

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΕΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

# Ημικλασικές Καταστάσεις στο Ατόμου του Υδρογόνου

Διπλωματική Εργασία

Αλεξανδροπούλου Χαρίκλεια

Τομέας Φυσικής

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

[Επιλογή ημερομηνίας]

## Περιεχόμενα

Πρόλογος .....	4
Κεφάλαιο 1 .....	5
<b>Το άτομο του Υδρογόνου</b> .....	5
<b>1.1 Εισαγωγή – Ιστορική Αναδρομή</b> .....	5
<b>1.2 Η Κβαντική θεωρία</b> .....	7
<b>1.2.1 Εξίσωση Schrodinger</b> .....	9
<b>1.2.2 Γωνιακή εξίσωση</b> .....	10
<b>1.2.3 Ακτινική εξίσωση</b> .....	12
<b>1.2.4 Γενική λύση</b> .....	15
<b>1.3 Πυκνότητα Πιθανότητας</b> .....	16
<b>1.5 Στροφορμή</b> .....	19
<b>1.6 Ενεργειακές στάθμες - Εκφυλισμός</b> .....	21
<b>1.7 Άρση εκφυλισμού λόγω ύπαρξης μαγνητικού πεδίου</b> .....	21
<b>1.8 Ατομικό Σύστημα μονάδων</b> .....	24
Κεφάλαιο 2 .....	25
<b>Κβαντικός Αρμονικός Ταλαντωτής</b> .....	25
<b>2.1 Βασικές αρχές</b> .....	25
<b>2.2 Αβεβαιότητα του αρμονικού ταλαντωτή</b> .....	28
<b>2.3 Σύγκριση με τον κλασικό αρμονικό ταλαντωτή</b> .....	30
<b>2.3 Έκφραση μέσω πινάκων</b> .....	32
<b>2.4 Σύμφωνες καταστάσεις</b> .....	32
Κεφάλαιο 3 .....	38
<b>Σύμφωνες Καταστάσεις του ατόμου του Υδρογόνου</b> .....	38
<b>3.1 Σύμφωνες καταστάσεις</b> .....	38
<b>3.2 Πειράματα για την παρατήρηση</b> .....	41
<b>3.3 Ιδιότητες του κυματοπακέτου</b> .....	42
<b>3.3.1 Συμπεριφορά για <math>t=0</math></b> .....	42
<b>3.3.2 Δυναμική του κυματοπακέτου</b> .....	44
<b>3.3.3 Αβεβαιότητα του κυματοπακέτου</b> .....	48
<b>3.3.4 Άλλες διατυπώσεις- Σχολιασμοί</b> .....	51

<b>Κεφάλαιο 4</b> .....	54
<b>Προσομοίωση των κυματοσυναρτήσεων</b> .....	54
<b>4.1 Φυσικές επιστήμες και υπολογιστής</b> .....	54
<b>4.2 Χρήση της Mathematica</b> .....	56
<b>Κεφάλαιο 5</b> .....	60
<b>Κώδικας της Εφαρμογής</b> .....	60
<b>5.1 Δομή της εφαρμογής</b> .....	60
<b>5.2 Ορισμός Μικροεφαρμογών</b> .....	62
Βιβλιογραφία.....	68

## Πρόλογος

Οι ημικλασικές καταστάσεις των κβαντομηχανικών συστημάτων απασχόλησαν την επιστημονική κοινότητα, από τα πρώτα κιάλας βήματα της κβαντικής φυσικής. Η ανατρεπτική θεωρία του προηγούμενου αιώνα δε μπορούσε, όπως άλλωστε αποδείχθηκε, παρά να συμπληρώνει και να επεκτείνει φυσικούς νόμους της κλασικής φυσικής. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον είχε η εύρεση, θεωρητική και πειραματική, ημικλασικών καταστάσεων σε συστήματα απλά, όπως ο αρμονικός ταλαντωτής και το άτομο του υδρογόνου.

Στη συγκεκριμένη εργασία αναπτύσσεται και παρουσιάζεται το φαινόμενο των ημικλασικών καταστάσεων του ατόμου του υδρογόνου, δηλαδή των κβαντικών καταστάσεων που βρίσκονται πολύ κοντά στο κλασικό όριο. Αφού γίνεται μια αναφορά στις ημικλασικές καταστάσεις του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή, αναλύονται θεωρητικά οι καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου που έχουν κλασική συμπεριφορά. Οι σύμφωνες καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, μιας και η ενέργεια στο σύστημα αυτό δεν αποτελεί γραμμική συνάρτηση του κύριου κβαντικού αριθμού, όπως η ενέργεια στον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή, γεγονός που δίνει ιδιαίτερα χαρακτηριστικά στην προσέγγιση του κλασικού ορίου. Για την καλύτερη μελέτη και εμπέδωση του φαινομένου, αναπτύχθηκε μικροεφαρμογή, με χρήση της Mathematica, όπου μπορεί κανείς να μελετήσει το άτομο του υδρογόνου, και να δει σχηματικά τις καταστάσεις του, τόσο τις ημικλασικές, όσο και τις διεγερμένες. Η χρήση της Mathematica δίνει νέες διαστάσεις στην μελέτη του φαινομένου, καθώς διευκολύνει τους αριθμητικούς υπολογισμούς, αφήνοντας χώρο και χρόνο για εκτενέστερη μελέτη και εμπέδωση. Η συγκεκριμένη μοντελοποίηση των σταθμών μπορεί να χρησιμοποιηθεί για εκμάθηση, εμπέδωση ή ακόμα και για την διδασκαλία αντίστοιχων κεφαλαίων της κβαντομηχανικής. Η ανάπτυξη της συγκεκριμένης εφαρμογής βοήθησε και εμένα προσωπικά να κατανοήσω παραμέτρους της κβαντικής φυσικής που μέχρι σήμερα δεν είχα αντιληφθεί.

Παρακάτω παρουσιάζεται στο πρώτο κεφάλαιο η θεμελιώδης θεωρία για το άτομο του υδρογόνου, ενός συστήματος εξαιρετικά σημαντικού για τη θεμελίωση της κβαντικής θεωρίας. Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια αναφορά στον αρμονικό ταλαντωτή και στις ημικλασικές καταστάσεις αυτού, θεωρία που αποτέλεσε τη βάση τόσο για την θεωρητική εξέλιξη των σύμφωνων καταστάσεων και σε άλλα συστήματα, όσο και για τεχνολογικά επιτεύγματα που χαρακτήρισαν τον προηγούμενο αιώνα. Στο τρίτο κεφάλαιο διατυπώνεται θεωρητικά και αναλύεται το ημικλασικό όριο του ατόμου του υδρογόνου, σύμφωνα με το πρότυπο του Brown.

Στα επόμενα κεφάλαια δίνεται η ανάλυση των εφαρμογών που αναπτύχθηκαν σε γλώσσα Mathematica. Οι εφαρμογές παρουσιάζουν σχηματικά τις θεωρητικές διατυπώσεις των προηγούμενων κεφαλαίων και προσφέρουν ένα διαδραστικό περιβάλλον για την καλύτερη κατανόηση των εννοιών.

# Κεφάλαιο 1

## Το άτομο του Υδρογόνου

### 1.1 Εισαγωγή – Ιστορική Αναδρομή

Το άτομο υδρογόνου είναι ένα άτομο του χημικού στοιχείου υδρογόνου. Το ουδέτερο άτομο αποτελείται από ένα μοναδικό θετικά φορτισμένο πρωτόνιο και ένα μοναδικό αρνητικά φορτισμένο ηλεκτρόνιο. Το πιο σύνηθες ισότοπο είναι το υδρογόνο  $-1$  ή πρώτιο ή ελαφρύ υδρογόνο το οποίο δε περιέχει νετρόνια. Άλλα ισότοπα είναι το δευτέριο το οποίο περιέχει ένα ή δύο νετρόνια. Παρακάτω θα αναφερθούμε στο υδρογόνο-1.

Η λέξη υδρογόνο (hydrogen) προέρχεται από τις αρχαίες ελληνικές λέξεις «ὔδωρ» + «γεννώ», δηλαδή δηλώνει την βασική χημική ιδιότητά του να καίγεται σχηματίζοντας *ὕδωρ*, δηλαδή νερό. Το χημικό στοιχείο Υδρογόνο (H), ή διυδρογόνο, είναι ένα άχρωμο, άοσμο, άγευστο, εξαιρετικά εύφλεκτο αμέταλλο, διατομικό αέριο, με ατομικό αριθμό ένα<sup>1</sup>.

