Συμπληρωμα θεωριας Κεφαλαιου 8

Διατήρηση της στροφορμής σε κεντρικά δυναμικά και οι συνέπειές της

Όπως κατά την κλασική κίνηση σε ένα κεντρικό πεδίο δυνάμεων –όπου το διάνυσμα $\boldsymbol{\ell}$ της στροφορμής παίζει έναν καίριο ρόλο, ακριβώς επειδή είναι διατηρήσιμο– έτσι και στην κβαντομηχανική, η στροφορμή αναμένεται να είναι ένας «βασικός παίκτης» στα αντίστοιχα προβλήματα, και αυτό θα φανεί καθαρά στο αμέσως επόμενο κεφάλαιο, όταν θα αναζητήσουμε το πλήρες σύνολο των λύσεων του ατόμου του υδρογόνου. Αν θέλετε να έχετε μια εκ των προτέρων κατανόηση ορισμένων χαρακτηριστικών αυτών των λύσεων –τα οποία θα προκύψουν αυτόματα από τη διαδικασία επίλυσης– κάντε τα εξής:

α) Επικαλεστείτε την εξίσωση

$$i\hbar\,\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \big\langle [A,H] \big\rangle \tag{1}$$

που δείξατε στο συμπλήρωμα θεωρίας του Κεφαλαίου 4, για να συμπεράνετε ότι: *στην κβαντομηχανική τα διατηρήσιμα μεγέθη είναι εκείνα που μετατίθενται με τη χαμιλτονιανή του προβλήματος*. Δείξτε ότι αυτή η συνθήκη συνεπάγεται όχι μόνο τη διατήρηση της μέσης τιμής αλλά και της αβεβαιότητας και γενικότερα όλης της στατιστικής κατανομής του μεγέθους.

β) Δείξτε ότι κατά την κβαντομηχανική κίνηση σε ένα τυχόν κεντρικό δυναμικό, η στροφορμή είναι μια διατηρήσιμη ποσότητα. Θα ισχύουν δηλαδή οι μεταθετικές σχέσεις

$$[H,\ell_i] = 0, \qquad i \equiv x,y,z \tag{2}$$

άρα –δείξτε το– θα ισχύει και η

$$[H,\boldsymbol{\ell}^2] = 0. \tag{3}$$

γ) Από τις (2) και (3) σε συνδυασμό με τις $[\ell_x,\ell_y] = i\hbar\ell_z +$ κυκλικές μεταθέσεις, συμπεράνετε ότι τα μεγέθη $H,\boldsymbol{\ell}^2$ και ℓ_z είναι συμβιβαστά και άρα μπορούν να έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.

Λύση

α) Σύμφωνα με τον νόμο της χρονικής μεταβολής των μέσων τιμών (βλ. *Συμπλήρωμα θεωρίας* 2, Κεφ. 4)

$$i\hbar \frac{d\langle A\rangle}{dt} = \big\langle [A,H] \big\rangle \tag{4}$$

είναι φανερό ότι αν $[A,H]=0$ –αν δηλαδή το φυσικό μέγεθος A μετατίθεται με τη χαμιλτονιανή του προβλήματος– τότε *η μέση του τιμή διατηρείται σταθερή με τον χρόνο*. Αν όμως είναι $[A,H]=0$, τότε θα είναι επίσης $[A^2,H]=0$ και γενικότερα $[A^n,H]=0$ ή, ακόμα, $[F(A),H]=0$, όπου $F(A)$ μια τυχούσα συνάρτηση του μεγέθους A. Και επειδή η (4) ισχύει για οποιοδήποτε φυσικό μέγεθος –A ή $F(A)$– τότε θα διατηρείται σταθερή με τον χρόνο όχι μόνο η μέση τιμή του A αλλά και η αβεβαιότητα και, γενικότερα, όλη η στατιστική κατανομή του μεγέθους. Μεταξύ των άλλων, αυτό συνεπάγεται και το εξής: Αν σε μια ορισμένη χρονική στιγμή η κατάσταση του συστήματος είναι μια ιδιοκατάσταση του (διατηρήσιμου) μεγέθους A, τότε θα παραμένει συνεχώς ιδιοκατάσταση με την ίδια ιδιοτιμή.

