Το Θεώρημα Feynman-Helman

Μια μέθοδος υπολογισμού των μέσων τιμών τελεστών που εμφανίζονται γραμμικά στη Χαμιλτονιανή. Εφαρμογή στις μέσες διπολικές ροπές και τη «σχέση virial».

῎Εστω ὅτι ἔχομε μιά Χαμιλτονιανή H πού ἐξαρτᾶται ἀπό μιά τυχοῦσα παράμετρο λ —εἶναι δηλαδή $H = H(\lambda)$— καί ἄς ὀνομάσομε $E(\lambda)$ καί $\psi(\lambda)$ τίς ἀντίστοιχες ἰδιοτιμές καί ἰδιοσυναρτήσεις πού θά ἐξαρτῶνται βεβαίως κι αὐτές ἀπό τήν παράμετρο λ. Θά δείξομε ὅτι ἰσχύει ἡ σχέση

$$\left\langle\frac{\partial H}{\partial \lambda}\right\rangle = \frac{\partial E}{\partial \lambda} \tag{1}$$

πού εἶναι γνωστή σάν *θεώρημα Feynman-Helman.*

᾿Απόδειξη: ῎Αν $E(\lambda)$ εἶναι ἡ ἰδιοτιμή πού ἀντιστοιχεῖ στήν ἰδιοσυνάρτηση $\psi(\lambda)$ θἄχομε

$$E(\lambda) = \big(\psi(\lambda),\ H(\lambda)\ \psi(\lambda)\big) \tag{2}$$

ὁπότε, ἄν παραγωγίσομε τά δύο μέλη ὡς πρός λ, θά πάρομε

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ H\psi\right) + \left(\psi,\ H\,\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right) + \left(\psi,\ \frac{\partial H}{\partial \lambda}\,\psi\right) \tag{3}$$

πού θά μᾶς δώσει τήν (1) μόνο ἄν οἱ δύο πρῶτοι ὅροι ἀλληλοαναιρεθοῦν. Πράγματι ἄν λάβομε ὑπ᾽ ὄψιν τήν ἐξίσωση ἰδιοτιμῶν $H\psi = E\psi$ θἄχομε

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ H\psi\right) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ E\psi\right) = E\left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ \psi\right)$$

$$\left(\psi,\ H\,\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right) = \left(H\psi,\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right) = \left(E\psi,\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right) = E\left(\psi,\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right)$$

καί προσθέτοντας κατά μέλη παίρνομε

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ H\psi\right) + \left(\psi, H\,\frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right) = E\left(\left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda},\ \psi\right) + \left(\psi,\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda}\right)\right) =$$

$$= E\,\frac{\partial}{\partial\lambda}\,(\psi,\ \psi) = E\,\frac{\partial}{\partial\lambda}\,1 = 0$$

ὅπου στή δεύτερη γραμμή πήραμε ὑπ' ὄψη τή συνθήκη κανονικοποίησης $(\psi,\ \psi) = 1$.

῾Η σχέση (1) εἶναι ἄμεσα ἀξιοποιήσιμη στήν πολύ συνηθισμένη περίπτωση ὅπου ἡ Χαμιλτονιανή H ἐξαρτᾶται γραμμικά ἀπό τήν παράμετρο λ. Εἶναι δηλαδή $H = H_0 + \lambda A$ ὅπου H_0 καί A τελεστές ἀνεξάρτητοι τοῦ λ. Θἄχομε τότε $\partial H/\partial\lambda = A$, ὁπότε ἡ (1) θά δώσει

$$\langle A\rangle = \frac{\partial E}{\partial\lambda} \tag{4}$$

Ἄν ἑπομένως οἱ ἰδιοτιμές τῆς Χαμιλτονιανῆς $H = H_0 + \lambda A$ εἶναι γνωστές γιά κάθε λ, τότε ἡ μέση τιμή τοῦ τελεστῆ A, στήν ἰδιοκατάσταση πού ἀντιστοιχεῖ στήν τιμή λ, θά προκύπτει ἀμέσως μέ παραγώγιση ὡς πρός λ τῆς ἰδιοτιμῆς E(λ). ῾Ο ἀναγνώστης ἄς ἐλέγξει μόνος του τήν ὀρθότητα τῆς (4) ἐφαρμόζοντας τη στή Χαμιλτονιανή τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτῆ $H = p^2/2m + kx^2/2$ μέ λ τό συντελεστή εἴτε τοῦ x^2 εἴτε τοῦ p^2.