Το υδρογόνο είναι το πιο άφθονο χημικό στοιχείο. Θεωρείται ότι αποτελεί το 75% της ορατής μάζας του σύμπαντος. Ωστόσο, το στοιχειακό υδρογόνο (διυδρογόνο,  $H_2$ ) είναι σχετικά σπάνιο στη Γη. Βιομηχανικά παράγεται από υδρογονάνθρακες, όπως το μεθάνιο, και συνήθως καταναλώνεται επιτόπου, κυρίως για την αναβάθμιση των ορυκτών καυσίμων (π.χ. με υδροπυρόλυση), στην παραγωγή αμμωνίας και στην παρασκευή μαργαρίνης. Το υδρογόνο επίσης μπορεί εναλλακτικά να παραχθεί και με ηλεκτρόλυση νερού, αλλά η μέθοδος αυτή γενικά αποφεύγεται ως σημαντικά λιγότερο οικονομική. Το υδρογόνο σχηματίζει ομοιοπολικές ενώσεις και ιονικές ενώσεις με αρνητικό φορτίο, σχηματίζοντας το ανιόν υδριδίου ( $H^-$ ). Παράγει επίσης επιδιαλυτομένα κατιόντα, όπως το οξόνιο ( $H_3O^+$ ). Παίζει σημαντικό ρόλο στην οξεοβασική χημεία, που περιλαμβάνει ανταλλαγή πρωτονίων μεταξύ διαλυμένων μορίων.

Μπορεί να συνδυαστεί χημικά με σχεδόν κάθε άλλο στοιχείο και έτσι μπορεί να δώσει περισσότερες ενώσεις από ότι μπορεί οποιοδήποτε άλλο στοιχείο. Στις ενώσεις αυτές συγκαταλέγονται το νερό, η αμμωνία, τα οξέα, τα υδροξείδια, διάφοροι υδρογονάνθρακες όπως το πετρέλαιο και το φυσικό αέριο και μεγάλο ποσοστό των υπόλοιπων οργανικών ενώσεων. Εξαιτίας της ελαφρότητάς του το υδρογόνο δεν αποτελεί περισσότερο από το 1% της συνολικής μάζας της Γης. Σε καθαρή αέρια

---

<sup>1</sup> 1 ατομική μάζα = 1,00794(7) amu, χημικό τύπο  $H_2$ , μοριακή μάζα 2,01588(14) amu. Είναι επίσης, το ελαφρύτερο χημικό στοιχείο.

μορφή συναντάται σπάνια, κυρίως σε φυσικά αέρια και σε μικρό ποσοστό στα ανώτερα στρώματα της ατμόσφαιρας.

Πολλά ορυκτά και όλοι οι ζωντανοί οργανισμοί περιέχουν ενώσεις. Το υδρογόνο βρίσκεται στην κερατίνη, στα ένζυμα, στα μόρια του DNA, ενώ βρίσκεται άφθονο στις τροφές υπό μορφή λιπών, πρωτεϊνών και υδατανθράκων. Όλα τα βαρύτερα στοιχεία, όπως και το ήλιο, προκύπτουν από την πυρηνική σύντηξη του υδρογόνου. Βάσει αυτής της διαδικασίας πιστεύεται ότι σχηματίστηκε το ίδιο το Σύμπαν, ενώ η ίδια διαδικασία είναι επίσης υπεύθυνη για την έκλυση ενέργειας από τα άστρα, όπως γίνεται στον Ήλιο.

Το 1671, ο Robert Boyle ανακάλυψε και περιέγραψε την αντίδραση ριניσμάτων σιδήρου και διαλυμάτων οξέων, που κατέληγαν στην παραγωγή αέριου υδρογόνου. Το 1746 ο Henry Cavendish ήταν ο πρώτος που αναγνώρισε το παραγόμενο υδρογόνο ως ξεχωριστό χημικό στοιχείο, ονομάζοντάς το «εύφλεκτο αέρα». Αργότερα, το 1781, διαπίστωσε ότι το υδρογόνο παράγει νερό όταν καίγεται. Συχνά σε αυτόν αποδίδεται και η ανακάλυψή του. Το 1783, ο Antoine Lavoisier ονόμασε το νέο χημικό στοιχείο «υδρογόνο», όταν αυτός και ο Laplace επιβεβαίωσαν την ανακάλυψη του Cavendish. Το υδρογόνο υγροποιήθηκε για πρώτη φορά από τον James Dewar το 1898 χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της απότομης εκτόνωσης συμπιεσμένου αερίου. Με την ίδια μέθοδο κατόρθωσε να παρασκευάσει στερεό υδρογόνο τον επόμενο χρόνο (1899).

Το δευτέριο ανακαλύφθηκε το Δεκέμβριο του 1931 από τον Harold Urey και το τρίτιο κατασκευάστηκε τεχνητά το 1934, από τους Ernest Rutherford, Mark Oliphant και Paul Harteck. Το βαρύ ύδωρ ( $D_2O$ ), ανακαλύφθηκε από την ομάδα του Urey το 1932.

Το 1806 ο Francois Isaac de Rivaz κατασκεύασε τον πρώτο κινητήρα εσωτερικής καύσης που χρησιμοποιούσε μίγμα υδρογόνου και οξυγόνου και λίγα χρόνια αργότερα ο Edward Daniel Clark ανακάλυψε τον σωλήνα ανάφλεξης υδρογόνου. Το 1823 ο Dobereiner εφηύρε τη λυχνία υδρογόνου.

Το πρώτο αερόστατο υδρογόνου εφευρέθηκε από τον Jack Charles το 1783. Το υδρογόνο παρείχε την απαιτούμενη άνωση για τα πρώτα αξιόπιστα αεροπορικά ταξίδια μετά από την εφεύρεση, το 1852, του πρώτου αερόπλοιο υδρογόνου από τον Henry Giffard. Ο Γερμανός Κόμης Ferdinand von Zeppelin προώθησε την ιδέα των αερόπλοιων που ανυψώνονται με υδρογόνο και που αργότερα ονομάστηκαν προς τιμήν του Zeppelin. Το πρώτο τέτοιο αερόπλοιο πέταξε το 1900. Η εφεύρεση αυτή εγκαινίασε τις πρώτες τακτικές αερογραμμές που, από το 1910, που άρχισαν, μέχρι την έναρξη του Πρώτου Παγκοσμίου Πολέμου, τον Αύγουστο του 1914, είχαν μεταφέρει 35.000 επιβάτες χωρίς κανένα ατύχημα. Κατά τη διάρκεια του πολέμου τα Zeppelin χρησιμοποιήθηκαν σε αποστολές αναγνώρισης βομβαρδισμού.

Η πρώτη υπερατλαντική πτήση, χωρίς στάσεις, έγινε από το βρετανικό αερόπλοιο R34 το 1919. Οι αερογραμμές με αερόπλοια επαναλήφθηκαν τη δεκαετία του 1920 και η ανακάλυψη του ηλίου στις ΗΠΑ, ως μη εύφλεκτο, υποσχόταν αυξημένη ασφάλεια, αλλά οι ΗΠΑ αρνήθηκαν να πουλήσουν το νέο αέριο για μια τέτοια χρήση. Η χρήση υδρογόνου στα αερόπλοια συνεχίστηκε, μέχρι το περίφημο δυστύχημα του αερόπλοιο Hindenburg πάνω από το New Jersey στις 6 Μαΐου του 1937. Η ανάφλεξη διαρροής υδρογόνου θεωρήθηκε η αιτία του, αλλά πιο προσεκτικές έρευνες που έγιναν αργότερα έδειξαν πως η αιτία ήταν η ανάφλεξη του ήταν άλλη. Όμως η δυσφήμιση του υδρογόνου ως ανυψωτικού αερίου ήταν καταλυτική και προκάλεσε τη διακοπή της χρήσης του.

Ωστόσο άλλες χρήσεις του υδρογόνου συνέχισαν να εφευρίσκονται και να χρησιμοποιούνται, όπως η πρώτη ψυχόμενη με υδρογόνο στροβιλογεννήτρια το 1937 στο Dayton του Οχάιο, από την Dayton Power & Light Co, που λόγω της θερμικής αγωγιμότητας του αερίου υδρογόνου είναι η πιο συνηθισμένη μέθοδος στον τομέα ακόμη και στις μέρες μας. Το 1977 χρησιμοποιήθηκε μπαταρία νικελίου - υδρογόνου στην τεχνολογία των δορυφόρων. Η συγκεκριμένη μπαταρία χρησιμοποιήθηκε και στους δορυφόρους ή διαστημόπλοια ISS, Mars Odyssey, Mars Global Surveyor και το διαστημικό τηλεσκόπιο Hubble. Τέλος, μείγμα υγρού υδρογόνου και οξυγόνου χρησιμοποιείται ως το συνηθισμένο προωθητικό των τελευταίων ορόφων των πυραύλων, των διαστημοπλοίων και των διαστημικών λεωφορείων.