β) Κατά την κλασική κίνηση σε ένα κεντρικό δυναμικό η στροφορμή είναι πάντα μια διατηρήσιμη ποσότητα. Αυτό απορρέει αμέσως από τη γνωστή εξίσωση

$$\frac{d\boldsymbol{\ell}}{dt} = \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F},$$

αν παρατηρήσουμε ότι σε ένα κεντρικό πεδίο δυνάμεων η δύναμη $\boldsymbol{F}$ έχει ακτινική κατεύθυνση ($\boldsymbol{F} \parallel \boldsymbol{r}$) και επομένως η ροπή της ως προς την αρχή ($\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$) μηδενίζεται. Δεδομένης της κεντρικής σημασίας των νόμων διατήρησης στη φυσική, είναι εύλογο να περιμένουμε ότι η στροφορμή θα είναι επίσης διατηρήσιμη ποσότητα και κατά την κβαντομηχανική κίνηση σε ένα κεντρικό δυναμικό. Για να το ελέγξουμε θα πρέπει να υπολογίσουμε τους μεταθέτες $[\ell_i, H]$ για $i = x,y,z$ και να δούμε αν μηδενίζονται ή όχι. Θα αποδείξουμε πρώτα ότι για μια τυχούσα χαμιλτονιανή $H = (\boldsymbol{p}^2/2m) + V(\boldsymbol{r})$ –όπου $V(\boldsymbol{r})$ ένα τυχόν (όχι κατ' ανάγκην κεντρικό) δυναμικό– ισχύει η μεταθετική σχέση

$$[\ell_i, H] = i\hbar\, \tau_i, \tag{5}$$

όπου $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$ η κλασική έκφραση της ροπής για τη δύναμη $\boldsymbol{F} = -\nabla V(\boldsymbol{r})$, που αντιστοιχεί στο δεδομένο δυναμικό. Αν δεχτούμε, προς στιγμήν, την (5), είναι φανερό ότι για ένα κεντρικό δυναμικό $V(r)$ θα είναι $\boldsymbol{F} \parallel \boldsymbol{r} \Rightarrow \boldsymbol{\tau} = 0$, οπότε η (5) συνεπάγεται ότι $[\ell_i, H] = 0$ και επομένως ότι όλες οι συνιστώσες του $\boldsymbol{\ell}$ –άρα και το ίδιο το διάνυσμα $\boldsymbol{\ell}$– είναι διατηρήσιμες ποσότητες, όπως και στο αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα.

Λόγω ισοδυναμίας όλων των κατευθύνσεων του χώρου, αρκεί να αποδείξουμε την (5) μόνο για μία συνιστώσα τού $\boldsymbol{\ell}$ έστω την ℓ_z. Δεδομένου ότι $\ell_z = xp_y - yp_x$, η εφαρμογή των κανόνων υπολογισμού μεταθετών που αναπτύξαμε στο σχετικό συμπλήρωμα του Κεφαλαίου 4 θα δώσει

$$
\begin{aligned}
[\ell_z, H] &= [xp_y - yp_x, H] = [xp_y, H] - [yp_x, H] \\
&= \big(x[p_y, H] + [x, H]p_y\big) - \big(y[p_x, H] + [y, H]p_x\big) \\
&= \left(x\left(-i\hbar\,\frac{\partial H}{\partial y}\right) + \left(i\hbar\,\frac{\partial H}{\partial p_x}\right)p_y\right) - \left(y\left(-i\hbar\,\frac{\partial H}{\partial x}\right) + \left(i\hbar\,\frac{\partial H}{\partial p_y}\right)p_x\right) \\
&= \left(x\left(-i\hbar\,\frac{\partial V}{\partial y}\right) + \left(i\hbar\,\frac{p_x}{m}\right)p_y\right) - \left(y\left(-i\hbar\,\frac{\partial V}{\partial x}\right) + i\hbar\,\frac{p_y}{m}\,p_x\right) \\
&= \left(x(i\hbar\,F_y) + i\hbar\,\frac{p_x}{m}\,p_y\right) - \left(y(i\hbar\,F_x) + i\hbar\,\frac{p_y}{m}\,p_x\right) \\
&= i\hbar(xF_y - yF_x) + \frac{i\hbar}{m}\,(p_xp_y - p_yp_x) \\
&= i\hbar\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F})_z + 0 = i\hbar\tau_z \qquad\qquad \text{ό.έ.δ.}
\end{aligned}
$$

όπου στα παραπάνω χρησιμοποιήσαμε τις γενικές μεταθετικές σχέσεις

$$
[x_i, A] = i\hbar\,\frac{\partial A}{\partial p_i}, \qquad [p_i, A] = -i\hbar\,\frac{\partial A}{\partial x_i}
$$

οι οποίες για

$$
A = H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)
$$

δίνουν

$$
\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}, \qquad \frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{\partial V}{\partial x_i} = -F_i
$$

ενώ –λόγω της μεταθετικότητας των συνιστωσών της ορμής– θα είναι επίσης $p_xp_y - p_yp_x = 0$ κ.ο.κ.

