ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΑ 5.2

ΣΥΣΤΗΜΑΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΤΗΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ(*)

1. Γιατί υπάρχει πρόβλημα

Όπως είδαμε στον αρμονικό ταλαντωτή και στο άτομο του υδρογόνου, αν απομονώσει κανείς τον μη πολυωνυμικό ασυμπτωτικό παράγοντα που αντιπροσωπεύει τη συμπεριφορά της λύσης στο άπειρο, το υπόλοιπο κομμάτι της κυματοσυνάρτησης έχει την ωραία κλειστή μορφή ενός πολυωνύμου. Οι ενεργειακές ιδιοτιμές είναι ακριβώς εκείνες οι τιμές για τις οποίες η σειρά-λύση τερματίζεται σε ένα πεπερασμένο πολυώνυμο. Αυτός ο τρόπος λύσης επαναλαμβάνεται πανομοιότυπος σε όλα τα επιλύσιμα δυναμικά της κβαντομηχανικής. Και επειδή το καίριο βήμα στη λύση είναι η εύρεση εκείνων των τιμών της ενέργειας για τις οποίες η σειρά τερματίζεται σε ένα πολυώνυμο, γι' αυτό και η μέθοδος είναι γνωστή ως «η πολυωνυμική μέθοδος». (Η ονομασία οφείλεται στον Sommerfeld, αν δεν κάνω λάθος.)

Στην παραδοσιακή της μορφή η μέθοδος είναι εξαιρετικά άκομψη και δύσχρηστη. Για να υπολογίσει κανείς τις ιδιοτιμές πρέπει να αναπτύξει τη ζητούμενη συνάρτηση σε δυναμοσειρά, να βρει την αναδρομική σχέση που ορίζει τους συντελεστές της, να ελέγξει την ασυμπτωτική συμπεριφορά, για να αποφανθεί στο τέλος ότι η σειρά πρέπει να τερματιστεί για να πάρουμε τη φυσικά αποδεκτή λύση. Αυτή είναι μια ευθεία μεν αλλά κοπιώδης και βαρετή διαδικασία, γι' αυτό και δεν ήταν ποτέ δημοφιλής ανάμεσα στους σπουδαστές. (Και όχι μόνο σ' αυτούς.)

Εκτός αυτού, η μέθοδος είναι και θεωρητικά μετέωρη, γιατί δεν είναι σε θέση να μας πει σε ποιες περιπτώσεις είναι εφαρμόσιμη και σε ποιες όχι. Έτσι, αφήνεται κανείς με την εντύπωση ότι όλα τα κβαντομηχανικά προβλήματα μπορούν να επιλυθούν με αυτόν τον τρόπο, πράγμα που κάθε άλλο παρά αληθινό είναι. Όμως αυτή δεν είναι μια αδυναμία της πολυωνυμικής μεθόδου ειδικά, αλλά ολόκληρης της θεωρίας των «ειδικών» διαφορικών εξισώσεων της Μαθηματικής Φυσικής.

(*) Πρόκειται για το 5ο κεφάλαιο της παλιάς *Κβαντομηχανικής* Ι, με ελάχιστες φραστικές αλλαγές.

Επειδή αυτή είναι μια περιοχή των κλασικών μαθηματικών για την οποία κανείς –απ' όσο γνωρίζω– δεν θεωρεί ότι υπάρχει πρόβλημα, γι' αυτό και είναι ανάγκη να εξηγήσω τους λόγους που με κάνουν να πιστεύω ότι η υπάρχουσα θεωρία δεν είναι καθόλου ικανοποιητική ούτε από θεωρητική ούτε από πρακτική άποψη. Και ο λόγος είναι κυρίως τούτος: δεν είναι σε θέση να μας πει ποιες από τις γραμμικές διαφορικές εξισώσεις με μεταβλητούς συντελεστές είναι επιλύσιμες[(*)] και ποιες όχι. Το μόνο που μαθαίνουμε είναι να «αναγνωρίζουμε» μια συλλογή «ειδικών» διαφορικών εξισώσεων όπως, π.χ., τις ακόλουθες

$$x^2y'' + xy' + (x^2 - \nu^2)y = 0 \qquad \textit{(εξίσωση Bessel)}$$

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + \lambda y = 0 \qquad \textit{(εξίσωση Legendre)}$$

$$y'' - 2xy' + \lambda y = 0 \qquad \textit{(εξίσωση Hermite)}$$

$$x(1 - x)y'' + (\alpha x + \beta)y' + \lambda y = 0 \qquad \textit{(κανονική υπεργεωμετρική)}$$

$$xy'' + (\alpha x + \beta)y' + \lambda y = 0 \qquad \textit{(συμβάλλουσα υπεργεωμετρική)}$$

χωρίς καν να διερωτώμαστε ποιο είναι το «ειδικό» χαρακτηριστικό αυτών των εξισώσεων, που τους δίνει μια προνομιούχα θέση μέσα στο αχανές σύνολο των γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με μεταβλητούς συντελεστές. Ή μήπως δεν έχουν τίποτε το προνομιούχο, από καθαρά μαθηματική άποψη, και ενδιαφερθήκαμε γι' αυτές μόνο και μόνο επειδή εμφανίζονται συχνά στα φυσικά προβλήματα;

Αυτή η ασάφεια δεν θα δημιουργούσε κανένα πρακτικό πρόβλημα, αν οι διαφορικές εξισώσεις που συναντούμε στην πράξη συμπεριλαμβάνονταν πάντα σε αυτόν τον κατάλογο. Κάτι που, φυσικά, δεν συμβαίνει. Θεωρήστε, π.χ., την εξίσωση

$$y'' - xy = 0 \tag{1}$$

που είναι γνωστή ως *εξίσωση του Airy* και εμφανίζεται σε μια πολύ μεγάλη ποικιλία προβλημάτων. Έχουμε άραγε κανένα λόγο να πιστεύουμε ότι η (1) θα ανάγεται σε κάποια από τις γνωστές εξισώσεις; Και αν ναι, με ποιον μετασχηματισμό; Απ' όσο γνωρίζω, η υπάρχουσα θεωρία δεν δίνει καμία απάντηση σε αυτό το πολύ πρακτικό και επείγον ερώτημα. Και όμως, τα βιβλία μάς πληροφορούν ότι η (1) ανάγεται στην εξίσωση Bessel με έναν μετασχηματισμό της μορφής

$$y(x) = x^{\alpha}F(\lambda x^{\beta}) \tag{2}$$

[(*)] Στο εξής, όπου «επιλύσιμες» διαβάζετε «ακριβώς επιλύσιμες».

για μια κατάλληλη-μυστηριώδη εκλογή των παραμέτρων α, β και λ. Μπορούμε άραγε να το «μυριστούμε» αυτό εκ των προτέρων; Απ' όσο καταλαβαίνω, όχι. Αφού δεν καταλαβαίνουμε ποιο είναι εκείνο το ειδικό χαρακτηριστικό της (1) που την κάνει να ανάγεται στην Bessel, πώς να καταλάβουμε τη λογική του μετασχηματισμού που πραγματοποιεί αυτή την αναγωγή; Και, εδώ που τα λέμε, δεν μπορούσε να είναι διαφορετικά. Τη στιγμή που δεν καταλαβαίνουμε ποιο είναι το ειδικό μορφολογικό χαρακτηριστικό της ίδιας της εξίσωσης Bessel που την καθιστά μαθηματικά ενδιαφέρουσα, δεν είναι καθαρή ματαιοπονία να προσπαθούμε να «περιγράψουμε» τις εξισώσεις που ανάγονται σε αυτήν;

Όπως έχουν λοιπόν τα πράγματα, δεν είμαστε σε θέση να ξεχωρίσουμε τις επιλύσιμες από τις μη επιλύσιμες εξισώσεις. Κριτήριο επιλυσιμότητας και συστηματική μέθοδος επίλυσης δεν υπάρχει. Διαθέτουμε μόνο μία συλλογή «γνωστών» εξισώσεων, καθώς και μερικές άλλες που ανάγονται σε αυτές για λόγους που δεν είναι αντιληπτοί εκ των προτέρων. Μάλιστα, η κλασική θεωρία των γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με μεταβλητούς συντελεστές, δεν καταπιάνεται καν με το ερώτημα της ακριβούς επιλυσιμότητας. Το κεντρικό της πρόβλημα είναι άλλο. Η μελέτη της αναλυτικής δομής των λύσεων, η οποία καθορίζεται από τα λεγόμενα «ιδιόμορφα σημεία» της διαφορικής εξίσωσης. Όμως η έννοια των ιδιόμορφων σημείων αποδεικνύεται εντελώς ακατάλληλη ως κριτήριο διαχωρισμού των επιλύσιμων από τις μη επιλύσιμες εξισώσεις. Γι' αυτό και η κλασική ταξινόμηση των εξισώσεων, που έχει ως βάση της το πλήθος και τον χαρακτήρα των ιδιόμορφων σημείων τους, δεν λύνει το δικό μας πρόβλημα. (Εξάλλου δεν ήταν αυτή η πρόθεσή της.) Γιατί αυτό που μας ενδιαφέρει εμάς ως φυσικούς ή μηχανικούς δεν είναι μόνο να *μελετήσουμε* τις εξισώσεις αλλά και να τις *λύσουμε*. Το ερώτημα της επιλυσιμότητας πρέπει να μπει λοιπόν, ευθύς εξαρχής, στο επίκεντρο της προβληματικής μας. Πρέπει δηλαδή να προσεγγίσουμε το όλο θέμα των διαφορικών εξισώσεων από μια νέα γωνία, που καθορίζεται από τα ακόλουθα αφετηριακά ερωτήματα:

α. *Πότε μια εξίσωση θα θεωρείται επιλύσιμη; (Ορισμός της επιλυσιμότητας.)*
β. *Μπορούμε να αναγνωρίσουμε τις επιλύσιμες εξισώσεις; (Κριτήριο επιλυσιμότητας.)*
γ. *Μήπως οι επιλύσιμες εξισώσεις συνδέονται μεταξύ τους; Μπορούν άραγε να αναχθούν σε μερικές βασικές εξισώσεις με έναν συστηματικό τρόπο;*

Στις παραγράφους που ακολουθούν θα απαντήσουμε μόνο στα δύο πρώτα ερωτήματα, γιατί αυτό μας αρκεί για να χτίσουμε μια συστηματική θεωρία της πολυωνυμικής μεθόδου που είναι και ο κεντρικός μας στόχος. Το κύριο μέρος της θεωρίας των ακριβώς επιλύσιμων εξισώσεων παρουσιάζεται στο βιβλίο, Σ. Τραχανάς, *Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις*, όπου και παραπέμπεται ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης.

2. Χαρακτηρισμός και ταξινόμηση των επιλύσιμων εξισώσεων

2.1. Το κριτήριο επιλυσιμότητας: Διβάθμιες και μονοβάθμιες εξισώσεις

Ας αρχίσουμε με τη διαπίστωση ότι η μόνη γενική μέθοδος ακριβούς λύσης των γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με μεταβλητούς συντελεστές είναι η *μέθοδος των δυναμοσειρών*. Όπως είδαμε στον αρμονικό ταλαντωτή (Κεφ. 7, § 3), η μέθοδος συνίσταται στο να γράψουμε τη λύση $y(x)$ στη μορφή

$$y(x) = \sum_k a_k\, x^k, \tag{3}$$

να την αντικαταστήσουμε στην εξίσωση και να υπολογίσουμε τους άγνωστους συντελεστές a_k.