## **1.2 Η Κβαντική Θεωρία**

Το άτομο του υδρογόνου έχει ιδιαίτερη σημασία στην Κβαντική θεωρία και την κβαντική θεωρία πεδίου ως ένα απλό φυσικό σύστημα δυο φορτισμένων σωματιδίων για το οποίο έχουν προκύψει πολλές απλές αναλυτικές λύσεις και σημαντικά συμπεράσματα για την ατομική θεωρία. Η εύρεση ημικλασικών καταστάσεων στο σύστημα αυτό αποτέλεσε πρόκληση από τις πρώτες, κιάλας, προσπάθειες που έγιναν για την απόδειξη της *Αρχής της Αντιστοιχίας*. Είναι πλέον κοινώς αποδεκτό ότι καταστάσεις με απόλυτα κλασική συμπεριφορά δεν είναι δυνατόν να υπάρξουν στο άτομο του υδρογόνου. Μπορούν να υπάρξουν καταστάσεις με κλασική συμπεριφορά για περιορισμένο χρονικό διάστημα και μετά αποκτούν πάλι καθαρά κβαντικό χαρακτήρα. Ο κβαντικός και ο κλασικός χαρακτήρας του κυματοπακέτου εναλλάσσονται συνεχώς για κάποιο χρονικό διάστημα, μέχρις ότου η κβαντική φύση του ατόμου να επικρατήσει εξ ολοκλήρου.

Το 1914 ο Νίελς Μπορ όρισε τις φασματικές συχνότητες του μετά από μια σειρά από παραδοχές. Αυτές οι παραδοχές, που αποτέλεσαν και τις θεμέλιες λίθους του μοντέλου του Μπορ, δεν ήταν απόλυτα σωστές, έδιναν, όμως, σωστές τιμές ενέργειας. Τα αποτελέσματα του Μπορ για τις συχνότητες και τις ενέργειες επιβεβαιώθηκαν από την εξίσωση Schrodinger το 1925-1926. Η εξίσωση Schrodinger δίνει μια αναλυτική λύση για το άτομο του υδρογόνου από όπου υπολογίζονται οι ενεργειακές στάθμες και οι φασματικές συχνότητες. Η λύση της εξίσωσης Schrödinger μπορεί να δώσει περισσότερες πληροφορίες από το μοντέλο του Μπορ, καθώς εξηγεί τον ανισοτροπικό χαρακτήρα των ατομικών δεσμών.

Η μελέτη του ατόμου του υδρογόνου, και η επίλυση του μέσω της εξίσωσης Schrödinger, ξεκινά από την παραδοχή ότι το ηλεκτρικό πεδίο του πυρήνα προέρχεται από ένα σημειακό φορτίο, δεδομένου ότι το μέγεθος του πυρήνα είναι πολύ μικρό ( $\sim 10^{-14} m$ ) σε σχέση με την απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα. Το σχήμα και το μέγεθος του πυρήνα δε λαμβάνονται υπόψη.

Η δύναμη Coulomb που αναπτύσσεται μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου καθορίζει την κίνηση του ηλεκτρονίου και είναι ίση με

$$F = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} r_0, \quad (1)$$

όπου  $r_0$  το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος της ακτίνας  $r$ ,  $Z$  ο ατομικός αριθμός,  $e$  το φορτίο του ηλεκτρονίου και  $\epsilon_0$  η μαγνητική διαπερατότητα του κενού. Σχηματικά φαίνεται παρακάτω.

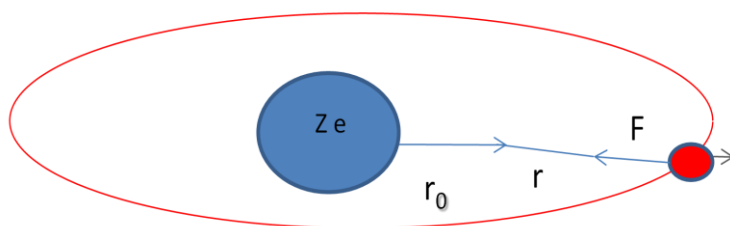
Το ηλεκτρόνιο εκτελεί τροχιά Κέπλερ ελλειπτικής μορφής. Ο Johannes Kepler<sup>1</sup> το 1609 όρισε τους νόμους των πλανητικών κινήσεων. Σύμφωνα με τον δεύτερο νόμο η επιβατική ακτίνα<sup>2</sup> σε ίσους χρόνους σαρώνει ίσα εμβαδά, γιατί κάθε πλανήτης κινείται ταχύτερα όταν βρίσκεται κοντά στο περιήλιο της τροχιάς του από ό, τι κοντά στο αφήλιο. Σύμφωνα με τον τρίτο νόμο το τετράγωνο του χρόνου που απαιτείται για να συμπληρώσει ένας πλανήτης μια πλήρη περιφορά γύρω από τον Ήλιο (περίοδος του πλανήτη) είναι ανάλογο του κύβου του μεγάλου ημιάξονα της ελλειπτικής του τροχιάς. Δεδομένων των δύο παραπάνω νόμων η περίοδος περιστροφής βρίσκεται

να είναι  $T = 2\pi \frac{\sqrt{m}}{k} a^{3/2}$ , όπου  $a$  ο μεγάλος ημιάξονας,  $m$  η μάζα του πλανήτη που

περιστρέφεται και  $\frac{m}{k^2}$  μια σταθερή ποσότητα<sup>3</sup>, με  $k^2 = \frac{L^2}{mp}$ , με  $L = mr^2\dot{\theta}$  να είναι η στροφορμή κάθε πλανήτη. Η ποσότητα της στροφορμής έχει σταθερό μέτρο, αφού η επιβατική ακτίνα διαγράφει σε ίσους χρόνους ίσες επιφάνειες, και το διάνυσμά της έχει σταθερή διεύθυνση, αφού η κίνηση των πλανητών μπορεί να θεωρηθεί επίπεδη και μπορεί να προσδιοριστεί μόνο από το  $r$  και το  $\theta$  (ακτινική και γωνιακή μεταβλητή αντίστοιχα), καθώς θεωρείται επίπεδη. Το 1687 ο Isaac Newton όρισε

τον νόμο της παγκόσμιας έλξης  $F = G \frac{mM_H}{r^2}$ , με  $G$  την σταθερά της παγκόσμιας

έλξης και  $M_H$  η μάζα του ηλίου. Η δύναμη αλληλεπίδρασης που αναπτύσσεται μεταξύ δύο μαζών, σε σύστημα που δρουν μόνο συντηρητικές δυνάμεις, είναι αντιστρόφως ανάλογη της απόστασής τους, και εξαρτάται μόνο από τις συμμετέχουσες μάζες και την μεταξύ τους απόσταση. Κατ' αντιστοιχία, στην κίνηση του ηλεκτρονίου λαμβάνεται υπόψη η δύναμη Coulomb μεταξύ των δύο σωματιδίων η οποία θέτει σε τροχιά το ηλεκτρόνιο γύρω από το κέντρο μάζας του συστήματος. Κάθε σύστημα δύο σωμάτων τα οποία αλληλεπιδρούν και λαμβάνεται υπόψη μόνο η δύναμη αλληλεπίδρασης μπορεί να θεωρηθεί κεπλεριανό.



Σχήμα 1.1: Η δύναμη Coulomb μεταξύ του μοναδικού πρωτονίου και μοναδικού ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου και η οποία καθορίζει και την κίνησή του. Με κόκκινο απεικονίζεται το ηλεκτρόνιο και με μπλε το πρωτόνιο

Η δυναμική ενέργεια δίνεται από τον τύπο

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2+y^2+z^2}}, \quad (2)$$

<sup>1</sup> Ο Johannes Kepler ήταν Γερμανός αστρονόμος (27 Δεκεμβρίου 1571 – 15 Νοεμβρίου 1630).

<sup>2</sup> Η γραμμή που ενώνει ένα πλανήτη με το κέντρο του Ήλιου.

<sup>3</sup> Μεταγενέστερες μετρήσεις έδειξαν ότι υπάρχει αξιοσημείωτο σφάλμα σε αυτό τον λόγο.



όπου  $x, y, z$  είναι οι ορθογώνιες συντεταγμένες του ηλεκτρονίου σ ' ένα τρισδιάστατο σύστημα αναφοράς, με αρχή των αξόνων τοποθετημένη στον πυρήνα.

### 1.2.1 Εξίσωση Schrodinger

Τα δύο φορτισμένα σωματίδια του ατόμου του υδρογόνου είναι ένα σύστημα σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μέσω ηλεκτροστατικών δυνάμεων Coulomb και κινούνται στον τρισδιάστατο χώρο. Στο σύστημα διατηρείται η ενέργεια του κέντρου μάζας και η ορμή. Αυτό που μελετάται είναι η σχετική κίνηση του πυρήνα, μάζας  $M$ , και του ηλεκτρονίου, μάζας  $m$ , ως προς το κέντρο μάζας τους. Το πρόβλημα μπορεί να μετασχηματιστεί σε πρόβλημα ενός σωματιδίου εάν θεωρήσουμε ότι το πρωτόνιο είναι ένας πυρήνας άπειρης μάζας ακίνητος στο κέντρο του ατόμου και το ηλεκτρόνιο ένα σωματίδιο μάζας ίση με την ανοιγμένη μάζα ( $\mu$ ) του συστήματος των σωματιδίων,

$$\mu = \frac{(M)}{m+M} m \quad (3)$$

Το ηλεκτρόνιο μάζας  $\mu$  κινείται γύρω από την ακίνητο πυρήνα. Η απόστασή τους είναι  $r$ . Το πρόβλημα είναι απόλυτα ισοδύναμο με το πραγματικό, μιας και ο πυρήνας είναι ακίνητος, όπως και στο πραγματικό πρόβλημα, και το ηλεκτρόνιο κινείται σε κεπλεριανή τροχιά γύρω από τον πυρήνα- πρωτόνιο, οπότε και η ολική ενέργεια του ισοδύναμου συστήματος είναι ίση με την ολική ενέργεια του πραγματικού σε ένα σύστημα αναφοράς όπου το κέντρο μάζας είναι σταθερό.

