ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΑ 10.2

Υπολογισμός των μέσων τιμών $\langle r^{-1}\rangle$, $\langle r^{-2}\rangle$ και $\langle r^{-3}\rangle$ για μια τυχούσα υδρογονική ιδιοκατάσταση

Ἄς παρατηρήσομε κατ' ἀρχάς ὅτι γιά τή μέση τιμή μιᾶς συνάρτησης τοῦ r, οἱ σφαιρικές ἁρμονικές δέν παίζουν κανένα ρόλο, ὁπότε εἶναι σά νά ὑπολογίζομε τήν ἴδια μέση τιμή πάνω στίς ἰδιοσυναρτήσεις τῆς μονοδιάστατης ἀκτινικῆς ἐξίσωσης Schrödinger. Στήν περίπτωσή μας τό σχετικό ἐνεργό δυναμικό ἔχει τή μορφή

$$\tilde{V}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \tag{1}$$

ἡ ὁποία, γιά κατοπινή εὐκολία, εἶναι σκόπιμο νά γραφεῖ σάν

$$V(r) = -\frac{g}{r} + \frac{G}{r^2} \tag{2}$$

ὅπου $g = e^2$ καί $G = \hbar^2 l(l+1)/2m$. Τό δυναμικό (2) ἔχει λυθεῖ, σάν καθ' αὐτό μονοδιάστατο, στό 5ο κεφάλαιο καί οἱ ἰδιοτιμές πού βρήκαμε τότε δίδονται ἀπό τόν τύπο

$$E = E_k = -\frac{\varepsilon}{2(s+k)^2} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{3}$$

μέ

$$\varepsilon = \frac{mg^2}{\hbar^2} \qquad \text{καί} \qquad s = \frac{1 + \sqrt{1 + \dfrac{8mG}{\hbar^2}}}{2} \tag{4}$$

Σ' αὐτό τό σημεῖο δέν ἔχομε παρά νά θυμηθοῦμε τό θεώρημα Feynman-Helman τοῦ προηγούμενου κεφαλαίου καί τή σχετική συζήτηση πού ἔγινε τότε. Τό «πρακτικό συμπέρασμα», ἄν θυμᾶστε, ἦταν ὅτι *ἡ μέση τιμή ἑνός τελεστή πού ἐμφανίζεται μέ τυχόντα συντελεστή σέ μιά ἀκριβῶς ἐπιλύσιμη Χαμιλτονιανή μπορεῖ πάντα νά ὑπολογιστεῖ σέ κλειστή μορφή γιά τυχοῦσα ἰδιοκατάσταση*. Συγκεκριμένα θἄναι

$$\langle A \rangle = \frac{\partial E}{\partial \lambda} \tag{5}$$

ὅπου $H = H_0 + \lambda A$ εἶναι ἡ Χαμιλτονιανή τοῦ προβλήματός μας, καί $E(\lambda)$ οἱ ἰδιοτιμές της, πού θεωροῦνται γνωστές γιά κάθε λ.

Ἡ ἐφαρμογή τῶν παραπάνω στήν περίπτωσή μας εἶναι, βεβαίως, ἄμεση. Ἡ Χαμιλτονιανή τοῦ ἰσοδύναμου μονοδιάστατου προβλήματος εἶναι

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{g}{r} + \frac{G}{r^2}$$

καί, ὅπως βλέπετε, οἱ τελεστές r^{-1} καί r^{-2} ἐμφανίζονται σ' αὐτήν μέ τούς τυχόντες συντελεστές $-g$ καί G ἀντίστοιχα. Σύμφωνα μέ τήν (5) θἄναι λοιπόν

$$\langle r^{-1}\rangle = -\frac{\partial E}{\partial g} \quad , \quad \langle r^{-2}\rangle = \frac{\partial E}{\partial G} \tag{6}$$

ὅπου τό E δίδεται ἀπό τόν τύπο (3). Παρατηρώντας τώρα ὅτι ἡ ἐξάρτηση τοῦ E ἀπό τό g ὀφείλεται μόνο στή μονάδα ἐνέργειας $\varepsilon = mg^2/\hbar^2$ θἄχομε ἀμέσως ὅτι

$$\langle r^{-1}\rangle = -\frac{2}{g}\,E \tag{7}$$

ὅπου γιά νά ἐπανέλθομε στό ἄτομο τοῦ Ὑδρογόνου θά πρέπει νά θέσομε $g = e^2$ καί $G = \hbar^2 l(l+1)/2m$ ὁπότε ἡ ἰδιοτιμή E στήν (7) θά πάρει τή γνωστή Κουλομπική μορφή $E = -me^4/2\hbar^2 n^2$. (Ἄν θέλει νά τό δεῖ αὐτό ἀναλυτικά ὁ ἀναγνώστης ἄς βεβαιωθεῖ ὅτι γιά $G = \hbar^2 l(l+1)/2m$ εἶναι $s = l+1$ ὁπότε τό $s+k = l+1+k$ στόν παρονομαστή τῆς (3) δέν εἶναι παρά ὁ γνωστός μας κύριος κβαντικός ἀριθμός τοῦ ἀτόμου τοῦ Ὑδρογόνου). Ἐν πάσῃ περιπτώσει τό ἀποτέλεσμα πού βρήκαμε εἶναι

$$\langle r^{-1}\rangle = \frac{me^2}{\hbar^2 n^2} = \frac{1}{\alpha_0 n^2} \tag{8}$$