ΟΡΙΣΜΟΣ: *Θα λέμε ότι η εξίσωσή μας είναι ακριβώς επιλύσιμη αν οι συντελεστές a_k μπορούν να υπολογιστούν σε κλειστή μορφή συναρτήσει του δείκτη k.*

Αυτός ο «ορισμός της επιλυσιμότητας» δεν είναι καθόλου αυθαίρετος ή υποκειμενικός. Μόνο όταν τα a_k είναι εκπεφρασμένα γνωστά, τότε μόνο μπορούμε να πούμε ότι η συνάρτηση που ορίζεται από την (3) είναι μαθηματικά καθορισμένη και επομένως «γνωστή». Στο κάτω-κάτω σκεφτείτε ότι και οι λεγόμενες «στοιχειώδεις συναρτήσεις» $\exp x$, $\sin x$, $\cos x$ κ.λπ., πάλι μέσω απειροσειρών ορίζονται. Το ότι τις θεωρούμε «γνωστές», απλώς σημαίνει ότι οι απειροσειρές τους έχουν γνωστούς συντελεστές.

Το επόμενο ερώτημα είναι λοιπόν το εξής: «Πότε οι συντελεστές a_k της (3) μπορούν να υπολογιστούν σε κλειστή μορφή;»

Όπως είδαμε από την εξίσωση Hermite, η αντικατάσταση της (3) στην εξίσωση οδηγεί σε μια αναδρομική σχέση, τέτοια ώστε τα a_k να μπορούν πράγματι να υπολογιστούν.

Δυστυχώς, για μια τυχούσα διαφορική εξίσωση η αναδρομική σχέση που προκύπτει έχει τη γενική μορφή

$$A_0(k)a_k + A_1(k)a_{k+1} + \cdots + A_n(k)a_{k+n} = 0, \tag{4}$$

περιέχει δηλαδή τους ζητούμενους συντελεστές a_k με πολλούς διαφορετικούς δείκτες. Αν ο αριθμός των διαφορετικών δεικτών που εμφανίζονται είναι n, τότε λέμε ότι πρόκειται για μια *αναδρομική σχέση με n όρους*. Ας προσθέσουμε ακόμα ότι οι δείκτες δεν είναι υποχρεωτικό να διαφέρουν κατά μονάδα, όπως στην ειδική περίπτωση (4).

Το πρόβλημα τώρα με τις αναδρομικές σχέσεις που έχουν τρεις ή περισσότερους όρους είναι ότι δεν μπορούν να επιλυθούν ακριβώς και να μας δώσουν τον γενικό συντελεστή a_k στη ζητούμενη κλειστή μορφή. Αυτό μπορεί να γίνει μόνο για τις *αναδρομικές σχέσεις με δύο όρους*, οι οποίες μπορούν να γραφούν πάντα στην πρότυπη μορφή

$$a_{k+\ell} = f(k)a_k\,. \tag{5}$$

Ο ακέραιος αριθμός ℓ ονομάζεται εδώ «βήμα» της αναδρομικής σχέσης, γιατί μας λέει ότι η σειρά (3) δεν περιέχει όλες τις δυνάμεις του x παρά μόνο αυτές που προκύπτουν από την εναρκτήρια με άλματα «μήκους» ℓ. Στην περίπτωση της εξίσωσης του Hermite, παραδείγματος χάριν, η αναδρομική σχέση είχε βήμα $\ell = 2$ όπως θυμάστε. Το ότι η (5) μπορεί να λυθεί και να μας δώσει το a_k σε κλειστή μορφή φαίνεται αμέσως, αν σκεφτείτε ότι συνδέει μόνο διαδοχικούς συντελεστές της σειράς,(*) οπότε αν την εφαρμόσουμε επανειλημμένα μπορούμε να βρούμε αμέσως τον γενικό συντελεστή αρκεί να γνωρίζουμε τον πρώτο, ο οποίος όμως μπορεί πάντα να εξισωθεί με τη μονάδα αφού η εξίσωσή μας υποτίθεται ομογενής. Για $\ell = 1$, π.χ., η λύση της (5) θα είναι

$$a_k = f(0)f(1)\ldots f(k-1) = \prod_{0}^{k-1} f(k).$$

Επιλύσιμες με τη μέθοδο των δυναμοσειρών είναι λοιπόν μόνο οι διαφορικές εξισώσεις που οδηγούν σε αναδρομικές σχέσεις με δύο όρους. Ποιες είναι όμως αυτές οι εξισώσεις; Διαθέτουν άραγε κανένα «ορατό» μορφολογικό χαρακτηριστικό που να μας επιτρέπει να τις αναγνωρίζουμε με απλή εποπτεία; Ναι, ευτυχώς, διαθέτουν. Για να διατυπώσουμε το σχετικό «αναγνωριστικό κριτήριο» θα χρειαστεί να εισαγάγουμε μια πολύ απλή έννοια και ένα εξίσου απλό θεώρημα. Μια χρήσιμη προκαταρκτική παρατήρηση είναι η εξής: Μια τυχούσα γραμμική διαφορική εξίσωση με πολυωνυμικούς συντελεστές θα αποτελείται από όρους της γενικής μορφής $x^m y^{(n)}$. Όταν ο διαφορικός τελεστής ενός τέτοιου όρου δράσει πάνω σε μια τυχούσα δύναμη x^k θα δώσει x^{k+d}, όπου $d = m - n$. Θα την μετατοπίσει δηλαδή κατά d. Αυτή η παρατήρηση υποκινεί τον ακόλουθο ορισμό, που η σημασία του θα φανεί καθαρά σε λίγο.

ΟΡΙΣΜΟΣ: *Βαθμός ενός τυπικού όρου $x^m y^{(n)}$ μιας διαφορικής εξίσωσης θα ονομάζεται η διαφορά*

$$d = m - n.$$

Η εξίσωση θα αποκαλείται n-βάθμια, αν περιέχει όρους με n διαφορετικούς βαθμούς.

Αν θεωρήσετε τη συνάρτηση $y(x)$ ως αδιάστατη ποσότητα και τη μεταβλητή x ως μήκος, τότε ο βαθμός d δεν είναι παρά η φυσική διάσταση του όρου $x^m y^{(n)}$ ή ισοδύναμα του διαφορικού τελεστή

(*) Η σειρά προχωράει με βήματα ℓ, όπως είπαμε.

$$L = x^m \frac{d^n}{dx^n}$$

ο οποίος εμφανίζεται στον τυπικό όρο της εξίσωσης. Παραδείγματος χάριν, η εξίσωση του Hermite

$$y'' - 2xy' + \lambda y = 0$$

είναι προφανώς *διβάθμια*. Ο πρώτος όρος της (y'') έχει βαθμό $d_1 = -2$ ενώ οι άλλοι δύο ($-2xy'$ και λy) βαθμό $d_2 = 0$. Αντίθετα, η εξίσωση

$$xy'' + x^2y' + y = 0$$

είναι *τριβάθμια*. Ο πρώτος όρος της έχει βαθμό μείον ένα, ο δεύτερος συν ένα και ο τρίτος μηδέν. Σημειώστε ότι για τον χαρακτηρισμό μιας εξίσωσης ως διβάθμιας, τριβάθμιας κ.λπ., δεν έχει σημασία το ποιοι είναι οι βαθμοί $d_1, d_2, \ldots$ που περιέχει, αλλά μόνο το πλήθος τους. Και εννοείται βεβαίως ότι οι όροι του ίδιου βαθμού μετράνε ως ένας. Παραδείγματος χάριν, η εξίσωση του Bessel

$$x^2y'' + xy' + (x^2 - \nu^2)\, y = 0$$

είναι επίσης διβάθμια, παρόλο που οι δύο βαθμοί της (μηδέν και συν δύο) είναι διαφορετικοί από εκείνους της Hermite. Με άλλα λόγια, μια εξίσωση είναι διβάθμια αν οι όροι της μπορούν να χωριστούν σε δύο ομάδες καθορισμένου βαθμού η καθεμία. Το πόσοι όροι περιέχονται στην κάθε ομάδα και το ποιος είναι ο κοινός τους βαθμός δεν έχει καμιά σημασία. Το ίδιο ισχύει και για μια n-βάθμια εξίσωση, μόνο που εδώ θα έχουμε n διαφορετικές ομάδες. Υπάρχουν φυσικά και *μονοβάθμιες εξισώσεις* όπως, π.χ., η

$$x^2y'' + xy' + y = 0,$$

της οποίας όλοι οι όροι έχουν τον ίδιο βαθμό. Αυτές οι εξισώσεις είναι γνωστές στη βιβλιογραφία ως *εξισώσεις του Euler*.

Η σπουδαιότητα της έννοιας του βαθμού και της ταξινόμησης των εξισώσεων που υπαγορεύεται από αυτήν, προκύπτει αμέσως από το ακόλουθο θεώρημα:

ΘΕΩΡΗΜΑ: *Μια n-βάθμια διαφορική εξίσωση οδηγεί σε μια αναδρομική σχέση με n όρους.*

Η λογική της απόδειξης αυτού του θεωρήματος είναι τελείως απλή, γι' αυτό και είναι προτιμότερο να την πούμε με λόγια αντί να τη θάψουμε κάτω από ένα σωρό περιττές πράξεις. Η ιδέα είναι η εξής: Αν αντικαταστήσουμε σε μια τυχούσα n-βάθμια εξίσωση τη δυναμοσειρά-λύση $y(x) = \sum a_k\, x^k$, τότε η γενική της δύναμη x^k θα υποστεί n διαφορετικές μετατοπίσεις $d_1, d_2, \ldots, d_n$, όσοι δηλαδή είναι οι διαφορετικοί βαθμοί των όρων της εξίσωσης. Συγκεκριμένα, οι δυνάμεις που θα προκύψουν από τη x^k θα είναι x^{k+d_1}, $x^{k+d_2}, \ldots, x^{k+d_n}$. Εν συνεχεία, πρέπει να κάνουμε τις αντίστροφες μετατοπίσεις δείκτη

$$k \to k - d_1, \quad k \to k - d_2, \quad \ldots, k \to k - d_n$$

ώστε να επαναφέρουμε μια κοινή γενική δύναμη x^k στις επιμέρους σειρές και να μηδενίσουμε το συντελεστή της. Η εξίσωση που θα προκύψει θα έχει λοιπόν τη μορφή

$$A_1(k)a_{k-d_1} + \cdots + A_n(k)a_{k-d_n} = 0,$$

θα είναι δηλαδή μια αναδρομική σχέση με n όρους, όπως θέλαμε να δείξουμε. Επιπρόσθετα, βρήκαμε ότι οι δείκτες με τους οποίους εμφανίζονται οι άγνωστοι συντελεστές a_k στην αναδρομική σχέση, προκαθορίζονται από τους βαθμούς $d_1, \ldots, d_n$ της εξίσωσης. Οι λεπτομέρειες της μορφής της μπορούν να επηρεάσουν μόνο τις εκφράσεις των συντελεστών $A_1(k) \ldots A_n(k)$ της αναδρομικής σχέσης αλλά όχι το πλήθος των όρων της. Ειδικότερα, για μια διβάθμια εξίσωση με βαθμούς d_1, d_2,(*) η αναδρομική σχέση θα έχει δύο όρους με συγκεκριμένη μορφή την