Σύμφωνα με τα παραπάνω το ηλεκτρόνιο ανοιγμένης μάζας  $\mu$  βρίσκεται σε τροχιά γύρω από τον ακίνητο πυρήνα υπό την επίδραση της δύναμης Coulomb με δυναμική ενέργεια

$$V(x) = -\frac{Ze^2}{x^2+y^2+z^2} \quad (4) \quad \text{c. g. s}$$

όπου  $x, y, z$  είναι οι ορθογώνιες συντεταγμένες του ηλεκτρονίου με φορτίο  $e$ , με τον ακίνητο πυρήνα να θεωρείται η αρχή των αξόνων. Η τρισδιάστατη εξίσωση Schrodinger είναι

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (5)$$

όπου  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , και  $E$  η ολική ενέργεια της σχετικής κίνησης του ατόμου.

Η διαφορική αυτή εξίσωση, για να επιλυθεί, θα πρέπει να χωριστεί σε τρεις κανονικές, όπου η κάθε μία θα εξαρτάται από μία μόνο μεταβλητή. Για το σκοπό αυτό εκφράζουμε την (5) σε σφαιρικές συντεταγμένες, οπότε παίρνει τη μορφή

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (6)$$

$$\text{όπου } \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

---

$1 e \cong -1,602 * 10^{-19} C$

Η μετατροπή από καρτεσιανές σε σφαιρικές συντεταγμένες έγινε σύμφωνα με τις σχέσεις :

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

$$r \in [0, \infty), \quad \theta \in [0, \pi], \quad \varphi \in [0, 2\pi)$$

Η δυναμική ενέργεια εκφρασμένη και αυτή σε σφαιρικές συντεταγμένες γίνεται:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (7) \quad \text{c.g.s.}$$

εξαρτάται δηλαδή μόνο από το  $r$ , την ακτινική απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα. Το πεδίο αυτό είναι ένα κεντρικό πεδίο.

Η λύση της εξίσωσης εξίσωσης (6) έχει τη μορφή,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (9)$$

όπου  $Y(\theta, \varphi)$  είναι οι σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις, λύσεις της γωνιακής εξίσωσης

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] = l(l+1) \quad (10)$$

και  $R(r)$  είναι οι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης :

$$\frac{r}{R} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1) \quad (11)$$

### 1.2.2 Γωνιακή εξίσωση

Η εξίσωση (9) μπορεί να γραφτεί και ως  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ , όπου θεωρούμε ότι  $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ . Η  $Y(\theta, \varphi)$  σπάει σε δύο κανονικές διαφορικές εξισώσεις την  $\Theta(\theta)$  και την  $\Phi(\varphi)$ , όπου η κάθε μία εξαρτάται από μία μόνο μεταβλητή, την  $\theta$  και την  $\varphi$  αντίστοιχα. Οι μερικές λύσεις των  $\Theta(\theta)$  και  $\Phi(\varphi)$  είναι:

$$\Theta_{l,m}(\theta) \equiv \vartheta_l^{|m|}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \vartheta_l^{|m|}(\cos \theta) \quad 0 < \theta < \pi \quad (12)$$

και

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad 0 < \varphi < 2\pi \quad (13)$$

Άρα οι λύσεις  $Y(\theta, \varphi)$  έχουν τη μορφή1:

$$Y(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} (-1)^l e^{im\varphi} \vartheta_l^{|m|}(\cos \theta) \quad (14)$$

οι οποίες είναι οι γνωστές σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις. Όπου  $l$  είναι ο κβαντικός αριθμός της στροφορμής που παίρνει τις τιμές  $l \geq |m|$ , και  $m$  ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός που παίρνει τιμές  $|m| = 0, 1, 2, \dots$ . Οι συναρτήσεις  $\vartheta_l^{|m|}(\cos \theta)$  είναι οι συναφείς συναρτήσεις Legendre. Στον παρακάτω πίνακα δίνονται οι πρώτες σφαιρικές αρμονικές για  $l=0, 1, 2$ .

---

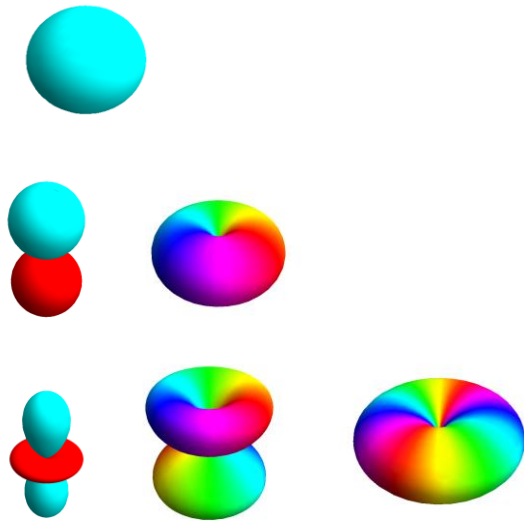
1 Η απόδειξη της λύση δεν αναφέρεται. Μπορεί κανείς να ανατρέξει σε οποιοδήποτε βιβλίο κβαντικής φυσικής.

---

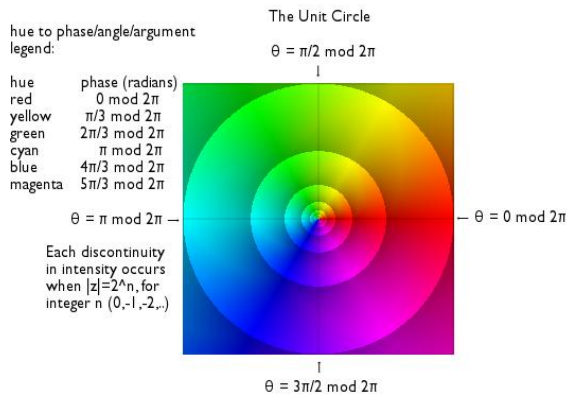
$Y_0^0$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
$Y_1^{-1}$	$\frac{1}{2}e^{-i\varphi}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta$
$Y_1^0$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$
$Y_1^1$	$\frac{1}{2}e^{i\varphi}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta$
$Y_2^{-2}$	$\frac{1}{4}e^{-2i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta$
$Y_2^{-1}$	$\frac{1}{2}e^{-i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]$
$Y_2^0$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(-1+3\cos^2\theta)$
$Y_2^1$	$-\frac{1}{2}e^{i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta$
$Y_2^2$	$\frac{1}{4}e^{2i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta$

Πίνακας 1.1: Οι σφαιρικές αρμονικές για  $l=0,1$  και  $2$ .

---



**Σχήμα 1.2:** Οι πρώτες σφαιρικές αρμονικές του ατόμου του υδρογόνου. Η πρώτη σειρά απεικονίζει την περίπτωση  $l=0$ , η δεύτερη την  $l=1$  και η τρίτη την  $l=3$ . Προφανώς έχουν σχεδιαστεί για  $|m|$ . Ο σχεδιασμός τους έγινε με εφαρμογή στο Mathematica. Η φάση απεικονίζεται χρωματικά σύμφωνα με τον κανόνα που απεικονίζεται στον μοναδιαίο κύκλο παρακάτω.



**Εικόνα 1.1:** Χρωματική απεικόνιση της μιγαδικής φάσης σε rad στο μοναδιαίο κύκλο. Οι ασυνέχειες στην ένταση προκύπτουν για τιμές  $|z|=2^n$ , με  $n= 0, -1, -2$ . Εικόνα από [http://en.wikipedia.org/wiki/File:Unit\\_circle\\_domain\\_coloring.png](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Unit_circle_domain_coloring.png)

### 1.2.3 Ακτινική εξίσωση

Η ακτινική εξάρτηση της  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ , δηλαδή το  $R(r)$  εξαρτάται από τη δυναμική ενέργεια του συστήματος.

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Έκτος από τη δυναμική ενέργεια Coulomb  $V(r)$ , υπεισέρχεται και η φυγοκεντρική δυναμική ενέργεια  $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ .

Από την εξίσωση (11) έχουμε:

$$\frac{r}{R} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1) \quad (12)$$

Θέτω  $rR(r) = u(r)$  οπότε προκύπτει:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (13)$$

Η συγκεκριμένη μορφή είναι παρόμοια με τη μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger, στην οποία για το άτομο του υδρογόνου εφαρμόζονται οι οριακές συνθήκες:

α)  $0 < r < \infty$  (το  $r$  δε παίρνει αρνητικές τιμές)

β)  $u(r) = 0$  στην αρχή των αξόνων, η λύση της εξίσωσης Schrödinger πρέπει να είναι παντού πεπερασμένη

γ)  $u(\infty) = 0$

Για την εύρεση της ακτινικής εξίσωσης μελετάμε ξεχωριστά τις περιπτώσεις μικρής, μεσαίας και μεγάλης απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.

