$ (τό $\overline{m}$

λέγεται θήκη τοῦ m).

β. <u>Μή διαχωριστοί (nonseparable) χῶροι τοῦ Hilbert.</u>

Ἕνας χῶρος H λέγεται μή διαχωριστός $\overset{ορσ}{\Longleftrightarrow}$ δέν εἶναι διαχωριστός.

Στήν Κβαντομηχανική συναντᾶμε κυρίως διαχωρίσιμους ~~πτους~~ χώρους Hilbert. Διάσταση ἑνός χώρου H εἶναι τό π λ ῆ θ ο ς τῶν γραμμικά ἀνεξαρτήτων διανυσμάτων στό H. Στούς χώρους τῶν μή πεπερασμένων διαστάσεων, μέ τό π λ ῆ θ ο ς ἐννοοῦμε τόν πληθικό ἀριθμό (cardinal number) τοῦ συνόλου τῶν γραμμικά ἀνεξάρτητων διανυσμάτων.

2. <u>Ἔννοια τῆς βάσεως.</u>

Λέμε βάση ἑνός χώρου H ἕνα σύνολο γραμμικά ἀνεξάρτητων διανυσμάτων $\{|b_i)\}$ πού οἱ γραμμικοί τους συνδιασμοί γεμίζουν ὅλο τό χῶρο H, δηλαδή $\forall\, |\psi) \in H$ εἶναι $|\psi) = \sum_i c_i |b_i)$. Γιά τήν περίπτωση χώρων ἀπείρων διαστάσεων, τό ἄθροισμα εἶναι γενικά σειρά, πού τό ὅριο συγκλίσεως της ὁρίζεται κατά norm.

Δηλαδή $\lim_{N\to\infty} \left\| |x) - \sum_{i=1}^{N} c_i |b_i) \right\| = 0$.

Ἀκόμα καί γιά τούς μή διαχωριστούς χώρους Hilbert τό πλῆθος τῶν μή μηδενικῶν συνιστωσῶν $(c_i \neq 0)$ εἶναι πάντα ἀριθμήσιμο, ἄρα τό παραπάνω ἄθροισμα εἶναι πάντα ἄθροισμα σειρᾶς.

Ἀποδεικνύεται εὔκολα τό παρακάτω:

<u>ΘΕΩΡΗΜΑ</u>: «Ὅλες οἱ βάσεις ἑνός χώρου H ἔχουν τόν ἴδιο πληθικό ἀριθμό».

3. <u>Ὀρθοκανονικές βάσεις.</u>



Μιά βάση στόν χῶρο H λέγεται ὀρθοκανονική $\longleftrightarrow$ ὅταν $(b_k, b_i) = \delta_{ki}$ ὅπου $\delta_{ki}$ τό σύμβολο τοῦ Kronecker. Δηλαδή:

$$\delta_{ki} = \begin{cases} 0, & k \neq i \\ 1, & k = i \end{cases}$$

4. <u>Κατασκευή ὀρθοκανονικῶν βάσεων:</u>

Σέ διαχωριστούς χώρους Hilbert μποροῦμε νά κατασκευάσουμε ὀρθοκανονική βάση, μέ τήν μέθοδο τῶν GRAM-SCMIDT. Ἔστω ἡ ἀκολουθία $|x_n)$ διανυσμάτων, πυκνή στό H. Ἀπό αὐτήν σχηματίζουμε ἀκολουθία ἀπό γραμμικά ἀνεξάρτητα καί μή μηδενικά διανύσματα $|x_m)$.

Ξεκινᾶμε ἀπό ἕνα τυχαῖο διάνυσμα $|x_1)$ καί κατασκευάζουμε τό μοναδιαῖο

$$|\varepsilon_1) = \frac{|x_1)}{\| |x_1) \|}$$

Θεωροῦμε τώρα τό διάνυσμα $|x_2) - (\varepsilon_1, x_2)|\varepsilon_1) = |y_2)$. Αὐτό εἶναι ὀρθογώνιο ὡς πρός τό $|x_1)$ ὅπως εἴδαμε προηγούμενα. Τό $|y_2)$ εἶναι ἐπίσης διάφορο τοῦ μηδενός (λόγω τῆς γραμμικῆς ἀνεξαρτησίας πού ὑποθέσαμε), ἐπομένως μπορεῖ νά νορμαλιστεῖ. Ἔτσι προκύπτει τό $|\varepsilon_2) = \dfrac{|y_2)}{\| |y_2) \|}$ μοναδιαῖο διάνυσμα κάθετο στό $|\varepsilon_1)$.

Τώρα θεωροῦμε τό διάνυσμα $|y_3) = |x_3) - (\varepsilon_1, x_3)|\varepsilon_1) - (\varepsilon_2, x_3)|\varepsilon_2)$.

Παρατηροῦμε ὅτι $|y_3) \perp |\varepsilon_1)$ καί $|\varepsilon_2)$, μετά τόν νορμαλισμό τοῦ $|x_3)$ παίρνουμε τό διάνυσμα:

$|\varepsilon_3) = \dfrac{|x_3)}{\| |x_3) \|}$, εἶναι $|\varepsilon_3) \perp |\varepsilon_1), |\varepsilon_2)$ καί $(\varepsilon_3, \varepsilon_3) = 1$.

Συνεχίζοντας μ' αὐτόν τόν τρόπο κατασκευάζουμε ὅλους τούς ὅρους τῆς ὀρθοκανονικῆς ἀκολουθίας $|\varepsilon_n)$ πού εἶναι βάση τοῦ H, ἀφοῦ ἡ ἀκολουθία $|x'_n)$ ὑποτέθηκε πυκνή στό H.

Στήν περίπτωση μή διαχωριστοῦ χώρου Hilbert ἡ δυνατότητα κατασκευῆς βάσεως ἐξασφαλίζεται μέ τήν βοήθεια τοῦ λήμματος τοῦ Zorn.

(Λῆμμα τοῦ Zorn): Ἄν σ' ἕνα μερικά διατεταγμένο σύνολο X, κάθε γραμμικά διατεταγμένο ὑποσύνολο ἔχει ἕνα ἐλάχιστο ἄνω φράγμα στό X, τότε τό X περιέχει ἕνα μέγιστο στοιχεῖο.–

Θεωροῦμε τό μερικά διατεταγμένο σύνολο τῶν ὀρθοκανονικῶν ὑποσυνόλων. Κάθε γραμμικά διατεταγμένο (μέ τήν διάταξη ~~καί~~ τοῦ "περιέχεται" ⊆) καί ἄρα σύμφωνα μέ τό λῆμμα τοῦ Zorn, ὑπάρχει ἕνα μέγιστο σύνολο ὀρθοκανονικῶν διανυσμάτων, πού εἶναι καί βάση.

## 5. Παράσταση διανύσματος μέ τις συνιστῶσες.

Ὅπως στόν Εὐκλείδειο χῶρο τῶν τριῶν διαστάσεων ἔχουμε ἀμφιμονοσήμαντη ἀντιστοιχία μεταξύ τοῦ διανύσματος $\vec{\psi}$ καί τῶν τριῶν συνιστωσῶν του $\psi_i = \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{\psi}$, $i = 1, 2, 3$, ὡς πρός μιά ὀρθοκανονική βάση $\{\vec{\varepsilon}_1, \vec{\varepsilon}_2, \vec{\varepsilon}_3\}$, $\vec{\psi} = \sum_{i=1}^{3} \psi_i \vec{\varepsilon}_i$

ἔτσι καί στούς χώρους Hilbert ἔχουμε τήν ἀμφιμονοσήμαντη ἀντιστοιχία μεταξύ τῶν διανυσμάτων
με norm ($\| |\psi> \|$) μικρότερα από άπειρο $<\psi|\psi> < \infty$.
$|\psi)$ καί τῶν ἀκολουθιῶν $\psi_i \equiv \psi(i)$,

$$|\psi) = \sum_{i \neq 0} \psi_i |\varepsilon_i) = \sum_{i \neq 0} \psi(i) |\varepsilon_i) \longleftrightarrow \psi_i = (\varepsilon_i, \psi),$$

$$\sum_{i \neq 0} |\psi(i)|^2 < \infty.$$



Τό διάνυσμα $|\psi)$ παριστάνεται ἐπίσης σάν μονόστηλος πίνακας, δηλαδή:

$$|\psi) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \qquad (4)$$

καί τό ἐσωτερικό γινόμενο, σάν ἀλγεβρικό γινόμενο πινάκων.

$$(\psi, z) = (\bar{\varphi}(1), \bar{\varphi}(2), \ldots) \cdot \begin{bmatrix} z(1) \\ z(2) \\ z(3) \\ \vdots \end{bmatrix} = \sum_i \bar{\varphi}(i) z(i), \quad (5)$$

ὅπου $\bar{\varphi}(i)$ ὁ συζυγής μιγαδικός τοῦ $\psi(i)$.

Μέ τήν βοήθεια τῶν συνιστωσῶν, τό ἐσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων δίνεται ἀπό τόν τύπο:

$$(z, \psi) = \sum_i \bar{z}_i \psi_i \quad , \quad z_i, \psi_i \neq 0 \qquad (6)$$

Πραγματικά:

$$(z, \psi) = \Big(\sum_i z_i |\varepsilon_i), \sum_k \psi_k |\varepsilon_k)\Big) = \sum_i \sum_k \bar{z}_i \psi_k (\varepsilon_i, \varepsilon_k) = \sum_i \bar{z}_i \psi_i$$

Τό norm:

$$\| |z) \| = (z, z)^{1/2} = \sqrt{\sum_i |z_i|^2} \quad , \quad z_i \neq 0. \qquad (7)$$

Οἱ τύποι αὐτοί ἀποτελοῦν γενίκευση τῶν γνωστῶν, ἀπό τούς Εὐκλείδειους χώρους πεπερασμένων διαστάσεων, ἐκφράσεων.

## §3. Γραμμικά συναρτησοειδῆ (Linear functionals).

Ἔστω ἕνας διανυσματικός χῶρος V ὡς πρός τό σῶμα τῶν μιγαδικῶν ἀριθμῶν $\mathbb{C}$. Ἔστω καί μιά συνάρτηση f:

$$V \ni x \xrightarrow{f} f(x) \equiv y \in \mathbb{C}$$

Μιά τέτοια ἀπεικόνιση πού ἀπεικονίζει τόν διανυσματικό χῶρο V στό σῶμα τῶν μιγαδικῶν ἀριθμῶν

$\mathbb{C}$ λέγεται συναρτησοειδές. Ἂν ἐπὶ πλέον ἡ $f$ ἱκανοποιεῖ τὴν σχέση

$$f(\alpha x_1 + \beta x_2) = \alpha f(x_1) + \beta f(x_2) \qquad (8)$$

τὸ συναρτησοειδὲς λέγεται γραμμικό.

Ἔστω γραμμικό συναρτησοειδές, ποὺ ἀπεικονίζει ἕνα χῶρο $H$ (Hilbert) σ' ἕνα ὑποσύνολο τοῦ σώματος τῶν μιγαδικῶν $\mathbb{C}$.

Τὸ συναρτησοειδὲς αὐτὸ θὰ λέγεται φραγμένο, ἂν ὑπάρχει μιὰ σταθερὰ $N$ τέτοια ὥστε

$$|f(x)| \leq N \, \| |x)\| \quad \text{γιὰ κάθε } |x) \in H .$$

Σὰν norm $\|f\|$ τοῦ συναρτησοειδοῦς $f$ ὁρίζεται ὁ ἀριθμός

$$\|f\| = \sup\{|f(x)| : \||x)\| \leq 1\} =$$
$$= \inf\{N : N \geq 0 \text{ καί } |f(x)| \leq N \||x)\|, \text{ γιὰ ὅλα τὰ } |x)\}. \qquad (9)$$

Ἔστω $m$ ἕνας κλειστὸς γραμμικὸς ὑπόχωρος τοῦ $H$. Ὁρίζουμε $m^{\perp}$ τὸ ὀρθογώνιο συμπλήρωμα τοῦ $m$:

$$m^{\perp} = \{|\psi) \in H : |\psi) \perp |z), \quad \forall\, |z) \in m\}.$$

Τὸ $m^{\perp}$ εἶναι κι' αὐτὸς κλειστὸς γραμμικὸς ὑπόχωρος τοῦ $H$.

Ἔστω τὸ σύνολο

$$m \oplus m^{\perp} = \{|z) + |\psi) : |z) \in m, |\psi) \in m^{\perp}\}$$

ἀποδεικνύεται ὅτι:

$$\boxed{m \oplus m^{\perp} = H} \qquad (10)$$

ΘΕΩΡΗΜΑ RIESZ

"Κάθε φραγμένο γραμμικὸ συναρτησοειδὲς $y(|x))$ στὸ $H$ μπορεῖ νὰ παρασταθεῖ σὰν ἐσωτερικὸ γινόμενο, δηλαδὴ $y(|x)) = (y|x)$, ὅπου $y \in H$.

Ἀπόδειξη.

Ἔστω τὸ σύνολο $m = \{|x) \in H : y(|x)) = 0\}$.



Ἀποδεικνύεται εὔκολα ὅτι τὸ $m$ εἶναι ἕνας γραμμικὸς ὑπόχωρος τοῦ $H$, γιατὶ ἂν $|x_1)$, $|x_2) \in m$, τότε

$$y(c_1|x_1) + c_2|x_2)) = c_1 y(|x_1)) + c_2 y(|x_2)) =$$
$$= c_1 \cdot 0 + c_2 \cdot 0 = 0.$$

Ἄρα $c_1|x_1) + c_2|x_2) \in m$.

Ἀκόμα ἐπειδὴ τὸ συναρτησοειδὲς εἶναι φραγμένο ὁ $m$ εἶναι κλειστός. Ἂν $m = H$ τότε $y(|x)) = 0 \ \forall |x) \in H$ καὶ $y(|x)) = (0|x)$, δηλαδὴ ἡ πρόταση ἀποδεικνύεται γιὰ $|y) = |0)$.

Ἔστω λοιπὸν $m \neq H$, τότε ὑπάρχει $|x_0) \in m^{\perp}$ μὲ $|x_0) \neq |0)$, θεωροῦμε τότε τὸ διάνυσμα:

$$|z) = |x) - \frac{y(|x))}{y(|x_0))} |x_0) .$$

Σίγουρα $y(|x_0)) \neq 0$ γιατὶ ἀλλιῶς $|x_0) \in m$.

Ἔχουμε ὅτι $y(|z)) = y(|x)) - \dfrac{y(|x))}{y(|x_0))} y(|x_0)) = 0$

ἄρα $|z) \in m$ καὶ ἐπομένως $(x_0|z) = 0$.

δηλαδὴ $(x_0|x) = \dfrac{y(|x))}{y(|x_0))} (x_0|x_0) \longrightarrow$

$$\frac{y(|x_0))}{(x_0|x_0)} (x_0|x) = y(|x)) \rightarrow y(|x)) = (y|x), \text{ ὅπου}$$

$|y) = \dfrac{\overline{y(|x_0))}}{(x_0|x_0)} |x_0)$, $\overline{y(|x))}$ ὁ συζυγὴς τοῦ $y(|x))$, γιατὶ $\dfrac{y(|x_0))}{(x_0|x_0)} (x_0|x) = \left[\dfrac{\overline{y(|x_0))}}{(x_0|x_0)} x_0, x\right]$.

Τὸ $|y)$ εἶναι μοναδικό, γιατὶ ἂν $|y')$ μὲ $y(|x)) = (y'|x)$ τότε: $(y|x) = (y'|x) \longrightarrow (y - y'|x) = 0 \ \forall |x) \in H$, ἄρα $|y) = |y')$.

Τὰ φραγμένα γραμμικὰ συναρτησοειδῆ τοῦ $V$ ἀποτελοῦν γραμμικὸ χῶρο $V'$. Στὸ χῶρο $V'$ μποροῦμε νὰ ὁρίσουμε ἕνα norm:

$$\| f \|' = \sup \{ |f(x)| : \| |x) \| \le 1 ,\ |x) \in V \} . \qquad (11)$$

Ὁ χῶρος $V'$ λέγεται συζυγής τοῦ $V$.

Ἄν ὁ διανυσματικός χῶρος $V$ ἔχει πεπερασμένες διαστάσεις, τότε ὁ $V'$ ἔχει τίς ἴδιες διαστάσεις. (Τά διανύσματα τοῦ $V$ λέγονται ἀνταλλοίωτα (contravariamt) καί τά διανύσματα τοῦ $V'$ συναλλοίωτα (covariamt)).

Ἄν $V'' = (V')' = V$, τότε ὁ χῶρος $V$ λέγεται ἀντανακλαστικός. Σύμφωνα μέ τό Θεώρημα τοῦ Riesz οἱ χῶροι Hilbert εἶναι ἀντανακλαστικοί (reflexive).

## §4. ΘΕΩΡΙΑ γραμμικῶν ΤΕΛΕΣΤΩΝ.

### 1. Γενικά γιά τελεστές.

Ἔστω δύο διανυσματικοί χῶροι $V_1$ καί $V_2$. Λέμε τελεστή κάθε ἀπεικόνιση $A$:

$$V_1 \supseteq D_A \ni |x) \longrightarrow y_A(|x)) \in R_A \subseteq V_2 . \qquad (12)$$

(Καί τό $y_A(|x))$ εἶναι ἕνα διάνυσμα τοῦ $V_2$ δηλαδή $y_A(|x)) \equiv |y)$), ἔτσι σέ κάθε διάνυσμα $|x)$ τῆς περιοχῆς $D_A$ ἀντιστοιχεῖ ἕνα διάνυσμα $y_A(|x)) \equiv |y) \in R_A \subseteq V_2$.

Ἡ ἀπεικόνιση αὐτή παριστάνεται μέ τό $A|x) = |y)$, $|x) \in D_A$.

Τό σύνολο $D_A$ τῶν διανυσμάτων γιά τά ὁποῖα ὁρίζεται ἡ παραπάνω ἀπεικόνιση, λέγεται <u>πεδίο ὁρισμοῦ</u> (Domain) τοῦ $A$ καί ἡ εἰκόνα τοῦ $D_A$ λέγεται <u>ἔκταση</u> (Range) τοῦ $A$.

Ἀπό τόν παραπάνω ὁρισμό μποροῦμε νά θεωρήσουμε κάθε τελεστή $A$ σάν μιά (μονότιμη) διανυσματική συνάρτηση. Ἄν οἱ χῶροι $V_1$ καί $V_2$ εἶναι τοπολογικοί, μποροῦμε νά ὁρίσουμε τήν συνέχεια ἑνός τελεστή ὅπως συνήθως,



δηλαδή:

"Ὁ τελεστής $A$ εἶναι συνεχής στό $|x_0) \in D_A$ τότε καί μόνο τότε ἄν γιά κάθε ἀνοιχτή περιοχή τοῦ $A|x_0)$, $V_2(A|x_0))$, ὑπάρχει ἀνοιχτή περιοχή $V_1(|x_0))$ τοῦ $|x_0)$ τέτοια ὥστε

$$\forall |x) \in V_1(|x_0)) \longrightarrow A|x) \in V_2(A|x_0)) .$$

Γιά παράδειγμα, ἄν οἱ $V_1$ καί $V_2$ εἶναι τοπολογικοί χῶροι μέ μιά τοπολογία πού πηγάζει ἀπό δύο ἀντίστοιχες norm $\| \ \|_{V_1}$, $\| \ \|_{V_2}$, θά λέμε ὅτι ὁ τελεστής $A$ εἶναι συνεχής στό $|x_0)$ ἄν γιά κάθε τυχαῖο $\varepsilon > 0$ ὑπάρχει $\delta(\varepsilon) > 0$ τέτοιο ὥστε:

$$\| A|x) - A|x_0) \|_{V_2} < \varepsilon ,\ \forall |x) \in D_A \text{ μέ } \| |x) - |x_0) \|_{V_1} < \delta(\varepsilon).$$

Ἕνας γραμμικός τελεστής εἶναι συνεχής ἄν εἶναι συνεχής στό $\vec{0}$.

Σέ ἀναλογία μέ τίς γραφικές παραστάσεις τῶν συναρτήσεων, λέμε γραφή (Graph) ἑνός τελεστή $A$ τό σύνολο τῶν σημείων $(A|x), |x)) \in V_2 \times V_1$, $|x) \in D_A \subseteq V_1$.

Ἄν ἡ γραφή τοῦ τελεστή $A$ εἶναι κλειστό σύνολο στό τοπολογικό γινόμενο $V_2 \times V_1$ ὁ τελεστής $A$ λέγεται κλειστός, δηλαδή ὁ $A$ εἶναι κλειστός ἄν γιά κάθε ἀκολουθία $V_1 \ni |x_n) \longrightarrow |x)$ καί $A|x_n) \equiv |y_n) \longrightarrow |y) \in V_2$ ἔχουμε $A|x) = |y)$.

Δύο τελεστές $A$ καί $B$ λέγονται ἴσοι, καί θά συμβολίζουμε αὐτό μέ $A = B$ τότε καί μόνο τότε, ἄν $D_A = D_B$ καί $A|x) = B|x)$ $\forall |x) \in D_A = D_B$.

