Συμπληρωμα 5.1

ΑΝΑΖΗΤΗΣΗ ΤΩΝ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΩΝ ΛΥΣΕΩΝ ΤΟΥ ΑΡΜΟΝΙΚΟΥ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗ ΜΕ ΤΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΑΠΤΥΓΜΑΤΟΣ ΣΕ ΔΥΝΑΜΟΣΕΙΡΑ

Τούτο το συμπλήρωμα απευθύνεται στους αναγνώστες εκείνους που θα ήθελαν να γνωρίσουν λίγο καλύτερα τη μέθοδο επίλυσης της εξισώσεως Schrödinger που μόνο ακροθιγώς παρουσιάσαμε στο κείμενο, ενώ στο επόμενο συμπλήρωμα θα δοθεί μια πολύ συστηματικότερη εκδοχή αυτής της μεθόδου που επιτρέπει τη γρήγορη επίλυση μιας πολύ μεγαλύτερης ποικιλίας κβαντομηχανικών προβλημάτων.

Υπενθυμίζουμε ότι μετά την «αφαίρεση» του ασυμπτωτικού παράγοντα στο άπειρο, δηλαδή με την εκτέλεση του μετασχηματισμού

$$\psi(x) = e^{-x^2/2} H(x)$$

η εξίσωση Schrödinger

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0$$

μετατράπηκε στην *εξίσωση Hermite*

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

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

$$H(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \tag{2}$$

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

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

η αντικατάσταση της (2) στην (1) θα δώσει

$$\sum_k k(k-1)a_k x^{k-2} - 2x\sum_k k a_k x^{k-1} + (2E-1)\sum_k a_k x^k = 0 \tag{3}$$

και η αρχική εξίσωση θα ικανοποιείται όταν ο ολικός συντελεστής b_k της τυχούσας δύναμης x^k στο πρώτο μέλος της (3) θα είναι ίσος με το μηδέν. Ο ολικός αυτός συντελεστής θα προκύπτει από τις τρεις επιμέρους σειρές στο πρώτο μέλος της (3) ως εξής: η πρώτη σειρά έχει ως γενική δύναμη την x^{k-2} και επομένως ο συντελεστής της δύναμης x^k θα προκύπτει με μετατόπιση κατά 2 του υπάρχοντος συντελεστή $k(k-1)a_k$. Η συμβολή αυτής της σειράς στον ολικό συντελεστή θα είναι λοιπόν η

$$k(k-1)a_k\Big|_{k\to k+2} = (k+2)(k+1)a_{k+2}. \tag{4}$$

Στη δεύτερη σειρά της (3) ο πολλαπλασιασμός επί x επαναφέρει ως γενική δύναμη την x^k οπότε η συμβολή αυτής της σειράς θα είναι

$$-2ka_k \tag{5}$$

ενώ από την τρίτη σειρά θα έχουμε

$$(2E-1)a_k. \tag{6}$$

Αθροίζοντας τις (4), (5) και (6) παίρνουμε για τον ολικό συντελεστή b_k την έκφραση

$$b_k = (k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (2E-1)a_k \tag{7}$$

η οποία θα πρέπει τώρα να εξισωθεί με μηδέν ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση (3). Μηδενίζοντας την (7) και λύνοντας ως προς a_{k+2} παίρνουμε την *αναδρομική σχέση*

$$a_{k+2} = \frac{2k-(2E-1)}{(k+1)(k+2)}a_k \tag{8}$$

η οποία προσδιορίζει πλήρως τη λύση, εφόσον μας επιτρέπει να υπολογίσουμε όλους τους συντελεστές της σειράς (2) με βάση τον πρώτο από αυτούς, ο οποίος όμως μπορεί πάντα να θεωρηθεί ίσος με τη μονάδα αφού η εξίσωση είναι ομογενής. Από την (8) είναι επίσης φανερό ότι επειδή η σειρά έχει *βήμα δύο* –«πηδάει» από το k στο $k+2$– θα περιέχει ή *μόνο τις άρτιες* ή *μόνο τις περιττές* δυνάμεις του x ανάλογα με το «σημείο εκκίνησης». Αν ξεκινά με τη μηδενική δύναμη –δηλαδή τον σταθερό όρο a_0– τότε θα περιέχει μόνο τις άρτιες δυνάμεις, ενώ αν ξεκινά με την πρώτη δύναμη –με συντελεστή a_1–

τότε θα περιέχει μόνο τις περιττές. Επομένως οι λύσεις θα είναι άρτιες ή περιττές, όπως το περιμέναμε.