*Περίπτωση 1<sup>η</sup>:* Έστω  $r$  πολύ μικρό και  $l \neq 0$ . Η δυναμική ενέργεια Coulomb  $(\sim \frac{1}{r})$  είναι αμελητέας σημασίας σε σχέση με τη φυγοκεντρική ενέργεια  $(\sim \frac{1}{r^2})$  οπότε η (13) παίρνει τη μορφή

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) = 0 \quad (14)$$

Με γενική λύση την

$$u(r) = C_1 r^{l+1} + C_2 r^{-l}$$

Ο δεύτερος όρος απορρίπτεται οπότε η  $u(r)$  είναι ανάλογη του  $r^{l+1}$ . Άρα

$$u(r) = C_1 r^{l+1}$$

Για  $l = 0$  το δυναμικό Coulomb δε μπορεί να αγνοηθεί.

*Περίπτωση 2<sup>η</sup>:* Έστω  $r$  πολύ μεγάλο. Η ολική πραγματική δυναμική ενέργεια μηδενίζεται και η (13) γίνεται

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(r) = 0 \quad (15)$$

Η ενέργεια  $E$  μπορεί να έχει θετικές τιμές (το ηλεκτρόνιο βρίσκεται πολύ μακριά και δεν δέχεται επίδραση από τον πυρήνα) ή αρνητικές τιμές (δέσμιες καταστάσεις). Οι δεύτερες αφορούν την εύρεση επίλυσης της ακτινικής εξίσωσης. Οι λύσεις τελικά της (13) είναι

$$u(r) \sim e^{-kr} + e^{kr}$$

με  $k^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$  και  $E < 0$ . Ο δεύτερος όρος απορρίπτεται, δεδομένου ότι η  $u(r)$  πρέπει να είναι πεπερασμένη σε άπειρη απόσταση. Άρα

$$u(r) \sim e^{-kr} \quad (16)$$

Οι οριακές συνθήκες επιτρέπουν στην περίπτωση που  $E < 0$  ορισμένες μόνο διακεκριμένες αρνητικές ιδιοτιμές της ενέργειας. Οι διακεκριμένες αυτές καταστάσεις λέγονται *δέσμιες καταστάσεις*.

Για την απλοποίηση των πράξεων μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο μετασχηματισμός

$$\rho = kr = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} r \quad (17)$$

δίνοντας τελικά στην προηγούμενη εξίσωση τη μορφή  $u(\rho) \sim e^{-\rho}$ .

*Περίπτωση 3<sup>η</sup>*:  $r$  ενδιάμεσης απόστασης. Η λύση, που θα καλύπτει όλη την περιοχή μεταβολής του  $r$ , θα είναι της μορφής

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho) \quad (18)$$

Με αντικατάσταση στην (13) λαμβάνεται

$$\frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2 \left( \frac{l+1}{\rho} - 1 \right) \frac{dw}{d\rho} + \left[ \frac{V(r)}{E} - \frac{2(l+1)}{\rho} \right] w = 0 \quad (19)$$

από την οποία προσδιορίζεται το  $w(\rho)$  λαμβάνοντας υπόψη τις οριακές συνθήκες για  $r$  πολύ μικρό και  $r$  άπειρο. Οι αποδεκτές λύσεις για το  $w(\rho)$  είναι τα συναφή πολυώνυμα Laguerre

$$w(\rho) = L_{q-\rho}^{\rho}(2\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (20)$$

Τελικά με αντικατάσταση της (18) στην (20) οι κυματοσυναρτήσεις προκύπτουν από

$$u(\rho) = N \rho^{l+1} e^{-\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (21)$$

με  $N$  τον παράγοντα κανονικοποίησης. Τελικά με επαναφορά από την (17) η (21) γράφεται

$$u(\rho) = N kr^{l+1} e^{-kr} L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \quad (22)$$

Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι κανονικοποιημένη, οπότε με εφαρμογή της συνθήκης κανονικοποίησης

$$\int_0^{\infty} |u(r)|^2 dr = N^2 \int_0^{\infty} e^{-2kr} (kr)^{2l+1} [L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr)]^2 dr = 1$$

και το  $N$  υπολογίζεται ίσο με

$$N = (2kr)^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} 2^{l+1} \quad (23)$$

Τέλος, με αντικατάσταση από την σχέση  $r R(r) = u(r)$  της  $R(r)$  η ακτινική συνάρτηση ορίζεται ως

$$R(r) = \left[ (2kr)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-kr} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \quad (24)$$

Η ακτινική εξίσωση εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς  $n$  και  $l$ .

### 1.2.4 Γενική λύση

Η γενική λύση της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου είναι η εξής:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \left[ (2kr)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-kr} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (25)$$

με  $k = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar}} = Z/na_0$ , όπου  $Z=1$  για το άτομο του υδρογόνου (ατομικός αριθμός)

και  $a_0$  η ακτίνα Bohr, που ισούται με  $\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ .

Για τους κβαντικούς αριθμούς  $n$  (κύριος κβαντικός αριθμός),  $l$  (κβαντικός αριθμός της στροφορμής) και  $m$  (μαγνητικός κβαντικός αριθμός) ισχύει κατά τα γνωστά:

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots \text{(ορίζει τις ενεργειακές στάθμες)}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad \text{ή} \quad l \leq n-1$$

$$-l \leq m \leq l \quad \text{ή} \quad |m| \leq l \quad (26)$$

Οι τιμές που λαμβάνει η ενέργεια του μοναδικού ηλεκτρονίου του ουδέτερου ατόμου του υδρογόνου δίνονται από τον τύπο

$$E_{n,j} \cong -\frac{E_1}{n^2} \left[ 1 + \frac{a^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] eV,$$

με  $j$  να είναι ο κβαντικός αριθμός ολικής στροφορμής και  $a$  η σταθερά λεπτής υφής<sup>1</sup>. Για  $n=1$  προκύπτει η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του ηλεκτρονίου<sup>2</sup>. Η ενέργεια εξαρτάται κυρίως από τον κύριο κβαντικό αριθμό  $n$ . Σε μια τιμή του  $n$  αντιστοιχούν διάφορα ζεύγη τιμών για τα  $l$  και  $m$ , με αποτέλεσμα διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις να αντιστοιχούν σε ίδια ιδιοτιμή ενέργειας (εκφυλισμός).

Για ιστορικούς λόγους οι καταστάσεις με ίδιο  $n$  θεωρείται ότι αποτελούν μια στιβάδα. Κάθε στιβάδα συμβολίζεται με ένα λατινικό κεφαλαίο γράμμα K, L, M, N... που αντιστοιχεί σε κάθε κβαντικό αριθμό. Οι καταστάσεις που έχουν ίδιο  $n$ , που ανήκουν δηλαδή στην ίδια στιβάδα, και ίδιο  $l$ , ανήκουν στην ίδια υποστιβάδα. Η κάθε υποστιβάδα συμβολίζεται με ένα μικρό λατινικό γράμμα s, p, d, f... που αντιστοιχεί στα  $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ . Ο παρακάτω πίνακας παραθέτει αυτό τον συμβολισμό.

---


$$1 \alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c}.$$

$$2 E_1 \approx \frac{m_e e^4}{8\hbar^2 \epsilon_0^2 n^2} \quad \text{όπου } m_e \text{ η μάζα του ηλεκτρονίου.}$$

n	Γράμμα Στιβάδας	L	Γράμμα Υποστιβάδας
1	K	1	S
2	L	2	P
3	M	3	F
4	N	4	G
5	O	5	h
⋮	⋮	⋮	⋮

Πίνακας 1 2: Συμβολισμός των στιβάδων και των υποστιβάδων με λατινικούς χαρακτήρες.

### 1.3 Πυκνότητα Πιθανότητας

Η κυματοσυνάρτηση για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου είναι

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = R_{1,0}(r)Y_0^0 = \pi^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (27)$$

οι σταθερές είναι τέτοιες ώστε η συνάρτηση να είναι κανονικοποιημένη. Η  $\psi_{1,0,0}$  δεν εξαρτάται από τη γωνιά, αφού είναι το γινόμενο ενός ακτινικού κύματος με την  $Y_0^0 = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}}$ . Όλα τα κύματα με  $l=0$  έχουν αυτό το χαρακτηριστικό. Οι καταστάσεις αυτές είναι *σφαιρικά συμμετρικές*.