Ἄν $D_A \subset D_B$ καί ἰσχύει $A|x) = B|x)$ $\forall |x) \in D_A$, τότε ὁ $B$ λέγεται ἐπέκταση (extension) τοῦ $A$, ὁ δέ $A$ λέγεται περιορισμός τοῦ $B$ (restriction) στό $D_A$. Αὐτό τό συμβολίζουμε μέ τό $A \subset B$.

Λέμε μηδενικό τελεστή καί συμβολίζουμε μέ $O$ τόν τελεστή $O\ |x) =$ μηδενικό διάνυσμα $\in V_2$ γιά κάθε $|x) \in V_1$.

2. ΓΡΑΜΜΙΚΟΙ ΤΕΛΕΣΤΕΣ:

Ὁ τελεστής $A$ λέγεται γραμμικός, ἄν τό πεδίο ὁρισμοῦ του εἶναι διανυσματικός ὑπόχωρος καί ἰσχύει:
$A(\alpha|x_1) + \beta|x_2)) = \alpha A(|x_1)) + \beta A(|x_2)),\ \forall |x_1), |x_2) \in D_A$ καί $\alpha, \beta$ τυχαῖοι ἀριθμοί ἀπό τό σῶμα τοῦ διανυσματικοῦ χώρου $V$.

3. ΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΤΕΛΕΣΤΗ ΜΕ ΠΙΝΑΚΑ

Ἔστω ἕνας χῶρος Hilbert, $H$ πού ἔχει σάν βάση ἕνα πλῆρες ὀρθοκανονικό σύστημα $(|\varepsilon_1), |\varepsilon_2), |\varepsilon_3), \ldots, |\varepsilon_n), \ldots)$.
Τότε ὅπως εἴδαμε τό τυχαῖο διάνυσμα $|\psi)$ τοῦ χώρου $H$ μπορεῖ νά γραφτεῖ ὑπό τήν μορφή $|\psi) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |\varepsilon_n)$. (13)
Ἔστω τώρα ἕνας γραμμικός τελεστής ὁρισμένος σ' ἕνα χῶρο $H_1$ καί μέ τιμές σ' ἕνα ἄλλο χῶρο $H_2$. Ἔστω ὅτι ὁ χῶρος $H_1$ δέχεται σάν βάση ἕνα πλῆρες ὀρθοκανονικό σύστημα $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n, \ldots\}$, ὁ δέ χῶρος $H_2$ δέχεται σάν βάση τό ὀρθοκανονικό σύστημα $\{e_1, e_2, \ldots, e_n, \ldots\}$.
Τότε γιά ἕνα διάνυσμα $|\psi) \in D_A \subset H_1$ ἔχουμε $A|\psi) = |\psi') \in H_2$.
Θά ἀναζητήσουμε τήν μορφή τοῦ $A$ σάν πίνακα.
Παίρνουμε τό ἐσωτερικό γινόμενο τῆς παραπάνω ἰσότητας, ἐπί $|e_i)$ ἔχουμε ὅτι:

$(e_i|\psi') \equiv \psi'(i) = (e_i|A|\psi) = \sum_k (e_i|A|\varepsilon_k)(\varepsilon_k|\psi) =$
$= \sum_k A_{ik}\psi(k)$ τελικά $\psi'(i) = \sum_k A_{ik}\psi(k)$,

ὅπου $\psi'(i) = (e_i|\psi')$ ἡ $i$-συνιστῶσα τοῦ $|\psi)$ στό $H_2$,
$\psi(k) = (\varepsilon_k|\psi)$ καί
$A_{ik} = (e_i|A|\varepsilon_k)$. (14)

Ἄρα ὁ $A$ περιγράφεται τελείως μέ τόν πίνακα:



$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots & \\ A_{31} & A_{32} & \cdots & & \\ A_{41} & \cdots & & & \\ \cdots & & & & \end{bmatrix} \qquad (15)$$

Στήν περίπτωση πού ἀπεικονίζεται ἕνας χῶρος $H_1$ στόν ἑαυτό του, δηλαδή στήν περίπτωση πού $H_1 = H_2$ παίρνουμε συνήθως $|e_k) = |\varepsilon_k)$ καί ἑπομένως τό στοιχεῖο τοῦ πίνακα $A_{nm}$ θά εἶναι $A_{nm} = (\varepsilon_n|A|\varepsilon_m)$ ὁ δέ πίνακας εἶναι τετραγωνικός.
Ἄν οἱ χῶροι $H_1$, $H_2$ ἔχουν διαστάσεις $\lambda$ καί $\mu$ τότε ὁ $A$ εἶναι ἕνας $\mu \times \lambda$ πίνακας.
Ἀπό ἐδῶ καί πέρα θά θεωροῦμε ὅτι $H_1 = H_2$ ἐκτός ἄν λεχτεῖ κάτι ἄλλο ἰδιαίτερα.

4. ΑΛΓΕΒΡΑ ΤΩΝ ΤΕΛΕΣΤΩΝ.

i) Ἔστω δύο γραμμικοί τελεστές $A$ καί $B$, μέ πεδία ὁρισμοῦ τά $D_A \subset H_1$ καί $D_B \subset H_1$. Καλοῦμε ἄθροισμα τῶν τελεστῶν αὐτῶν, τόν γραμμικό τελεστή $A+B$ μέ πεδίο ὁρισμοῦ τό $D_{A+B} = D_A \cap D_B$ πού ὁρίζεται μέ τό $(A+B)|x) = A|x) + B|x)$, $\forall |x) \in D_{A+B}$. (16)
Ὅταν οἱ $A$ καί $B$ ἔχουν τήν μορφή πινάκων τότε τό $A+B$ θά εἶναι τό ἄθροισμα τῶν πινάκων.

ii) Τό γινόμενο τοῦ γραμμικοῦ τελεστή $A$ ἐπί τόν ἀριθμό $a$ ὁρίζεται σάν ὁ τελεστής $aA$ μέ πεδίο ὁρισμοῦ τό $D_{aA} = D_A$ καί τέτοιος ὥστε:
$(aA)|x) = a(A|x))$, $\forall |x) \in D_{aA} = D_A$.
Ὅταν ὁ $A$ εἶναι πίνακας τό $aA$ εἶναι τό γνωστό γινόμενο ἀριθμοῦ ἐπί πίνακα.

iii) Γινόμενο τελεστῶν. Ἔστω οἱ τελεστές $A$ καί $B$, ὁρισμένοι στό $D_A$ καί $D_B$ ἀντίστοιχα. Ὁρίζουμε σάν γινόμενο τῶν τελεστῶν $AB$ τόν τελεστή, πού ἔχει σάν πεδίο ὁρισμοῦ τό $D_{AB}=\{|x): |x)\in D_B \text{ καί } B|x)\in D_A\}$ καί τέτοιος ὥστε: $(AB)|x) = A(B|x))$. (17)

Στήν περίπτωση πού $A, B$ πίνακες, τότε τό $AB$ εἶναι ὁ γνωστός πολλαπλασιασμός τῶν πινάκων. Παρατηροῦμε ὅτι $A+B=B+A$ ὅπως ἀκόμα ὅτι

$$(A(BC)) = ((AB)C).$$

Ἀλλά γενικά $AB\neq BA$. Ἡ διαφορά $AB-BA$ λέγεται μεταθέτης τῶν $A$ καί $B$ καί συμβολίζεται μέ $[A,B]$ δηλαδή,

$$[A,B]\equiv AB-BA. \qquad (18)$$

Ἀποδεικνύονται εὔκολα οἱ παρακάτω ἰδιότητες γιά τόν μεταθέτη.

(α) $[A,B] = -[B,A]$ καί $[A,A]=0$

(β) $[A,BC] = [A,B]C + B[A,C]$

(γ) $[BC,A] = B[C,A] + [B,A]C$

$$[[A,B],C] + [[C,A],B] + [[B,C],A] = 0.$$

(Ταυτότητα τοῦ Jacobi).

Ἔστω λοιπόν ἕνας τελεστής $A$ (ἀπό ἐδῶ καί πέρα θά θεωροῦμε ὅτι τό πεδίο ὁρισμοῦ $D_A = H$ ἐκτός ἄν λέγεται ἰδιαίτερα), μέ πεδίο ὁρισμοῦ τό $D_A$ καί πεδίο τιμῶν τό $R_A$. Τότε σάν ἀντίστροφος $A^{-1}$ τοῦ τελεστή $A$ (ὅταν ὑπάρχει), ὁρίζεται ὁ τελεστής

(α) $AA^{-1}=I$, (β) $A^{-1}A=I$,

ὅπου $I$ ὁ ταυτοτικός τελεστής.

Ἄν ἰσχύει μόνο ἡ (α) ἤ μόνο ἡ (β), τότε λέμε ὅτι ὁ $A^{-1}$ εἶναι δεξιά ἀντίστροφος, ἤ ἀντίστοιχα ἀριστερά ἀντίστροφος τοῦ τελεστή $A$.

Ἄν $R_A = H$ καί ἡ σχέση $A|x)=0$ συνεπάγεται $|x)=0$ τότε



ὁ ἀντίστροφος τοῦ $A$ ὑπάρχει.

Πράγματι, ἔστω ὁ τελεστής $A: D_A\longrightarrow H$. Τότε σέ κάθε διάνυσμα $|x)$ τοῦ χώρου $D_A$ ἀντιστοιχεῖ ἕνα καί μόνο $|y)\in H$. Δηλαδή $|x)\longrightarrow |y)$.

Ἀλλά τό $|y)$ εἶναι εἰκόνα μόνο ἑνός προτύπου $|x)\in D_A$, γιατί ἄν ἦταν τουλάχιστον δύο, ἔστω τῶν $|x_1)$ καί $|x_2)$ τότε

$$A|x_1) = |y) = A|x_2)$$
$$\longrightarrow A|x_1) - A|x_2) = 0$$
$$\longrightarrow A(|x_1)-|x_2))=0$$

καί σύμφωνα μέ τήν ὑπόθεση πρέπει: $|x_1)=|x_2)$.

Ἑπομένως ὁ $A$ εἶναι ἀμφιμονοσήμαντος, ἄρα ὑπάρχει ὁ $A^{-1}: H\longrightarrow D_A$ καί $A^{-1}|y)=|x)$. Θά εἶναι δέ καί $AA^{-1}|y) = A|x) = |y)$ ὅπως καί $A^{-1}A|x) = A^{-1}|y) = |x)$.

Ἄν ἔχουμε δύο τελεστές $A$ καί $B$ καί ὑπάρχουν οἱ ἀντίστροφοί τους $A^{-1}$ καί $B^{-1}$ τότε ὑπάρχει καί ὁ $(AB)^{-1}$ καί ἰσχύει $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ γιατί $(AB)(B^{-1}A^{-1}) = I$ καί $(B^{-1}A^{-1})(AB) = I$ ἄρα $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$.

Ὅταν $A$ εἶναι πίνακας, τότε ὁ ἀντίστροφος τοῦ $A$ θά εἶναι ὁ ἀντίστροφος τοῦ πίνακος, ἄν βέβαια ὑπάρχει.

Ὑπενθυμίζουμε ὅτι σέ χώρους πεπερασμένων διαστάσεων, ἡ ἀναγκαία καί ἱκανή συνθήκη γιά νά ὑπάρχει ἀντίστροφος πίνακας εἶναι ὁρ.$A_{ik}\neq 0$ (ὁρίζουσα $|A_{ik}|\neq 0$)

Γιά πίνακες δέν ἰσχύει, γενικά, ἡ μεταθετική ἰδιότητα (σέ διαστάσεις $\geq 2$), παρατηροῦμε ὅτι ἡ Ἄλγεβρα τῶν τελεστῶν διαφέρει ἀπό τήν Ἄλγεβρα τῶν ἀριθμῶν.

## 5. Ὁ συζυγής ἑνός τελεστή. ($A^+$)

Ἔστω $A$ ἕνας γραμμικός τελεστής στό $H$ καί ἔστω $D_A$ τό πεδίο ὁρισμοῦ του, πυκνό στό $H$ δηλαδή $\bar{D}_A = H$. Τότε ὁ συζυγής $A^*$ τοῦ τελεστή $A$ ὁρίζεται στό σύνολο $D_A^* = \{|\psi): (Ax,\psi) = (x, z(\psi))\}$, δηλαδή τό $D_A^*$ ὁρίζεται γιά ὅλα τά $|\psi)$ γιά τά ὁποῖα ὑπάρχει $z(\psi)$ καί ἰσχύει $(Ax,\psi) = (x, z(\psi))$ καί λέμε $A^*|\psi) = |z(\psi))$. Ἐπειδή τό σύνολο $D_A$ εἶναι πυκνό στό H ὁ παραπάνω ὁρισμός ἔχει ἔννοια. Πραγματικά τό $z(\psi)$ εἶναι μονότιμη συνάρτηση, γιατί ἄν ἦταν πλειότιμη, τότε $(Ax,\psi) = (x, z(\psi))$ καί

$$(Ax,\psi) = (x, z'(\psi)).$$

$$\longrightarrow (x, z(\psi) - z'(\psi)) = 0, \quad \forall\, |x) \in D_A,$$

καί ἐπειδή τό $D_A$ εἶναι πυκνό ἔχουμε $|z(\psi)) = |z'(\psi))$.

Ὁ τελεστής $A^*$ εἶναι πάντοτε γραμμικός (ἀνεξάρτητα τῆς γραμμικότ. τοῦ A). Ἐπίσης ὁ $A^*$ εἶναι κλειστός. Δηλαδή ἄν $|x_n) \to |x)$, γιά $n \to \infty$ καί $A^*|x_n) = |\psi_n) \to |\psi)$ τότε θά ἰσχύει $A^*|x) = |\psi)$ ἤ

$$A^* \lim_{n\to\infty} |x_n) = \lim_{n\to\infty} A^*|x_n).$$

Ἐξ ὑποθέσεως ἔχουμε

$$(Ax', x_n) = (x', A^*x_n) = (x', \psi_n) \longrightarrow (x', \psi), \qquad (19)$$

ὅπως ἐπίσης $(Ax', x_n) \to (Ax', x) = (x', A^*x)$ (20)

λόγω τῆς συνεχείας τοῦ ἐσωτερικοῦ γινομένου.

Ἀπό τίς σχέσεις (19) καί (20) ἔχουμε:

$(x', \psi) = (x', A^*x) \longrightarrow A^*|x) = |\psi)$, δηλαδή ὁ $A^*$ εἶναι κλειστός.

Ἄν $A_1^*$, $A_2^*$ εἶναι οἱ συζυγεῖς τῶν τελεστῶν $A_1$, $A_2$ ἀντίστοιχα καί $c_1$, $c_2$ μιγαδικοί ἀριθμοί, τότε

$$(c_1A_1 + c_2A_2)^* = \bar{c}_1 A_1^* + \bar{c}_2 A_2^*,$$

ὅπου $\bar{c}_1$, $\bar{c}_2$ οἱ συζυγεῖς τῶν $c_1$, $c_2$ ἀντίστοιχα.

Ἐπίσης $(A_1A_2)^* = A_2^* A_1^*$.

Ἄν ἕνας τελεστής A παριστάνεται μέ τήν μορφή πίνακα, ἀποδεικνύεται εὔκολα ὅτι ὁ συζυγής $A^*$ εἶναι ὁ πίνακας μέ στοιχεῖο πίνακος (matrix element) τό $A^*_{mn} = \bar{A}_{nm}$,

*(Ἄσκηση)

1) Διαγων. Ερμ. 2ου [illegible]
2) Μίγμα.



ὅπου $\bar{A}_{nm}$ μιγαδικός συζυγής τοῦ $A_{nm}$.

6. Ὁρισμοί.

Ἕνας τελεστής A λέγεται Ἑρμιτιανός (Hermitian) ἄν $(Ax, \psi) = (x, A\psi)$ γιά ὅλα τά $|x)$, $|\psi) \in D_A$. Βασική ἰδιότητα

Συμμετρικός λέγεται κάθε Ἑρμιτιανός τελεστής, πού τό πεδίο ὁρισμοῦ του $D_A$ εἶναι πυκνό στό H, δηλαδή $\bar{D}_A = H$.

Ὁ συζυγής $A^*$ ἑνός συμμετρικοῦ τελεστή, ἀποτελεῖ ἐπέκταση τοῦ A. Ἄν καί $D_A = D_A^*$, τότε $A = A^*$ καί ὁ τελεστής A λέγεται αὐτοσυζυγής. $\langle x|Ax\rangle$ πραγμα- [illegible]

Ὁρισμός. Κάθε λύση τῆς ἐξισώσεως $A|x_\lambda) = \lambda|x_\lambda)$ μέ $0 < \| |x_\lambda) \| < +\infty$, ὅπου λ μιγαδικός (γενικά), λέγεται χαρακτηριστικό ἰδιοδιάνυσμα, ἀντίστοιχο πρός τήν ἰδιοτιμή λ.

Στόν χῶρο τῶν πεπερασμένων διαστάσεων ὑπάρχουν πάντα χαρακτηριστικά διανύσματα καί τιμές (ἰδιοδιανύσματα καί ἰδιοτιμές).

Ἔτσι ἔστω A ἕνας γραμμικός τελεστής στόν χῶρο τῶν k διαστάσεων καί $A_{ik}$ ὁ ἀντίστοιχος πίνακας (ὡς πρός μιά βάση).

Τό πρόβλημα νά βροῦμε τίς ἰδιοτιμές τοῦ A ἰσοδυναμεῖ μέ τήν λύση τοῦ ὁμογενοῦς γραμμικοῦ συστήματος:

$$A_{ik}\psi_k = \lambda\psi_k \quad \text{ἤ} \quad \sum_{i=1}^{n} (A_{ik} - \lambda\delta_{ik})\psi_k = 0.$$

Ἱκανή καί ἀναγκαία συνθήκη γιά νά ὑπάρξει μή μηδενική λύση εἶναι ὅπως εἶναι γνωστό ὁ μηδενισμός τῆς ὀρίζουσας, δηλαδή:

$$\det(A_{ik} - \lambda\delta_{ik}) = 0. \qquad (21)$$

Ἡ ὀρίζουσα αὐτή εἶναι πολυώνυμο k βαθμοῦ ὡς πρός λ. Τό πολυώνυμο αὐτό λέγεται χαρακτηριστικό πολυώνυμο καί οἱ ρίζες του εἶναι οἱ ἰδιοτιμές. Ἔτσι ἡ ὕπαρξη ἰδιοτιμῶν στό χῶρο τῶν πεπερασμένων διαστάσεων ἐξασφαλίζεται ἀπό τό Θεμελιῶδες Θεώρημα τῆς Ἀλγέβρας.

Στό χῶρο ὅμως τῶν ἀπείρων διαστάσεων αὐτό δέν ἀληθεύει πάντα. Π.χ. ἔστω ὁ τελεστής Λ.

$$\Lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Ἔστω τυχαῖο ἰδιοδιάνυσμα του $|x)$ καί ἡ ἀντίστοιχη ἰδιοτιμή λ. Τότε

$$\Lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \\ \vdots \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda x_1 \\ \lambda x_2 \\ \vdots \\ \lambda x_n \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Δηλαδή:

$\lambda x_1 = 0 \longrightarrow \lambda = 0$ ἤ $x_1 = 0$

$\lambda x_2 = x_1$

$\vdots$

$\lambda x_n = x_{n-1}$

$\vdots$

Ἄν $\lambda = 0 \longrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ x_1 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}$ δηλαδή $x_1 = x_2 = \cdots = \cdots \equiv 0$,

δηλαδή $|x) = 0$.

Ἄν $x_1 = 0$ καί $\lambda = 0$ τότε καλυπτόμαστε ἀπό τήν



προηγούμενη περίπτωση $\lambda = 0$. Ἄν $\lambda \neq 0$ καί $x_1 = 0$ τότε $\lambda x_2 = x_1 = 0 \longrightarrow x_2 = 0$ καί ὅπως διαπιστώνεται εὔκολα $x_n = 0$, $n = 2, 3, \dots$ ἄρα πάλι $|x) = 0$. Ἑπομένως τό $|x)$ δέν εἶναι ἰδιοδιάνυσμα γιατί $|x) = 0$.

*(1)

7. Ἰδιότητες Ἑρμιτιανῶν τελεστῶν.

Ἄν μᾶς δώσουνε τόν Ἑρμιτιανό τελεστή Λ οἱ ἀριθμοί $(x, \Lambda x)$, $|x) \in D_\Lambda$ εἶναι πραγματικοί. Γιατί ἔχουμε $(x, \Lambda x) = (\Lambda x, x)$ (Ἐξ αἰτίας τῆς Ἑρμιτιανῆς ἰδιότητας) καί $(x, \Lambda x) = \overline{(\Lambda x, x)}$ ἄρα $(\Lambda x, x) = \overline{(\Lambda x, x)}$, ἐπομένως $(x, \Lambda x)$ πραγματικός. Εἰδικά ἄν $\Lambda|x) = \lambda|x)$ τότε $\lambda = \dfrac{(x, \Lambda x)}{(x, x)}$ = πραγματικός.