$$A_1(k)a_{k-d_1} + A_2(k)a_{k-d_2} = 0,$$

η οποία γράφεται πάντα στην ισοδύναμη τυπική μορφή

$$a_{k+\ell} = f(k)a_k,$$

όπου

$$\ell = d_2 - d_1.$$

Καταλήξαμε λοιπόν στο πολύ σημαντικό συμπέρασμα ότι: *μόνο οι διβάθμιες εξισώσεις είναι ακριβώς επιλύσιμες με τη μέθοδο των δυναμοσειρών, γιατί μόνο αυτές οδηγούν σε μια αναδρομική σχέση με δύο όρους, μέσω της οποίας ο γενικός συντελεστής της σειράς-λύσης μπορεί να υπολογιστεί σε κλειστή μορφή.* Επιπλέον βρήκαμε ότι το βήμα της αναδρομικής σχέσης ισούται με τη διαφορά των δύο βαθμών της εξίσωσης και επομένως μπορεί να βρεθεί με απλή της εποπτεία. Στις επιλύσιμες εξισώσεις πρέπει να προστεθεί και η τετριμμένη κατηγορία των *μονοβάθμιων* οι οποίες, σύμφωνα με το γενικό θεώρημα, οδηγούν σε αναδρομική σχέση με έναν μόνο όρο, το οποίο σημαίνει ότι δεν υπάρχει πια μηχανισμός που να συνδέει διαφορετικούς συντελεστές της σειράς, οπότε η τελευταία θα εκφυλίζεται σε μία μόνο δύναμη. Σε αυτή την περίπτωση λοιπόν, η λύση θα είναι της μορφής $y = x^s$, όπου το s υπολογίζεται με κατευθείαν αντικατάσταση στην εξίσωση.

(*) Στο εξής θα υποθέτουμε πάντα ότι $d_1 < d_2$.

Παραδείγματος χάριν, για την εξίσωση

$$x^2y'' + xy' - y = 0,$$

η οποία είναι εμφανώς μονοβάθμια, η αντικατάσταση $y = x^s$ δίνει

$$x^2 s(s-1)x^{s-2} + xsx^{s-1} - x^s = 0$$

$$\Rightarrow \ \big(s(s-1) + s - 1\big)x^s = 0$$

$$\Rightarrow \ s^2 - 1 = 0 \ \Rightarrow \ s = \pm 1.$$

Οι δύο λύσεις της εξίσωσης θα είναι λοιπόν οι

$$y_1(x) = x, \qquad y_2(x) = \frac{1}{x}\cdot$$

Είναι εύκολο να δείτε ότι οι μονοβάθμιες εξισώσεις οποιασδήποτε τάξης ανάγονται στις εξισώσεις με σταθερούς συντελεστές, με την αλλαγή μεταβλητής $x = e^t$. Επομένως δεν είναι παρά μια διαφορετική μορφή αυτών των εξισώσεων. Έτσι φτάσαμε σε μια ενοποιημένη θεώρηση των επιλύσιμων εξισώσεων η οποία περιλαμβάνει τόσο τις «ειδικές» (Bessel, Legendre, Hermite κ.λπ.), που είναι όλες τους διβάθμιες, όσο και εκείνες με σταθερούς συντελεστές οι οποίες μπορούν πάντα να αναχθούν σε μονοβάθμιες. (Μια αναγωγή που δεν είναι βέβαια πρακτικά αναγκαία.)

2.2. Από ποια δύναμη αρχίζει η δυναμοσειρά-λύση; Η συνθήκη έναρξης

Υπάρχει ένα τελευταίο ζήτημα που απομένει να εξεταστεί. Μέχρι τώρα γράφαμε τη δυναμοσειρά-λύση στη μορφή $y(x) = \sum_k a_k x^k$ χωρίς να προσδιορίζουμε τη δύναμη από την οποία αρχίζει. Αυτή η ασάφεια ίσως μάλιστα και να ενθάρρυνε την εντύπωση ότι μπορούμε να αρχίζουμε τη σειρά απ' όπου εμείς θέλουμε. Ή, έστω, από τον σταθερό όρο, δηλαδή τη μηδενική δύναμη. Το οποίο είναι τελείως λάθος. Τις εναρκτήριες δυνάμεις της σειράς τις καθορίζει η ίδια η εξίσωση, και μάλιστα με έναν πολύ απλό μηχανισμό. Η σχετική ανάλυση θα υποβοηθηθεί αν αναλύσουμε τον διαφορικό τελεστή L της διβάθμιάς μας εξίσωσης στις δύο μονοβάθμιες συνιστώσες του L_1 (βαθμού d_1) και L_2 (βαθμού d_2). Αν δηλαδή τον γράψουμε στη μορφή

$$L = L_1 + L_2.$$

Για να καταλάβετε τι σημαίνουν όλα αυτά, πάρτε ως παράδειγμα την εξίσωση του Hermite

$$y'' - 2xy' + \lambda y = 0$$

της οποίας η συμβολική γραφή $Ly = 0$ είναι

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\,\frac{d}{dx} + \lambda\right)y = 0,$$

οπότε ο διαφορικός της τελεστής L θα είναι ο

$$L = \frac{d^2}{dx^2} - 2x\,\frac{d}{dx} + \lambda = L_1 + L_2$$

όπου

$$L_1 = \frac{d^2}{dx^2}, \qquad L_2 = -2x\,\frac{d}{dx} + \lambda.$$

Με άλλα λόγια, ο L_1 περιέχει όλους τους όρους του L που έχουν βαθμό d_1 και ο L_2 εκείνους που έχουν βαθμό d_2. Και επειδή έχουμε δεχθεί ότι θα είναι πάντα $d_1 < d_2$ γι' αυτό και ο L_1 θα ονομάζεται στο εξής «ελαχιστοβάθμια» συνιστώσα του L, και ο L_2 «μεγιστοβάθμια». Ενώ ανάλογη ορολογία θα ισχύει και για τις αντίστοιχες ομάδες όρων της διαφορικής εξίσωσης. Ας προσθέσουμε ακόμα ότι η δράση ενός μονοβάθμιου τελεστή −όπως είναι οι L_1 και L_2− πάνω σε μια δύναμη x^k μετατοπίζει τον εκθέτη της κατά d, όπου d ο βαθμός του τελεστή. Υποθέστε τώρα ότι η εναρκτήρια δύναμη της δυναμοσειράς-λύσης είναι x^s. Θα είναι δηλαδή

$$y(x) = x^s + \textit{ανώτερες δυνάμεις}.$$

Αν δράσουμε πάνω στην $y(x)$ με τον διαφορικό τελεστή $L = L_1 + L_2$ της εξίσωσής μας, η χαμηλότερη δύναμη που θα προκύψει θα είναι η x^{s+d_1} και θα προέλθει μόνο από τη δράση της ελαχιστοβάθμιας συνιστώσας L_1 πάνω στην εναρκτήρια δύναμη x^s της σειράς. Θα έχουμε δηλαδή

$$\begin{aligned} Ly &= L_1 x^s + \textit{ανώτερες δυνάμεις} \\ &= (\textit{σταθερά})\, x^{s+d_1} + \textit{ανώτερες δυνάμεις}. \end{aligned}$$

Για να ικανοποιείται η εξίσωση $Ly = 0$ πρέπει πριν απ' όλα να μηδενίζεται ο συντελεστής της χαμηλότερης δύναμης x^{s+d_1}. Πρέπει δηλαδή να ισχύει η ακόλουθη «συνθήκη έναρξης»

$$L_1 x^s = 0,$$

η οποία διατυπώνεται λεκτικά ως εξής:

Η εναρκτήρια δύναμη της δυναμοσειράς λύσης πρέπει να ικανοποιεί τη μονοβάθμια εξίσωση που σχηματίζουν οι ελαχιστοβάθμιοι όροι της αρχικής.

Σε αντίθεση με τη χαμηλότερη, οι άλλες δυνάμεις της σειράς Ly έχουν «διπλή καταγωγή». Καθεμιά τους προέρχεται από τη δράση τόσο του L_1 όσο και του L_2 πάνω σε δυο διαφορετικές δυνάμεις της σειράς y. Έτσι η απαλοιφή τους εξασφαλίζεται με κατάλληλη εκλογή των συντελεστών της σειράς y. Το ότι μια τέτοια εκλογή είναι δυνατή μας το εγγυάται η ύπαρξη μιας αναδρομικής σχέσης με δύο όρους, μέσω της οποίας αυτοί οι συντελεστές μπορούν να υπολογιστούν έτσι, ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση $Ly = 0$. (Να απαλείφονται δηλαδή όλες οι δυνάμεις της σειράς Ly.) Για να πάρει όμως μπρος η μηχανή της αναδρομικής σχέσης πρέπει να ικανοποιηθεί πρώτα η «συνθήκη έναρξης» η οποία και θα μας προσδιορίσει τις κατάλληλες εναρκτήριες δυνάμεις. Ένα σχετικό παράδειγμα είναι το εξής:

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1: (Η εξίσωση Bessel)

$$x^2y'' + xy' + (x^2 - \nu^2)y = 0.$$

Εδώ ελαχιστοβάθμιοι όροι είναι οι x^2y'', xy', $-\nu^2 y$. Η εναρκτήρια δύναμη x^s πρέπει να ικανοποιεί λοιπόν τη μονοβάθμια εξίσωση

$$\begin{aligned} & x^2(x^s)'' + x(x^s)' - \nu^2(x^s) = 0 \\ & \Rightarrow \ \big(s(s-1) + s - \nu^2\big)x^s = 0 \\ & \Rightarrow \ s^2 - \nu^2 = 0 \ \Rightarrow \ s = \pm\,\nu. \end{aligned}$$

Καθεμιά από τις δύο εναρκτήριες δυνάμεις $s = \pm\,\nu$ ορίζει μια ανεξάρτητη σειρά-λύση σε συμφωνία με το γεγονός ότι η εξίσωσή μας είναι δευτεροτάξια. Και επειδή η Bessel έχει βήμα $\ell = 2$ οι σειρές θα περιέχουν μόνο τις δυνάμεις x^s, $x^{s+2}, \ldots, x^{s+2k}, \ldots$. Θα είναι δηλαδή

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^{s+2k} = x^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^{2k},$$

όπου $s = \pm\,\nu$.

Τελειώνοντας, θα θέλαμε να σημειώσουμε ξανά ότι τα όσα είπαμε προηγουμενως αποτελούν μόνο ένα μικρό μέρος της θεωρίας των διβάθμιων εξισώσεων. Από τα «παραλειπόμενα» αναφέρουμε ενδεικτικά το γεγονός ότι όλες οι διβάθμιες εξισώσεις μπορούν να αναχθούν στις λεγόμενες *υπεργεωμετρικές εξισώσεις* (που είναι και αυτές διβάθμιες) οπότε οι λύσεις τους μπορούν να εκφραστούν μέσω των υπεργεωμετρικών συναρτήσεων και μόνο. *Οι διβάθμιες εξισώσεις αποτελούν μια οικογένεια με όλη τη σημασία του όρου.*

2.3. Πέρα από τις διβάθμιες εξισώσεις: Ο ρόλος της «αφαίρεσης» του ασυμπτωτικού παράγοντα

Τι γίνεται όμως, όταν η εξίσωσή μας είναι παραπάνω από διβάθμια; Σύμφωνα με τα προηγούμενα, μια τέτοια εξίσωση δεν μπορεί να λυθεί κατευθείαν με τη μέθοδο των δυναμοσειρών γιατί θα οδηγήσει σε μια αναδρομική σχέση με τρεις ή περισσότερους όρους, από την οποία είναι εν γένει αδύνατον να υπολογίσει κανείς τους συντελεστές της σειράς σε κλειστή μορφή.