Το ηλεκτρόνιο που περιγράφεται από προηγούμενη εξίσωση βρίσκεται με πιθανότητα ανά μονάδα όγκου που δίνεται από την έκφραση

$$|\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \quad (28)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας είναι επίσης σφαιρικά συμμετρική, όπως θα πρέπει να συμβαίνει με κάθε κύμα κατάστασης  $s$ . Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη «γειτονιά» ενός σημείου είναι η ίδια για όλα τα σημεία που ισαπέχουν από το κέντρο (δηλαδή τον πυρήνα). Ορίζεται η ακτινική κατανομή πιθανότητας με τη συναφή της πυκνότητα  $P(r)$  τέτοια ώστε το γινόμενο  $P(r) dr$  να είναι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε οποιοδήποτε σημείο μέσα στον σφαιρικό φλοιό ακτίνας  $r$  και πάχους  $dr$ . Ο όγκος του φλοιού είναι το γινόμενο του εμβαδού της επιφάνειας  $4\pi r^2$  επί το πάχος του φλοιού  $dr$ . Αφού η πυκνότητα πιθανότητας  $|\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)|^2$  είναι ίδια παντού μέσα στον φλοιό, ισχύει

$$P(r)dr = |\psi|^2 4\pi r^2 dr \quad (29)$$

ή για την κατάσταση  $1s$ ,

$$P_{1s}(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

Το ίδιο αποτέλεσμα προκύπτει και για το  $u(r)$

$$P(r) = |u(r)|^2 = r^2 |R(r)|^2 \quad (30)$$



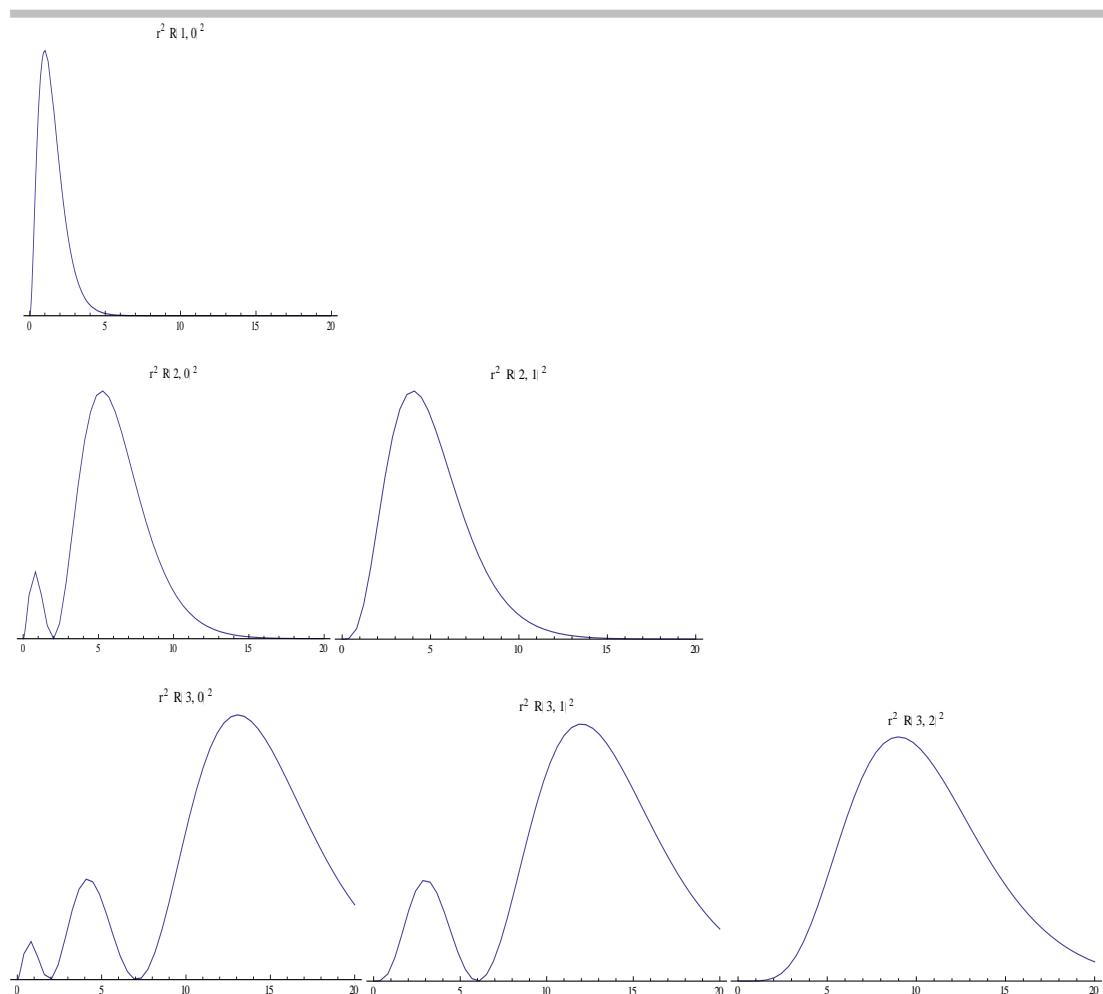
Η τελευταία εξίσωση δίνει την ακτινική πυκνότητα πιθανότητας για οποιαδήποτε κατάσταση. Για τις σφαιρικές καταστάσεις  $s$  είναι ίση με  $4\pi r^2 |\psi|^2$  (όπως αναφέρθηκε παραπάνω). Η γραφική παράσταση της  $P_{1s}(r)$ , καθώς και οι γραφικές παραστάσεις των υπολοίπων πυκνοτήτων πιθανότητας για τις πρώτες διεγερμένες καταστάσεις παρουσιάζονται στο επόμενο σχήμα. Η  $P(r)$  ερμηνεύεται ως η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου σε απόσταση  $r$  από τον πυρήνα, ανεξάρτητα με την κατεύθυνση στο χώρο. Η κορυφή της πρώτης καμπύλης, καθώς και οι μέγιστες κορυφές των υπολοίπων καταστάσεων, αντιστοιχούν στη μέγιστη απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, δεδομένου ότι ο πυρήνας βρίσκεται στην αρχή των αξόνων.

Προφανώς ισχύει η συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_0^{\infty} P(r) dr = 1 \quad (31)$$

και η μέση απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα μπορεί να υπολογιστεί από

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r P(r) dr \quad (32)$$



Σχήμα 1.3: Η σχηματική αναπαράσταση των πρώτων ακτινικών πυκνοτήτων πιθανότητας για το άτομο του υδρογόνου. Σχεδιάστηκαν στο Mathematica. Οι μέγιστες κορυφές δείχνουν την μέγιστη θέση του ηλεκτρονίου για την συγκεκριμένη κατάσταση. Η απόσταση αυτή εξαρτάται από την τιμή της ενέργειας, και όσο πιο υψηλή είναι η τιμή της ενέργειας, τόσο μεγαλύτερη και η απόσταση. Οι συναρτήσεις σχεδιάστηκαν στο Mathematica .

Οι πρώτες διεγερμένες καταστάσεις για το άτομο του υδρογόνου, για  $n=2$ , είναι οι  $\psi_{2,0,0}, \psi_{2,1,0}, \psi_{2,1,-1}, \psi_{2,1,1}$ . Όλες έχουν τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό και την ίδια ολική ενέργεια  $E_2$  (τετραπλός εκφυλισμός). Η κατάσταση  $\psi_{2,0,0}$  είναι σφαιρικά συμμετρική. Ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση  $2s$ , θα βρίσκεται μακρύτερα από τον πυρήνα από ότι ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση  $1s$ . Είναι προφανές λοιπόν ότι η μέγιστη κορυφή της αναπαράστασης της πυκνότητας πιθανότητας, όλο και θα απομακρύνεται από τον πυρήνα. Η παρατήρηση αυτή διατηρεί την παλαιά αντίληψη του ότι τα ηλεκτρόνια είναι τοποθετημένα σε στοιβάδες.

Οι καταστάσεις  $\psi_{2,0,0}, \psi_{2,1,0}, \psi_{2,1,-1}, \psi_{2,1,1}$  δεν είναι σφαιρικά συμμετρικές. Οι γωνίες  $\theta$  και  $\varphi$  πλέον θα επηρεάσουν την κατανομή της κυματοσυνάρτησης. Οι καταστάσεις έχουν ίδια ακτινική κυματοσυνάρτηση, αλλά αυτή πολλαπλασιάζεται κάθε φορά με διαφορετικές σφαιρικές αρμονικές, ανάλογα με τον κβαντικό αριθμό  $l$  και  $m$ . Σχηματική αναπαράσταση της εξάρτησης από τις σφαιρικές αρμονικές δίνεται στο Σχήμα 1.2.

Αξιίζει να σημειωθεί ότι η πυκνότητα πιθανότητας είναι ανεξάρτητη από την  $\varphi$  και επομένως είναι συμμετρική γύρω από τον άξονα  $z$  πάντα. Η ιδιότητα αυτή είναι αποτέλεσμα του ότι  $|e^{im_l\varphi}| = 1$ . Το αποτέλεσμα αυτό ισχύει για όλες τις υδρογονοειδής κυματοσυναρτήσεις.