ΘΕΩΡΗΜΑ:

"Οἱ ἰδιοτιμές ἑρμιτιανοῦ τελεστή εἶναι πραγματικοί ἀριθμοί, τά δέ ἰδιοδιανύσματα πού ἀντιστοιχοῦν σέ διάφορες ἰδιοτιμές, εἶναι ὀρθογώνια μεταξύ τους."

Ἀπόδειξη: Τό πρῶτο μέρος τοῦ Θεωρήματος δείχτηκε παραπάνω.

Ἔστω $|\lambda_1)$ καί $|\lambda_2)$ τά ἰδιοδιανύσματα τοῦ Λ πού ἀντιστοιχοῦν στίς ἰδιοτιμές $\lambda_1$ καί $\lambda_2$ ἀντίστοιχα. Εἶναι $\Lambda|\lambda_1) = \lambda_1|\lambda_1)$ καί $\Lambda|\lambda_2) = \lambda_2|\lambda_2) \longrightarrow (\lambda_2, \Lambda\lambda_1) = (\Lambda\lambda_2, \lambda_1) \longrightarrow \lambda_1(\lambda_2, \lambda_1) = \overline{\lambda}_2(\lambda_2, \lambda_1) = \lambda_2(\lambda_2, \lambda_1)$.

(Ἐπειδή λόγω τῆς ἑρμιτιανῆς ἰδιότητας τοῦ Λ, $\overline{\lambda}_2 = \lambda_2$).

Ἀπό τήν τελευταία σχέση ἔχουμε: $(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_2, \lambda_1) = 0$ καί ἐπειδή ὑποθέσαμε $\lambda_1 \neq \lambda_2 \longrightarrow (\lambda_2, \lambda_1) = 0$. ὅ.ἔ.δ.

8. Θεμελιῶδες Θεώρημα περί αὐτοσυζυγῶν τελεστῶν.

Ὅπως εἶναι γνωστό στούς Εὐκλείδειους χώρους πεπερασμένων διαστάσεων, τό σύνολο τῶν χαρακτηριστικῶν διανυσμάτων ἑνὸς τυχαίου ἑρμιτιανοῦ τελεστῆ δίνει μιὰ ὀρθοκανονικὴ βάση

$\{|\lambda_i)\}$ , $i = 1, 2, \ldots, n$

$(\lambda_i, \lambda_k) = \delta_{ik}$ (ὀρθοκανονικότητα) καὶ

$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i)(\lambda_i| = I$ (πληρότητα).

Ἡ σχέση τῆς πληρότητας λέγεται καὶ φασματικὴ ἀνάλυση τῆς ταυτότητας. Λόγω τῆς $\Lambda|\lambda_i) = \lambda_i|\lambda_i)$ καὶ τῆς σχέσεως τῆς πληρότητας ὁ τελεστὴς $\Lambda$ μπορεῖ νὰ πάρει τὴν μορφή:

$$\Lambda = \Lambda I = \sum_{i=1}^{n} \Lambda |\lambda_i)(\lambda_i| = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |\lambda_i)(\lambda_i| ,$$

δηλαδὴ σὰν γραμμικὸς συνδιασμὸς τῶν προβολικῶν τελεστῶν $|\lambda_i)(\lambda_i|$.

Μὲ τὴν βοήθεια τῆς φασματικῆς ἀναλύσεως μποροῦμε νὰ ὁρίσουμε συναρτήσεις ἑνὸς τελεστῆ

$f(\Lambda) = \sum_i f(\lambda_i)|\lambda_i)(\lambda_i|$.

Χρησιμοποιώντας τὴν βάση $\{|\lambda_i)\}$ σὰν σύστημα ἀναφορᾶς, ὁ $\Lambda$ παριστάνεται μὲ διαγώνιο πίνακα.

$\Lambda_{ik} = (\lambda_i, \Lambda\lambda_k) = \lambda_i \delta_{ik}$, δηλαδὴ

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

Οἱ πιὸ ἁπλοὶ αὐτοσυζυγεῖς τελεστὲς εἶναι οἱ προβολικοί.

9. <u>Προβολικοὶ τελεστές.</u>

Ἔστω $m$ ἕνας κλειστὸς ὑπόχωρος τοῦ χώρου $H$ (Hilbert) καὶ ἔστω $m^{\perp}$ τὸ ὀρθογώνιο συμπλήρωμα τοῦ $m$. Τότε κάθε διάνυσμα $|x)$ τοῦ $H$ μπορεῖ νὰ ἀναλυθεῖ μὲ ἕνα καὶ μόνο τρόπο: $|x) = |x_m) + |x_m^{\perp})$, ὅπου $|x_m) \in m$ καὶ $|x_m^{\perp}) \in m^{\perp}$ δηλαδή



$(|x) - |x_m))^{\perp} \in m.$

(Τὸ διάνυσμα $|x_m)$ εἶναι μοναδικὸ καὶ μπορεῖ νὰ ὁριστεῖ καὶ σὰν διάνυσμα ποὺ κάνει ἐλάχιστο τὸ $\||x) - |x_m)\|$, $|x_m) \in m$).

Λέμε προβολικὸ τελεστὴ $P_m$ τὸν τελεστὴ ποὺ ὁρίζεται ἀπὸ τὴν σχέση: $P_m|x) = |x_m)$. Φαίνεται ἀμέσως ὅτι ὁ $P_m$ εἶναι αὐτοσυζυγὴς $P^* = P$ καὶ αὐτοδύναμος (ἢ ἀδύναμος) $P^2 = P$.

Πραγματικά, ἔστω τυχαῖα διανύσματα $|x) = |x_m) + |x_m^{\perp})$ καὶ $|y) = |y_m) + |y_m^{\perp})$ τότε:

$$(P_m x, y) = (x_m, y) = (x_m, y_m) + (x_m, y_m^{\perp}) = (x_m, y_m)$$

$$(x, P_m y) = (x, y_m) = (x_m, y_m) + (x_m^{\perp}, y_m) = (x_m, y_m)$$

Δηλαδὴ

$$\underline{P_m = P_m^*}$$

Ἐπίσης $P_m^2|x) = P_m P_m|x) = P_m|x_m) = |x_m) = P_m|x) \longrightarrow$

$\longrightarrow P^2 = P.$

Ἀποδεικνύεται ὅτι ὁ $P_m$ ἔχει μόνο τὶς ἰδιοτιμὲς 0 καὶ 1.

Γιατί ἔστω ἕνα ἰδιοδιάνυσμα του $|x)$. Τότε πρέπει

$P_m|x) = \lambda|x)$, (22)

ἀλλὰ $P_m = P_m^2$ ἄρα

$P_m|x) = P_m^2|x) = P_m P_m|x) = P_m \lambda|x) = \lambda P_m|x) =$

$= \lambda^2|x) = \lambda|x) \longrightarrow (\lambda^2 - \lambda)|x) = |0)$.

Ἐπειδὴ $|x) \neq |0) \rightarrow \lambda^2 - \lambda = 0 \rightarrow \lambda = 1$ ἢ $\lambda = 0$.

Θὰ δείξουμε ὅτι ἰσχύει καὶ τὸ ἀντίστροφο. Δηλαδή: Ἂν ἕνας τελεστὴς $P$, ὁρισμένος στὸ $H$, ἱκανοποιεῖ τὶς σχέσεις $P^* = P$ καὶ $P^2 = P$, εἶναι προβολικὸς καὶ προβάλλει τὰ διανύσματα τοῦ χώρου $H$ στὸν ὑπόχωρο $m$, τὰ διανύσματα τοῦ ὁποίου εἶναι ἰδιοδιανύσματα τοῦ $P$ μὲ ἰδιοτιμὴ 1.

κτηριστικῶν διανυσμάτων ἑνός τυχαίου ἑρμιτιανοῦ τελεστή δίνει μιά ὀρθοκανονική βάση $\{|\lambda_i)\}$ , $i = 1, 2, \dots, n$
$(\lambda_i, \lambda_k) = \delta_{ik}$ (ὀρθοκανονικότητα) καί
$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i)(\lambda_i| = I$ (πληρότητα).
Ἡ σχέση τῆς πληρότητας λέγεται καί φασματική ἀνάλυση τῆς ταυτότητας. Λόγω τῆς $\Lambda|\lambda_i) = \lambda_i|\lambda_i)$ καί τῆς σχέσεως τῆς πληρότητας ὁ τελεστής $\Lambda$ μπορεῖ νά πάρει τήν μορφή:
$$\Lambda = \Lambda I = \sum_{i=1}^{n} \Lambda|\lambda_i)(\lambda_i| = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |\lambda_i)(\lambda_i| ,$$
δηλαδή σάν γραμμικός συνδιασμός τῶν προβολικῶν τελεστῶν $|\lambda_i)(\lambda_i|$
Μέ τήν βοήθεια τῆς φασματικῆς ἀναλύσεως μποροῦμε νά ὁρίσουμε συναρτήσεις ἑνός τελεστή
$f(\Lambda) = \sum_i f(\lambda_i)|\lambda_i)(\lambda_i|$ .
Χρησιμοποιώντας τήν βάση $\{|\lambda_i)\}$ σάν σύστημα ἀναφορᾶς, ὁ $\Lambda$ παριστάνεται μέ διαγώνιο πίνακα.
$\Lambda_{ik} = (\lambda_i, \Lambda\lambda_k) = \lambda_i \delta_{ik}$ , δηλαδή
$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$
Οἱ πιό ἁπλοί αὐτοσυζυγεῖς τελεστές εἶναι οἱ προβολικοί.

9. Προβολικοί τελεστές.

Ἔστω $m$ ἕνας κλειστός ὑπόχωρος τοῦ χώρου $H$ (Hilbert) καί ἔστω $m^{\perp}$ τό ὀρθογώνιο συμπλήρωμα τοῦ $m$. Τότε κάθε διάνυσμα $|x)$ τοῦ $H$ μπορεῖ νά ἀναλυθεῖ μέ ἕνα καί μόνο τρόπο : $|x) = |x_m) + |x_m^{\perp})$, ὅπου $|x_m) \in m$ καί $|x_m^{\perp}) \in m^{\perp}$ δηλαδή



$(|x) - |x_m))^{\perp} \in m$.
(Τό διάνυσμα $|x_m)$ εἶναι μοναδικό καί μπορεῖ νά ὁριστεῖ καί σάν διάνυσμα πού κάνει ἐλάχιστο τό $\||x) - |x_m)\|$ , $|x_m) \in m$ ).
Λέμε προβολικό τελεστή $P_m$ τόν τελεστή πού ὁρίζεται ἀπό τήν σχέση : $P_m|x) = |x_m)$ . Φαίνεται ἀμέσως ὅτι ὁ $P_m$ εἶναι αὐτοσυζυγής $P^* = P$ καί αὐτοδύναμος (ἤ ἀδύναμος) $P^2 = P$.
Πραγματικά, ἔστω τυχαῖα διανύσματα $|x) = |x_m) + |x_m^{\perp})$ καί $|y) = |y_m) + |y_m^{\perp})$ τότε:
$$(P_m x, y) = (x_m, y) = (x_m, y_m) + (x_m, y_m^{\perp}) = (x_m, y_m)$$
$$(x, P_m y) = (x, y_m) = (x_m, y_m) + (x_m^{\perp}, y_m) = (x_m, y_m)$$
Δηλαδή
$$\underline{P_m = P_m^*}$$
Ἐπίσης $P_m^2|x) = P_m P_m|x) = P_m|x_m) = |x_m) = P_m|x) \longrightarrow$
$\longrightarrow P^2 = P$.
Ἀποδεικνύεται ὅτι ὁ $P_m$ ἔχει μόνο τίς ἰδιοτιμές 0 καί 1.
Γιατί ἔστω ἕνα ἰδιοδιάνυσμα του $|x)$. Τότε πρέπει
$P_m|x) = \lambda|x)$ , (22)
ἀλλά $P_m = P_m^2$ ἄρα
$P_m|x) = P_m^2|x) = P_m P_m|x) = P_m \lambda|x) = \lambda P_m|x) =$
$= \lambda^2|x) = \lambda|x) \longrightarrow (\lambda^2 - \lambda)|x) = |0)$ .
Ἐπειδή $|x) \neq |0) \rightarrow \lambda^2 - \lambda = 0 \rightarrow \lambda = 1$ ἤ $\lambda = 0$ .
Θά δείξουμε ὅτι ἰσχύει καί τό ἀντίστροφο. Δηλαδή:
Ἄν ἕνας τελεστής $P$, ὁρισμένος στό $H$, ἱκανοποιεῖ τίς σχέσεις $P^* = P$ καί $P^2 = P$, εἶναι προβολικός καί προβάλλει τά διανύσματα τοῦ χώρου $H$ στόν ὑπόχωρο $m$, τά διανύσματα τοῦ ὁποίου εἶναι ἰδιοδιανύσματα τοῦ $P$ μέ ἰδιοτιμή 1.

Ἀπόδειξη.

Ἀφοῦ $P^2 = P$ ὁ $P$ ἔχει ἰδιοτιμές μόνο 0 καί 1.
Ἔστω ὁ χῶρος

$$m = \{ |x) \in H : P|x) = |x) \}.$$

Εὔκολα δείχνεται ὅτι ὁ $m$ εἶναι γραμμικός χῶρος. Ὁ $P$ εἶναι φραγμένος, γιατί

$$\| P|x) \|^2 = (Px, Px) = (P^2x, x) \leq \| P^2|x) \| \|x\| = \| |x) \| = \| P|x) \| = \| |x) \| \longrightarrow \| P|x) \| \leq \| |x) \|.$$

Ἄρα εἶναι καί συνεχής. Ἔστω τώρα σημεῖο συσσωρεύσεως $|y)$ τοῦ $m$ τότε ὑπάρχει $|x_n) \in m$, $n \in N$, $(1,2,\dots) : |x_n) \longrightarrow |y)$.
Λόγω τῆς συνεχείας τοῦ $P$ ἔχουμε:
Ἀλλά $P|x_n) = |x_n) \longrightarrow |y)$, ἄρα $P|y) = |y)$ δηλαδή $|y) \in m$.
Ἄρα ὁ $m$ εἶναι κλειστός ὑπόχωρος καί ἐπομένως $m^\perp \oplus m = H$.
Ἔστω $|\xi) \in H$ τότε $|\xi) = P|\xi) + (1-P)|\xi)$.
Ἄν βάλω $P|\xi) = |\xi_1)$ καί $(1-P)|\xi) = |\xi_2)$ τότε $|\xi) = |\xi_1) + |\xi_2)$. Ἀλλά $P|\xi_1) = P(P|\xi)) = P^2|\xi) = P|\xi) = |\xi_1)$ ἄρα $|\xi_1) \in m$.
Τό $|\xi_2) \in m^\perp$, γιατί ἄν $|y) \in m$ ἔχω:

$$(y|\xi_2) = (y, (1-P)|\xi) = ((1-P)y, \xi) = (0, \xi) = 0.$$

Ἄρα $|\xi_2) \in m^\perp$. Αὐτό σημαίνει ὅτι $|\xi_1)$ εἶναι προβολή τοῦ $|\xi)$ στό $m$, δηλαδή $P|\xi) = |\xi_1)$, ὅ.ἔ.δ.
Οἱ πιό ἁπλοί προβολικοί τελεστές εἶναι οἱ προβολικοί τελεστές πού προβάλλουν σέ μιά διεύθυνση $|\varepsilon_m)$. (Τό $m$ μονοδιάστατος χῶρος). Ἕναν τέτοιο προβολικό τελεστή μποροῦμε νά τόν συμβολίσουμε μέ $|\varepsilon_m)(\varepsilon_m|$ δηλαδή:

$$P_m|x) = |\varepsilon_m)(\varepsilon_m|x) = ((\varepsilon_m|x))\,|\varepsilon_m) \qquad (23)$$



Ἐπίσης ἄν $|\varepsilon_i)$, $i = 1, 2, \dots k$ ~~ὀρθογώνια~~ μοναδιαῖα διανύσματα, τό σύμβολο $\sum_{i=1}^{k} |\varepsilon_i)(\varepsilon_i|$ εἶναι προβολικός τελεστής (βλ. ἀσκ. 4). Γενικώτερα ἄν $P_{m_i}$ προβολικοί τελεστές καί $m_i$ χῶροι ὀρθογώνιοι μεταξύ τους, τότε τό $\sum P_{m_i}$ εἶναι προβολικός τελεστής.
Τό γινόμενο δύο προβολικῶν τελεστῶν $P_{m_1}, P_{m_2}$ εἶναι προβολικός τελεστής $\longleftrightarrow [P_{m_1}, P_{m_2}] = 0$.

Ἀπόδειξη.

(Ὀρθά): Ἔστω ὁ $P_{m_1}P_{m_2}$ προβολικός τελεστής. Θά δείξουμε ὅτι: $[P_{m_1}, P_{m_2}] = 0$. Εἶναι $(P_{m_1}P_{m_2})^* = P^*_{m_2}P^*_{m_1} = P_{m_2}P_{m_1}$, (γιατί $P^*_{m_1} = P_{m_1}$ καί $P^*_{m_2} = P_{m_2}$).
Ἀλλά ὑποθέσαμε ὅτι ὁ $(P_{m_1}P_{m_2})$ εἶναι προβολικός τελεστής, ἄρα $(P_{m_1}P_{m_2})^* = P_{m_1}P_{m_2}$.
Ἄρα: $P_{m_1}P_{m_2} = P_{m_2}P_{m_1} \longrightarrow [P_{m_1}, P_{m_2}] = 0$.

(Ἀντίστροφα).

Ἔστω $[P_{m_1}, P_{m_2}] = 0$. Θά δείξουμε ὅτι $P_{m_1}P_{m_2}$ εἶναι προβολικός τελεστής. Ἀρκεῖ νά δείξουμε ὅτι $(P_{m_1}P_{m_2})^* = P_{m_1}P_{m_2}$ καί $(P_{m_1}P_{m_2})^2 = (P_{m_1}P_{m_2})$. Ἔχουμε ὅτι:
$(P_{m_1}P_{m_2})^* = P^*_{m_2}P^*_{m_1} = P_{m_2}P_{m_1} = P_{m_1}P_{m_2}$.
Ἐπίσης $(P_{m_1}P_{m_2})^2 = (P_{m_1}P_{m_2})(P_{m_1}P_{m_2}) =$
$P_{m_1}(P_{m_2}P_{m_1})P_{m_2} = P_{m_1}(P_{m_1}P_{m_2})P_{m_2} = P^2_{m_1}P^2_{m_2} = P_{m_1}P_{m_2}$
Ἄρα ὁ $P_{m_1}P_{m_2}$ εἶναι προβολικός τελεστής.

## 10. Μοναδιαῖοι μετασχηματισμοί.

Ἰσομετρικός λέγεται ἕνας μετασχηματισμός πού ἀφήνει ἀναλλοίωτο τό ἐσωτερικό γινόμενο, δηλαδή:

$$(Ag, Af) = (g, f), \quad \forall g, f \in H. \qquad (24)$$

Προφανῶς $D_A = H$, ἄρα $\exists$ ὁ $A^*$ καί $A^*A = I$.
Οἱ χαρακτηριστικές τιμές τοῦ ἰσομετρικοῦ τελεστῆ ἔχουν μέτρο τή μονάδα, γιατί ἄν $A|\lambda) = a|\lambda)$

Υπόδειξη $(A\lambda, \lambda)$ άσκηση 5

τότε $\underset{\|}{(A\lambda, A\lambda)} = (a\lambda, a\lambda) = |a|^2(\lambda,\lambda) = |a|^2 (A\lambda, A\lambda)$
$\rightarrow |a|^2 = 1 \rightarrow |a| = 1$.

*1 Ἂν A ἰσομετρικός καί $AA^* = I$ τότε ὁ A λέγεται μοναδιαῖος (unitary).
Ἂν A ἰσομετρικός καί ἡ ἔκτασή του εἶναι ἴση μέ H τότε ὁ A εἶναι μοναδιαῖος.

Ἀπόδειξη.

Ἔστω τυχαῖο $f \in H$, τότε $\exists g \in H: Ag = f$ καί
$AA^* f = AA^* Ag = Ag = f$, ἄρα $AA^* = I$ ὅ.ἔ.δ.