Μιά πρώτη ἐφαρμογή, πού ἔχει ἄμεση σχέση μέ τό τωρινό μας θέμα, ἀφορᾶ τή Χαμιλτονιανή $H = H_0 - qz\mathcal{E}$ ἑνός σωματιδίου φορτίου q πού βρίσκεται μέσα σ' ἕνα ὁμογενές ἠλεκτρικό πεδίο ἐντάσεως $\mathcal{E}$ κατά τή διεύθυνση τοῦ ἄξονα z. Σύμφωνα μέ τήν (4) θἄχομε τότε

$$\langle D_z\rangle = -\frac{\partial E}{\partial\mathcal{E}} \tag{5}$$

ὅπου $D_z = qz$ ἡ z — συνιστώσα τῆς διπολικῆς ροπῆς τοῦ σωματιδίου. Βάσει τῆς (5) τό ἀποτέλεσμα (11) τῆς προηγούμενης παραγράφου προκύπτει ἀμέσως ἀπό τήν (6). ῾Η (5) σέ συνδυασμό μέ τή σχέση-ὁρισμό τῆς πολωσιμότητας $\langle D_z\rangle = \alpha\mathcal{E}$, δίνει γιά τό α τόν τύπο

$$\alpha = \frac{1}{\mathcal{E}}\,\frac{\partial E}{\partial\mathcal{E}} \tag{6}$$

ἀπό τόν ὁποῖο φαίνεται ἀμέσως ὅτι ἄν εἶναι $E = \frac{1}{2}\,\alpha\mathcal{E}^2$ —ὅπως προκύπτει σ' ἕνα διαταρακτικό ὑπολογισμό δεύτερης τάξης— τότε αὐτό τό α παριστάνει πράγματι τήν πολωσιμότητα. Μέ χρήση τῶν παραπάνω ἰδεῶν ἁπλουστεύεται λοιπόν σημαντικά ἡ ἐξαγωγή μερικῶν ἀπό τά προηγούμενά μας ἀποτελέσματα.

Πρίν προχωρήσομε σέ μιά δεύτερη ἐφαρμογή θά δώσομε τώρα καί μιά διαφορετική ἀπόδειξη τῆς (4) πού τήν κάνει μάλλον προφανῆ. ῾Η ἰδέα εἶναι νά κάνομε στήν παράμετρο λ τήν ἀπειροστή μετατόπιση $\lambda \to \lambda + \delta\lambda$ καί στή Χαμιλτονιανή $H_0 + \lambda A + \delta\lambda A = H + \delta\lambda A$ πού προκύπτει, νά θεωρήσομε τόν ὅρο δλA σάν διαταραχή καί νά ἐφαρμόσομε τή θεωρία διαταραχῶν πρώτης τάξης γιά τόν ὑπολογισμό τῆς προκαλούμενης ἐνεργειακῆς μετατόπισης ΔΕ. Θἄχομε λοιπόν

$$\Delta E = <\delta\lambda A> = \delta\lambda <A> \tag{7}$$

ὅπου ὅμως τό ΔΕ ἰσοῦται ἐδῶ μέ $E(\lambda+\delta\lambda) - E(\lambda)$ ἀφοῦ οἱ ἰδιοτιμές $E(\lambda)$ εἶναι γνωστές γιά κάθε λ. Ἔτσι ὁ (7) δίνει ἀμέσως

$$<A> = \frac{E(\lambda+\delta\lambda)-E(\lambda)}{\delta\lambda} \to \frac{\partial E}{\partial \lambda}$$

Τό πρακτικό συμπέρασμα εἶναι ὅτι *οἱ μέσες τιμές τελεστῶν πού ἐμφανίζονται μέ τυχόντα συντελεστή σέ ἀκριβῶς ἐπιλύσιμες Χαμιλτονιανές, μποροῦν πάντα νά ὑπολογιστοῦν ἀκριβῶς, γιά μιά τυχοῦσα ἰδιοκατάσταση.* Συγκρατεῖστε αὐτή τήν παρατήρηση γιατί θά μᾶς χρειαστεῖ στό ἑπόμενο κεφάλαιο.