Υπάρχει εντούτοις μια ορισμένη κατηγορία –εποπτικά αναγνωρίσιμη μάλιστα– τριβάθμιων εξισώσεων οι οποίες είναι ακριβώς επιλύσιμες γιατί μπορούν να αναχθούν σε διβάθμιες με έναν συστηματικό τρόπο. Μια τέτοια περίπτωση τη συναντήσαμε ήδη, αν και δεν διαθέταμε ακόμα τα εννοιολογικά εργαλεία για να την αντιληφθούμε ως τέτοια. Πρόκειται για την εξίσωση Schrödinger του αρμονικού ταλαντωτή

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

η οποία είναι προφανώς τριβάθμια. Ο όρος ψ'' έχει βαθμό μείον δύο, ο $2E\psi$ βαθμό μηδέν και ο $-x^2\psi$ συν δύο. Όμως όταν αφαιρέσουμε από την ψ την ασυμπτωτική της συμπεριφορά στο άπειρο, κάνοντας το μετασχηματισμό

$$\psi(x) = e^{-x^2/2} H(x) \tag{6}$$

τότε καταλήγουμε στη νέα εξίσωση (εξίσωση του Hermite)

$$H'' - 2xH' + (2E - 1)H = 0,$$

η οποία είναι πια *διβάθμια*. Από καθαρά μαθηματική άποψη λοιπόν, το αποτέλεσμα του μετασχηματισμού (6) –το οποίο εξηγεί και τη βαθύτερη αναγκαιότητά του– είναι ότι μετατρέπει την αρχική τριβάθμια εξίσωση σε διβάθμια. Όπως θα δούμε και σε άλλα σχετικά προβλήματα σε λίγο, η αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα κάνει πάντα την ίδια ακριβώς δουλειά. *Μετατρέπει την εξίσωσή μας σε διβάθμια.* Έτσι, το μόνο που έχουμε να κάνουμε από κει και πέρα είναι να αναζητήσουμε τις τερματιζόμενες λύσεις της.

Στην παράγραφο που ακολουθεί θα δείξουμε ότι αυτό μπορεί να γίνει με έναν εξαιρετικά απλό τρόπο.

3. *Το βασικό θεώρημα της πολυωνυμικής μεθόδου: Η συνθήκη ύπαρξης τερματιζόμενων λύσεων*

Υποθέστε τώρα ότι η δυναμοσειρά τερματίζεται σε μια δύναμη x^ν. Έστω δηλαδή ότι

$$y = x^\nu + \textit{κατώτερες δυνάμεις}.$$

Αν δράσουμε πάνω στην y με τον διαφορικό τελεστή $L = L_1 + L_2$ της διαφορικής μας εξίσωσης, τότε θα πάρουμε πάλι μια τερματιζόμενη σειρά, της οποίας η μέγιστη δύναμη θα είναι η $x^{\nu+d_2}$ και θα προέρχεται αποκλειστικά από τη δράση της μεγιστοβάθμιας συνιστώσας L_2 (βαθμού d_2) πάνω στη δύναμη τερματισμού x^ν. Θα είναι δηλαδή

$$\begin{aligned} Ly &= L_2 x^\nu + \textit{κατώτερες δυνάμεις} \\ &= (\textit{σταθερά})\, x^{\nu+d_2} + \textit{κατώτερες δυνάμεις}. \end{aligned}$$

Για να ικανοποιείται η εξίσωση $Ly = 0$ θα πρέπει σίγουρα να μηδενίζεται ο συντελεστής της μέγιστης δύναμης $x^{\nu+d_2}$. Θα πρέπει, με άλλα λόγια, να ισχύει η ακόλουθη «συνθήκη τερματισμού»

$$L_2 x^\nu = 0 \tag{7}$$

της οποίας το περιεχόμενο διατυπώνεται απλά ως εξής:

Η δύναμη τερματισμού πρέπει να ικανοποιεί τη μονοβάθμια εξίσωση που σχηματίζουν οι μεγιστοβάθμιοι όροι της αρχικής.

Αρκεί όμως αυτή η συνθήκη για να εξασφαλίσει την ύπαρξη τερματιζόμενων λύσεων; Όχι, δεν αρκεί. Και ο λόγος είναι απλός.

Η λύση αρχίζει από κάποια εναρκτήρια δύναμη s και προχωρεί κατά βήματα ℓ. Έτσι μπορεί να τερματιστεί μόνο σε μια δύναμη ν, που απέχει από την εναρκτήρια κατά ακέραιο αριθμό βημάτων. Πρέπει δηλαδή να ισχύει η σχέση

$$\nu = s + n\ell, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{8}$$

Αν αυτό συμβαίνει, τότε όλα θα δουλέψουν ρολόι. Η συνθήκη έναρξης θα μας προσδιορίσει την εναρκτήρια δύναμη s, δηλαδή το σημείο εκκίνησης. Αμέσως μετά θα πάρει μπρος η μηχανή της αναδρομικής σχέσης

$$a_{k+\ell} = f(k) a_k$$

η οποία θα βγάζει τον ένα μετά τον άλλο τους συντελεστές των επόμενων δυνάμεων. Αν η δύναμη τερματισμού είναι μια από αυτές, τότε μόλις η μηχανή της αναδρομικής σχέσης φτάσει εκεί θα σταματήσει για τα καλά. Γιατί; Διότι σε αυτό το σημείο ο παράγοντας $f(k)$ που συνδέει τον έναν συντελεστή με τον επόμενό του θα μηδενιστεί, οπότε όλοι θα βγαίνουν μηδέν από κει πέρα. Αυτό μπορούμε να το δείξουμε αρκετά εύκολα· δεν θα το κάνουμε όμως, γιατί ο μηχανισμός της όλης υπόθεσης είναι διαισθητικά τόσο προφανής ώστε οι σοβαροφανείς αποδείξεις μόνο να τον συσκοτίσουν μπορούν. Αφήνοντας λοιπόν κατά μέρος το μαθηματικό πρωτόκολλο, ας διατυπώσουμε τις προηγούμενες διαπιστώσεις μας ως θεώρημα.

ΘΕΩΡΗΜΑ: *Μια διαφορική εξίσωση διαθέτει τερματιζόμενες λύσεις αν: α) Είναι διβάθμια. β) Η δύναμη τερματισμού απέχει από την εναρκτήρια κατά ακέραιο αριθμό βημάτων.*

Δεν μένει παρά να προχωρήσουμε στην «πειραματική» επιβεβαίωση αυτού του θεωρήματος, κάνοντας διάφορα παραδείγματα στα οποία το κοινό ζητούμενο είναι να δούμε αν οι εξισώσεις μας έχουν τερματιζόμενες λύσεις και για ποιες τιμές των παραμέτρων τους.

ΠΑΡΑΔΕΙΜΑ 2: (Η εξίσωση του Legendre)

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + \lambda y = 0.$$

Παρατηρήστε κατ' αρχάς ότι η εξίσωση είναι διβάθμια. Ελαχιστοβάθμιος όρος είναι μόνο ο y'' (βαθμού μείον δύο) και μεγιστοβάθμιοι οι $-x^2y''$, $-2xy'$ και λy βαθμού μηδέν. Το βήμα είναι λοιπόν $\ell = 2$.

α. Συνθήκη έναρξης

$$(x^s)'' = s(s-1)x^{s-2} = 0$$
$$\Rightarrow\ s = 0,\, 1.$$

β. Συνθήκη τερματισμού

$$-\,x^2(x^\nu)'' - 2x(x^\nu)' + \lambda(x^\nu) = 0$$
$$\Rightarrow\ \big(-\nu(\nu-1) - 2\nu + \lambda\big)x^\nu = 0$$
$$\Rightarrow\ \lambda = \nu(\nu+1).$$

Για τις λύσεις που ξεκινούν με $s = 0$, δηλαδή από τον σταθερό όρο, το ν θα είναι ένας άρτιος ακέραιος, αφού πρέπει να απέχει από την εναρκτήρια δύναμη κατά πολλαπλάσια του βήματος που είναι $\ell = 2$. Για $s = 1$ θα είναι $\nu = s + n\ell = 1 + 2n =$περιττός ακέραιος. Τελικά λοιπόν το ν μπορεί να είναι ένας τυχών θετικός ακέραιος ή μηδέν.

Συμπέρασμα: Η εξίσωση του Legendre διαθέτει τερματιζόμενες λύσεις μόνο όταν η παράμετρος λ παίρνει μία από τις τιμές

$$\lambda = n(n+1), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Οι λύσεις είναι άρτια ή περιττά πολυώνυμα, ανάλογα με το αν ο βαθμός τους $\nu = n$ είναι άρτιος ή περιττός αριθμός. Η εκπεφρασμένη μορφή τους μπορεί να βρεθεί με κατευθείαν αντικατάσταση στην εξίσωση.

ΠΑΡΑΔΕΙΜΑ 3: (Η εξίσωση του Laguerre)

$$xy'' + (1-x)y' + \lambda y = 0.$$

Η εξίσωση είναι πάλι διβάθμια με ελαχιστοβάθμιους όρους τους xy'', y' με $d_1 = -1$ και μεγιστοβάθμιους τους $-xy'$, λy με $d_2 = 0$. Το βήμα είναι τώρα $\ell = d_2 - d_1 = 1$.

α. Συνθήκη έναρξης

$$x(x^s)'' + (x^s)' = 0\ \Rightarrow\ \big(s(s-1) + s\big)x^{s-1} = 0$$
$$\Rightarrow\ s = 0. \quad \textit{(διπλή ρίζα)}$$

β. Συνθήκη τερματισμού

$$-x(x^\nu)' + \lambda(x^\nu) = (-\nu + \lambda)x^\nu = 0 \ \Rightarrow \ \lambda = \nu.$$

Η συνθήκη $\nu = s + n\ell$ δίνει εδώ $\nu = 0 + n = n$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$.

Η εξίσωση του Laguerre διαθέτει λοιπόν τερματιζόμενες πολυωνυμικές λύσεις μόνο όταν

$$\lambda = n, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Το γεγονός ότι η συνθήκη έναρξης έδωσε μόνο μία τιμή για το s (διπλή ρίζα) σημαίνει ότι μόνο η μία λύση της εξίσωσης μπορεί να βρεθεί με τη μέθοδο των δυναμοσειρών. Υπάρχει όμως τρόπος, όταν γνωρίζουμε τη μία λύση να βρούμε και την άλλη, αν και αυτό το ζήτημα δεν θα μας απασχολήσει εδώ.