σέ συμφωνία μ' αὐτό πού χρησιμοποιήσαμε νωρίτερα. Ἐξ ἴσου ἁπλή εἶναι καί ἡ ἐφαρμογή τοῦ δεύτερου ἀπό τούς τύπους (6) ἀπ' ὅπου προκύπτει ὅτι

$$\langle r^{-2}\rangle = \frac{1}{\alpha_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \tag{9}$$

Σημειῶστε ὅτι ἡ μέση τιμή (9) ἐξαρτᾶται ἀπό τό l ἐνῶ ἡ (8) ὄχι. Ποῦ ὀφείλεται αὐτή ἡ διαφορά;

Ἀπομένει νά δοῦμε πώς θά ὑπολογισεῖ ἡ μέση τιμή $<r^{-3}>$ γιά τήν ὁποία ἡ προηγούμενη μέθοδος δέν εἶναι ἐφαρμόσιμη. (Ἡ προσθήκη ἑνός ὅρου τῆς μορφῆς k/r^3 στό ἀρχικό δυναμικό δέν δίνει ἀκριβῶς ἐπιλύσιμο πρόβλημα). Εὐτυχῶς ὑπάρχει καί γι' αὐτή τήν περίπτωση ἕνα κατάλληλο τέχνασμα πού θά μᾶς ἐπιτρέψει πάλι νά βροῦμε τό ζητούμενο ἀποτέλεσμα σέ κλειστή μορφή. Ἡ βασική ἰδέα μπορεῖ νά φανεῖ πολύ καθαρά σ' ἕνα μονοδιάστατο πρόβλημα στό πλῆρες διάστημα $-\infty < x < +\infty$. Ξεκινᾶμε μέ τή διαπίστωση ὅτι τά δυναμικά $V(x)$ καί $V(x-\alpha)$ πού προκύπτουν τό ἕνα ἀπό τό ἄλλο μέ μετατόπιση κατά α ἔχουν τίς ἴδιες ἀκριβῶς ἰδιοτιμές. Ὅμως γιά $\alpha = \delta\alpha$ =ἀπειροστό, τό δυναμικό $V(x-\alpha)$ γράφεται σάν

$$V(x-\alpha) = V(x-\delta\alpha) = V(x) - \delta\alpha V'(x)$$

ὁπότε ὁ ὅρος $-\delta\alpha V'(x)$, θεωρούμενος σάν διαταραχή στό ἀρχικό δυναμικό $V(x)$, θά προκαλέσει μιά μετατόπιση τῶν ἐνεργειακῶν του ἐπιπέδων ἴση μέ $-\delta\alpha < V'(x) >$. Ἀφοῦ ὅμως ξέρομε ὅτι αὐτή ἡ μετατόπιση εἶναι μηδέν θἄχομε ἀναγκαστικά

$$< V'(x) > = 0 \tag{10}$$

Ἡ ἐφαρμογή τοῦ προηγούμενου συλλογισμοῦ σ' ἕνα πρόβλημα μισοῦ διαστήματος —ὅπως αὐτό πού ἀντιστοιχεῖ στήν ἀκτινική ἐξίσωση Schrödinger— εἶναι λίγο πιό μπελαλίδικη διότι πρέπει νά ληφθεῖ ὑπ' ὄψη καί ἡ μετατόπιση τῆς ἀρχῆς σέ συνδυασμό μέ τήν συνοριακή συνθήκη μηδενισμοῦ τῆς κυματοσυνάρτησης. Εὔκολα ὅμως βλέπει κανείς ὅτι τό ἀποτέλεσμα (10) ἰσχύει κι ἐδῶ ὑπό τόν ὅρο ὅτι ἡ σχετική μέση τιμή ἔχει νόημα. Θἄναι δηλαδή

$$< \widetilde{V}'(r) > = 0 \Rightarrow \left< V'(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m r^3} \right> = 0 \tag{11}$$

ὅπου βέβαια ἡ ἐμφάνιση τῆς μέσης τιμῆς $<r^{-3}>$ μᾶς περιορίζει στίς καταστάσεις μέ $l \neq 0$ γιά τίς ὁποῖες τό σχετικό ὁλοκλήρωμα ὑπάρχει. Ἐφαρμόζοντας τώρα τόν (11) γιά $V = -e^2/r$ παίρνομε

$$\left< \frac{1}{r^3} \right> = \frac{1}{\alpha_0^3} \, \frac{1}{n^3 l(l+1)\left(l + \frac{1}{2}\right)}$$

πού εἶναι τό ἀποτέλεσμα πού εἴχαμε ὑποσχεθεῖ νά δείξομε.