Τό ἐνδιαφέρον ὅμως εἶναι ὅτι ἡ (4) εἶναι ἀξιοποιήσιμη καί σέ προβλήματα πού δέν λύνονται ἀκριβῶς ἀλλά ἡ ἐξάρτηση τῶν ἐνεργειακῶν τους ἰδιοτιμῶν ἀπό τίς παραμέτρους τῆς Χαμιλτονιανῆς εἶναι διαστατικά προσδιορίσιμη. Ὅπως ἔχομε ξαναπεῖ αὐτό συμβαίνει ὅταν τό δυναμικό εἶναι μόνο μιά δύναμη τοῦ x ὁπότε εἰσάγεται μόνο μία πρόσθετη παράμετρος στό πρόβλημα (ὁ συντελεστής g τῆς δύναμης) πού σέ συνδυασμό μέ τίς «μόνιμες» ħ καί m δίνει ἕνα σύνολο τριῶν παραμέτρων ὁπότε τά πάντα πλέον εἶναι ζήτημα διαστάσεων. Ἄς ἐφαρμόσομε λοιπόν τήν (4) σέ μιά Χαμιλτονιανή τῆς μορφῆς

$$H = \frac{p^2}{2m} + gx^\nu$$

ὅπου οἱ ἐνεργειακές ἰδιοτιμές εἶναι ὑποχρεωμένες —λόγω διαστάσεων— νά ἔχουν τή μορφή

$$E = c\hbar^\alpha m^\beta g^\gamma$$

μέ

$$\alpha = \frac{2\nu}{\nu+2} \quad , \quad \beta = \frac{-\nu}{\nu+2} \quad , \quad \gamma = \frac{2}{\nu+2} \tag{8}$$

Θἄναι ἑπομένως

$$<x^\nu> = \frac{\partial E}{\partial g} = c\hbar^\alpha m^\beta \gamma g^{\gamma-1} = \frac{\gamma}{g} E$$

$$\Rightarrow \ <V> = \gamma E \tag{9}$$

ὅπου $V = gx^\nu$ ἡ δυναμική ἐνέργεια τοῦ προβλήματος. Δεδομένου τώρα ὅτι (γιά ἰδιοκαταστάσεις πάντα) εἶναι $<E> = E = <T>+<V>$ ἡ (9) μπορεῖ νά μετατραπεῖ σέ μιά *σχέση ἀνάμεσα στίς μέσες τιμές κινητικῆς καί δυναμικῆς* *ἐνέργειας*. Γιά σχέσεις αὐτοῦ τοῦ τύπου ὑπῆρχε πάντα ἐνδιαφέρον διότι μᾶς λένε τί ποσοστό τῆς ὁλικῆς ἐνέργειας τοῦ συστήματος εἶναι κινητική καί τί δυναμική. Ἐκφράζουν δηλαδή, κατά κάποιο τρόπο, τό βαθμό «ζωηρότητας» τῆς κίνησης. Ἄν τό μεγαλύτερο ποσοστό τῆς ὁλικῆς ἐνέργειας εἶναι κινητική τότε, προφανῶς, ἡ κίνηση εἶναι πολύ «σφριγηλή». Ἀλλοιώτικα μᾶλλον... κατατονική. Ἐν πάσῃ περιπτώσει, γιά ὅλους αὐτούς τούς λόγους, ἡ σχέση πού συνδέει τά $<T>$ καί $<V>$ σ' ἕνα πρόβλημα εἶναι γνωστή σάν *σχέση ἤ θεώρημα virial*(*) καί ἡ μορφή της στήν περίπτωσή μας εἶναι

$$<V> = \gamma E = \gamma(<T>+<V>) \Rightarrow <T> = \frac{1-\gamma}{\gamma} <V>$$

πού γιά $\gamma = 2/\nu+2$ δίνει τελικά

$$<T> = \frac{\nu}{2} <V> \tag{10}$$

Ἐφαρμόστε μόνοι σας τήν (10) σέ διάφορες εἰδικές περιπτώσεις (π.χ., ἁρμονικός ταλαντωτής καί ἄτομο Ὑδρογόνου) καί συζητεῖστε τό ἀποτέλεσμα.