ΠΑΡΑΔΕΙΜΑ 4:

$$xy'' + (1 - x^3)y' + 6x^2y = 0. \tag{1}$$

Εδώ οι δύο ομάδες όρων καθορισμένου βαθμού είναι οι xy'', y' με $d_1 = -1$ και $-x^3y'$, $6x^2y$ με $d_2 = 2$. Το βήμα είναι $\ell = 3$. Οι συνθήκες έναρξης και τερματισμού δίνουν $s = 0$ και $\nu = 6$. Αυτές οι τιμές διαφέρουν προφανώς κατά δύο βήματα, οπότε θα υπάρχει τερματιζόμενη λύση και θα έχει τη μορφή

$$y(x) = 1 + \alpha x^3 + \beta x^6, \tag{2}$$

θα περιέχει δηλαδή μόνο τις δυνάμεις που προκύπτουν από την εναρκτήρια, με άλματα μήκους τρία. Πράγματι, εισάγοντας την (2) στην (1) βλέπετε ότι επαληθεύεται αν τα α, β εκλεγούν ως $\alpha = -2/3$ και $\beta = 1/18$.

Αν ο αριθμητικός συντελεστής του τελευταίου όρου στην (1) ήταν ένας τυχών αριθμός λ, τότε η συνθήκη τερματισμού θα έδινε $\nu = \lambda$, οπότε η απαίτηση να είναι $\nu = s + n\ell$ θα έβγαζε $\nu = 0 + 3n = 3n$ και επομένως

$$\lambda = 3n, \qquad n, 1, 2, \ldots.$$

Βλέπετε έτσι πόσο καθοριστικό ρόλο παίζει το *βήμα* στον προσδιορισμό εκείνων των τιμών μιας παραμέτρου της εξίσωσης για τις οποίες υπάρχουν τερματιζόμενες λύσεις.

ΠΑΡΑΔΕΙΜΑ 5: (Η εξίσωση Schrödinger του αρμονικού ταλαντωτή)

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0. \tag{1}$$

Η (1) είναι γνωστή στη μαθηματική βιβλιογραφία ως «εξίσωση Weber» ή «εξίσωση του παραβολικού κυλίνδρου», και η «επίσημη» γραφή της έχει το σύμβολο λ στη θέση του $2E$. Όπως είπαμε και προηγουμένως, η (1) είναι μια τριβάθμια εξίσωση και επομένως είναι καθαρή ματαιοπονία να προσπαθήσουμε να τη λύσουμε κατευθείαν με τη μέθοδο των δυναμοσειρών. Αν όμως αφαιρέσουμε από την ψ την ασυμπτωτική της συμπεριφορά στο άπειρο, κάνοντας την αντικατάσταση

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

τότε παίρνουμε τη νέα εξίσωση

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

η οποία είναι πια διβάθμια και επομένως για κατάλληλες τιμές της παραμέτρου E μπορεί να έχει τερματιζόμενες λύσεις. Ας τις αναζητήσουμε:

α. Συνθήκη έναρξης

Ελαχιστοβάθμιος όρος στην (2) είναι μόνο ο H'', οπότε η εναρκτήρια δύναμη x^s θα ικανοποιεί την εξίσωση

$$(x^s)'' = s(s-1)x^{s-2} = 0 \;\Rightarrow\; s = 0,\ 1.$$

β. Συνθήκη τερματισμού

Μεγιστοβάθμιοι όροι της (2) είναι οι $-2xH'$ και $(2E-1)H$. Έτσι η δύναμη τερματισμού x^ν θα ικανοποιεί την

$$-2x(x^\nu)' + (2E-1)x^\nu = (-2\nu + 2E - 1)x^\nu$$

$$\Rightarrow\; E = \nu + \frac{1}{2}. \tag{3}$$

Επειδή οι εναρκτήριες δυνάμεις είναι μηδέν ή ένα και το βήμα της εξίσωσης $\ell = 2$, το ν μπορεί να είναι ένας τυχών θετικός ακέραιος ή μηδέν. Θέτοντας $\nu = n$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ στην (3) παίρνουμε για τις ενεργειακές ιδιοτιμές τη γνωστή μας έκφραση

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

Όπως βλέπετε από τα παραπάνω παραδείγματα, η εφαρμογή της πολυωνυμικής μεθόδου είναι πλέον τετριμμένη και απαλλαγμένη από όλες τις ανιαρές και κοπιώδεις λεπτομέρειες της παραδοσιακής διαδικασίας. Τώρα δεν χρειάζεται πια ούτε να αντικαθιστούμε μια απειροσειρά στην εξίσωση ούτε να βρίσκουμε την αναδρομική σχέση, ούτε να εξετάζουμε την ασυμπτωτική συμπεριφορά της συνάρτησης που αυτή ορίζει, ούτε … τίποτα! Όλα αυτά είναι τελείως περιττά.

Αν η εξίσωση που προκύπτει μετά την αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα είναι διβάθμια, τότε τελειώσαμε. Το κριτήριο ύπαρξης τερματιζόμενων λύσεων μας δίνει τις ζητούμενες ιδιοτιμές μέσα σε ένα λεπτό. Αν δεν είναι διβάθμια, τότε πάλι τελειώσαμε. Το πρόβλημά μας δεν είναι ακριβώς επιλύσιμο. Μάλιστα, όπως μπορεί να δει κανείς (αν και αυτό το ζήτημα δεν θα μας απασχολήσει εδώ), υπάρχει ένα απλούστατο κριτήριο, βάσει του οποίου μπορούμε να δούμε αμέσως αν η αρχική μας εξίσωση είναι ακριβώς επιλύσιμη ή όχι. Ας προσθέσουμε ακόμα ότι οι τερματιζόμενες λύσεις δεν είναι αναγκαστικά ακέραια πολυώνυμα. Αυτό εξαρτάται από το αν η εναρκτήρια δύναμη s είναι ακέραια ή όχι. Στην πρώτη περίπτωση και όλες οι άλλες δυνάμεις θα είναι ακέραιες, οπότε η λύση θα είναι ένα ακέραιο πολυώνυμο. Στη δεύτερη, η τερματιζόμενη λύση θα περιέχει τις δυνάμεις

$x^s, x^{s+\ell}, x^{s+2\ell}, \ldots, x^{s+n\ell} = x^\nu$ όπου ℓ το βήμα της εξίσωσης. Τότε μπορούμε, αν θέλουμε, να βγάλουμε έξω τον κοινό παράγοντα x^s, οπότε το υπόλοιπο κομμάτι της λύσης θα είναι ξανά ένα ακέραιο πολυώνυμο. Αυτή όμως είναι μια περιττή κίνηση την οποία δεν υπάρχει κανένας λόγος να κάνουμε.

Αξίζει επίσης τον κόπο να αντιληφθούμε στη γενικότητά του το μηχανισμό βάσει του οποίου η συνθήκη ύπαρξης τερματιζόμενων λύσεων δρα ως «συνθήκη κβάντωσης», που επιλέγει μια διάκριτη ακολουθία τιμών μιας ελεύθερης παραμέτρου λ της εξίσωσής μας. Η ιδέα είναι πολύ απλή. Από τις συνθήκες έναρξης και τερματισμού, τα s και ν θα εκφραστούν συναρτήσει του λ. Θα είναι δηλαδή $s = s(\lambda)$ και $\nu = \nu(\lambda)$. (Συνήθως το λ εμφανίζεται μόνο στη μία ομάδα όρων της εξίσωσης $-$στην ελαχιστοβάθμια ή τη μεγιστοβάθμια$-$ οπότε ένα από τα s και ν βγαίνει ανεξάρτητο του λ.) Έτσι, όταν επιβάλουμε την τελική συνθήκη $\nu(\lambda) = s(\lambda) + n\ell$ και λύσουμε ως προς λ θα πάρουμε μια διάκριτη ακολουθία τιμών $\lambda_n = \lambda(n)$.

Στα κβαντομηχανικά προβλήματα το ρόλο της ελεύθερης παραμέτρου λ τον παίζει η ενέργεια E, οπότε είναι τελείως καθαρό πια πώς γίνεται η κβάντωσή της. Βλέπετε δηλαδή ότι όλη αυτή η τεχνική είναι πολύ κατάλληλη για έναν γρήγορο υπολογισμό των ιδιοτιμών, οι οποίες είναι συχνά και το μόνο που μας ενδιαφέρει: η γνώση τους μας δίνει αμέσως το διάκριτο φάσμα εκπομπής ή απορρόφησης του προβλήματος. Όχι βέβαια ότι ο υπολογισμός των ιδιοσυναρτήσεων είναι ιδιαίτερα δύσκολος. Όπως είδαμε στον αρμονικό ταλαντωτή ή το άτομο του υδρογόνου, το μόνο που έχουμε να κάνουμε είναι να αντικαταστήσουμε στη νέα (διβάθμια) εξίσωση το κατάλληλο, ακέραιο ή όχι, πολυώνυμο και να υπολογίσουμε τους συντελεστές του. Στην πράξη, μόνο οι δυο-τρεις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις μάς χρειάζονται, οπότε τα σχετικά πολυώνυμα είναι μικρού βαθμού και ο υπολογισμός τους είναι, ουσιαστικά, τετριμμένος. Ας τονίσουμε τέλος, αν και είναι προφανές, ότι η εφαρμογή της πολυωνυμικής μεθόδου σε ένα οποιοδήποτε κβαντομηχανικό (ή όχι) πρόβλημα δεν απαιτεί καμιά απολύτως ειδική γνώση για οποιαδήποτε «ειδική» διαφορική εξίσωση. Για μας «ειδικές» διαφορικές εξισώσεις δεν υπάρχουν. Υπάρχουν μόνο διβάθμιες εξισώσεις, τις οποίες γνωρίζουμε πώς να χειριστούμε έστω κι αν τις βλέπουμε για πρώτη φορά. Το αν τυχόν τις έχουμε ξαναδεί δεν ωφελεί σε τίποτε. Πάλι την ίδια δουλειά θα κάνουμε.

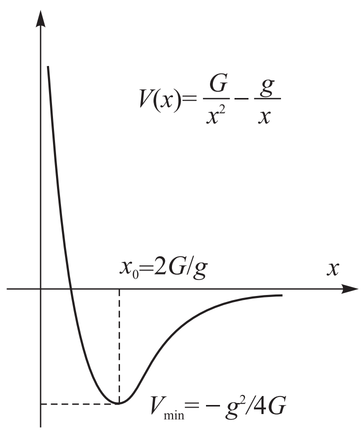
4. Δύο ρεαλιστικά «μοριακά δυναμικά»

Με τα εργαλεία που έχουμε τώρα στη διάθεσή μας μπορούμε να λύσουμε οποιοδήποτε κβαντομηχανικό δυναμικό θέλουμε, αρκεί να είναι επιλύσιμο βέβαια. Εδώ διαλέξαμε να παρουσιάσουμε δύο από αυτά, που συνδυάζουν το τερπνόν μετά του ωφελίμου. Το «τερπνόν» αναφέρεται στο καθαρά μαθηματικό μέρος της λύσης, το οποίο θα σας δώσει την ευκαιρία να ασκηθείτε στη χρήση της πολυωνυμικής μεθόδου και να διαπιστώσετε πόσο εύκολη είναι.

Το «ωφέλιμον» είναι ότι και τα δύο δυναμικά, ιδιαίτερα μάλιστα το δεύτερο, δίνουν μια πολύ πιο ρεαλιστική περιγραφή του δονητικού φάσματος των διατομικών μορίων απ’ ό,τι ο αρμονικός ταλαντωτής. Έτσι συμπληρώνουν πολύ ωραία το φυσικό μέρος των σχετικών κεφαλαίων (Κεφ. 7 και Κεφ. 12, § 3).