*2 *3 Σάν παράδειγμα μοναδιαίου μετασχηματισμοῦ ἀναφέρουμε τόν μετασχηματισμό πού ἀντιστοιχεῖ στήν ἀλλαγή ὀρθοκανονικῆς βάσεως:
$\{|\varepsilon_k)\} \longrightarrow \{|\varepsilon'_k)\} : |\varepsilon'_k) = U|\varepsilon_k)$, $k = 1,2\ldots$
Ἂς θεωρήσουμε τή δράση τοῦ $U$ πάνω στίς συνιστῶσες.
Ἔχουμε:
$$|\psi) = \sum_{k=1}^{\infty} \psi_k |\varepsilon_k) = \sum_{k=1}^{\infty} \psi'_k |\varepsilon'_k), \quad \text{ὅπου:}$$
$$\psi'_\ell = (\varepsilon'_\ell|\psi) = (\varepsilon'_\ell, \sum_{k=1}^{\infty}\psi_k|\varepsilon_k) = \sum_{k=1}^{\infty}\psi_k(\varepsilon'_\ell|\varepsilon_k) =$$
$$= \sum_{k=1}^{\infty}\psi_k(\varepsilon_\ell|U^*\varepsilon_k) = \sum_{k=1}^{\infty}\psi_k U^*_{\ell k}, \quad \text{ὅπου:}$$
$$U^*_{\ell k} = (\varepsilon_\ell, U^*\varepsilon_k) = \overline{(\varepsilon_k, U\varepsilon_\ell)} = \overline{U}_{k\ell}.$$

Ὁ μετασχηματισμός $U$ πάνω στά στοιχεῖα τῶν πινάκων δρᾶ ὡς ἑξῆς:
$$A'_{\ell k} = (\varepsilon'_\ell, A\varepsilon'_k) = (U\varepsilon_\ell, AU\varepsilon_k) = (\varepsilon_\ell, U^*AU\varepsilon_k) =$$
$$= U^*_{\ell m} A_{mn} U_{nk} = U^{-1}_{\ell m} A_{mn} U_{nk}$$
ἤ $A' = U^*AU = U^{-1}AU$.

## § 5. ΠΕΡΙ ΤΗΣ δ-ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΣ.

Στή Φυσική γίνεται μεγάλη χρήση τῆς δ-συναρτή-



σεως, πού τήν εἰσήγαγε ὁ P. A. M. DIRAC.
Ἡ δ-συνάρτηση εἶναι γενίκευση τοῦ συμβόλου τοῦ Kronecker:
$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases} \qquad i,k = 1,2,\ldots n, \quad (24)$$
γιά συνεχεῖς δεῖκτες ὅπως ἀκολουθεῖ: Τό σύμβολο δik μπορεῖ νά ὁριστεῖ καί μέ τό $\sum_{k=1}^{n}\delta_{ik}x_k = x_i$, δηλαδή σάν ταυτοτικός πίνακας γιά κάθε διάνυσμα $(x_1, x_2, \ldots x_n)$ ἤ σάν συναρτησοειδές
$$\delta_i(\vec{x}) = x_i \quad \text{ἤ} \quad \sum_{k=1}^{n}\delta_i(k)\,x_k = x_i$$
Οἱ παραπάνω ὁρισμοί εἶναι κατάλληλοι γιά τήν γενίκευση πού ζητᾶμε. Ἡ δ-συνάρτηση εἶναι μιά πραγματική συνάρτηση $\delta(x-x_0)$, τέτοια ὥστε γιά κάθε συνάρτηση $f$ συνεχή στό σημεῖο $x_0$ ἔχουμε:
$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0) \qquad (25)$$

ἤ ἀλλιῶς δ-συνάρτηση εἶναι τό γραμμικό συναρτησοειδές:
$$\delta_{x_0}\{f\} = f(x_0). \qquad (26)$$
Ἀπό τόν ὁρισμό της ἡ δ πρέπει νά εἶναι παντοῦ μηδέν ἐκτός ἀπό τό σημεῖο $x_0$ πού πρέπει ν' ἀπειρίζεται. (Ἀκριβέστερα δέν ὁρίζεται στό $x_0$). Μέ τό Θεώρημα τοῦ Fourier μποροῦμε νά ἔχουμε μιά ὁλοκληρωτική μορφή αὐτῆς τῆς συναρτήσεως.

## ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΙ FOURIER.

Ὁ ὁλοκληρωτικός μετασχηματισμός Fourier συνοφίζεται στὴν παρακάτω ταυτότητα.

<u>Θεώρημα:</u> Γιά κάθε συνάρτηση $\psi(\vec{x})$ στό ν Εὐκλείδειο χῶρο τῶν ν-διαστάσεων, πού πληρεῖ τή σχέση,

πολλαπλό $$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{x})|^2 dV(\vec{x}) < \infty$$

ἰσχύουν οἱ ταυτότητες

$$\psi(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_F(\vec{p}) \frac{e^{i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi)^{\nu/2}} dV(\vec{p}) \qquad (27)$$

πού

$$\psi_F(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{x}) \frac{e^{-i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi)^{\nu/2}} dV(x) \qquad (28)$$

ὁ «ὁλοκληρωτικός μετασχηματισμός Fourier» τῆς $\psi(x)$.

Τό $\vec{p}\cdot\vec{x}$ εἶναι ἐσωτερικό γινόμενο στό χῶρο τῶν ν-διαστάσεων καί τά $dV(\vec{p})$, $dV(\vec{x})$, στοιχεῖα ὄγκου στό χῶρο τῶν μεταθέσεων στίς διαστάσεις (τῶν $\vec{p}$ ἤ τῶν $\vec{x}$).

Σέ καρτεσιανές συντεταγμένες:

$dV(\vec{p}) = dp_1 dp_2 \cdots dp_\nu$, $dV(\vec{x}) = dx_1 dx_2 \cdots dx_\nu$.

Τά ὁλοκληρώματα παίρνονται σ' ὁλόκληρο τό χῶρο τῶν $\vec{p}$ καί $\vec{x}$. Γιά μιά αὐστηρή, σχολαστική ἀπόδειξη τοῦ θεωρήματος παραπέμπουμε στήν ἐκτεταμένη μαθηματική βιβλιογραφία. Ἐμεῖς θά περιοριστοῦμε σέ μιά ἀπόδειξη ὅσο μποροῦμε πιό ἁπλή, καί συγχρόνως νά ὑποδείξουμε τόν τρόπο ἐφαρμογῆς του.

<u>Ἀπόδειξη:</u> Ἀρχίζουμε μέ τό γνωστό ὁλοκλήρωμα GAUSS σέ μιά διάσταση,



$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a\, e^{-a^2p^2/4}}{2(\pi)^{1/2}} dp = 1 \qquad (29)$$

Τό ὁλοκλήρωμα αὐτό συγκλίνει ἀρκετά γρήγορα καί μετάθεση τῆς ὁλοκληρώσεως στό μιγαδικό ἐπίπεδο τῶν $p$, ἀπό τόν πραγματικό ἄξονα, $\mathrm{Im}\, p = 0$, στήν εὐθεία $\mathrm{Im}\, p = -2i\,x/a^2$ (ἀλλαγή $p \to p - 2ix/a^2$), δέν ἀλλάζει τήν τιμή τοῦ ὁλοκληρώματος,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a\, e^{-a^2(p-2ix/a^2)^2/4}}{2(\pi)^{1/2}} dp = 1,$$

ἤ

$$\delta_a(x) = \frac{e^{-x^2/a^2}}{a(\pi)^{1/2}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-a^2p^2/4}}{(2\pi)^{1/2}} \frac{e^{ipx}}{(2\pi)^{1/2}} dp.$$

Ἔτσι ἀποδείχτηκε ἡ ἀνάλυση FOURIER γιά τήν εἰδική περίπτωση τῆς συναρτήσεως GAUSS $\psi(x) = \delta_a(x)$ ὅπου

$$\delta_a(x) = \frac{e^{-x^2/a^2}}{a(\pi)^{1/2}} \qquad (30)$$

Στήν προκειμένη περίπτωση ὁ μετασχηματισμός FOURIER $(\delta_a)_F(p)$ τῆς συναρτήσεως $\delta_a(x)$ εἶναι

$$(\delta_a)_F(p) = \frac{e^{-a^2p^2/4}}{(2\pi)^{1/2}} \qquad (30.a)$$

Μέ βάση τήν ἀνάλυση Fourier τῆς συναρτήσεως $\delta_a(x)$ θά ἀναλύσουμε τώρα μιά γενική συνάρτηση $\psi(x)$. Παρατηροῦμε πρῶτα ὅτι ἄν πάρουμε μιά ἀκολουθία συναρτήσεων $\delta_a(x)$ μέ $a$ νά τείνει στό μηδέν, τείνει στή συνάρτηση $\delta(x)$ τοῦ DIRAC.

Πράγματι στό ὅριο $a \to 0$ ἡ $\delta_a(x)$ τείνει στό μηδέν γιά κάθε $x \neq 0$ ἐνῶ πάντοτε σύμφωνα μέ τίς σχέσεις (29) καί (30) ἔχουμε:

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

Ἄρα

$$\lim_{a\to 0} \delta_a(x) = \delta(x)$$

Ὁ μετασχηματισμός FOURIER γιά συνάρτηση GAUSS μᾶς δίνει καί τό μετασχηματισμό τῆς συναρτήσεως DIRAC.

$$\delta_a(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} (1/2\pi)^{1/2} \frac{e^{ipx}}{(2\pi)^{1/2}}\,dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_F(p)\,\frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi}}\,dp$$

τοῦ $\delta_F(p) = 1/(2\pi)^{1/2}$.

Αὐτό μᾶς φτάνει τώρα γιά τήν ἀνάλυση μιᾶς τυχαίας συνάρτησης $\Psi(x)$.

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x')\,\delta(x-x')\,dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ip(x-x')}}{(2\pi)}\,dp\,dx' =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x')\,\frac{e^{-ipx}}{(2\pi)^{1/2}}\,dx'\,\frac{e^{ipx}}{(2\pi)^{1/2}}\,dp =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_F(p)\,\frac{e^{ipx}}{(2\pi)^{1/2}}\,dp.$$

Μέ προφανεῖς μετατροπές δείχνεται καί τό δεύτερο σκέλος τοῦ Θεωρήματος. Οἱ συναρτήσεις GAUSS καί DIRAC εἶναι ἄρτιες $\delta(x) = \delta(-x)$. Ἡ γενίκευση σέ ν-διαστάσεις εἶναι ἕνα τετριμμένο πού τό ἀφήνουμε



γιά ἐξάσκηση.

Συνοψίζοντας ἔχουμε:

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

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} f(x')\,dx'\,dk =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')}\,dk \right] dx'$$

Ἄρα

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')}\,dk \qquad (31)$$

Συχνά χρησιμοποιεῖται καί ὁ ἑξῆς ὁρισμός

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \cos k(x-x')\,dk \qquad (32)$$

πού εἶναι τό ἄρτιο μέρος τοῦ ὁλοκληρώματος (31)

Ἀπό τόν ὁρισμό τῆς δ, γιά κάθε συνάρτηση f συνεχῆ στό 0 ἔχουμε:

$$f(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx \quad \text{καί} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,dx = 1.$$

Εὔκολα ἀποδεικνύεται ὅτι ἄν ἡ συνάρτηση f εἶναι συνεχής στό $x_0$ ἔχουμε, ἄν $a_1 < a_2$

$$\int_{a_1}^{a_2} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{ἄν } a_1 < x_0 < a_2 \\ 0 & \text{ἄν } x_0 < a_1,\ x_0 > a_2 \end{cases} \qquad (33)$$

Ὅπως ἔχουμε ἀναφέρει $\delta(x) = \delta(-x)$ γιατί:

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

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix(-\xi)}\, d\xi = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(-x)\xi}\, d\xi = \delta(-x).$$

Ἐπίσης $\delta(\lambda x) = \frac{1}{\lambda}\delta(x)$, $\lambda > 0$, γιατί

$$\delta(\lambda x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda x\xi}\, d\xi = \frac{1}{\lambda}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix\lambda\xi}\, d(\lambda\xi) =$$

$$= \frac{1}{\lambda}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixt}\, dt = \frac{1}{\lambda}\delta(x).$$

Ἀκόμα ἰσχύει ἡ σχέση $x\delta(x) = 0$. (34)

Πραγματικά:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) x f(x)\, dx = x f(x)\Big|_{x=0} = 0 f(0) = 0.$$

Ἡ παράγωγος τῆς δ-συναρτήσεως πού τήν συμβολίζουμε μέ δ′ ὁρίζεται σάν τό γραμμικό συναρτησοειδές $\delta'_x\{f\} = -f'(x)$ ὅπου $f \in D_{\delta'_x}$

Καί γενικά γιά τήν m-παράγωγο ἰσχύει ἡ σχέση:

$\delta_x^{(m)}\{f\} = (-1)^m f^{(m)}(x)$, $\forall f \in D_{\delta_x^{(m)}}$

Ἰσχύει ἀκόμα: $x\delta'(x) = -\delta(x)$ (35)

Πράγματι ἔχουμε: $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, x\, \delta'(x)\, dx = -(xf(x))'\Big|_0 =$

$$= -xf'(x) - f(x)\Big|_0 = -f(0) = -\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x) f(x)\, dx.$$

Σ' αὐτό τό συμπέρασμα μπορεῖ νά καταλήξει κανείς καί μέ στοιχειώδεις πράξεις.

Γενικά γιά τήν συνάρτηση δ μποροῦμε νά ἐργαζόμαστε μέ στοιχειώδεις πράξεις ὁλοκληρώσεως καί παραγωγίσεως. Μόνο γινόμενα συναρτήσεων δ δέν ὁρίζονται.

Ἡ δ-συνάρτηση στό χῶρο τῶν 3 διαστάσεων εἶναι

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$$



καί ἰσχύει:

$$\int_V f(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\, dV = \begin{cases} f(\vec{r}_0) & \text{ἄν } \vec{r}_0 \in V \\ 0 & \text{ἄν } \vec{r}_0 \notin V. \end{cases}$$

Ἐπειδή ἡ δ-συνάρτηση εἶναι σφαιρικῶς συμμετρικό συναρτησοειδές, δίνουμε τήν ἔκφρασή της σέ πολικές συντεταγμένες:

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r^2}\delta(r).$$

Δίνουμε ἀκόμα μερικές μορφές τῆς δ-συναρτήσεως, ὅπως τό ὅριο συνηθισμένων συναρτήσεων (συναρτησοειδῶν).

1. $\delta = \lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x)$

*2. $\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} y_\varepsilon(x)$, ὅπου $y_\varepsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & , |x| < \varepsilon \\ 0 & , |x| > \varepsilon \end{cases}$

*3. $\delta(x) = \lim_{a\to 0} y_a(x)$, ὅπου $y_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-(x/a)^2}$

*4. $\delta(x) = \lim_{a\to 0} y_a(x)$, $y_a(x) = \frac{1}{2a} e^{-|x|/a}$, $a > 0$.

* $\lim_{k\to\infty}(\sin^2 kx/kx^2)\frac{1}{\pi k}$

* Οἱ παραστάσεις 2, 3, 4 εἶναι παραστάσεις τῆς δ-συναρτήσεως σάν τό ὅριο ὁλοκληρωτικῶν πυρήνων:

$$\int \delta(x-y) f(y)\, dy = \lim_{\varepsilon\to 0}\int \delta_\varepsilon(x-y) f(y)\, dy. \quad (36)$$

(Ὁ ὁλοκληρωτικός γραμμικός μετασχηματισμός, ὅπως εἶναι γνωστό ὁρίζεται ἀπό τήν σχέση:

$\psi'(x) = \int A(x,y)\psi(y)\, dy$.

καί ἀποτελεῖ γενίκευση τῆς $\psi_i' = \sum_k A_{ik}\psi_k$

Ἡ συνάρτηση $A(x,y)$ λέγεται ὁλοκληρωτικός πυρήνας)

Τά παραπάνω ὅρια θά τά παίρνουμε μετά τήν ὁλοκλήφωση :

$$\delta\{f\} = \lim \int \delta_\varepsilon(x) f(x)\, dx \qquad (37)$$

Ἡ δ-συνάρτηση μπορεῖ νά χρησιμοποιειθεῖ γιά νά λύσει προβλήματα τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς, π.χ. μποροῦμε μέ αὐτήν νά παραστήσουμε τήν πυκνότητα ὑλικοῦ σημείου κ.λ.π.

Ἄ σ κ η σ η.

Μέ τήν βοήθεια τῆς δ-συναρτήσεως νά δειχτεῖ ἡ σχέση:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp ,$$

ὅπου $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx} \tilde{\varphi}(p)\, dp$ .

Ἀπάντηση: Ξεκινᾶμε ἀπό τό πρῶτο μέλος:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\psi^*(x)\, dx \qquad (38)$$

Ἀλλά εἶναι:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx} \tilde{\varphi}(p)\, dp$$

καί

$$\psi^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip'x} \tilde{\varphi}(p')\, dp'$$

Τά ἀντικαθιστᾶμε στή σχέση (38) καί ἔχουμε:

$$(38) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)\, e^{ipx}\, dp \, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p')\, e^{-ip'x}\, dp' \right] dx =$$



$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)\, dp \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}^*(p')\, dp' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x}\, dx \qquad (39)$$

Χρησιμοποιοῦμε τήν παρακάτω ἔκφραση τῆς δ-συναρτήσεως:

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

ὁπότε ἡ (39) γίνεται:

$$(39) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)\, dp \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}^*(p')\, dp' \cdot \delta(p-p') \qquad (40)$$

Βάσει τῆς γνωστῆς σχέσεως:

$$f(x_0) = \int \delta(x-x_0) f(x)\, dx$$

ἡ σχέση (40) γίνεται:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)\, dp\, \tilde{\varphi}^*(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp$$

Λύση διαφορικῶν ἐξισώσεων μέ τήν μέθοδο ἀνάλυσης κατά FOURIER

Ὅπως εἴδαμε στήν προηγούμενη παράγραφο "μηδενισμός μιᾶς συναρτήσεως συνεπάγεται τό μηδενισμό τοῦ μετασχηματισμοῦ FOURIER καί ἀντιστρόφως."

$$\Psi(\vec{x}) \equiv 0 \longleftrightarrow \Psi_F(\vec{p}) \equiv 0$$

Θά χρησιμοποιήσουμε τήν πρόταση αὐτή στή μέθοδο λύσεως διαφορικῶν ἐξισώσεων μέ ἀνάλυση Fourier. Ἔστω ὅτι $\Psi(\vec{x})$ εἶναι μία λύση τῆς γραμμικῆς διαφορικῆς ἐξισώσεως,

$$\mathbb{P}_\nu(-i\vec\nabla)\,\psi(\vec x) = \rho(\vec x) \qquad (41)$$

ὅπου $\mathbb{P}_\nu(-i\vec\nabla)$ πολυώνυμο ν βαθμοῦ ὡς πρός $-i\vec\nabla$, μέ σταθερούς συντελεστές καί $\rho(\vec x)$ (ὑποτιθέμένη) γνωστή συνάρτηση. Ὁ τελεστής $\mathbb{P}_\nu(-i\vec\nabla)$ δρώντας στή συνάρτηση $\psi(\vec x)$, μεῖον τή συνάρτηση $\rho(\vec x)$ μᾶς δίνει τή μηδενική συνάρτηση. Ἄρα καί ὁ μετασχηματισμός $\{\mathbb{P}_\nu(-i\vec\nabla)\psi\}_F(\vec p) - \rho_F(\vec p)$ πρέπει νά εἶναι μηδέν

τη ὑποτιθέ- μενη των δρα- στη

$$\mathbb{P}_\nu(-i\vec\nabla)\psi(\vec x) - \rho(\vec x) = 0 \longleftrightarrow \mathbb{P}_\nu(\vec p)\psi_F(\vec p) - \rho_F(\vec p) = 0$$

$$\Longrightarrow \mathbb{P}_\nu(\vec p)\psi_F(\vec p) = \rho_F(\vec p).$$

Ἡ τελευταία ἰσότητα

$$\mathbb{P}_\nu(\vec p)\,\psi_F(\vec p) = \rho_F(\vec p) \qquad (42)$$

εἶναι μιά ἀλγεβρική ἐξίσωση καί μπορεῖ συνήθως νά μᾶς δώσει τό $\psi_F(\vec p)$ εὔκολα. Γυρίζοντας τέλος στήν (27) ἔχουμε καί τή ζητούμενη λύση $\psi(\vec x)$,

$$\psi(\vec x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_F(\vec p)\,\frac{e^{i\vec p\vec x}}{(2\pi)^{\nu/2}}\,dV(\vec p).$$

Χρησιμοποιώντας τή γενική λύση τῆς (42) ἔχουμε τή γενική λύση τῆς (41). Μέ κατάλληλο συνδυασμό λύσεων τῆς (41) πετυχαίνουμε νά βροῦμε λύση πού ἱκανοποιεῖ τίς συνοριακές συνθῆκες ἑνός δοσμένου προβλήματος. Θά περιγράψουμε τήν ἐφαρμογή τῆς μεθόδου μέ παραδείγματα:

(α) Λύση τῆς διαφορικῆς ἐξισώσεως:

$$\vec\nabla^2\psi(\vec x) = -Q\,\delta(\vec x),$$

σέ τρεῖς διαστάσεις, ὅπου $\delta(\vec x)$ εἶναι ἡ συνάρτηση DIRAC σέ τρεῖς διαστάσεις. Στήν προκειμένη

— ?



περίπτωση, ν=2 $\quad \mathbb{P}_\nu(\vec p) = \cancel{-}\vec p^2$ καί $\delta_F(\vec p) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$.