Παρατηρώντας τώρα πιο προσεκτικά την αναδρομική σχέση (8), διαπιστώνουμε αμέσως ότι αν είναι

$$2E-1=2n \;\Rightarrow\; E=E_n=n+\frac{1}{2}, \tag{9}$$

τότε θα γράφεται ως

$$a_{k+2}=\frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)}a_k \tag{10}$$

από όπου είναι αμέσως φανερό ότι η σειρά τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο βαθμού n, αφού για $k=n$ ο αναδρομικός τύπος δίνει μηδέν και έτσι όλοι οι συντελεστές βγαίνουν μηδέν από εκεί και πέρα. Καταλήξαμε έτσι στο ήδη γνωστό αποτέλεσμα αλλά με μια συστηματική διαδικασία που κατοχυρώνει απόλυτα την ορθότητά του.(*) Επιπλέον τώρα έχουμε στη διάθεσή μας και έναν αναδρομικό τύπο που μας επιτρέπει να υπολογίζουμε πολύ εύκολα τους συντελεστές των πολυωνυμικών λύσεων για οποιοδήποτε n. Παραδείγματος χάριν, για το πολυώνυμο δευτέρου βαθμού ($n=2$) η αναδρομική σχέση (10) θα ξεκινά με τον σταθερό όρο a_0 –τον οποίο μπορούμε να θεωρήσουμε ίσο με τη μονάδα για τους γνωστούς λόγους–, οπότε θα έχουμε

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

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

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

που είναι, βεβαίως, το γνωστό μας αποτέλεσμα.

Εντελώς ανάλογα, για το πολυώνυμο με $n=5$ η (10) θα γράφεται ως

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

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

(*) Είναι χρήσιμο να θυμηθούμε από αυτή την άποψη ότι εκείνο που αποδείξαμε στο κείμενο είναι απλώς τούτο: ότι, *αν υπάρχουν* πολυωνυμικές λύσεις της (1) βαθμού n, αυτό θα συμβαίνει μόνο αν το E παίρνει τη διάκριτη ακολουθία τιμών (9). Όμως –όπως είχαμε τονίσει και τότε– αυτή είναι απλώς μια *αναγκαία συνθήκη* αλλά όχι και ικανή να διασφαλίσει την ύπαρξη πολυωνυμικών λύσεων.

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

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

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

και επομένως

$$H_5(x)=a_1x+a_3x^3+a_5x^5=x-\frac{4}{3}x^3+\frac{4}{15}x^5\sim 4x^5-20x^3+15x \qquad (11)$$

που είναι όντως το σωστό αποτέλεσμα, όπως μπορείτε εύκολα να βεβαιωθείτε αντικαθιστώντας το στην (11) και ελέγχοντας αν ικανοποιείται ή όχι. Μην εκπλαγείτε όμως αν ζητήσετε από τον συμβολικό σας υπολογιστή να σας δώσει το πολυώνυμο Hermite $H_5(x)$ και η έκφραση που πάρετε δεν συμπίπτει ακριβώς με την (11). Και ο λόγος γι' αυτό είναι, βεβαίως, γνωστός. Όντας λύσεις μιας ομογενούς εξίσωσης, τα πολυώνυμα Hermite ορίζονται με αυθαιρεσία μιας πολλαπλασιαστικής σταθεράς $-$που μπορεί να εξαρτάται από το $n-$ η οποία έχει επιλεγεί στη βιβλιογραφία με βάση κάποια «συνθήκη κανονικοποίησης» που τα ορίζει πλέον με έναν μονοσήμαντο τρόπο· έτσι ώστε όταν χρησιμοποιούμε το συναρτησιακό σύμβολο $H_n(x)$ να αναφερόμαστε όλοι σε μια απολύτως καθορισμένη πολυωνυμική συνάρτηση χωρίς πολλαπλασιαστική αυθαιρεσία. Ποια είναι αυτή η «συνθήκη κανονικοποίησης» και τι ενδιαφέρουσες ιδιότητες έχουν τα έτσι οριζόμενα πολυώνυμα Hermite θα το βρει ο αναγνώστης στο βιβλίο: Σ. Τραχανάς, *Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις*, σ. 446. Η κανονικοποίηση αυτή προκύπτει επίσης από την αλγεβρική μέθοδο που χρησιμοποιήσαμε στο κείμενο και ειδικότερα από τον τύπο του Rodrigues.