Όπως διαπιστώνεται πειραματικά, ο βασικός νόμος του δονητικού φάσματος των διατομικών μορίων είναι ότι: *η απόσταση ανάμεσα στα διαδοχικά ενεργειακά επίπεδα μειώνεται κατά ένα σταθερό ποσό καθώς ανεβαίνουμε στο φάσμα*. Αυτό συνεπάγεται ότι ο συνολικός αριθμός σταθμών θα είναι *πεπερασμένος* και ότι η έκφραση των ενεργειακών ιδιοτιμών θα έχει τη μορφή ενός *δευτεροβάθμιου τριωνύμου ως προς τον κβαντικό αριθμό* n. Αυτό λοιπόν θα είναι το εμπειρικό κριτήριο, βάσει του οποίου θα αποφασίσουμε για το ποιο από τα δυναμικά μας είναι ρεαλιστικότερο. Αρχίζουμε με το λεγόμενο δυναμικό Krätzer και με την αυτονόητη επισήμανση ότι η μεταβλητή x θα αντιστοιχεί τώρα στην απόσταση r μεταξύ των ατόμων του μορίου.

4.1. Το μοριακό δυναμικό Krätzer



Εξίσωση του Schrödinger:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{G}{x^2} + \frac{g}{x}\right)\psi = 0$$

Σχημα 1. Το μοριακό δυναμικό Krätzer

Λύση:

Βήμα 1: (Διαστατική απλοποίηση)

Εδώ το πρόβλημά μας έχει τέσσερις παραμέτρους ($\hbar, m, g$ και G) από τις οποίες μπορούμε να εξισώσουμε με μονάδα μόνο τις τρεις. Ως τέτοιες ας διαλέξουμε τις $\hbar, m$ και g. Έστω λοιπόν ότι

$$\hbar = m = g = 1,$$

οπότε η εξίσωση του Schrödinger θα γράφεται ως

$$\psi'' + 2\left(E - \frac{G}{x^2} + \frac{1}{x}\right)\psi = 0. \tag{9}$$

Παρατηρήστε ότι αυτή είναι μια *τριβάθμια εξίσωση*. Οι όροι ψ'' και $-2G\psi/x^2$ έχουν βαθμό μείον δύο, ο $2E\psi$ βαθμό μηδέν και ο $2\psi/x$ μείον ένα. Ελπίζουμε όμως ότι με την αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα στο άπειρο, η (9) θα μετατραπεί σε διβάθμια. Ας το προσπαθήσουμε.

Βήμα 2: (Αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα)

Στην ασυμπτωτική περιοχή $x \to +\infty$ οι όροι G/x^2 και $1/x$ φεύγουν, οπότε παίρνουμε

$$\psi''_\infty + 2E\psi_\infty = \psi''_\infty - \gamma^2\psi_\infty = 0 \qquad (\gamma^2 = -2E) \tag{10}$$

Επειδή εδώ ενδιαφερόμαστε μόνο για τις δέσμιες καταστάσεις, θα είναι $E < 0$, οπότε δικαιολογούμαστε να θέσουμε $\gamma^2 = -2E$. Η ασυμπτωτική εξίσωση (10) λύνεται αμέσως (και ακριβώς) με αποτέλεσμα

$$\psi_\infty = e^{\pm\gamma x}.$$

Εμάς μας χρειάζεται η λύση που σβήνει στο $+\infty$, οπότε διαλέγουμε το εκθετικό $\exp(-\gamma x)$ και γράφουμε

$$\psi(x) = e^{-\gamma x}F(x) \tag{11}$$

$$\Rightarrow \ \psi'' = e^{-\gamma x}(F'' - 2\gamma F' + \gamma^2 F). \tag{12}$$

Εισαγάγοντας τις (11) και (12) στην (9) παίρνουμε

$$F'' - 2\gamma F' + \left(\frac{2}{x} - \frac{2G}{x^2}\right)F = 0. \tag{13}$$

Όπως βλέπετε, η συνταγή της αφαίρεσης του ασυμπτωτικού παράγοντα έκανε το θαύμα της. Η νέα εξίσωση (13) είναι πια διβάθμια, οπότε μπορούμε να αναζητήσουμε τις τερματιζόμενες λύσεις της.

Βήμα 3: (Αναζήτηση τερματιζόμενων λύσεων)

α) Συνθήκη έναρξης

Ελαχιστοβάθμιοι όροι στη (13) είναι οι F'' και $-2GF/x^2$, οπότε η εναρκτήρια δύναμη x^s θα ικανοποιεί την εξίσωση

$$(x^s)'' - \frac{2G}{x^2}\, x^s = \big(s(s-1) - 2G\big)x^{s-2} = 0$$

$$\Rightarrow\ s^2 - s - 2G = 0\ \Rightarrow\ s = \frac{1 \pm \sqrt{1+8G}}{2}\,.$$

Εδώ κρατάμε μόνο τη ρίζα με το θετικό πρόσημο γιατί η άλλη δίνει λύση που απειρίζεται στο $x = 0$. Θα είναι λοιπόν

$$s = \frac{1 + \sqrt{1+8G}}{2}. \tag{14}$$

β) Συνθήκη τερματισμού

Μεγιστοβάθμιοι όροι της (13) είναι οι $-2\gamma F'$ και $2F/x$, οπότε θα έχουμε

$$-2\gamma(x^\nu)' + \frac{2}{x}(x^\nu) = (-2\gamma\nu + 2)x^{\nu-1} = 0$$

$$\Rightarrow\ \gamma = \frac{1}{\nu}.$$

Για να είναι δυνατός ο τερματισμός, το ν πρέπει να απέχει από το s κατά έναν ακέραιο αριθμό βημάτων. ($\nu = s + n\ell$.) Η (13) έχει βαθμούς $d_1 = -2$ και $d_2 = -1$ άρα $\ell = 1$. Θα είναι λοιπόν $\nu = s + n$ και επομένως

$$\gamma = \frac{1}{s+n}. \tag{15}$$

Υψώνοντας την (15) στο τετράγωνο και παίρνοντας υπ' όψιν ότι $\gamma^2 = -2E$, βρίσκουμε για τις ενεργειακές ιδιοτιμές την έκφραση

$$E_n = -\frac{1}{2}\,\frac{1}{(s+n)^2}\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

όπου το s δίνεται από τη (14) συναρτήσει της δεδομένης παραμέτρου G. Το τελευταίο βήμα είναι να αποκαταστήσουμε τις συνήθεις διαστάσεις στα αποτελέσματα.

Βήμα 4: (Αποκατάσταση των διαστάσεων)

Η αποκατάσταση των διαστάσεων στην έκφραση των ενεργειακών ιδιοτιμών θα γίνει με τη γνωστή αντικατάσταση

$$E_n \to \epsilon E_n,$$

όπου ϵ η χαρακτηριστική ενέργεια του προβλήματος. Επιπλέον, το s πρέπει να παραμείνει αδιάστατο γι' αυτό το G μέσα στην τετραγωνική ρίζα της (14) πρέπει να διαιρεθεί με την αντίστοιχη χαρακτηριστική μονάδα G_0. Για την αποκατάσταση των διαστάσεων στις κυματοσυναρτήσεις θα χρειαστούμε επίσης και το χαρακτηριστικό μήκος a. Ας ξεκινήσουμε με το τελευταίο. Το πρόβλημά μας είναι να κατασκευάσουμε μια ποσότητα με διαστάσεις μήκους από τα τρία μεγέθη $\hbar, m$ και g που εξισώσαμε με μονάδα. Ως συνήθως, δεν θα ακολουθήσουμε τον ευθύ αλλά κοπιώδη τρόπο $-$να γράψουμε δηλαδή $a = \hbar^{\mu} m^{\nu} g^{\lambda}$ και να προσδιορίσουμε τα μ, ν, λ εξισώνοντας τις διαστάσεις$-$ αλλά θα συνδυάσουμε δυο-τρεις γνωστές εκφράσεις που περιέχουν τα $\hbar, m, g$ και το a. Επειδή στο δυναμικό εμφανίζεται ο όρος g/x, το g/a θα έχει διαστάσεις ενέργειας. Διαστάσεις ενέργειας έχει όμως και η έκφραση $\hbar^2/ma^2$, όπως ήδη γνωρίζουμε. Εξισώνοντας αυτές τις δύο ομοδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε

$$\frac{g}{a} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \;\Rightarrow\; a = \frac{\hbar^2}{mg}.$$

Βάζοντας το a στο g/a ή στο $\hbar^2/ma^2$ παίρνουμε για τη χαρακτηριστική ενέργεια τον τύπο

$$\epsilon = \frac{mg^2}{\hbar^2}.$$

Οι διαστάσεις του G είναι (ενέργεια) $\times$ (μήκος)^2, αφού ο όρος G/x^2 εμφανίζεται στο δυναμικό. Η σχετική χαρακτηριστική μονάδα G_0 θα είναι λοιπόν

$$G_0 = \epsilon\, a^2 = \frac{mg^2}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{mg}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{m},$$

οπότε η διαστατικά αποκαταστημένη μορφή των ενεργειακών ιδιοτιμών θα είναι τελικά η

$$E_n = -\frac{mg^2}{2\hbar^2 (s+n)^2} \qquad\qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

όπου

$$s = \frac{1 + \sqrt{1 + \dfrac{8mG}{\hbar^2}}}{2}.$$

Παρατηρήστε ότι αφού το G έχει διαστάσεις $\hbar^2/m$ δεν είναι διαστατικά ανεξάρτητο από τα $\hbar$ και m. Αυτό σημαίνει ότι αν τυχόν επιλέγαμε να εξισώσουμε με μονάδα την τριάδα $\hbar, m, G$ αντί της $\hbar, m, g$ θα είχαμε κάνει λάθος. Με άλλα λόγια, σε ένα πρόβλημα που έχει περισσότερες από τρεις παραμέτρους, έχουμε το δικαίωμα να δώσουμε αυθαίρετες τιμές σε όποια τριάδα θέλουμε, υπό τον όρο ότι τα μέλη της είναι διαστατικά ανεξάρτητα.

Φυσική ανάλυση των αποτελεσμάτων

- Ας ελέγξουμε πρώτα την ορθότητα του αποτελέσματός μας, με κριτήριο το αν η θεμελιώδης στάθμη πέφτει ή όχι στον πυθμένα του δυναμικού στο κλασικό όριο $\hbar \to 0$ ή $m \to \infty$. Το δυναμικό Krätzer γίνεται ελάχιστο στο σημείο $x = x_0$ όπου

$$\frac{dV}{dx} = -\frac{2G}{x^3} + \frac{g}{x^2} = 0 \ \Rightarrow \ x_0 = \frac{2G}{g}$$

και η ελάχιστη τιμή του, $V_{\min} = V(x_0)$, είναι

$$V_{\min} = -\frac{g^2}{4G}.$$

Εμείς βρήκαμε ότι η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης δίνεται από τον τύπο

$$E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2 s^2} \quad \text{με} \quad s = \frac{1 + \sqrt{1 + 8mG/\hbar^2}}{2}.$$

Στο κλασικό όριο $\hbar \to 0$ ή $m \to \infty$, ο όρος $8mG/\hbar^2$ στην τετραγωνική ρίζα γίνεται πολύ μεγάλος, οπότε το s τείνει ασυμπτωτικά στην έκφραση

$$s \to \sqrt{2mG/\hbar^2}\,.$$

Έτσι, ο τύπος για το E_0 δίνει

$$E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2(2mG/\hbar^2)} = -\frac{g^2}{4G}$$

σε συμφωνία με την απαίτηση του σωστού κλασικού ορίου.