ἐνῶ $\quad \psi_F(\vec p) = \dfrac{Q}{(2\pi)^{3/2}\,|\vec p|^2}$ καί $\psi(\vec x) = \dfrac{Q}{4\pi|\vec x|}$.

(β) Λύση τῆς διαφορικῆς ἐξισώσεως:

$$-\vec\nabla^2\psi(\vec x) + \mu^2\psi(x) = Q\,\delta(\vec x).$$

ἐδῶ

$$\psi_F(\vec p) = \frac{1}{\vec p^2+\mu^2}\,\frac{Q}{(2\pi)^{3/2}} \quad \text{καί} \quad \psi(\vec x) = \frac{Q\,e^{-\mu|\vec x|}}{4\pi|\vec x|}$$

(γ) Ὁμοίως νά λυθεῖ καί ἡ διαφορική ἐξίσωση

$$(\partial_t^2 - \vec\nabla^2)\,\psi(\vec x,t) = -m^2\,\psi(\vec x,t)$$

Ἀσκήσεις

1. Νά ἀναλυθοῦν κατά FOURIER οἱ συναρτήσεις:

(α) $\dfrac{e^{-(x-x_0)^2/a^2}}{a(\pi)^{1/2}}$ $\quad$ (β) $\delta(x-x_0)$ ὅπου δ ἡ συνάρτηση DIRAC

2. Νά δειχτεῖ ὅτι ὁ μετασχηματισμός FOURIER τῆς $\dfrac{1}{(2\pi)^{1/2}}e^{iax}$ εἶναι $\delta(P-a)$

3. Νά δειχτεῖ ἡ ταυτότητα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_F(P)|^2\,dP.$$

4. Ἄν $\psi_F(P)$ εἶναι ὁ μετασχηματισμός FOURIER τῆς συναρτήσεως $\psi(x)$, δεῖξτε ὅτι ὁ μετασχηματισμός FOURIER τῆς $\frac{d}{dx}\psi(x) \equiv \psi'(x)$ εἶναι

$$\left\{\frac{d\psi(x)}{dx}\right\}_F = (\psi')_F(P) = iP\,\psi_F(P).$$

Γενικώτερα ἂν $\mathbb{P}_\nu(-i\vec{\nabla})$ εἶναι ὁ γραμμικός τελεστής πολυώνυμο ν βαθμοῦ ὡς πρός τό $-i\vec{\nabla}$ καί $\psi(\vec{x})$ μιά ν φορές παραγωγίσιμη συνάρτηση ὡρισμένες στό πραγματικό χῶρο τῶν ν διαστάσεων τότε

$$\left\{\mathbb{P}_\nu(-i\vec{\nabla})\psi\right\}_F(\vec{P}) = \mathbb{P}_\nu(\vec{P})\,\psi_F(\vec{P})$$

5. Δεῖξτε ὅτι, ἄν ἡ $\psi(\vec{x})$ ἱκανοποιεῖ τή διαφορική ἐξίσωση,

$$(\vec{\nabla}^2 - \partial_t^2)\psi(\vec{x},t) - \mu^2\psi(\vec{x},t) = 0.$$

τότε ἡ $\psi_F(\vec{P})$ ἱκανοποιεῖ ἀλγεβρική ἐξίσωση,

$$(\omega^2 - \vec{P}^2 - \mu^2)\,\psi_F(\vec{P},\omega) = 0.$$

Γενικώτερα ἄν ἡ $\psi(x)$ ἱκανοποιεῖ τή διαφορική ἐξίσωση $\mathbb{P}_\nu(-i\vec{\nabla})\psi(\vec{x}) = 0$ τότε

$$\mathbb{P}_\nu(\vec{P})\,\psi_F(\vec{P}) = 0.$$



# ΚΕΦΑΛΑΙΟΝ IV

## ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΘΕΜΕΛΙΩΣΗ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

### §1. Ἀξιώματα Κβαντομηχανικῆς

Σ' αὐτό τό κεφάλαιο θά προσπαθήσουμε νά διατυπώσουμε σέ μιά αὐστηρότερη μαθηματική γλῶσσα, τίς βασικές ἔννοιες γιά τήν κβαντομηχανική περιγραφή τῶν δυναμικῶν συστημάτων καί φυσικῶν μεγεθῶν, ὅπως ἐπίσης καί τά ἀξιώματα φυσικῆς ἑξήγησης, πού θά συνδέουν τίς βασικές ἔννοιες μέ τό πείραμα. Τέλος θά ἀσχοληθοῦμε, ἀξιωματικά, μέ τόν δυναμικό νόμο πού θά περιγράφει τήν χρονική ἐξέλιξη ἑνός κβαντομηχανικοῦ συστήματος.

Τά ἀξιώματα τῆς Κβαντομηχανικῆς δέν εἶναι τόσο εὔκολο νά τά καταλάβεις ὅπως τά ἀξιώματα τῆς Κλασσικῆς Μηχανικῆς. Αὐτά ἀποτελοῦν ἀφαίρεση τῶν γενικῶν ἰδιοτήτων καί τῆς φυσικῆς ἑξήγησης τῆς ἐξισώσεως τοῦ Schrödinger πού γνωρίσαμε προηγουμένως. Τελικός κριτής ὅλων αὐτῶν, ὅπως καί κάθε φυσικῆς θεωρίας, εἶναι ἡ συνεχής πειραματική ἐπαλήθευση ὅλων τῶν λογικῶν συμπερασμάτων πού βγαίνουν ἀπό αὐτά.

ΑΞΙΩΜΑ 1: "Οἱ καταστάσεις ἑνός δυναμικοῦ συστήματος ἀντιστοιχοῦν ἀμφιμονοσήμαντα (μέ μιά αὐθαίρετη φάση) μέ τά μοναδιαῖα διανύσματα $|\psi\rangle$ ἑνός χώρου Hilbert H ".

Τό ἀξίωμα αὐτό ἐκφράζει κυρίως τήν γενική ἀρχή τῆς ἐπαλληλίας, πού χαρακτηρίζει τίς κυματικές ἐκδηλώσεις ὅλων τῶν κβαντομηχανικῶν συστημάτων. Σύμφωνα μέ τήν ἀρχή τῆς ἐπαλληλίας τῶν καταστάσεων, δύο ἤ περισσότερες καταστάσεις ἀθροιζόμενες ὁδηγοῦν σέ μιά νέα κατάσταση τοῦ συστήματος. Ἑπομένως εἶναι φυσικό νά ὑποθέσουμε ὅτι τό σύνολο τῶν καταστάσεων ἀποτελεῖ ἕνα διανυσματικό χῶρο.

Θυμίζουμε ἐδῶ τό χαρακτηριστικό πείραμα ἀναλύσεως καί συνθέσεως πολωμένου φωτός μέ κρύσταλλο τουρμαλίνου. Ἄν τό ἐπίπεδο πολώσεως τοῦ φωτός πού προσπίπτει εἶναι κάθετο πρός τόν ὀπτικό ἄξονα τοῦ κρυστάλλου, τό φῶς ἀπορροφᾶται. Ἄν τό φῶς εἶναι πολωμένο παράλληλα πρός τόν ὀπτικό ἄξονα τοῦ κρυστάλλου, διέρχεται.

Ἔστω $\alpha$ ἡ γωνία μεταξύ τοῦ ἐπιπέδου πολώσεως καί ὀπτικοῦ ἄξονα τοῦ κρυστάλλου, ἡ ἔνταση τοῦ διερχομένου φωτός εἶναι $\simeq E^2 \sin^2\alpha$.

Κατά τήν κλασσική εἰκόνα $\vec{E} = E_x \hat{e}_x + E_y \hat{e}_y$, ὅπου $E_x = E\cos a$, $E_y = E\sin a$ καί $E = |\vec{E}|$, ἡ ἔνταση τοῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ πεδίου τοῦ διερχομένου φωτός εἶναι $\vec{E} = E_y \hat{e}_y$ καί ἡ ἔνταση τοῦ φωτός εἶναι ἀνάλογη τοῦ $E_y^2 = E^2 \sin^2 a$.

Πῶς μποροῦμε νά ἐξηγήσουμε αὐτό τό φαινόμενο διατηρώντας, κβαντομηχανικά, τήν ἀτομική ὑπόσταση κάθε ἑνός φωτονίου;

Κβαντομηχανικά πρέπει τό φωτόνιο, ἡ φυσική κατάσταση $\psi_{\vec{E}}$, (ὄχι τό ἠλεκτρικό πεδίο), νά ἀναλυθεῖ σέ ἄθροισμα δύο καταστάσεων. Ἔστω ὅτι ἡ $\psi_x$ παριστάνει τήν κατάσταση ἑνός φωτονίου παράλληλα πρός τόν ὀπτικό ἄξονα καί $\psi_y$ παριστάνει τήν κατάσταση ἑνός φωτονίου πολωμένου κάθετα πρός τόν ὀπτικό ἄξονα.

Τότε $\psi_{\vec{E}} = \cos a\, \hat{e}_x + \sin a\, \hat{e}_y$.



Γιά τήν κβαντομηχανική ἐξήγηση τοῦ φαινομένου χρειαζόμαστε καί μιά ἄλλη παραδοχή: ὅτι τά ἐσωτερικά γινόμενα
$|(\hat{e}_x, \psi_{\vec{E}})|^2 = \cos^2 a$ καί $|(\hat{e}_y, \psi_{\vec{E}})|^2 = \sin^2 a$,
παριστάνουν τήν πιθανότητα νά βρεθεῖ τό φωτόνιο στή μιά ἤ τήν ἄλλη κατάσταση. Ἡ γενίκευση τοῦ ὁριστικά θετικοῦ, (ἀπό τή φυσική ἐξήγησή του σάν πλάτος πιθανότητας), ἐσωτερικοῦ γινομένου στόν χῶρο τῶν ἀπείρων διαστάσεων, ὁδηγεῖ στήν ὑπόθεση τοῦ χώρου Hilbert.

ΑΞΙΩΜΑ 2. « Τά φυσικά μεγέθη ἀντιστοιχοῦν ἀμφιμονοσήμαντα σέ αὐτοσυζυγεῖς τελεστές στό H ».

Ἡ ἀνάγκη τοῦ δεύτερου ἀξιώματος φαίνεται ἀπό τήν παρακάτω παρατήρηση. Ὅταν στό μικρόκοσμο μετρήσουμε ἕνα φυσικό μέγεθος, ἀλλάζουμε, γενικά, τήν κατάσταση τοῦ συστήματος, δηλαδή ἀπεικονίζουμε ἕνα ἀρχικό διάνυσμα τοῦ χώρου H σ' ἕναν ἄλλο. Οἱ ἀπεικονίσεις αὐτές εἶναι γραμμικές, δηλαδή διατηροῦν τήν ἐπαλληλία τῶν καταστάσεων. Αὐτό φανερώνει τή συσχέτιση τῶν φυσικῶν μεγεθῶν μέ γραμμικούς τελεστές τοῦ χώρου Hilbert.

Εἰδική περίπτωση μετρήσεως ἀναφέρθηκε παραπάνω στό «ΝΑΙ-ΟΧΙ» πείραμα (YES-NO experiment) τῆς διελεύσεως ἤ ὄχι φωτονίου μέσα ἀπό κρύσταλλο πολώσεως. Ὁ κρύσταλλος ἤ θά ἀφήσει τό φωτόνιο νά περάσει ἤ θά τό ἀπορροφήσει. Ὥστε τό ἀποτέλεσμα τῆς μετρήσεως αὐτῆς εἶναι μιά γραμμική ἀπεικόνιση μιᾶς καταστάσεως στόν ἑαυτό της ἤ στό μηδενικό διάνυσμα.

Ἡ παραπέρα ἀπαίτηση αὐτοσυζυγίας τῶν τελεστῶν – παρατηρήσιμων μεγεθῶν – θὰ δικαιολογηθεῖ ὅταν θὰ συζητήσουμε τὸ τρίτο ἀξίωμα.

ΑΞΙΩΜΑ 3. (Τῆς φυσικῆς ἐξηγήσεως).

«Ἂν τὸ δυναμικὸ σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $|\psi)$ ἡ μέση τιμὴ $\bar{A}$, τοῦ φυσικοῦ μεγέθους A θὰ εἶναι: $\bar{A}_\psi = (\psi, A\psi)$.» (1)

Ἐπειδὴ τ' ἀποτελέσματα τῶν μετρήσεων θὰ εἶναι πραγματικοὶ ἀριθμοί, πρέπει οἱ τελεστὲς A ποὺ ἀντιστοιχοῦν σὲ φυσικὰ μεγέθη νὰ εἶναι τουλάχιστον ἑρμιτιανοί, (βλέπε, κεφ. III, § 4.7) καὶ ἀκριβέστερα αὐτοσυζυγεῖς.

Θυμίζουμε ὅτι ἡ μέση τιμὴ $\bar{A}$ ἑνὸς φυσικοῦ μεγέθους A, ὅταν τὸ δυναμικὸ σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $|\psi)$ ὁρίζεται ὡς ἑξῆς: Παρασκευάζουμε τὸ δυναμικὸ σύστημα n φορὲς στὴν ἴδια κατάσταση $|\psi)$ καὶ μετρᾶμε κάθε φορὰ τὸ μέγεθος A.

Ἔστω $a_i$ τὸ ἀποτέλεσμα τῆς μετρήσεως τοῦ A κατὰ τὸ $i$ πείραμα, τότε,

$$\bar{A} \equiv \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum a_i \quad \text{ἤ} \quad \bar{A} = \mathop{S}_{a} a\,\rho(a)\,, \qquad (2)$$

ὅπου $\rho(a)$ εἶναι ἡ πιθανότητα (συχνότητα), κατὰ τὴν ὁποία τὸ ἀποτέλεσμα τῆς μετρήσεως τοῦ A στὸ $|\psi)$ εἶναι ὁ ἀριθμὸς $a$. Σύμφωνα μὲ τὰ παραπάνω, οἱ προβλέψεις τῆς Κβαντομηχανικῆς, ἔχουν στατιστικὸ χαρακτῆρα. Μόνο οἱ μέσες τιμὲς τῶν μετρήσεων προβλέπονται ἀπὸ τὴν θεωρία μὲ ἀπόλυτη ἀκρίβεια (determinism).

Τὸ ἀποτέλεσμα κάθε μιᾶς μετρήσεως προβλέπεται



μόνο στατιστικά, μὲ μιὰ διασπορὰ ἀβεβαιότητας γύρω ἀπὸ τὴ μέση τιμή. Σὲ ἀναλογία μὲ τὴν Κλασσικὴ Στατιστικὴ Μηχανικὴ ποὺ ὁρίζουμε τὴ διασπορὰ ἢ μέτρο ἀβεβαιότητας ἑνὸς μεγέθους A μὲ τὸ $\sqrt{(\Delta A)^2}$, ὅπου

$$(\Delta A)^2 = \int_a (a-\bar{A})^2 \rho(a)\, da\,, \qquad (3)$$

ὁρίζουμε κβαντομηχανικὰ τὴν διασπορὰ ἑνὸς μεγέθους, ὅταν τὸ θεωρούμενο σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $\psi$, μὲ τό:

$$(\Delta A)^2_\psi = (A-\bar{A}_\psi)^2_\psi = (\psi, A^2\psi) - (\psi, A\psi)^2 = \overline{A^2} - \bar{A}^2 \qquad (4).$$

Ἂς θεωρήσουμε τώρα ἕναν τυχαῖο αὐτοσυζυγῆ τελεστὴ A.

Σύμφωνα μὲ τὸ Θεμελιῶδες Θεώρημα περὶ αὐτοσυζυγῶν τελεστῶν, κάθε αὐτοσυζυγὴς τελεστὴς A ἀναλύεται σὲ ἄθροισμα προβολικῶν τελεστῶν, $A = \int_a a|a)(a|$, ποὺ μετριῶνται μὲ πειράματα «ΝΑΙ – ΟΧΙ». Τὸ σύνολο τῶν ἰδιοδιανυσμάτων $|a)$ τοῦ A, $A|a) = a|a)$, ἀποτελεῖ πλήρη ὀρθοκανονικὴ βάση.

$$\int_a |a)(a| = I\,, \quad (a|a') = \delta_{aa'}\,. \qquad (5)$$

Ἡ ἀναπάρασταση τῶν διανυσμάτων $|\psi)$ τοῦ χώρου Hilbert, μὲ τὶς συνιστῶσες τους $\psi(a)$ ὡς πρὸς τὴ βάση αὐτή, ἀποτελεῖ μιὰ φυσικὴ ἀναπαράσταση τοῦ χώρου Hilbert μὲ τὶς συναρτήσεις $\psi(a)$ ποὺ ὁρίζονται πάνω στὸ φάσμα τοῦ τελεστῆ A καὶ ἱκανοποιοῦν τὴ σχέση $\int_a |\psi(a)|^2 < \infty$. Οἱ συναρτήσεις ψ(α) λέγονται κυματικές συναρτήσεις στην ἀναπαράσταση τοῦ χώρου - τοῦ φάσματος - τοῦ τελεστὴ Α. Προφανῶς ὑπάρχουν ἄπειρες βάσεις. Ἡ Μετάβαση ἀπό τὴ μιά βάση στὴν ἄλλη πετυχαίνεται μέ ἕνα μοναδιαῖο (unitary) μετασχηματισμό.

Γιά νά βροῦμε τὴ μέση τιμή τοῦ Α ἄς χρησιμοποιήσουμε τὴν ἀναπαράσταση τοῦ Α στὴ φυσική του βάση $\{|a)\}$. Στὴ βάση αὐτή ἡ μέση τιμή τοῦ $A=\int_\alpha \alpha|a)(a|$ στό $|\psi)$ εἶναι,

$$\bar{A} = (\psi, A\psi) = (\psi, \int_\alpha \alpha|a)(a|\psi)) = \int_\alpha \alpha(\psi|a)(a|\psi)\,da =$$

$$= \int_\alpha \alpha|(a|\psi)|^2 da = \int_\alpha \alpha|\psi(a)|^2 da \;, \qquad (6)$$

ὅπου ἔγινε χρήση τῶν ἰδιοτήτων (5),

Σύγκριση τῆς σχέσεως (6) μέ τὴν (2) δείχνει ὅτι τά $|\psi(a)|^2$ εἶναι ἡ πιθανότητα νά προκύψει σάν ἀποτέλεσμα μετρήσεως ἡ ἰδιοτιμή α ὅταν τό σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $|\psi)$.

Παρατηροῦμε ὅτι ἡ ὁλική πιθανότητα ἰσοῦται πραγματικά μέ τὴν μονάδα $\int_a |\psi(a)|^2 = (\psi,\psi) = 1$, λόγω τῆς πληρότητας (5) καί τοῦ πρώτου ἀξιώματος. Ὥστε τό ἀξίωμα 3 εἶναι συνεπές πρός τό 1. Ἡ πιθανότητα νά βροῦμε σάν ἀποτέλεσμα μετρήσεως τιμή ποὺ δέν βρίσκεται στό φάσμα τοῦ παρατηρήσιμου μεγέθους εἶναι μηδενική.

Ἡ ἀπαίτηση πραγματικῶν τιμῶν τῶν φυσικῶν μεγεθῶν καί ἡ ἀπαίτηση τῆς πληρότητας τῶν φυσικῶν ἰδιο-



καταστάσεων, κάνουν φανερή τὴν ὑπόθεση ὅτι οἱ τελεστές ποὺ ἀντιστοιχοῦν σέ μετρήσιμα φυσικά μεγέθη, πρέπει νά εἶναι αὐτοσυζυγεῖς.

## § 2. Ἀπροσδιοριστία τῆς Κβαντομηχανικῆς

Ἀπό ὅσα εἴπαμε μέχρι τώρα, ἡ Κβαντομηχανική μοιάζει βέβαια μέ τὴν Κλασσική Στατιστική Μηχανική, ὡστόσο ὑπάρχει μιά βασική διαφορά. Στὴν Κλασσική Μηχανική παρουσιάζεται διασπορά μόνο ὅταν τό σύστημα εἶναι ἕνα στατιστικό σύνολο, (στατιστικό ἄθροισμα καθαρῶν καταστάσεων). Στὴν μέτρηση φυσικῶν μεγεθῶν κατά τὴν Κβαντομηχανική ὑπάρχει πάντα διασπορά ἀκόμα καί γιά καθαρές καταστάσεις, ἐκτός ἄν τύχη ἡ κατάσταση ψ νά εἶναι χαρακτηριστική κατάσταση τοῦ μετρουμένου μεγέθους, ὁπότε ἡ διασπορά στό $|\psi)$ γιά τό μέγεθος αὐτό θά εἶναι μηδέν. Ἀλλά θά ὑπάρχει πάντα διασπορά γιά τὴν μέτρηση ἄλλων μεγεθῶν. Αὐτό τό παρατηροῦμε χαρακτηριστικά, στό πρόβλημα τῆς μετρήσεως περισσότερων τοῦ ἑνός μεγεθῶν.