Για ένα κεντρικό δυναμικό θα είναι λοιπόν $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F} = 0 \Rightarrow [\ell_i, H] = 0$ οπότε θα είναι επίσης και

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{\ell}^2, H] &= [\ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2, H] = [\ell_x^2, H] + [\ell_y^2, H] + [\ell_z^2, H] \\
&= \ell_x[\ell_x, H] + [\ell_x, H]\ell_x + \text{κ.λπ.} \\
&= \ell_x\cdot 0 + 0\cdot\ell_x + \cdots = 0.
\end{aligned}
$$

Επομένως –όπως ήταν αναμενόμενο– εκτός από τις συνιστώσες της στροφορμής θα είναι διατηρήσιμη ποσότητα και το μέτρο της.

γ) Σύμφωνα με το κβαντομηχανικό κριτήριο διατήρησης που διατυπώσαμε πριν $-[A, H] = 0-$ αν ένα μέγεθος είναι διατηρήσιμο θα είναι επίσης *συμβιβαστό* με τη χαμιλτονιανή του προβλήματος και επομένως θα μπορεί να μετρηθεί ταυτόχρονα με αυτήν. Θα υπάρχουν δηλαδή *κοινές ιδιοσυναρτήσεις* $\psi_{E\alpha}$ των μεγεθών H και A για τις οποίες θα συναληθεύουν οι εξισώσεις ιδιοτιμών

$$H\psi_{E\alpha} = E\psi_{E\alpha}, \qquad A\psi_{E\alpha} = \alpha\psi_{E\alpha}.$$

Αν επιπλέον υπάρχει και ένα δεύτερο διατηρήσιμο μέγεθος B που είναι συμβιβαστό και με το A –δηλαδή $[A, B] = 0$– τότε θα υπάρχει επίσης ένα κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων των μεγεθών H, A και B τέτοιο ώστε

$$H\psi_{E\alpha\beta} = E\psi_{E\alpha\beta}, \qquad A\psi_{E\alpha\beta} = \alpha\psi_{E\alpha\beta}, \qquad B\psi_{E\alpha\beta} = \beta\psi_{E\alpha\beta}.$$

Και αν το σύστημα αυτών των τριών μεγεθών –H, A και B– δεν μπορεί να διευρυνθεί περαιτέρω –δεν υπάρχει, δηλαδή, κανένα άλλο μέγεθος C που να μετατίθεται και με τα τρία από αυτά– τότε λέμε ότι τα μεγέθη αυτά συναποτελούν ένα *πλήρες σύστημα ταυτόχρονα μετρήσιμων μεγεθών*. Και μια άμεση συνέπεια αυτής της *πληρότητας* είναι η εξής: Αν γνωρίζουμε τις τιμές όλων των μεγεθών ενός τέτοιου πλήρους συστήματος, τότε η κατάσταση του σωματιδίου είναι μονοσήμαντα προσδιορισμένη. Η ταυτόχρονη μέτρησή τους –που είναι, βεβαίως, δυνατή αφού μετατίθενται– συνιστά μια *πλήρη μέτρηση*.

Επιπλέον, επειδή –όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο– οι εκφράσεις των τελεστών $\boldsymbol{\ell}^2$ και ℓ_z σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\boldsymbol{\ell}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right), \qquad \ell_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

περιέχουν παραγωγίσεις μόνο ως προς θ και φ –και του ℓ_z μόνο ως προς φ– μπορούμε να πούμε εκ των προτέρων ότι οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi(r, \theta, \varphi)$ σε ένα κεντρικό δυναμικό θα έχουν τη χωριζόμενη μορφή

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(\theta)\Theta(\theta)\Phi(\varphi),$$

όπου η $\Phi(\varphi)$ θα είναι ιδιοσυνάρτηση μόνο του ℓ_z

$$\ell_z\Phi(\varphi) = a_m\Phi(\varphi)$$

και άρα θα έχει τη μορφή $\Phi(\varphi) = e^{ia_m\varphi/\hbar}$, όπου τα a_m προσδιορίζονται αμέσως από τη συνθήκη