- Οι ιδιοσυναρτήσεις που βρήκαμε έχουν τη μορφή

$$\psi_n(x) = e^{-\gamma x} F_n(x),$$

όπου $F_n(x)$ ένα μη ακέραιο πολυώνυμο που αρχίζει με τη μη ακέραια (εν γένει) δύναμη x^s και τερματίζεται στην $x^\nu = x^{s+n}$. Περιέχει δηλαδή n συνολικά δυνάμεις. Αυτό που μας ενδιαφέρει να τονίσουμε εδώ είναι ότι, λόγω της θετικής εναρκτήριας δύναμης x^s, όλες οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ μηδενίζονται στο $x = 0$. Ισχύει δηλαδή πάντα η συνοριακή συνθήκη

$$\psi_n(0) = 0.$$

Αυτό το αποτέλεσμα είναι όχι μόνο καλόδεχτο, αλλά και αναμενόμενο. Όταν το δυναμικό απειρίζεται στην αρχή, τότε η ίδια η εξίσωση Schrödinger εξαναγκάζει την κυματοσυνάρτηση να μηδενίζεται εκεί. Σε φυσική γλώσσα, αυτό σημαίνει ότι το σωματίδιο αποφεύγει τις περιοχές άπειρης δυναμικής ενέργειας. Ο απειρισμός του δυναμικού στην αρχή, ισοδυναμεί έτσι με την τοποθέτηση ενός αδιαπέραστου τοίχου, ο οποίος εμποδίζει το σωματίδιο να περάσει στην άλλη μεριά του άξονα. Γι' αυτό το λόγο τα προβλήματα αυτού του τύπου είναι προβλήματα «μισού διαστήματος». Μάλιστα, η συνοριακή συνθήκη $\psi(0) = 0$ επιβάλλεται περίπου αυτόματα από την ίδια την εξίσωση και δεν απαιτεί την ενεργό δική μας επέμβαση. (Εμείς πρέπει απλώς να αποφύγουμε μια απειριζόμενη λύση σε αυτό το σημείο.)

- Δυστυχώς το δυναμικό Krätzer είναι μάλλον αποτυχία από φαινομενολογική άποψη. Η έκφραση των ενεργειακών του ιδιοτιμών όχι μόνο δεν είναι ένα τριώνυμο ως προς n –όπως απαιτεί ο σχετικός εμπειρικός νόμος– αλλά δεν θέτει και κανέναν περιορισμό στο n. Υπάρχουν δηλαδή άπειρες δέσμιες καταστάσεις. Πού οφείλεται άραγε η αδυναμία αυτού του δυναμικού να αναπαράγει το εμπειρικό δονητικό φάσμα; Για να μην μακρυγορούμε, ο λόγος είναι ο εξής. Όπως είπαμε αλλού, οι δυνάμεις που συγκρατούν τα άτομα στο μόριο είναι πολύ μικρής εμβέλειας και γίνονται πρακτικά μηδέν όταν τα απομακρύνουμε κατά μία ή δύο ατομικές διαμέτρους. Όμως μια τόσο γρήγορη εξασθένιση είναι χαρακτηριστική ενός εκθετικού νόμου. Περιμένουμε δηλαδή ότι ο δεξιός κλάδος της καμπύλης ενός πραγματικού μοριακού δυναμικού θα περιγράφεται από κάποιο φθίνον εκθετικό. Όσο για τον αριστερό κλάδο, αυτός προέρχεται κυρίως από την ηλεκτροστατική άπωση των δύο πυρήνων και επομένως πρέπει να απειρίζεται σαν $1/r$ στη γειτονιά της αρχής. Στο φως αυτής της ανάλυσης καταλαβαίνουμε αμέσως ότι το βασικό ελάττωμα του δυναμικού Krätzer είναι ότι σβήνει πολύ αργά στο άπειρο –και συγκεκριμένα σαν $1/r$– και όχι εκθετικά, όπως απαιτεί το πραγματικό πρόβλημα. Είναι δηλαδή ένα δυναμικό μεγάλης –και μάλιστα άπειρης[(*)]– εμβέλειας. Και είναι γνωστό –θυμηθείτε το παράδειγμα του δυναμικού Coulomb– ότι τέτοια δυναμικά έχουν άπειρο πλήθος δέσμιων καταστάσεων. Όσον αφορά τη συμπεριφορά στην αρχή, το δυναμικό Krätzer απειρίζεται σαν $1/r^2$ και όχι σαν $1/r$ όπως θα έπρεπε. Όμως το βασικό του ελάττωμα δεν είναι αυτό. Είναι η συμπεριφορά για μεγάλα r.

- Το «δίδαγμα» είναι σαφές: πρέπει να αναζητήσουμε ένα μοριακό δυναμικό που να σβήνει εκθετικά σε μεγάλες αποστάσεις. Επιπλέον πρέπει να είναι και επιλύσιμο. Το πώς αναζητούμε συστηματικά τα επιλύσιμα δυναμικά δεν θα το συζητήσουμε εδώ. Απλώς θα αρκεστούμε στο να πάρουμε έτοιμο το λεγόμενο *μοριακό δυναμικό Morse*

$$V(x) = V_0(e^{-2\lambda x} - 2e^{-\lambda x}) \tag{16}$$

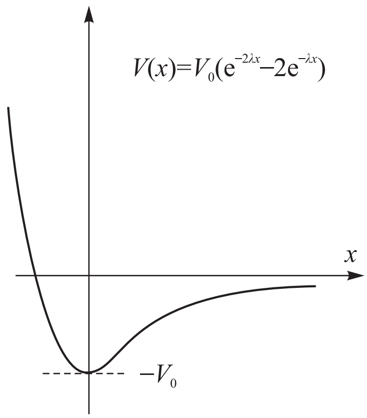
[(*)] Δυναμικά που σβήνουν σαν $1/r$ θεωρούνται *άπειρης εμβέλειας*.

του οποίου η γραφική παράσταση δίνεται στην αρχή της επόμενης παραγράφου. Η μορφή αυτού του δυναμικού απαιτεί ορισμένες διευκρινίσεις. Παρατηρήστε κατ' αρχάς ότι πάει στο μηδέν για $x \to +\infty$ και στο άπειρο για $x \to -\infty$. Δηλαδή δεν απειρίζεται στην αρχή, όπως εμείς θέλουμε, αλλά στο $-\infty$. Αν όμως το μετατοπίσουμε προς τα δεξιά, ώστε το ελάχιστό του να έλθει στο σημείο ισορροπίας $x = x_0$ του μορίου, τότε ο αριστερός του κλάδος, λόγω της εκθετικής ανόδου του, θα κόψει τον κατακόρυφο άξονα τόσο ψηλά, ώστε πρακτικά είναι σαν να έχουμε ένα δυναμικό που απειρίζεται στο $x = 0$. Επειδή όμως αυτή η μετατόπιση του δυναμικού Morse στη «φυσική» του θέση δεν επηρεάζει τις ενεργειακές ιδιοτιμές, γι' αυτό και διαλέξαμε να το γράψουμε σ' εκείνη τη μορφή στην οποία το ελάχιστό του είναι στο μαθηματικά πιο βολικό σημείο $x = 0$. Ο μυστηριώδης συντελεστής «δύο» ανάμεσα στα εκθετικά της (16) αυτόν ακριβώς το σκοπό εξυπηρετεί. Φέρνει δηλαδή το ελάχιστο στο $x = 0$. Όμως το δυναμικό Morse είναι ακριβώς επιλύσιμο και στη γενικότερη μορφή

$$V(x) = Ae^{-2\lambda x} - Be^{-\lambda x}$$

η οποία προκύπτει με μια αυθαίρετη μετατόπιση του x στη (16). Η λύση του δίνεται στην παράγραφο που ακολουθεί. Η μόνη αλλαγή στην προηγούμενη «κωδικοποιημένη» διαδικασία είναι ότι τώρα το δυναμικό αποτελεί μια *άρρητη συνάρτηση* η οποία πρέπει πρώτα να γίνει ρητή με μια κατάλληλη αλλαγή ανεξάρτητης μεταβλητής. Αυτή η «ρητοποίηση» της εξίσωσης του Schrödinger είναι προφανώς αναγκαία, διότι όλη η θεωρία που αναπτύξαμε νωρίτερα είναι εφαρμόσιμη μόνο για εξισώσεις με ρητούς συντελεστές. (Οι οποίοι, βέβαια, μπορούν πάντα να γίνουν πολυώνυμα αν πολλαπλασιαστούν με το ελάχιστο κοινό πολλαπλάσιο των παρονομαστών τους.) Η εξίσωση του Schrödinger για ένα άρρητο δυναμικό $V(x)$ μπορεί σίγουρα να ρητοποιηθεί όταν το $V(x)$ είναι μια ρητή συνάρτηση του εκθετικού. Η κατάλληλη αλλαγή ανεξάρτητης μεταβλητής $t = t(x)$ είναι τότε η $t = \exp(\pm x)$. Ας σημειώσουμε όμως ότι για πολλά από τα άρρητα δυναμικά που επιλύονται ακριβώς (π.χ. το $V(x) = -V_0/\tanh^2 \lambda x$) είναι πιο βολικό να τα ρητοποιήσουμε με την αλλαγή $t = \tanh x$, γιατί η συναρτησιακή τους μορφή είναι συνήθως μια απλή υπερβολική συνάρτηση.

4.2. Το μοριακό δυναμικό Morse



Εξίσωση του Schrödinger

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0 e^{-2\lambda x} + 2V_0 e^{-\lambda x})\psi = 0$$

Σχημα 2. Το μοριακό δυναμικό Morse.

Λύση:

Βήμα 1: (Διαστατική απλοποίηση)

Εδώ έχουμε την ευχέρεια να εξισώσουμε με μονάδα μία από τις τριάδες $(\hbar, m, \lambda)$ ή $(\hbar, m, V_0)$. Προτιμούμε την πρώτη, γιατί για $\lambda = 1$ η αλλαγή μεταβλητής $t = \exp(-\lambda x) = \exp(-x)$ που θα κάνουμε σε λίγο, θα δώσει απλούστερους αριθμητικούς συντελεστές στη μετασχηματισμένη εξίσωση Schrödinger. Έστω λοιπόν

$$\hbar = m = \lambda = 1$$

$$\Rightarrow \ \psi'' + 2(E - V_0 e^{-2x} + 2V_0 e^{-x})\psi = 0. \tag{17}$$

Βήμα 2: (Ρητοποίηση της εξίσωσης του Schrödinger)

Η (17) αποκτά ρητούς συντελεστές με την αλλαγή μεταβλητής

$$t = e^{-x}$$

για την οποία είναι

$$\frac{dt}{dx} = -t \qquad \frac{d^2t}{dx^2} = t$$

και δεδομένου ότι

$$\psi'' = \left(\frac{dt}{dx}\right)^2 \ddot{\psi} + \frac{d^2t}{dx^2}\dot{\psi} \qquad \left(\psi' \equiv \frac{d\psi}{dx},\ \dot{\psi} \equiv \frac{d\psi}{dt}\right)$$

η μετασχηματισμένη μορφή της (17) θα είναι

$$t^2\ddot{\psi} + t\dot{\psi} + 2(E - V_0\,t^2 + 2V_0 t)\psi = 0. \tag{18}$$

Σημειώστε ότι όταν η μεταβλητή x κινείται από μείον άπειρο μέχρι συν άπειρο, το t $(= e^{-x})$ πάει από συν άπειρο έως μηδέν. Θα είναι λοιπόν

$$0 \leqq t \leqq \infty.$$

Παρατηρήστε ακόμα ότι η (18) είναι μια τριβάθμια εξίσωση με βαθμούς *μηδέν* (όροι $t^2\ddot{\psi}$, $t\dot{\psi}$, $2E\psi$), *ένα*, (όρος $4V_0\,t\psi$) και *δύο*, (όρος $-2V_0\,t^2\psi$). Ελπίζουμε όμως ότι με την αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα στο $t = \infty$ η εξίσωση θα μετατραπεί σε διβάθμια. Ας το προσπαθήσουμε.