Ἔστω ὅτι ἐπιθυμοῦμε τὴν μέτρηση δύο φυσικῶν μεγεθῶν Λ καί Μ τέτοιων ὥστε ὁ μεταθέτης $[\Lambda, M] = -ic \neq 0$

(Ὁ c προφανῶς εἶναι Ἑρμιτιανός).

Ὑπάρχουν πάντα φυσικά μεγέθη - γραμμικοί τελεστές - Λ καί Μ μή μεταθετοί, ὅταν ὁ διανυσματικός χῶρος τῶν φυσικῶν καταστάσεων εἶναι $\geq 2$. Ἄν ὁ χῶρος τῶν καταστάσεων ἦταν διαστάσεων $<2$ ἡ Θεωρία δέν θά εἶχε φυσικό περιεχόμενο, ἀφοῦ δὲν θὰ μποροῦσε ν' ἀπαντήσει καταφατικὰ (ΝΑΙ) ἢ ἀρνητικὰ (ΟΧΙ), οὔτε σὲ μιὰ ἐρώτηση ποὺ τὴν θέτουμε μὲ τὸ πείραμα.

Θὰ δείξουμε ὅτι ἂν τὸ σύστημα βρίσκεται στὴν κατάσταση $|\psi)$ τότε τὸ γινόμενο ἀβεβαιότητας $(\Delta\Lambda)^2_\psi (\Delta M)^2_\psi$ τῶν μετρησίμων μεγεθῶν Λ καὶ Μ ἀντίστοιχα, εἶναι μεγαλύτερο ἢ ἴσο τοῦ $\frac{1}{4}|(\psi, c\psi)|^2$.

Χωρὶς νὰ χάσουμε τίποτα ἀπὸ τὴν γενικότητα, ὑποθέτουμε ὅτι $(\bar\Lambda)_\psi = 0$, $(\bar M)_\psi = 0$ ἄλλιῶς θεωροῦμε ἀντὶ τῶν Λ, Μ τοὺς τελεστὲς $\Lambda - \bar\Lambda_\psi$, $M - \bar M_\psi$.

<u>Ἀπόδειξη</u>: Ἔχουμε

$$0 \le \|(\Lambda + ixM)|\psi)\|^2 = ((\Lambda + ixM)\psi, (\Lambda + ixM)\psi) =$$
$$= (\psi, \Lambda^2\psi) + x^2(\psi, M^2\psi) + ix(\psi, (M\Lambda - \Lambda M)\psi) =$$
$$= (\psi, M^2\psi)x^2 + (\psi, c\psi)x + (\psi, \Lambda^2\psi).$$

Ἀπὸ τὴν θετικότητα τῆς πραγματικῆς αὐτῆς τετραγωνικῆς μορφῆς (οἱ συντελεστὲς εἶναι ὅλοι πραγματικοὶ ἀριθμοί, ὡς μέσες τιμὲς ἑρμιτιανῶν τελεστῶν) — σύμφωνα πρὸς γνωστὸ θεώρημα τῆς στοιχειώδους Ἄλγεβρας — βγάζουμε ὅτι:

$$\bar\Lambda^2_\psi \bar M^2_\psi \ge \frac{1}{4}(\bar c)^2_\psi$$

ἢ

$$(\Delta\Lambda)^2_\psi (\Delta M)^2_\psi \ge \frac{1}{4}(\bar c)^2_\psi$$

$$(\Delta\Lambda)^2_\psi (\Delta M)^2_\psi = ((\psi, \Lambda^2\psi) - (\psi, \Lambda\psi)^2)((\psi, M^2\psi) - (\psi, M\psi)^2) \ge$$

$$\ge \frac{1}{4}(\psi, c\psi)^2, \quad \text{ὅ.ἔ.δ.} \qquad (8)$$

Ἂς θεωρήσουμε τώρα σὰν παράδειγμα τὴν μέτρηση τῶν τελεστῶν θέσεως $\mathbb{X}$ καὶ ὁρμῆς $\mathbb{P}$.
Οἱ τελεστὲς αὐτοὶ ἱκανοποιοῦν τὴν σχέση



$$[\mathbb{P}, \mathbb{X}] = -i\hbar. \qquad (9)$$

Ἑπομένως $(\Delta x)^2_\psi (\Delta p)^2_\psi \ge \frac{\hbar}{4}$, (10)

* πότε ισχύει η ισότητα

δηλαδὴ προκύπτουν οἱ γνωστὲς σχέσεις ἀπροσδιοριστίας, (ἀβεβαιότητας), μετρήσεως συζυγῶν κανονικῶν μεταβλητῶν.

Γιὰ τὴν εἰδικὴ περίπτωση ποὺ $[M, \Lambda] = 0$ δὲν ὑπάρχει ὁ περιορισμὸς (8) καὶ θὰ εἶναι δυνατὴ ἡ ὕπαρξη καταστάσεων $|\psi)$ γιὰ τὶς ὁποῖες $(\Delta\Lambda)^2 = 0$ καὶ $(\Delta M)^2 = 0$. Ἐξ' ἄλλου σύμφωνα μὲ προηγούμενη παρατήρηση, μηδενικὴ διασπορὰ σημαίνει ὅτι βρισκόμαστε σὲ ἰδιοκατάσταση. Αὐτὸ δείχνει ὅτι ὑπάρχουν καταστάσεις $|\psi)$ ποὺ εἶναι κοινὲς ἰδιοκαταστάσεις τῶν Λ καὶ Μ. Πραγματικὰ ἂν δύο φυσικὰ μεγέθη Λ καὶ Μ εἶναι μεταθετὰ $[\Lambda, M] = 0$ καὶ τὸ φάσμα τοῦ Λ δὲν εἶναι ἐκφυλισμένο, θὰ δείξουμε ὅτι κάθε χαρακτηριστικὸ διάνυσμα $|\lambda)$ τοῦ Λ εἶναι χαρακτηριστικὸ διάνυσμα καὶ τοῦ Μ. Ὑποθέτουμε ὅτι οἱ τελεστὲς ποὺ θεωροῦμε ἔχουν διακεκριμένο φάσμα. Ἔστω $|\lambda)$ ἰδιοδιανύσματα τοῦ Λ μὲ ἰδιοτιμὴ λ. Τότε

$$M\Lambda|\lambda) = \lambda\{M|\lambda)\} = \Lambda\{M|\lambda)\},$$

δηλαδὴ τὸ $M|\lambda)$ εἶναι ἰδιοδιάνυσμα τοῦ Λ μὲ τὴν ἴδια ἰδιοτιμὴ λ. Ἐξ' ἄλλου ἐπειδὴ ὑποθέσαμε ὅτι τὸ φάσμα τοῦ Λ δὲν εἶναι ἐκφυλισμένο, τὸ $M|\lambda)$ θὰ εἶναι πολλαπλάσιο τοῦ $|\lambda)$:

$$M|\lambda) = \mu|\lambda).$$

Ἔτσι δείξαμε ὅτι κάθε ἰδιοδιάνυσμα $|\lambda)$ τοῦ Λ εἶναι ἰδιοδιάνυσμα καὶ τοῦ Μ, δηλαδὴ

$$M|\lambda) = \mu(\lambda)|\lambda)$$

Τό σύνολο τῶν κοινῶν αὐτῶν ἰδιοδιανυσμάτων, (δηλαδή ὅλων τῶν ἰδιοδιανυσμάτων τοῦ $\Lambda$), εἶναι μιά πλήρης βάση. Ἔτσι, ὁ τύπος $M|\lambda) = \mu(\lambda)|\lambda)$ λέει ὅτι ὅταν τά παρατηρήσιμα μεγέθη $M$ καί $\Lambda$ εἶναι μεταθετά καί τό φάσμα τοῦ $\Lambda$ εἶναι ἁπλό, τότε ὁ $M$ εἶναι συνάρτηση τοῦ $\Lambda$.

$$M|\psi) = \sum_\lambda M|\lambda)(\lambda|\psi) = \sum_\lambda \mu(\lambda)|\lambda)(\lambda|\psi).$$

ΟΡΙΣΜΟΣ: Λέμε πλῆρες σύνολο ἀμοιβαίως μεταθετῶν φυσικῶν μεγεθῶν, ἕνα σύνολο μεταθετῶν φυσικῶν μεγεθῶν $M_i$ μέ $[M_i, M_j] = 0$, τέτοιο ὥστε τό σύστημα $|\mu_1, \mu_2, \dots)$ ὅλων τῶν κοινῶν ἰδιοδιανυσμάτων $M_i|\mu_1, \mu_2, \dots) = \mu_i|\mu_1, \mu_2, \dots)$ νά εἶναι πλῆρες καί μή ἐκφυλισμένο ὡς πρός τό φάσμα $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_j, \dots)$.

Ἄν τό φάσμα ἑνός τελεστή $A$ δέν εἶναι ἐκφυλισμένο, τότε ὁ $A$ μόνος του εἶναι ἕνα πλῆρες σύστημα μεταθετῶν τελεστῶν. Ἐπίσης τό σύνολο τῶν προβολικῶν τελεστῶν, πού παρουσιάζονται στή φασματική ἀνάλυση τοῦ $A$, εἶναι ἕνα πλῆρες σύνολο μεταθετῶν παρατηρησίμων μεγεθῶν.

Ἄλλα ἁπλά παραδείγματα.

Ἔστω $\{|\varepsilon_n) : n = 1, 2, \dots\}$ μιά ὀρθοκανονική βάση. Οἱ ἁπλοί προβολικοί τελεστές $P_k = |\varepsilon_k)(\varepsilon_k|$, εἶναι ὅπως εἴδαμε στίς προηγούμενες παραγράφους αὐτοσυζυγεῖς μέ τιμές 0 καί 1. Τό ἀντίστοιχο παρατηρήσιμο μέγεθος (observable) εἶναι μιά ἐρώτηση. « Βρίσκεται τό σύστημα στήν κατάσταση $|\varepsilon_k)$; »

Ἡ μέση τιμή $\bar{P}_k$ εἶναι ἡ ἀπάντηση. Ἄν τό σύστημα



μας βρίσκεται στήν κατάσταση $|k)$ ἡ ἀπάντηση εἶναι ΝΑΙ, $\bar{P}_k = 1$. Ἄν τό σύστημα δέν βρίσκεται στήν κατάσταση $|k)$ ἡ ἀπάντηση εἶναι ΟΧΙ, ἡ μέση τιμή $\bar{P}_k = 0$.

Γενικά $\bar{P}_K = \sum_K (\psi|\varepsilon_k)(\varepsilon_k|\psi) = |\psi(k)|^2$, (11)

εἶναι ἡ πιθανότητα τοῦ νά βροῦμε τό σύστημα στήν κατάσταση $|k)$. Γι' αὐτό τό $(\varepsilon_k|\psi) = \psi(k)$ λέγεται πλάτος πιθανότητας.

## §3. ΤΕΛΕΣΤΕΣ ΘΕΣΕΩΣ ΚΑΙ ΟΡΜΗΣ

Ἀπό τούς πιό χρήσιμους τελεστές στήν Κβαντομηχανική, εἶναι οἱ τελεστές θέσεως καί ὁρμῆς τῶν σωματιδίων. Παρακάτω περιοριζόμαστε στό μονοδιάστατο πρόβλημα καί σέ σύστημα ἀπό ἕνα ὑλικό σημεῖο μάζας $m$.

### 1. Τελεστής θέσεως $\mathbb{X}$

Γιά νά ἐξασφαλίσουμε τήν ὁμοιογένεια τοῦ χώρου εἶναι φυσικό νά ἀπαιτήσουμε, ὅτι τό φάσμα τοῦ τελεστή $\mathbb{X}$ συμπίπτει μέ τό συνεχές τῶν πραγματικῶν ἀριθμῶν. Γιά κάθε $-\infty < x < +\infty$ νά ὑπάρχει «ἰδιοσυνάρτηση» $|x)$ τέτοια ὥστε $\mathbb{X}|x) = x|x)$.

Στήν Κλασσική Μηχανική γιά τήν πλήρη περιγραφή τῆς καταστάσεως ἑνός ὑλικοῦ σημείου, χρειάζονται καί ἡ θέση καί ἡ ὁρμή τοῦ ὑλικοῦ σημείου. Στήν Κβαντομηχανική ὅμως λόγω τῆς ἀρχῆς τῆς ἀπροσδιοριστίας, ὅπως εἴδαμε, δέν μποροῦμε ταυτόχρονα νά προσδιορίσουμε θέση καί ὁρμή, ἀλλά ὁ τελεστής τῆς θέσεως θά πρέπει νά εἶναι μόνος του ἕνα πλῆρες σύστημα, (γιά τήν περιγραφή ὑλικοῦ σημείου, χωρίς σπίν, φορτίο κ.τ.λ.). Ὥστε ὑποθέτουμε ὅτι τό φάσμα τοῦ $\mathbb{X}$ εἶναι ἁπλό. Στήν ἀναπαράσταση τοῦ τελεστῆ τῆς Θέσεως, ὁ χῶρος τοῦ Hilbert θά εἶναι γενικά οἱ μιγαδικές συναρτήσεις $(x|\psi) = \psi(x)$, πού ὁρίζονται στόν πραγματικό ἄξονα, πού ἱκανοποιοῦν τήν συνθήκη νορμαλισμοῦ:

$$(\psi,\psi) = \int (\psi|x)\,dx\,(x|\psi) = \int dx\,|\psi(x)|^2 < +\infty .$$

Τό ὁλοκλήρωμα αὐτό τό παίρνουμε κατά Lebesgue, οἱ δέ κυματικές συναρτήσεις ὁρίζονται μέ τήν ἰσοδυναμία τοῦ "ἴσες σχεδόν παντοῦ". Δηλαδή δύο διανύσματα $|\psi_1)$ καί $|\psi_2)$ θεωροῦνται ἴσα, ὅταν οἱ ἀντίστοιχες κυματικές συναρτήσεις $\psi_1(x)$ καί $\psi_2(x)$ εἶναι παντοῦ ἴσες, ἐκτός ἀπό ἕνα σύνολο μηδενικοῦ μέτρου κατά Lebesgue δηλαδή: $|\psi_1) = |\psi_2)$ ἄν $m\{x : \psi_1(x) \neq \psi_2(x)\} = 0$. (12)

Ἄς ζητήσουμε τή λύση τοῦ προβλήματος τῶν ἰδιοτιμῶν τοῦ $\mathbb{X}$.
Ἀπαιτοῦμε $\mathbb{X}|x) = x|x)$ μέ $\int dx\,|x)(x| = 1$ καί $(x|x') = \delta(x-x')$, δηλαδή

$$\psi_{x'}(x) = (x|\psi_{x'}) = (x'|x) = \delta(x-x') \qquad (13)$$

ὅπου $|x) = |\psi_x)$ ἡ ἰδιοσυνάρτηση τοῦ $x$ καί $\delta(x-x')$ ἡ γνωστή συνάρτηση τοῦ Dirac. Ἐπομένως στήν ἀναπαράσταση θέσεων, ἡ ἰδιοσυνάρτηση $|\psi_x) = |x)$ τοῦ τελεστῆ $\mathbb{X}$ ἔχει τήν μορφή μιᾶς συναρτήσεως δ. Ἐξ ἄλλου ὁ τελεστής Θέσεως $\mathbb{X}$ στήν ἀναπαράσταση Θέσεως ἔχει τήν μορφή πίνακα

$$(x''|\mathbb{X}x') = x'\delta(x''-x') \qquad (14)$$

Γενικώτερα

$$(x|\mathbb{X}\psi) = \int (x|\mathbb{X}|x')\,dx'\,(x'|\psi) = \int dx'\,x'\delta(x-x')\psi(x') =$$



$$= x\psi(x),$$

δηλαδή ὁ τελεστής $\mathbb{X}$ στόν χῶρο τῶν θέσεων δρᾶ ἁπλά σάν νά πολλαπλασιάζουμε τήν συνάρτηση $\psi(x)$ ἐπί $x$.

Σύμφωνα μέ τό ἀξίωμα τῆς φυσικῆς ἐξήγησης,

$$(\psi|x)\,dx\,(x|\psi) = |\psi(x)|^2\,dx \qquad (15)$$

παριστάνει τήν πιθανότητα νά βρίσκεται τό ὑλικό σημεῖο μεταξύ $x$ καί $x+dx$. Δηλαδή ξαναβρίσκουμε τήν γνωστή ἐξήγηση τῆς κυματικῆς συναρτήσεως τοῦ Schrödinger.

### 2. Ἡ ὁρμή ὑλικοῦ σημείου.

Ἡ ὁρμή εἶναι ἕνα ἀπό τά πιό βασικά μετρήσιμα φυσικά μεγέθη. Θά πρέπει ἐπομένως νά τῆς ἀντιστοιχήσουμε ἕνα αὐτοσυζυγή τελεστή $\mathbb{P}$. Τό φάσμα τοῦ $\mathbb{P}$ πού ὑποθέτουμε ἁπλό — τό ἐπιχείρημα εἶναι ἀνάλογο πού δόθηκε γιά τόν τελεστή Θέσεως — εἶναι τό συνεχές* — $-\infty < p < +\infty$. Λόγω τῆς αὐτοσυζυγίας τοῦ $\mathbb{P}$ οἱ ἰδιοκαταστάσεις τοῦ $|p)$ ἀποτελοῦν μιά ὀρθοκανονική βάση, μέ τόν γενικευμένο ὀρθονορμαλισμό τοῦ Dirac

$$(p|p') = \delta(p-p') \qquad (16)$$

Στή βάση αὐτή, πού θά τήν λέμε χῶρο τῶν ὁρμῶν ὁ $\mathbb{P}$ δρᾶ ἁπλῶς πολλαπλασιαστικά:

$$\mathbb{P}|p) = p|p).$$

### 3. Σχέση τοῦ τελεστή τῆς ὁρμῆς πρός τόν τελεστή τῆς θέσεως.

Ὅπως στήν Κλασσική Μηχανική ἔτσι καί στήν Κβαντομηχανική ὁ τελεστής τῆς ὁρμῆς σχετίζεται μέ

* Συμμετρία τοῦ φυσικοῦ χώρου ὡς πρός τούς μετασχηματισμούς τοῦ Γαλιλαίου.

τίς μεταθέσεις στόν χῶρο. Πράγματι ἔστω $|p\rangle$ μιά ἰδιοκατάσταση τῆς ὁρμῆς p. Ἄν T(a) ὁ τελεστής τῆς μεταθέσεως κατά a παίρνοντας ὑπ' ὄψιν τόν κυματικό χαρακτῆρα τῶν κβαντομηχανικῶν καταστάσεων, ἔχουμε

$$T(a)|p\rangle = e^{ip/\hbar a}\,|p\rangle. \qquad (17)$$

Ἡ νέα κατάσταση διαφέρει τῆς παλιᾶς κατά τήν φάση

$$e^{ip/\hbar a} = e^{i2\pi/\lambda} \qquad (18)$$

ὅπως προκειμένου γιά ἐπίπεδο κύμα, μήκους — κατά De Broglie — $\lambda = p/\hbar$. Ὁ τύπος (17) θεωρεῖται σάν βασικό ἀξίωμα πού περιγράφει τόν μετασχηματισμό τῶν ἰδιοκαταστάσεων τῆς ὁρμῆς ὡς πρός τήν ὁμάδα τῶν μεταθέσεων.

Ἀπό τήν (17) μποροῦμε νά ὁρίσουμε τόν $\mathbb{P}$ μέ τό

$$\mathbb{P} = -i\hbar \frac{dT(a)}{da} \qquad (19)$$

καί

$$T(a) = e^{i\mathbb{P}a/\hbar} \qquad (20)$$

δηλαδή ἡ ὁρμή $\mathbb{P}$ εἶναι γεννήτρια τῆς ὁμάδας τῶν μεταθέσεων.

### 3.1. Παρατηρήσεις

Οἱ ἰδιοτιμές τοῦ T(a) ἔχουν ἀπόλυτη τιμή = 1. Αὐτό εἶναι ἀποτέλεσμα τοῦ ὅτι ὁ T(a) εἶναι μοναδιαῖος, ὅπως φυσικά τό περιμένουμε ἀπό τήν συμμετρία μεταθέσεως ἤ ἀλλιῶς σχετικότητας μεταθέσεως (ἀναλλοίωτο τῶν φυσικῶν νόμων ὡς πρός τοπική μετάθεση).

Ἀναφέρουμε ἐδῶ χωρίς ἀπόδειξη τό ἑξῆς θεώρημα τοῦ Wigner " Κάθε φυσική συμμετρία τῆς θεωρίας, δηλαδή αὐτομορφισμός τοῦ χώρου τοῦ Hilbert τῶν φυσικῶν καταστάσεων, πού



διατηρεῖ ἀμετάβλητες τίς πυκνότητες πιθανότητας, πραγματοποιεῖται ἀπό ἕνα μοναδιαῖο (unitary) ἤ ἀντιμοναδιαῖο (antiunitary) μετασχηματισμό ".