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \;\; \Rightarrow \;\; a_m = \hbar m \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

που εκφράζει την αυτονόητη απαίτηση να είναι η κυματοσυνάρτηση μια *μονότιμη συνάρτηση του χώρου*, αφού η περιστροφή κατά 2π γύρω από τον άξονα z μας ξαναφέρνει στο ίδιο σημείο. Όσο για την πλήρη *γωνιακή κυματοσυνάρτηση*

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) = \Theta(\theta)e^{im\varphi},$$

αυτή θα προκύπτει ως ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\boldsymbol{\ell}^2$ –θα είναι δηλαδή $\boldsymbol{\ell}^2 Y = a_\ell Y$– και επειδή η έκφραση αυτού του τελεστή είναι πάντα η ίδια (δεν εξαρτάται από το συγκεκριμένο κεντρικό δυναμικό), η μορφή αυτής της γωνιακής κυματοσυνάρτησης θα προσδιοριστεί άπαξ διά παντός και θα είναι κοινή για όλα τα κεντρικά δυναμικά. Έτσι, αυτό που θα απομένει θα είναι η λύση μόνο μιας ακτινικής εξίσωσης για τη συνάρτηση $R(r)$.

Είναι φανερό ύστερα από τα παραπάνω ότι *κατά την κίνηση σε ένα κεντρικό δυναμικό, τα μεγέθη $H, \boldsymbol{\ell}^2$ και ℓ_z συγκροτούν ένα πλήρες σύστημα ταυτόχρονα μετρήσιμων μεγεθών*, αφού μετατίθενται μεταξύ τους και επιπλέον –όπως μπορείτε να δείτε μόνοι σας– δεν υπάρχει κανένα άλλο που να μετατίθεται και με τα τρία. Η τριάδα $H, \boldsymbol{\ell}^2$ και ℓ_z θα διαθέτει επομένως ένα κοινό πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων που θα προσδιορίζεται από την απαίτηση να συναληθεύουν οι τρεις εξισώσεις ιδιοτιμών

$$H\psi_{n\ell m} = E_n \psi_{n\ell m}, \qquad \boldsymbol{\ell}^2 \psi_{n\ell m} = \alpha_\ell \psi_{n\ell m}, \qquad \ell_z \psi_{n\ell m} = \beta_m \psi_{n\ell m}, \tag{6}$$

όπου $E_n, \alpha_\ell, \beta_m$ οι ιδιοτιμές των μεγεθών $H, \boldsymbol{\ell}^2$ και ℓ_z αντίστοιχα και n, ℓ και m τρεις αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί που προσδιορίζουν τις επιτρεπόμενες τιμές τους. Και όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, για το άτομο του υδρογόνου οι επιτρεπόμενες αυτές τιμές θα είναι οι

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, && n = 1, 2, \ldots \\ \alpha_\ell &= \hbar^2\,\ell(\ell+1), && \ell = 0, 1, 2, \ldots \\ \beta_m &= \hbar m, && m = -\ell, \ldots, +\ell, \end{aligned}$$

Το σίγουρο είναι ότι κατά την κίνηση σε ένα κεντρικό δυναμικό –και αυτό που μας ενδιαφέρει κυρίως εδώ είναι το *δυναμικό Coulomb*– εκτός από την ενέργεια του σωματιδίου θα μπορούμε να γνωρίζουμε ταυτόχρονα τόσο το μέτρο της στροφορμής του όσο και την προβολή της στον άξονα z.

Οι αναγνώστες που εργάστηκαν πάνω σε τούτο το Συμπλήρωμα θεωρίας θα έχουν την ευκαιρία σε λίγο –όταν προχωρήσουν στη μελέτη του επόμενου κεφαλαίου– να διαπιστώσουν ότι τα όσα είπαμε εδώ θα τους βοηθήσουν να δουν από μια υψηλότερη σκοπιά τη διαδικασία πλήρους επίλυσης του ατόμου του υδρογόνου και τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από αυτήν. Όπως στην κλασική έτσι και στην κβαντική μηχανική η ύπαρξη διατηρήσιμων μεγεθών διευκολύνει σημαντικά τη λύση ενός προβλήματος, γι' αυτό και η μελέτη των νόμων διατήρησης είναι ένα βασικό θέμα σε πιο προχωρημένα μαθήματα είτε κλασικής είτε κβαντικής μηχανικής.