Βήμα 3: (Αφαίρεση του ασυμπτωτικού παράγοντα)

Στο όριο $t \to \infty$ από τον συντελεστή του ψ στην (18) θα επιζήσει μόνο ο $-2V_0\,t^2$, οπότε η ασυμπτωτική εξίσωση θα είναι

$$t^2\ddot{\psi}_\infty + t\dot{\psi}_\infty - 2V_0\,t^2\psi_\infty = 0. \tag{19}$$

Αν υποθέσουμε επιπλέον ότι (λόγω της υπεροχής του t^2 έναντι του t για μεγάλα t) ο όρος $t^2\ddot{\psi}_\infty$ κυριαρχεί πάνω στον $t\dot{\psi}_\infty$ –υπόθεση που θα ελεγχθεί και εκ των υστέρων– τότε η (19) γράφεται ως

$$\begin{aligned} & t^2\ddot{\psi}_\infty - 2V_0\,t^2\psi_\infty = 0 \\ & \Rightarrow\ \ddot{\psi}_\infty - 2V_0\,\psi_\infty = 0 \\ & \Rightarrow\ \psi_\infty = e^{\pm\gamma t} \qquad\qquad \gamma = \sqrt{2V_0} \end{aligned}$$

και γι' αυτό το αποτέλεσμα ισχύει πράγματι ότι $t^2\ddot{\psi}_\infty \gg t\dot{\psi}_\infty$ για $t \to \infty$, όπως είχαμε υποθέσει. Όπως πάντα, κρατάμε το φθίνον εκθετικό και κάνουμε στην (18) την αντικατάσταση

$$\psi(t) = e^{-\gamma t}F(t)$$

για την οποία είναι

$$\dot{\psi} = e^{-\gamma t}(\dot{F} - \gamma F), \qquad \ddot{\psi} = e^{-\gamma t}(\ddot{F} - 2\gamma\dot{F} + \gamma^2 F), \tag{20}$$

οπότε η (18) –αντικαθιστώντας και την παράμετρο V_0 με το ίσον της $\gamma^2/2$– γίνεται

$$t^2(\ddot{F} - 2\gamma\dot{F} + \gamma^2 F) + t(\dot{F} - \gamma F) + (2E - \gamma^2 t^2 + 2\gamma^2 t)F = 0.$$

Παρατηρήστε ότι οι όροι $t^2\gamma^2 F$ και $-\gamma^2 t^2 F$ από την πρώτη και τελευταία ομάδα αντίστοιχα, απαλείφονται και χάρις σ' αυτή την απαλοιφή καταλήγουμε στη *διβάθμια εξίσωση*

$$t^2\ddot{F} + (t - 2\gamma t^2)\dot{F} + \big(2E + (2\gamma^2 - \gamma)t\big)F = 0 \tag{21}$$

της οποίας ελαχιστοβάθμιοι όροι είναι οι $t^2\ddot{F}$, $t\dot{F}$, $2EF$ με βαθμό μηδέν και μεγιστοβάθμιοι οι $-2\gamma t^2\dot{F}$ και $(2\gamma^2-\gamma)tF$ με βαθμό συν ένα. Το βήμα είναι $\ell = 1$.

Βήμα 4: (Αναζήτηση τερματιζόμενων λύσεων)

α. Συνθήκη έναρξης

$$\begin{aligned} & t^2(t^s)^{\cdot\cdot} + t(t^s)^{\cdot} + 2E(t^s) = 0 \\ \Rightarrow\ & \big(s(s-1) + s + 2E\big)t^s = 0 \\ \Rightarrow\ & s^2 + 2E = 0. \end{aligned} \tag{22}$$

β. Συνθήκη τερματισμού

$$\begin{aligned} & -2\gamma t^2(t^\nu)^{\cdot} + (2\gamma^2-\gamma)t(t^\nu) = 0 \\ \Rightarrow\ & \big(-2\gamma\nu + (2\gamma^2-\gamma)\big)t^{\nu+1} = 0 \\ \Rightarrow\ & \nu = \gamma - \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{23}$$

Επειδή εδώ είναι $\ell = 1$, η συνθήκη $\nu = s + n\ell$ δίνει $\nu = s + n$ οπότε βάσει των (22) και (23) θα έχουμε

$$\begin{aligned} & E_n = -\frac{1}{2}s^2 = -\frac{1}{2}(\nu - n)^2 \\ \Rightarrow\ & E_n = -\frac{1}{2}\left(\gamma - n - \frac{1}{2}\right)^2 \end{aligned} \tag{24}$$

όπου $\gamma(=\sqrt{2V_0}\,)$ μια γνωστή παράμετρος του προβλήματος. Προσέξτε όμως γιατί τώρα το n δεν μπορεί να πάρει μια οσοδήποτε μεγάλη ακέραια τιμή. Πράγματι, επειδή το s πρέπει να είναι πάντα θετικό (ώστε η κυματοσυνάρτηση να είναι πεπερασμένη στο $t = 0 \Rightarrow x = -\infty$), η σχέση

$$\nu = s + n = \gamma - 1/2$$

δίνει αμέσως την ανισότητα

$$s = \gamma - n - 1/2 \geqq 0,$$

δηλαδή

$$n \leqq \gamma - \frac{1}{2}\,, \tag{25}$$

η οποία σημαίνει ότι *το πρόβλημα έχει πεπερασμένο πλήθος δέσμιων καταστάσεων*.

Βήμα 5: (Αποκατάσταση των διαστάσεων)

Δεδομένου ότι η μεταβλητή λx του εκθετικού πρέπει να είναι αδιάστατη, το λ θα έχει διαστάσεις αντίστροφου μήκους, δηλαδή διαστάσεις κυματαριθμού. Έτσι, παίρνοντας ως βάση τον γνωστό τύπο $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ βλέπουμε αμέσως ότι ο μοναδικός συνδυασμός των $\hbar, m$ και λ με διαστάσεις ενέργειας είναι ο

$$\epsilon = \frac{\hbar^2\lambda^2}{m}.$$

Για να επαναφέρουμε τις συνήθεις διαστάσεις στην (24) πρέπει να πολλαπλασιάσουμε το δεύτερο μέλος της με τη χαρακτηριστική ενέργεια ϵ. Επιπλέον, η παράμετρος γ πρέπει να κρατηθεί αδιάστατη, μια και προστίθεται με αδιάστατες ποσότητες. Δεδομένου ακόμα ότι το V_0 στον τύπο $\gamma = \sqrt{2V_0}$ έχει διαστάσεις ενέργειας, πρέπει να διαιρεθεί με ϵ, ώστε το γ να παραμείνει αδιάστατο. Θα είναι δηλαδή $\gamma = \sqrt{2V_0/\epsilon}$ και επομένως

$$E_n = -\frac{\epsilon}{2}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{\epsilon}} - n - \frac{1}{2}\right)^2 \tag{26}$$

ή πιο αναλυτικά

$$E_n = -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar\lambda} - n - \frac{1}{2}\right)^2. \tag{27}$$

Φυσική ανάλυση των αποτελεσμάτων

- Ως συνήθως, το πρώτο μας καθήκον είναι να ελέγξουμε την ορθότητα των αποτελεσμάτων. Ο πιο απλός έλεγχος είναι να δούμε αν η θεμελιώδης στάθμη πέφτει στον πυθμένα του δυναμικού στο κλασικό όριο. Εδώ βρήκαμε ότι

$$E_0 = -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar\lambda} - \frac{1}{2}\right)^2.$$

  Στο όριο $\hbar \to 0$ ή $m \to \infty$ επιζεί μόνο ο πρώτος όρος μέσα στην παρένθεση, οπότε θα έχουμε

$$E_0 \to -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar\lambda}\right)^2 = -V_0.$$

Το ελάχιστο του δυναμικού Morse είναι $-V_0$ και επομένως η E_0 έχει πράγματι το σωστό κλασικό όριο.

- Ας δούμε τώρα αν οι ενεργειακές ιδιοτιμές (27) συμφωνούν με τα φαινομενολογικά δεδομένα. Παρατηρήστε κατ' αρχάς ότι η έκφραση $E_n = E(n)$ που βρήκαμε είναι πράγματι ένα δευτεροβάθμιο τριώνυμο ως προς n, όπως θέλαμε να συμβαίνει. Ειδικότερα, η (27) μπορεί να γραφεί ως

$$E_n = -V_0 + \hbar\lambda\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{28}$$

η οποία είναι ακριβώς η εμπειρική έκφραση

$$E_n = -V_0 + \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\epsilon}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{29}$$

που χρησιμοποιούν οι φασματοσκόποι για να περιγράψουν τα πειραματικά δεδομένα.

Η εμπειρική παράμετρος ϵ στην (29) δίνεται στη θεωρητική έκφραση (28) από την ποσότητα $\varepsilon = \hbar^2\lambda^2/m$, δηλαδή από τη χαρακτηριστική μονάδα ενέργειας. (Υπενθυμίζουμε ότι το ϵ είναι το σταθερό ποσόν, κατά το οποίο μειώνεται η απόσταση των γειτονικών σταθμών καθώς ανεβαίνουμε στο φάσμα.) Η αντιπαραβολή των (28) και (29) μας λέει ακόμα ότι η ποσότητα $\lambda\sqrt{2V_0/m}$ πρέπει να παριστάνει τη συχνότητα ω_0 των μικρών ταλαντώσεων γύρω από τον πυθμένα του δυναμικού Morse. Πράγματι, αν θυμηθούμε ότι η σταθερά ελατηρίου k στον τύπο $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ δίνεται από τη δεύτερη παράγωγο του δυναμικού στο σημείο που έχει ελάχιστο, τότε για την τωρινή περίπτωση θα έχουμε

$$k = V''(0) = \left[V_0(e^{-2\lambda x} - 2e^{-\lambda x})\right]''_{x=0} = 2V_0\lambda^2$$

$$\Rightarrow\ \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{2V_0\lambda^2}{m}} = \lambda\sqrt{\frac{2V_0}{m}} \qquad \text{ό.έ.δ.}$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι το δυναμικό Morse αναπαράγει πλήρως τον βασικό εμπειρικό τύπο του ταλαντωτικού φάσματος των διατομικών μορίων. Αυτό σημαίνει ότι αποτελεί μια πολύ αξιόπιστη περιγραφή των δυνάμεων ανάμεσα στα άτομα. Πράγματι, ο κβαντομηχανικός υπολογισμός αυτών των δυνάμεων συμφωνεί αρκετά καλά με την καμπύλη Morse, εκτός βέβαια από την περιοχή της αρχής, όπου το πραγματικό δυναμικό απειρίζεται.