Η κατάσταση  $\psi_{2,1,0}$  έχει έντονα χαρακτηριστικά προσανατολισμού στο χώρο, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.2. Μερικές φορές, λοιπόν η συγκεκριμένη κατάσταση γράφεται και  $[\psi_{2p}]_z$  για να τονιστεί αυτός ο προσανατολισμός. Ο προσανατολισμός αυτός δηλώνει ότι το ηλεκτρόνιο έχει άξονα συμμετρίας τον άξονα  $z$ . Άλλες καταστάσεις με έντονο προσανατολισμό στο χώρο μπορούν να σχηματιστούν με συνδυασμό κυμάτων με  $m_l = +1$  και  $m_l = -1$ . Έτσι, οι κυματοσυναρτήσεις

$$\begin{aligned} [\psi_{2p}]_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1} \} \\ [\psi_{2p}]_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{2,1,1} - \psi_{2,1,-1} \} \end{aligned} \quad (33)$$

έχουν συμμετρικές πυκνότητες πιθανότητας κατά μήκος των αξόνων  $x$  και  $y$  αντίστοιχα. Οι κυματοσυναρτήσεις των προηγούμενων εξισώσεων, που σχηματίστηκαν με υπέρθεση κυμάτων της πρώτης διεγερμένης στάθμης  $E_2$ , είναι και αυτές στάσιμες καταστάσεις με την ίδια ενέργεια. Τα τρία κύματα  $[\psi_{2p}]_z, [\psi_{2p}]_x, [\psi_{2p}]_y$  μαζί μπορούν να χρησιμοποιηθούν εξίσου καλά για την περιγραφή των καταστάσεων  $2p$  των υδρογονοειδών ατόμων. Κυματοσυναρτήσεις με έντονη κατευθυντικότητα παίζουν σπουδαίο ρόλο στον χημικό δεσμό, στον σχηματισμό μορίων και στις χημικές ιδιότητες. Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger που αναφέρεται το συγκεκριμένο μοντέλο του ατόμου του υδρογόνου είναι γραμμικώς ανεξάρτητες. Κάθε γραμμικός συνδυασμός των κυματοσυναρτήσεων ίδιας ενέργειας  $n=2$  και  $l=1$  θα είναι μια κυματοσυνάρτηση σαφώς καθορισμένης ενέργειας και μέτρου στροφορμής, όχι όμως και συνιστώσας  $L_z$ . Οι τρεις αυτές συναρτήσεις

αποτελούν μια βάση του διανυσματικού υπόχωρου που χαρακτηρίζεται από  $n=2$  και  $l=1$ .

Η επόμενη διεγερμένη στάθμη έχει  $n=3$  και ενέργεια  $E_3$ . Είναι εννέα φορές εκφυλισμένη, δηλαδή υπάρχουν εννέα κυματοσυναρτήσεις με την ίδια ενέργεια, οι οποίες αντιστοιχούν σε όλες τις δυνατές επιλογές των  $l$  και  $m_l$  για  $n=3$ . Οι εννέα αυτές καταστάσεις, όλες μαζί αποτελούν την Τρίτη στιβάδα, με υποστιβάδες τις 3s, 3p, και 3d, οι οποίες αποτελούνται από μία, τρεις και πέντε καταστάσεις αντίστοιχα. Στην εφαρμογή που ακολουθεί μπορεί κανείς να επιλέξει  $n=3$  και αντίστοιχα τα  $l$  και  $m$  που θέλει για να δει την πυκνότητα πιθανότητας των ιδιοκαταστάσεων. Επίσης μπορεί να δει το αποτέλεσμα της υπέρθεσης καταστάσεων ίδιας ενέργειας.

## 1.5 Στροφορμή

Η τροχιακή στροφορμή ορίζεται ως:  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ . Αν θεωρήσουμε τις προβολές τις  $L_x, L_y, L_z$  στους άξονες του καρτεσιανού επιπέδου  $x, y, z$  αντίστοιχα παίρνουμε:

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ L_y &= i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \end{aligned} \quad (34)$$

Έστω η προβολή της ολικής στροφορμής  $L_z$  του περιστρεφόμενου ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα. Αντιστοιχούν σε αυτήν οι ερμιτιανοί τελεστές  $\widehat{L}^2$  και  $\widehat{L}_z$ . Οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών είναι οι σφαιρικές αρμονικές  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  και οι ιδιοτιμές τους είναι οι σχέσεις που συνδέουν την στροφορμή με τον κβαντικό αριθμό  $l$ , δηλαδή

$$\begin{aligned} \widehat{L}^2 \text{ έχει ιδιοτιμές } l(l+1)\hbar^2 \text{ και} \\ \widehat{L}_z \text{ έχει ιδιοτιμές } m\hbar \end{aligned}$$

Ισχύουν, λοιπόν οι παρακάτω εξισώσεις

$$\begin{aligned} \widehat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ \widehat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= m\hbar Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (35)$$

Για τα  $l, m$  ισχύουν οι σχέσεις (25). Οι σχέσεις (35) προκύπτουν από την έκφραση της στροφορμής σε σφαιρικές συντεταγμένες, η οποία είναι  $L^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ . Η έκφραση αυτή, προφανώς, χρησιμοποιείται σε προβλήματα με σφαιρική συμμετρία, και δίνει τροχιακή στροφορμή  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ . Η τροχιακή στροφορμή διατηρείται σε συστήματα με πλήρη συμμετρία. Η συνιστώσα  $z$  της τροχιακής στροφορμής ταυτίζεται με την αζιμουθιακή συνιστώσα της ορμής στην κλασική περιγραφή, οπότε για το ημικλασικό όριο του ατόμου του υδρογόνου, θα χρησιμοποιηθεί η αζιμουθιακή γωνία αντί του  $z$  στην μοναδική συνιστώσα της στροφορμής.

Τα μεγέθη της στροφορμής και της προβολής της παίρνουν συγκεκριμένες μόνο τιμές, δηλαδή είναι κβαντισμένα. Οι τελεστές  $\widehat{L}^2$  και  $\widehat{L}_z$  μετατίθενται μεταξύ τους και είναι δυνατόν να είναι γνωστή η τιμή και των δύο ταυτόχρονα. Αντίθετα οι τελεστές  $\widehat{L}_x$  ή  $\widehat{L}_y$  και  $\widehat{L}_z$  δεν μετατίθενται, με αποτέλεσμα να μην μπορεί να υπολογιστεί η τιμή τους την ίδια χρονική στιγμή. Γενικά μόνο το μέγεθος της ολικής στροφορμής και μιας εκ των προβολών είναι δυνατόν να είναι γνωστά ταυτόχρονα. Η μέση τιμή των άλλων δυο προβολών είναι μηδέν.

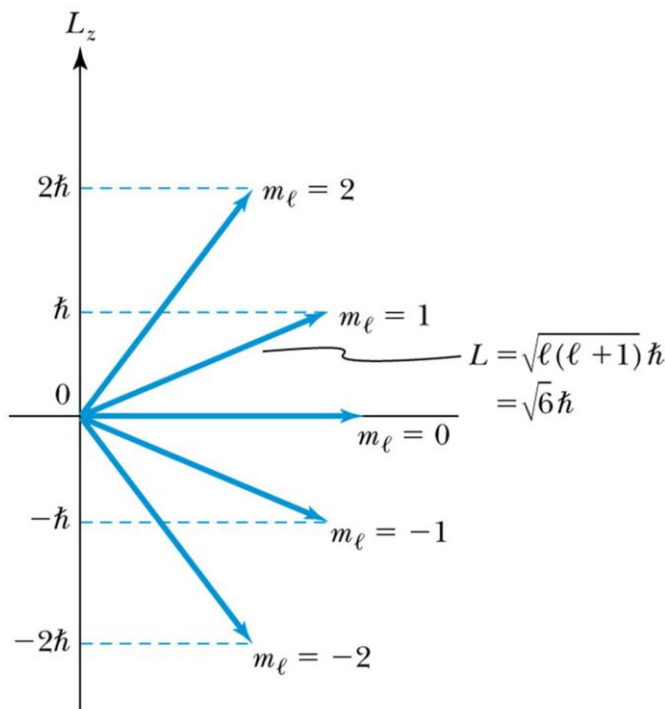
Αν θεωρηθεί η προβολή  $\widehat{L}_z$ , με τις άλλες δύο να έχουν μέση τιμή μηδέν, τότε η ακριβής τιμή της είναι

$$L_z = m\hbar$$

Αυτό οδηγεί σε κβάντωση της κατεύθυνσης. Ο προσανατολισμός του διανύσματος της ολικής στροφορμής μπορεί να είναι μόνο αυτός για τον οποίο οι προβολές του  $\widehat{L}$  στον άξονα z είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του  $\hbar$ . Η γωνία  $\theta$  που σχηματίζει η διεύθυνση L, με τον άξονα z δίνεται από

$$\cos\theta = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$$

και παίρνει ορισμένες τιμές. Σχηματικά δίνεται ένα παράδειγμα παρακάτω για  $l=2$  και άρα  $L = \sqrt{6}\hbar$ .



Εικόνα 1.2: Σχεδιασμός του διανύσματος της στροφορμής με δεδομένο κβαντικό αριθμό  $l=2$  άρα  $L = \sqrt{6}\hbar$ . Προκύπτουν 6 προσανατολισμοί που αντιστοιχούν σε κάθε  $m$  που μπορεί να προκύψει δεδομένου του  $l$ .