Ἀντιμοναδιαῖος λέγεται ἕνας μετασχηματισμός πού ἀπεικονίζει τόν H στόν συζυγή του (Dual) [ὁ συζυγής τοῦ H συμπίπτει μέ τόν H ἐπειδή οἱ χῶροι Hilbert εἶναι αὐτοσυζυγεῖς (selfdual) ὥστε τά ἐσωτερικά γινόμενα νά ἀπεικονίζονται στά συζυγή $(\varphi, x) \longrightarrow (\varphi, x) = (x, \varphi)$. Παρατηροῦμε ὅτι $A \to A^*$ τά δέ γινόμενα $ABC\cdots F$ τελεστῶν ἀπεικονίζονται ὡς ἑξῆς

$$ABC\cdots F \longrightarrow F^*\cdots C^*B^*A^*.$$ ]

### 4. Ἔκφραση τοῦ τελεστῆ τῆς ὁρμῆς ὑλικοῦ σημείου, στό χῶρο τῶν θέσεων.

Ἔστω ψ(x) ἡ κυματική συνάρτηση ὑλικοῦ σημείου στό χῶρο τῶν θέσεων. Τότε ἀπό τόν ὁρισμό τοῦ τελεστῆ τῶν μεταθέσεων

$$T(a)\psi(x) \equiv \psi(x+a) = e^{a\,d/dx}\,\psi(x), \qquad (21)$$

πού ἡ δεύτερη ἰσότητα εἶναι ὁ γνωστός τύπος τοῦ Taylor.

Ὑποθέτουμε ὅτι ἡ ψ(x) βρίσκεται στό πεδίο ὁρισμοῦ τοῦ τελεστῆ $e^{a\,d/dx}$. Συγκρίνοντας τήν σχέση (21) μέ τήν (20) ἔχουμε:

$$\mathbb{P} = -i\hbar \frac{d}{dx} \qquad (22)$$

Θά ἀποδείξουμε ὅτι ὁ ἔτσι ὁριζόμενος τελεστής $\mathbb{P}$ εἶναι Hermitian. Ἔστω ψ(x) καί φ(x) δύο καταστάσεις τοῦ χώρου Hilbert στό πεδίο ὁρισμοῦ $D_{\mathbb{P}}$ τοῦ $\mathbb{P}$. Τότε ὁλοκληρώνοντας κατά μέρη, ἔχουμε:

$$(\psi, \mathbb{P}\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x)\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\varphi(x)\right)dx =$$

$$= -i\hbar\, \overline{\varphi(x)}\,\psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{d}{dx}\bar{\psi}(x)\right]\varphi(x)dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)\right)}\varphi(x)\,dx = (\mathbb{P}\psi, \varphi) \quad \text{ὅ.ἔ.δ.}$$

Στήν πορεία τῆς ἀποδείξεως χρησιμοποιήθηκε τό γεγονός ὅτι $\varphi(x)\to 0$ καί $\psi(x)\to 0$ ὅταν $x\to\pm\infty$ ἀφοῦ τά ὁλοκληρώματα

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2dx\,, \quad \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx$$

ὀφείλουν νά ὑπάρχουν.

Οἱ ἰδιοσυναρτήσεις τοῦ $\mathbb{P}$ στόν χῶρο τῶν θέσεων προκύπτουν μέ ἁπλή ὁλοκλήρωση τῆς στοιχειώδους ἐξισώσεως ἰδιοτιμῶν.

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\psi_p(x) = p\psi_p(x), \quad \text{......(23)}$$

ὅπου $\psi_p(x)$ ἡ ἰδιοσυνάρτηση πού ἀντιστοιχεῖ στήν ἰδιοτιμή $p$ τῆς ὁρμῆς. Μέ ὁλοκλήρωση προκύπτει

$\psi_p(x) = N_p e^{ipx/\hbar}$, ὅπου $N_p$ κατάλληλη σταθερά νορμαλισμοῦ.

Ἀπό ἐδῶ καί πέρα θά παίρνουμε

$$N_p = (2\pi)^{-1/2} \quad \text{......(24)}$$

Τό φάσμα τοῦ $\mathbb{P}$ εἶναι τό συνεχές τῶν πραγματικῶν ἀριθμῶν, $-\infty < p < +\infty$.

Παρατηροῦμε ὅτι οἱ ἰδιοσυναρτήσεις $\psi_p(x)$ τοῦ $\mathbb{P}$, τά "ἐλεύθερα κύματα", ἔχουν νόρμα $\infty$ δηλαδή,



$$\|\psi_p\| = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_p(x)|^2dx = (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}dx = \infty \qquad (25)$$

καί γενικώτερα ὁ ὀρθονορμαλισμός τους ἐκφράζεται μέ τήν βοήθεια τῆς συναρτήσεως δ τοῦ Dirac:

$$(\psi_{p'}, \psi_p) = (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\, e^{-i(p'-p)x} = \delta(p'-p), \qquad (26)$$

Ἔτσι, σύμφωνα μέ τά παραπάνω, οἱ $|\psi_p)$ δέν ἀνήκουν στό χῶρο τοῦ Hilbert. Στήν μαθηματική ὁρολογία χαρακτηρίζονται σάν γενικευμένες συναρτήσεις ἤ κατανομές (generalized functions or distributions). Γιά νά ἀποφύγουμε τήν χρήση γενικευμένων συναρτήσεων σέ μιά στοιχειώδη μεταχείριση τοῦ προβλήματος, προχωροῦμε συνήθως ὅπως θά δοῦμε παρακάτω: Ὑποθέτουμε ὅτι ὁ χῶρος μέσα στόν ὁποῖο κινεῖται τό δυναμικό σύστημα περιορίζεται στό διάστημα $(0,L)$. Εἶναι φυσικό ὅτι ἄν $L\to+\infty$ ἡ συμπεριφορά τοῦ δυναμικοῦ συστήματος μέσα στό "κουτί μήκους L" θά προσεγγίζει τήν πραγματική συμπεριφορά τοῦ δυναμικοῦ συστήματος στόν ἐλεύθερο χῶρο. Φυσικά χρειάζονται ὁρισμένες πρόσθετες ὁριακές συνθῆκες γιά τά $\psi(x)$, ὥστε ὁ $-i\hbar\frac{d}{dx}$ νά παραμείνει Hermitian.

Πρέπει

$$\int_0^L dx\,\bar{\varphi}(x)\left[-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right] - \int_0^L dx\,\psi(x)\overline{\left[i\hbar\frac{d\varphi}{dx}\right]} =$$

$$= -i\hbar\bar{\varphi}(x)\psi(x)\Big|_0^L = 0, \text{ δηλαδή } \psi(0)\bar{\varphi}(0) = \psi(L)\bar{\varphi}(L). \qquad (27)$$

Από αυτή προκύπτει αμέσως η οριακή συνθήκη $\psi(0) = \psi(L)$. Δηλαδή για να είναι ο $\mathbb{P}$ Hermitian θα πρέπει να έχουμε περιοδικές συνθήκες στα άκρα του χώρου (κουτιού). Το πρόβλημα των ιδιοτιμών του $-i\hbar \frac{d}{dx}$ λύνεται τώρα στοιχειωδώς. Το φάσμα των ιδιοτιμών του είναι ασυνεχές.

$$P_n = \frac{2\pi\hbar}{L}\, n \,, \qquad n = (0, \pm 1, \pm 2, \dots) \qquad (28)$$

Και οι ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{P_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{iP_n x/\hbar} \,. \qquad (29)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{P_n}$ προφανώς ικανοποιούν κανονικές συνθήκες ορθοκανονικότητας και αποτελούν βάση στον αντίστοιχο χώρο του Hilbert $L_2\,(0, L)$. Βέβαια έχουμε χάσει την συνέχεια του φάσματος αλλά στο όριο του $L \longrightarrow +\infty$ το φάσμα γίνεται συνεχές.*

## 5. Σχέσεις μεταθέσεως (Commutation Relations) των τελεστών $\mathbb{X}$ και $\mathbb{P}$.

Χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση θέσεως $\mathbb{X} = x$ και $\mathbb{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, βρίσκουμε αμέσως ότι ο μεταθέτης (commutator) των $\mathbb{X}$ και $\mathbb{P}$ είναι

$$[\mathbb{X}, \mathbb{P}] = i\hbar \,. \qquad (30)$$

* Για μια αυστηρή μαθηματική μεταχείριση των τελεστών p και x, που αποφεύγει την εισαγωγή γενικευμένων συναρτήσεων του Dirac βλέπε: J. Von Neumann: "Mathematical Foundation of Quantum Mechanics".



Επειδή τα $\mathbb{X}$ και $\mathbb{P}$ στην Κλασσική Μηχανική αποτελούν ζεύγος κανονικών μεταβλητών, η σχέση (30) λέγεται κανονική σχέση μεταθέσεως (canonical commutation relation).

Εξ' άλλου στην Κλασσική Μηχανική ένα ζεύγος κανονικών μεταβλητών $q_i, P_i$ χαρακτηρίζεται από το ότι έχει αγκύλη του Poisson* $\{q_i, P_i\}$ ίση με την μονάδα.

$$\{q_i, P_i\} \equiv \sum_{k=1}^{n} \left( \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial P_i}{\partial P_k} - \frac{\partial q_i}{\partial P_k} \frac{\partial P_i}{\partial q_k} \right) = 1 \qquad (31)$$

Άρα συγκρίνοντας την σχέση (30) με την σχέση (31) βρίσκουμε την αντιστοιχία:

$$\frac{1}{i\hbar}[q, P]_{QM} \longleftrightarrow \{q, P\}_{AP} \qquad (32)$$

μεταξύ του κβαντομηχανικού μεταθέτη και της κλασσικής αγκύλης του Poisson. Η αντιστοιχία αυτή που θα συναντήσουμε σύντομα και στις εξισώσεις της κινήσεως, αποτελεί βάση για την κβαντομηχανική μεταχείριση γνωστών κλασσικών δυναμικών συστημάτων.

Βάζοντας στην άκρη, την αντιστοιχία (32) μεταξύ μεταθέτη και αγκύλης Poisson, ο μη μηδενισμός του μεταθέτη συζυγών μεταβλητών είναι καθαρά κβαντομηχανικού χαρακτήρα.

Έτσι για τα $\mathbb{X}$ και $\mathbb{P}$ π.χ εφαρμογή του θεωρήματος της § 2 οδηγεί στις γνωστές σχέσεις

* Θυμίζουμε ότι η κλασσική αγκύλη του Poisson $\{A, B\}_{AP}$ δύο δυναμικών μεταβλητών A, B ενός ολονόμου δυναμικού συστήματος ορίζεται διά του:

ἀβεβαιότητας
$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar}{4} \qquad (33)$$

Κατὰ τὴν Κλασσικὴ Μηχανικὴ ὅμως τὸ ἐλάχιστο τοῦ γινομένου τῆς διασπορᾶς θέσεως ἐπὶ τὴν διασπορὰ τῆς ὁρμῆς εἶναι μηδέν, ἐφ' ὅσον κλασσικὰ τὰ x καὶ p μποροῦν νὰ μετρηθοῦν συγχρόνως μὲ ὅση ἀκρίβεια θέλουμε. Αὐτὸ μποροῦμε νὰ τὸ ἐκφράσουμε καὶ μὲ τὸ ὅτι ὁ κλασσικὸς μεταθέτης τῶν $\mathbb{X}$ καὶ $\mathbb{P}$ εἶναι μηδέν, $[\mathbb{X}, \mathbb{P}]_{κλ.} = 0$.
Τὸ κλασσικὸ ὅριο τῶν σχέσεων μεταθέσεως προκύπτει ἀπὸ τὴν σχέση (30) γιὰ $\hbar \longrightarrow 0$
$$[\mathbb{X}, \mathbb{P}]_{κβ.} \xrightarrow[\hbar \to 0]{} [\mathbb{X}, \mathbb{P}]_{κλ.} = 0 \qquad (34)$$

Αὐτὸ ἐξασφαλίζει τὸ κλασσικὸ ὅριο τῆς Κβαντομηχανικῆς.

## §4 ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRODINGER Ἤ ΝΟΜΟΣ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΜΕΤΑΤΟΠΙΣΕΩΣ, ΕΞΕΛΙΞΕΩΣ.

Ὅπως μάθαμε ἀπὸ τὴ μελέτη τῶν φωτονίων ἢ γενικότερα τῶν σωματιακῶν κυμάτων, ἡ κατάσταση ἑνὸς κβαντομηχανικοῦ συστήματος περιγράφεται ἀπὸ κάποιο διάνυσμα.

$$\{A,B\} = \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right),$$

ὅπου τὸ ἄθροισμα περιλαμβάνει ὅλα τὰ ζεύγη ἑνὸς πλήρους συστήματος κανονικῶν μεταβλητῶν. Ἡ ἀγκύλη τοῦ Poisson ὅπως καὶ ὁ μεταθέτης εἶναι μιὰ ἀντισυμμετρικὴ πράξη, δηλαδή:
$$\{A,B\} = -\{B,A\}$$



$$|\psi(t,x))$$
σ' ἕνα χῶρο Hilbert, ποὺ ἀποτελεῖ γενίκευση τοῦ Εὐκλείδειου χώρου σὲ μιγαδικὸ γενικὰ χῶρο, μὲ ἑρμιτιανὸ ἐσωτερικὸ γινόμενο.
Ἀναζητοῦμε τὸ νόμο τῆς χρονικῆς ἐξελίξεως
$$\psi(t) \longrightarrow \psi(t+a)$$
μετὰ ἀπὸ χρόνο a.
Στὴν κλασσικὴ Μηχανικὴ ἡ χρονικὴ ἐξέλιξη βρίσκεται ὅταν γνωρίζουμε τὴ Hamiltonian. Εἶναι λογικὸ νὰ ὑποθέσουμε κάτι ἀνάλογο καὶ στὴν Κβαντικὴ Φυσική. Ἡ ἀπεικόνιση αὐτὴ πρέπει νὰ εἶναι συνεχής, νὰ διατηρεῖ τὴν πιθανότητα καὶ τὴ φορὰ τοῦ χρόνου. Στὰ μαθηματικὰ αὐτὸ ἐκφράζεται μὲ τὴν διατήρηση τῶν ἐσωτερικῶν γινομένων καὶ ἐξασφαλίζεται μὲ τὴν ὑπόθεση ὅτι ὁ τελεστὴς $U(a)$ τῆς χρονικῆς ἐξελίξεως νὰ εἶναι μοναδιαῖος.
$$U(a) = e^{-iHa/\lambda} \qquad (35)$$
ὅπου H ὁ γεννήτορας τῶν μετασχηματισμῶν τῆς χρονικῆς μετατοπίσεως,
$$H = \lambda i \frac{d}{da} U(a)\Big|_{a=0} \qquad (36)$$

Ἄρα
$$|\psi(t+a)) = e^{-iH\frac{a}{\lambda}} |\psi(t)) \qquad (37)$$
Συνδιάζοντας τὴν (36) μὲ τὴν μαθηματικὴ ταυτότητα,
$$\psi(t) \longrightarrow \psi(t+a) = e^{-ia\frac{d}{dt}} \psi(t) \qquad (38)$$
ἔχουμε
$$i\lambda \partial_t \psi(t,x,\dots) = H(x,\dots)\psi(t,x) \qquad (39)$$
Ἡ πιὸ ἁπλὴ ὑπόθεση εἶναι ὅτι ὁ τελεστὴς H ἀντι-

στοιχεῖ στὴ Χαμιλτονιανή. Τὸν συντελεστὴ $\lambda$ τὸν ταυτίζουμε μὲ τὴ σταθερὰ τοῦ PLANCK, ἔτσι ποὺ νὰ νορμαλιστεῖ ὁ τύπος μὲ τοὺς κανόνες τῆς παλιᾶς Κβαντομηχανικῆς.

Ἔχουμε τελικὰ

$$i\hbar\partial_t \Psi(t,x) = H\Psi(t,x)$$

ἢ σὲ ὁλοκληρωτικὴ μορφὴ

$$\Psi(t) = e^{-i/\hbar \int_{t_0}^{t} H dt}\,\Psi(t_0) \qquad (40).$$

Ἡ σχέση (40) δείχνει ὅτι στὸ ὅριο $\hbar \longrightarrow 0$ οἱ τύποι τῆς Κβαντομηχανικῆς ἐξισώσεως δίνουν τὶς κλασσικὲς τροχιές. Ὁ $U(t,t_0)$ διαδίδει μόνο τὶς τροχιὲς γιὰ τὶς ὁποῖες τὸ ὁλοκλήρωμα τῆς δράσεως $\int H dt$ εἶναι στάσιμο, καὶ ἔτσι εἶναι πραγματικά. (Βλέπε Feynman).

# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

## §1. 1. ΚΥΜΑΤΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

Οἱ ἐξισώσεις τοῦ MAXWELL ἀποτελοῦν ἕνα γραμμικὸ σύστημα διαφορικῶν ἐξισώσεων μὲ μερικὲς παραγώγους πρώτης τάξεως ὡς πρὸς τὸ χῶρο καὶ τὸ χρόνο.

Διαχωρίζοντας τὸ ἠλεκτρικὸ ἀπὸ τὸ μαγνητικὸ πεδίο οἱ ἐξισώσεις γίνονται δευτέρου βαθμοῦ. Πράγματι, παίρνοντας τὸ στροβιλισμὸ στὴν ἐξίσωση

$$\vec\nabla \times \vec E + \partial_t \vec B = 0 \qquad \text{ἔχουμε:}$$

$$\vec\nabla \times (\vec\nabla \times \vec E + \partial_t \vec B) = 0$$

ἢ $\quad -\vec\nabla^2 \vec E + \vec\nabla(\vec\nabla\cdot\vec E) + \partial_t \vec\nabla \times \vec B = 0$

ἢ $\quad \vec\nabla^2 \vec E - \partial_t^2 \vec E = -\vec\nabla\rho + \partial_t \vec J\,, \qquad (1.1)$

ὅπου στὸ δεύτερο βῆμα χρησιμοποιήσαμε τὴν ταυτότητα

$$\vec\nabla \times (\vec\nabla \times \vec E) = -\vec\nabla^2 \vec E + \vec\nabla(\vec\nabla \vec E)\,,$$

καὶ τελικὰ τὴν ἐξίσωση $\vec\nabla \times \vec B = 0$ γιὰ νὰ ἀπαλείψουμε τὸ μαγνητικὸ πεδίο $\vec B$.

Ὁ τελεστὴς $\square = (\vec\nabla^2 - \partial_t^2)$, λέγεται D'ALEMBERTIAN.

Στὶς μονάδες ποὺ ἡ ταχύτητα τοῦ φωτὸς δὲν ἰσοῦται μὲ ἕνα D'ALEMBERTIAN γράφεται,

$$\square = \left[\vec\nabla^2 - (1/c^2)\,\partial_t^2\right]$$

Ὁμοίως βρίσκουμε

$$(\vec\nabla^2 - \partial_t^2)\,\vec B = -\vec\nabla \times \vec J. \qquad (1.2)$$

γιὰ τὸ μαγνητικὸ πεδίο.

Οἱ ἐξισώσεις (1) καὶ (2) ἔχουν σαφῆ κυματικὸ χαρακτῆρα. Ἡ ταχύτητα διαδόσεως τῶν ἠλεκτρομαγνητικῶν κυμάτων εἶναι $c$.

Στίς ἑπόμενες παραγράφους γιά εὐκολώτερη κατανόηση τῶν φυσικῶν μεγεθῶν θά κρατήσουμε τήν ταχύτητα $c$ ἐκφρασμένη στούς τύπους τοῦ κύματος.

Ἐξ' ἄλλου βάζοντας $\rho=0$ καί $\vec{J}=0$, θά περιορίσουμε στά ἐλεύθερα κύματα.

$$\left\{\vec{\nabla}^2 - (1/c^2)\,\partial_t^2\right\}\vec{E} = 0 \qquad (1.3)$$

$$\left\{\vec{\nabla}^2 - (1/c^2)\,\partial_t^2\right\}\vec{B} = 0 \qquad (1.4)$$

Οἱ ἐξισώσεις αὐτές ἔχουν ἁπλές λύσεις τά γνωστά μας μονοχρωματικά ἐπίπεδα κύματα

$$\vec{E}(\vec{x},t) = (1/2\pi)^{3/2}\, E_x\, e^{\pm i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}$$

ΑΠΛΑ ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΚΥΜΑΤΟΣ

Παραθέτουμε ἁπλές μορφές κύματος. Τό κυμαινόμενο μέγεθος $\Psi(\vec{x},t)$ εἶναι βαθμωτό

(α) Ἐπίπεδο κῦμα διαδιδόμενο κατά τήν θετική ($\Psi^+$) ἤ ἀρνητική διεύθυνση ($\Psi^-$) τοῦ μοναδιαίου διανύσματος $\vec{n}$.

$$\Psi^+ = \Phi(\vec{x}\cdot\vec{n} - ct), \quad \Psi^- = \Phi(\vec{x}\cdot\vec{n} + ct)$$

ὅπου $\Phi$ τυχαῖα συνάρτηση μιᾶς μεταβλητῆς.