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

$$\psi(x)=\psi_\infty(x)F(x)=e^{-\lambda x^\mu}F(x) \qquad (12)$$

όπου $F(x)$ η *συμπληρωματική συνάρτηση* για την οποία ευλόγως εικάζουμε ότι θα έχει τη μορφή ενός πολυωνύμου όλων των δυνατών βαθμών ώστε η πλήρης κυματοσυνάρτηση (12) να έχει τον απαιτούμενο αριθμό κόμβων, δηλαδή την αναμενόμενη *κυματοειδή μορφή*. Η περίπτωση του δυναμικού $V = \frac{1}{2}gx^6$ –το 1/2 μπήκε για λόγους κατοπινής ευκολίας– προσφέρεται ως ένα καλό παράδειγμα για το «πού μπορεί να κολλήσει» το παραπάνω γενικό σχέδιο. Όπως μπορείτε μόνοι σας να δείτε –με κατευθείαν αντικατάσταση στην εξίσωση Schrödinger– ο ασυμπτωτικός παράγοντας σε αυτή την περίπτωση έχει τη μορφή $\psi_\infty(x) = \exp(-x^4/4)$, οπότε η (12) θα γράφεται ως

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

και η αντικατάστασή της στην εξίσωση Schrödinger

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

θα δώσει τη νέα, ως προς F, εξίσωση

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

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

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

Θα πρέπει όμως να πούμε ταυτόχρονα ότι *όλα* τα «κλασικά» προβλήματα της κβαντομηχανικής που επιδέχονται ακριβή λύση –αρμονικός ταλαντωτής, άτομο υδρογόνου, θεωρία στροφορμής κ.λπ.– λύνονται με την πολυωνυμική μέθοδο. Και επειδή με αυτά ακριβώς τα προβλήματα πρόκειται να ασχοληθούμε εδώ, η πολυωνυμική μέθοδος είναι το *βασικό* μας εργαλείο ακριβούς επίλυσης της εξίσωσης Schrödinger αν πρόκειται να χρησιμοποιήσει κανείς μεθόδους διαφορικών εξισώσεων και όχι την αλγεβρική μέθοδο στην οποία δίνουμε έμφαση σε τούτο το βιβλίο. Μάλιστα, προκειμένου να πείσουμε τον αναγνώστη ότι η εφαρμογή της μεθόδου –και ο υπολογισμός βασικών αποτελεσμάτων όπως οι *ιδιοτιμές*– είναι κυριολεκτικά τετριμμένη, του συνιστούμε να συνεχίσει την τακτική που υιοθετήσαμε στο κείμενο, και να αποφύγει την αυστηρή εφαρμογή της μεθόδου των δυναμοσειρών. Να θεωρεί δηλαδή ως δεδομένο ότι υπάρχουν πολυωνυμικές λύσεις και να εφαρμόζει τη σχετική *αναγκαία συνθήκη* η οποία μας δίνει τις ζητούμενες ιδιοτιμές μέσα σε μια γραμμή. Και, βεβαίως, μπορεί να κατασκευάσει κανείς εκπεφρασμένα τουλάχιστον τα δύο-τρία πρώτα πολυώνυμα του κάθε προβλήματος, αφ' ενός για να βεβαιωθεί ότι όντως οι πολυωνυμικές λύσεις υπάρχουν και, αφ' ετέρου, διότι αντιπροσωπεύουν τις πιο βασικές καταστάσεις του συγκεκριμένου κβαντικού συστήματος: τη θεμελιώδη και την πρώτη ή δεύτερη από τις διεγερμένες του. Με την απλοποιημένη αυτή εκδοχή της πολυωνυμικής μεθόδου η ακριβής επίλυση των «κλασικών» προβλημάτων της κβαντομηχανικής αποδεικνύεται πολύ ευκολότερη από ό,τι στην κλασική μηχανική!