(β) Ἕνα σφαιρικό κῦμα ἐξερχόμενο (πού φεύγει) ἀπό τήν ἀρχή τῶν συντεταγμένων, $\Psi^+$, ἤ εἰσερχόμενο (πού ἔρχεται) στήν ἀρχή τῶν ἀξόνων $\Psi^-$.

$$\Psi^+ = \Phi(R-ct)/R, \quad \Psi^- = \Phi(R+ct)/R$$

ὅπου $\Phi^\pm$ τυχαῖες συναρτήσεις μιᾶς μεταβλητῆς $\Phi(s)$ μέ τόν περιορισμό $\Phi^+(s)=0$ γιά $s\leq 0$ καί $\Phi^-(s)=0$, γιά $-s\leq 0$

(γ) κυλινδρικό κῦμα ἐξερχόμενο ἀπό ($\Psi$), ἤ εἰσερχόμενο ($\xi$) στόν ἄξονα Z, πού θεωροῦμε ἄξονα κυλινδρικῆς συμμετρίας

$$\Psi^+ \underset{\rho\to\infty}{\approx} \Phi(\rho - ct)/\rho^{1/2}, \quad \Psi^- \underset{\rho\to\infty}{\approx} \Phi(\rho + ct)/\rho^{1/2},$$



$\Phi$ τυχαῖα συνάρτηση μιᾶς μεταβλητῆς, μέ τό μόνο περιορισμό ὅπως στή (β).

Ἐπιβεβαιῶστε ὅτι ὅλες οἱ παραπάνω συναρτήσεις $\Psi$ ἱκανοποιοῦν τήν κυματική ἐξίσωση,

$$\left(\nabla^2 - (1/c^2)\,\partial_t^2\right)\Psi(x,t) = 0$$

ὑποθέτοντας ὅτι ἡ αὐθαίρετη συνάρτηση $\Phi$ εἶναι ἀρκετά ὁμαλή ὥστε νά μή ἔχετε δυσκολία στίς παραγωγίσεις. Σχεδιάστε τή $\Psi$ γιά διάφορες $x$ χρονικές στιγμές ὥστε νά δώσετε μιά εἰκόνα τῆς κυματικῆς διαδόσεως.

$$\Psi = \left(\Theta(t)\,\Phi(R-ct) + \Theta(-t)\,\Phi(R+ct)\right)/R.$$

Συμπέρασμα, τό ἠλεκτρομαγνητικό κῦμα σάν σωμάτιο, φωτόνιο

Ἡ ἐξήγηση τοῦ φάσματος ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος (MAX PLANCK) (1900) τοῦ φωτοηλεκτρικοῦ φαινομένου (EINSTEIN 1905), καί τοῦ φαινομένου COMPTON (1925), μᾶς ὁδηγεῖ στήν ἑξῆς ὑπόθεση ἀντιστοίχως:

(ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ, ΦΩΣ ΣΑΝ ΚΥΜΑ) (ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΩΣ ΣΑΝ ΣΩΜΑΤΙΟ)

ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΚΥΜΑ ⟷ ΦΩΤΟΝΙΟ $(\Psi(E^+(x,t)))$

$$\vec{E}^{(\pm)}_{\vec{k}}(x,t) = \vec{E}^{(\pm)}_{\vec{k}}\,\frac{e^{\pm i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}}{(2\pi)^{3/2}} \longleftrightarrow (N/V)^{1/2}\,\vec{\varepsilon}_{\vec{k}}\,\frac{e^{-i(E_\gamma t - \vec{k}\vec{x})/\hbar}}{(2\pi)^{3/2}}$$

ὅπου $\omega=2\pi\nu$ ἡ κυκλική συχνότητα τοῦ κύματος πού ὑποθέσαμε γιά ἁπλότητα μονοχρωματικό καί ἐπίπεδο, διαδιδόμενο κατά μῆκος τοῦ κυματικοῦ διανύσματος (διανύσματος διαδόσεως $\vec{k}$),

$$\vec{k} = (2\pi/\lambda)\,\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$$

ὅπου $\lambda$ τό μῆκος κύματος. Ἡ ταχύτητα τοῦ φωτός $c = \lambda \cdot \nu$ στίς μονάδες μας εἶναι 1.
$\vec{E}_{\vec{k}}^{(\pm)}$ εἶναι τό πλάτος τοῦ κύματος ἐπί τό διάνυσμα πολώσεως μέ τά σημεῖα + ἤ − ἀντίστοιχα σέ θετική ἤ ἀρνητική συχνότητα $+\omega$ ἤ $-\omega$.
Ἐρχόμαστε τώρα στή κβαντομηχανική περιγραφή, εἰκόνα "φωτόνιο". $E_\nu = h\nu = \hbar\omega$ ἡ ἐνέργεια ἑνός φωτονίου, $\hbar = h/2\pi$ ἡ σταθερά τοῦ PLANCK ($\hbar = 1.05 \times 10^{-27}$ erg/sec).

$$\vec{P} = \frac{h}{2\pi}\vec{K} ,$$

ἡ ὁρμή τοῦ φωτονίου. Ὅπως ἀναφέρθηκε καί προηγούμενα ὁ τύπος πού δίνει τήν ὁρμή εἶναι συνέπεια τοῦ $E_\nu = h \cdot \nu$ καί τῆς θεωρίας τῆς σχετικότητας

$$E_\nu^2 = P_\nu^{-2} ,$$

ἀφοῦ τό φωτόνιο πρέπει νά ἔχει μηδενική μάζα γιά νά διαδίδεται μέ ταχύτητα ἴση μέ τήν ταχύτητα τοῦ φωτός.
Τό πλάτος

$$\vec{E}_{\vec{k}} \longrightarrow (N/V)^{1/2}\,\vec{\varepsilon} ,$$

τοῦ κλασσικοῦ κύματος δίνει τή θέση του στό πλάτος τῆς πιθανότητας

$$(N/V)^{1/2} = (\text{Πιθανότητα ἀνά ὄγκο})^{1/2} ,$$

νά βροῦμε N φωτόνια ἀνά μονάδα ὄγκου ἐπί τό μοναδιαῖο διάνυσμα τῆς πολώσεως $\vec{\varepsilon}$

$$\vec{\varepsilon}_{\vec{k}} = \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|} .$$

Ἐδῶ τελειώνουμε τήν ἀντιστοίχηση.



## 2. ΚΥΜΑΤΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΓΙΑ ΑΛΛΑ ΠΕΔΙΑ-ΣΩΜΑΤΙΑ

Εἴδαμε ὅτι ἡ κυματική ἐξίσωση πού ἱκανοποιοῦν τά ἐλεύθερα φωτόνια (φωτόνια μακρυά ἀπό πηγές ἤ ἀλληλεπιδράσεις) εἶναι:

$$(\vec{\nabla}^2 - \partial_t^2)\,\psi^{(+)}(\vec{x}, t, \pm) = 0 \qquad (21)$$

Τό (+) σημεῖο ἄνω δείκτης τῆς κυματικῆς συναρτήσεως $\psi^{(+)}$, σημαίνει ὅτι θά κρατήσουμε μόνο τίς θετικές συχνότητες (θετική ἐνέργεια), ἐνῶ τά + ἤ − δεξιά στην παρένθεση μέ τίς χωροχρονικές μεταβλητές $\psi(\vec{x}, t, +)$ ἤ $\psi(\vec{x}, t, -)$, εἶναι δεῖκτες πολώσεως ἤ ἰσοδύναμα σπίν. Τό + ἀντιστοιχεῖ σέ δεξιόστροφα, ὡς πρός τό διάνυσμα διαδόσεως k, κυκλικά πολωμένο φῶς, καί τό − σέ ἀριστερόστροφα. Συχνά χρησιμοποιεῖται ὁ ὅρος δεξιόστροφη "ἑλίκωση" γιά τό + ἤ ἀριστερόστροφη "ἑλίκωση" γιά τό −.
Στή γλῶσσα τοῦ σπίν, πού θά μάθουμε ἀργότερα, φῶς δεξιόστροφα πολωμένο ἔχει σπίν +1 παράλληλα πρός τό διάνυσμα διαδόσεως, τήν ὁρμή P, καί τό ἀριστερόστροφα πολωμένο σπίν −1 κατά τῆς ὁρμῆς.
Ὅμοια ἐξίσωση ἰσχύει γιά κάθε σωμάτιο μηδενικῆς μάζας. Πράγματι ἀναλύοντας κατά FOURIER τήν (1) μέ τό γνωστό τύπο τῆς Σχετικότητας ὅτι τό σωμάτιο ἔχει μηδενική μάζα

$$E = \sqrt{M^2 + \vec{P}^2} = |\vec{P}| .$$

Τό νετρίνο π.χ $\nu$ (νετρίνο πού σχετίζεται μέ τό ἠλεκτρόνιο) καί $\nu_\mu$ (νετρίνο πού σχετίζεται μέ $\mu^-$ μεσόνιο) ἔχουν σπίν −1/2 παράλληλα μέ τήν ὁρμή τους (εἶναι ἀριστερόστροφα), τά ἀντίστοιχα ἀντισωμάτια τους $\bar{\nu}_e$ καὶ $\bar{\nu}_\mu$ ἔχουν σπιν, ἑλικότητα $+1/2$.

Τὸ ὑποτιθέμενο GRAVITON ἀντίστοιχο τοῦ φωτονίου στὸ πεδίο τῆς βαρύτητας ποὺ ἔχει σπιν 2 σύμφωνα μὲ Γεωμετρική Θεωρία τῆς Σχετικότητας τοῦ EINSTEIN, θὰ ἔχει τὸ σπὶν του εἴτε παράλληλα (+2) ἢ ἀντιπαράλληλα μὲ τὴν ὁρμή του (-).

Γιὰ σωμάτια μηδενικῆς μάζας ἔχουμε:

«Τὰ μηδενικῆς μάζας σωμάτια παρουσιάζονται μὲ τὴ μέγιστη δυνατὴ ἑλίκωση, τὸ σπὶν τους εἶναι δηλαδὴ εἴτε παράλληλο ἢ ἀντιπαράλληλο μὲ τὴν ὁρμή», οἱ ὑπόλοιπες $(2s-1)$ δυνατὲς συνιστῶσες ἐξαφανίζονται ἀπ' τὴ Φύση.

Τὰ μηδενικοῦ σπὶν σωμάτια (ἀντίστοιχα σὲ βαθμωτὸ πεδία) ἔχουν φυσικὰ μόνο μιὰ συνιστῶσα.

<u>ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ ΓΙΑ ΠΕΔΙΑ-ΣΩΜΑΤΙΑ ΜΑΖΑΣ $M\neq 0$</u>

Ὅταν ἡ μάζα τοῦ σωματίου εἶναι μὴ μηδενικὴ ἡ περιγραφὴ τῆς πολώσεως γίνεται πολύπλοκη. Ὅλες οἱ $(2s+1)$ συνιστῶσες ἔρχονται στὸ φυσικὸ προσκήνιο καὶ ἀνακατεύονται μεταξύ τους στὴν μετάβαση ἀπὸ σύστημα σὲ σύστημα ἀναφορᾶς. Ξεφεύγει ἀπὸ τὸ πλαίσιο τοῦ τωρινοῦ μαθήματος νὰ ἀσχοληθοῦμε περισσότερο μ' αὐτὸ τὸ θέμα καὶ στὸ ὑπόλοιπο τῆς παραγράφου θὰ παραβλέψουμε τυχὸν δυνατοὺς δείκτες πολώσεως. Παραλείποντας δείκτες πολώσεως, ἡ κυματικὴ ἐξίσωση γιὰ ἐλεύθερα σωμάτια-πεδία μάζας $M$ εἶναι ἁπλὴ σὰν πρῶτα

$$\hbar^2(\vec{\nabla}^2-\partial_t^2)\,\psi^+(\vec{x},t) = M^2\,\psi^+(\vec{x},t)$$

Ἐπαναλαμβάνουμε ὅτι μετὰ τὴν κβαντομηχανικὴ



ἀντιστοίχιση:

«Ἐνέργεια $= E \longrightarrow \mathbb{E} = i\hbar\partial_t$»

καὶ

«Ὁρμή $= P \longrightarrow \mathbb{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$»,

τῆς προηγούμενης παραγράφου, ἡ κυματικὴ ἐξίσωση ἐκφράζει ὅτι τὸ σωμάτιο ποὺ περιγράφει ἔχει μάζα $M$

$$E = \sqrt{M^2+\vec{P}^2}$$

Τέλος ἐπιθυμοῦμε νὰ τονίσουμε ἰδιαίτερα τὸ γεγονὸς ὅτι τὰ φωτόνια παρουσιάζονται μόνο μὲ θετικὴ συχνότητα, θετικὴ ἐνέργεια

$$E_\nu = h\nu.$$

Γιὰ τὴν ἐξήγηση τῆς ἀκτινοβολίας τοῦ μέλανος σώματος σύμφωνα μὲ τὴν ὑπόθεση τοῦ PLANCK δὲν χρειάστηκαν ἀρνητικὲς ἐνέργειες. Ἔτσι στὴν κβαντομηχανικὴ περιγραφὴ τῆς καταστάσεως τοῦ συστήματος «φωτονίου» χάνουμε τὶς μισὲς λύσεις, αὐτὲς ποὺ ἀντιστοιχοῦν σὲ ἀρνητικὲς ἐνέργειες (συχνότητες). Ἡ παρατήρηση αὐτὴ εἶναι πολὺ σημαντικὴ γιατί ὑποδεικνύει ὅτι ἡ διαφορικὴ ἐξίσωση ποὺ διέπει τὴ χρονικὴ ἐξέλιξη τῶν φωτονίων, παρ' ὅλο τὸ συσχετισμό τους μὲ τὸ ἠλεκτρομαγνητικὸ πεδίο, εἶναι βασικὰ πρώτης τάξεως ὡς πρὸς τὸ χρόνο. Σὲ ἀντίθεση μὲ τὴ πεδιακὴ ἐξίσωση κύματος $(\vec{\nabla}^2-\partial_t^2)\,\vec{E}(\vec{x},t)=0$.

Ὥστε:

«ἡ διαφορικὴ ἐξίσωση τῆς χρονικῆς ἐξελίξεως τῶν κβαντικῶν καταστάσεων πρέπει νὰ εἶναι πρώτης τάξεως ὡς πρὸς τὸ χρόνο».

Ὅπως θὰ δοῦμε σύντομα ἡ παραπάνω πρόταση ἀποτελεί θεμελιακό συστατικό τής κβαντομηχανικής, σέ επίπεδο αξιώματος.

*Όπως θά μάθετε αργότερα οί πεδιακές εξισώσεις παραμένουν καί στή κβαντομηχανική, σάν εξισώσεις πάνω στούς τελεστές πού αντιστοιχούν στά φυσικά μεγέθη. Αυτές οί εξισώσεις μπορούν νά είναι ανωτέρας τάξεως ώς πρός τό χρόνο, πχ τού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου γιά τό όποίο μιλάμε. Η κυματική ωστόσο εξίσωση τού φωτονίου ($\Psi(E^+(x,t))$), θά είναι πρώτης τάξεως ώς πρός τό χρόνο.

~~3 Λίγη Σχετικιστική Κινηματική~~

V Στή Νευτώνια Μηχανική ή κατάσταση ενός ελευθέρου σωματιδίου καθορίζεται άπ' τή θέση $\vec{x}$, καί τήν ταχύτητά του $\vec{v}$, μιά χρονική στιγμή. Αντί τής ταχύτητας μπορούμε νά χρησιμοποιήσουμε τήν ορμή υποθέτοντας ότι τό σωμάτιο έχει μιά δοσμένη μάζα m

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$$

~~ώστε χρειάζεται καί ή παράμετρος μάζα~~. Ισοδύναμα γιά τήν πληροφορία τής ταχύτητας ~~άπ' τήν ορμή $\vec{p}$~~, αντί τής μάζας ~~m~~ μπορεί νά χρησιμοποιειθεί ή ενέργεια E

$$E = \vec{p}^{\,2}/2m \Rightarrow \vec{v} = \vec{p}/(\vec{p}^{\,2}/2E) \quad (3.1)$$

Στήν ειδική θεωρία τής Σχετικότητας τά πράγματα είναι παρόμοια. Αντί τής ταχύτητας αρκεί ξανά ή ενέργεια καί ή ορμή p. Η διαφορά είναι ότι ή ενέργεια καί ή ορμή δέν συνδέονται τώρα μέ τήν έκφραση (1) αλλά μέ τό γνωστό σχετικιστικό



τύπο,

$$E = c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^{\,2}} = mc^2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^{\,2}}{m^2c^2}}$$

ή

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^{\,2} = m^2c^4 \quad (3.2)$$

όπου c ή ταχύτητα τού φωτός, καί m ή μάζα τού σωματίου. Ο τύπος αυτός (3.2) είναι εύκολο νά παραχθεί. *2

Η ταχύτητα τού σωματίου δίνεται από τή σχέση

$$\vec{v} = \frac{c^2\vec{p}}{E} \quad (3.3)$$

Οί τύποι (2) καί (3) μπορούν νά θεωρηθούν ότι προέρχονται από τή LAGRANGIAN

$$L = -mc^2\sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (3.4)$$

πού δίνει τό απλούστερο σχετικιστικά αναλλοίωτο ολοκλήρωμα τής δράσεως. (Βλ. Ασκ. στό τέλος τής Παραγρ.)
Η ορμή $\vec{p}$ ορίζεται κατά τόν συνηθισμένο, γνωστό μας τρόπο, σάν γεννήτρια τών μεταθέσεων στό χώρο (βλ Μηχανική) καί υπολογίζεται μέ τό ανάδελτα τής Λαγκρανζιανής ώς πρός τήν ταχύτητα,

$$\vec{p} = \vec{\nabla}_{\vec{v}} L(\vec{x}, \vec{v}, t), \quad \vec{v} = d\vec{x}/dt,$$

όταν ή ταχύτητα είναι μικρή σχετικά μέ τήν ταχύτητα τού φωτός.

$$\frac{v^2}{c^2} \ll 1,$$

Οί σχετικιστικές εκφράσεις δίνουν πάλι τήν κινηματική τού Νεύτωνα.
Γιά καλύτερη κατανόηση καί αποδείξεις παραπέμπουμε στήν εκτεταμένη βιβλιογραφία τής Σχετικιστικής Μηχανικής. Παρ' ότι σέ πρώτη όψη οί σχετικιστικοί τύποι φαίνονται ίσως πολύπλοκοι, εφ' όσον δέν τούς

συνηθήσαμε, στό βάθος τους εἶναι ἁπλοί, ἁπλούστεροι ἀπό τούς μή σχετικιστικούς. Θά μπορούσαμε νά ποῦμε. Ἄν ὀνομάσουμε τήν ἐνέργεια, $E$, τήν χρονική ἤ μηδενική συνιστῶσα τῆς ὁρμῆς, $P_0$, καί τίς ἄλλες τρεῖς συνιστῶσες,

$$\vec{P} = (P_1, P_2, P_3),$$

τίς ταυτίσουμε μέ τήν συνηθισμένη ὁρμή, τότε ἡ (3,2) ἐκφράζει ὅτι ἡ μάζα $m$ εἶναι τό μῆκος τοῦ διανύσματος $P_\mu = (P_0, \vec{P})$ τῆς ὁρμῆς τοῦ σωματίου σ' ἕνα χῶρο τεσσάρων διαστάσεων (Πυθαγόρειο θεώρημα). Ὁ χῶρος αὐτός εἶναι βέβαια ψευτοευκλείδειος. Τό τετράγωνο τῆς τετρορμῆς

$$\sum_{\mu=0}^{3} P_\mu P^\mu = P_0^2 - \vec{P}^2 \qquad (3.5)$$

(ὄχι $P_0^2 + \vec{P}^2$ ὅπως στόν Εὐκλείδειο χῶρο).
Δεῖξτε ὅτι οἱ τύποι αὐτοί ἀπορρέουν ἀπό τήν Lagrangian

$$L = -mc^2\sqrt{1-(d\vec{x}/dt)^2/c^2} = -mc^2\sqrt{1-\vec{v}^2}$$

ἡ LAGRANGIAN αὐτή ἐξασφαλίζει τό σχετικιστικά ἀναλλοίωτο τοῦ ὁλοκληρώματος τῆς δράσεως

$$I = -mc\int_{s_1}^{s_2} ds' = -mc^2\int_{t_1}^{t_2}\sqrt{(1-\vec{v}^2)}\,dt.$$

ὅπου $ds^2 = c^2(dt)^2 - (dx)^2$
καί γιά μικρές ταχύτητες μᾶς δίνει τίς ἐξισώσεις τοῦ Νεύτωνα. (Ὥστε ἡ $L$ εἶναι ἡ σωστή, καί μοναδική, γιά τήν περιγραφή ἐλεύθερου σωματίου χωρίς spin).



## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Γαλάνη Κατερίνα

7712918 √

Κουτογιάννης Νίκος

8216058

Γιάννης

Παπαδάκη

2288538

Γιώργος

Χριστόπουλος.