## 1.6 Ενεργειακές στάθμες - Εκφυλισμός

Με εξαίρεση τη θεμελιώδη στάθμη για  $n=0$ , όλες οι υπόλοιπες είναι *εκφυλισμένες*. Η τάξη εκφυλισμού, δηλαδή ο αριθμός των ιδιοσυναρτήσεων με ίδια ενέργεια, είναι  $2l + 1$ . Εξαρτάται αρχικά από το  $n$ , όπου, για δεδομένο  $n$ , οι αντίστοιχες επιτρεπτές τιμές του  $l$  καθορίζουν τελικά τον αριθμό των εκφυλισμένων καταστάσεων. Κάθε κατάσταση εμφανίζει επίσης  $s_{\text{spin}} \pm 1/2$ , το οποίο δίνει  $2s+1$  δέσμες παρουσία μαγνητικού πεδίου, γεγονός που αποδεικνύει τον ύπαρξη του  $s_{\text{spin}}$  και τον ενεργειακό εκφυλισμό των επιπρόσθετο εκφυλισμό των καταστάσεων λόγω αυτού.

Η σφαιρική συμμετρία του προβλήματος είναι υπεύθυνη για τον εκφυλισμό που παρουσιάζει. Το άτομο είναι σφαιρικό, οπότε όλες οι ιδιοσυναρτήσεις που διαφέρουν μόνο ως προς την τιμή του  $m$  θα έχουν ίδια ενέργεια, αφού οι διαφορετικές τιμές του  $m$  αντιστοιχούν σε διαφορετικούς προσανατολισμούς του διανύσματος της στροφορμής στον χώρο, οι οποίοι δεν επηρεάζουν την ενέργεια του ηλεκτρονίου. Ο εκφυλισμός αυτός ονομάζεται *περιστροφικός εκφυλισμός* και αναμένεται σε όλα τα κεντρικά δυναμικά. Η ονομασία απορρέει από το γεγονός ότι λόγω της περιστροφικής συμμετρίας που έχει κάθε κεντρικό δυναμικό οι ενεργειακές του ιδιοτιμές θα εξαρτώνται μόνο από τους κβαντικούς αριθμούς  $n$  και  $l$  και όχι από το  $m$ .

Όμως στο άτομο του υδρογόνου συγκεκριμένα οι ενεργειακές στάθμες είναι ανεξάρτητες και από το  $l$ . Προκύπτουν καταστάσεις με διαφορετικό  $l$  που έχουν ίδια ενέργεια. Ο εκφυλισμός αυτός ονομάζεται *συμπτωματικός ή υδρογονικός εκφυλισμός* και είναι αποτέλεσμα της ιδιότητας από την κλασική μηχανική ότι διαθέτει κλειστές μη κυκλικές τροχιές.

## 1.7 Άρση εκφυλισμού λόγω ύπαρξης μαγνητικού πεδίου

Η άρση του περιστροφικού εκφυλισμού μπορεί να επιτευχθεί με την παρουσία μαγνητικού πεδίου. Στα άτομα υπάρχουν διάφορες καταστάσεις με ίδια ενέργεια όπως διατυπώθηκε παραπάνω. Όλες αυτές οι καταστάσεις δηλώνουν ότι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην ίδια στιβάδα, και αντιπροσωπεύονται από μια κοινή γραμμή στο φάσμα εκπομπής. Η παρουσία μαγνητικού πεδίου αλλάζει αυτή την εικόνα, καθώς αντιδρά διαφορετικά με ηλεκτρόνια που χαρακτηρίζονται από διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς. Ο κύριος κβαντικός αριθμός μπορεί να είναι ίδιος, δεν είναι όμως ίδιοι ο κβαντικός αριθμός στροφορμής και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Το αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης μαγνητικού πεδίου και ηλεκτρονίων με διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς είναι η παρουσία λεπτών φασματικών γραμμών, πολύ κοντά η μία στην άλλη. Η παρουσία μαγνητικού πεδίου χωρίζει τις ενεργειακές στάθμες από μία σε διαφορετικές. Οι μεταβάσεις στις στάθμες που προκύπτουν διέπονται από τους κανόνες επιλογής. Η απόσταση μεταξύ αυτών των γραμμών είναι ανάλογη του μαγνητικού πεδίου, ιδιότητα που είναι χρήσιμη για αρκετές πρακτικές εφαρμογές, όπως στην αστρονομία, όπου δίνεται η δυνατότητα μέτρησης του μαγνητικού πεδίου του ήλιου και των άλλων αστέρων.

Θεωρούμε ένα μαγνητικό πεδίο<sup>1</sup> κατά τον άξονα z

$$B = B \hat{z}$$

Τότε η ενέργεια αλληλεπίδρασης της μαγνητικής ροπής και ενός μαγνητικού πεδίου είναι

$$U = -\mu \cdot B \quad (37)$$

Η μαγνητική ροπή ορίζεται ως

$$\mu = -\frac{e}{2m_e c} L$$

Οπότε η ενέργεια γράφεται τελικά

$$U = \frac{eB}{2m_e c} L_z \quad (38)$$

Για το  $L_z$  ισχύει

$$L_z = \hbar m$$

αφού οι ατομικές ιδιοκαταστάσεις είναι και ιδιοκαταστάσεις του  $L_z$  με ιδιοτιμές  $\hbar m$  και

$$U = \frac{eB}{2m_e c} L_z = \mu_B B m \quad (39)$$

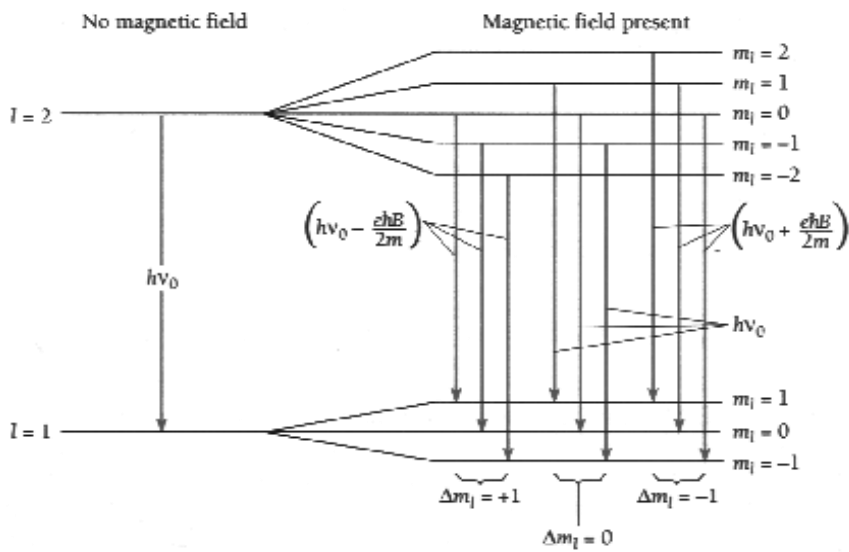
με

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

η μαγνητόνη του Bohr, που αποτελεί την μονάδα μέτρησης των ατομικών μαγνητικών ροπών. Η προσθήκη στις ατομικές στάθμες ενός όρου της μορφής  $U = \frac{eB}{2m_e c} L_z$  θα προκαλέσει άρση του περιστροφικού εκφυλισμού, αφού πλέον η ενέργεια των σταθμών θα εξαρτάται από τον κβαντικό αριθμό m. Για παράδειγμα για την στάθμη με  $l=1$  η άρση του εκφυλισμού θα δώσει το παρακάτω αποτέλεσμα που φαίνεται στην εικόνα.

---

<sup>1</sup> Το μαγνητικό πεδίο είναι ανομοιογενές για να είναι μπορέσει να ασκηθεί μαγνητική δύναμη σε άτομο.



Εικόνα 1.4 :Ομαλό φαινόμενο Zeeman. Η τοποθέτηση μαγνητικού πεδίου κατά τον άξονα z προκαλεί άρση του περιστροφικού εκφυλισμού δημιουργώντας τρεις καινούριες στάθμες για  $l=1$  και πέντε για  $l=2$ . Οι στάθμες είναι ισαπέχουσες και διαφέρουν ως προς τον κβαντικό αριθμό  $m$ . Οι μεταβάσεις έχουν σχεδιαστεί σύμφωνα με τους κανόνες επιλογής. Εικόνα από [http://psi.phys.wits.ac.za/teaching/Connell/phys284/2005/lecture-03/lecture\\_03/node14.html](http://psi.phys.wits.ac.za/teaching/Connell/phys284/2005/lecture-03/lecture_03/node14.html)

Για μια στάθμη με τυχόν  $l$  το πλήθος των σταθμών Zeeman θα είναι  $2l+1$  και η μεταξύ τους απόσταση ίση με  $\mu_B B$ . Η απόσταση αυτή ονομάζεται απόσταση Zeeman.

Αν στη θεμελιώδη στάθμη του υδρογόνου εφαρμοστεί ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο της μορφής

$$B = \hat{z}B(z) \quad (40)$$

δηλαδή πεδίο με διεύθυνση και βαθμίδα κατά τον άξονα  $z$ , τότε η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι

$$U = -\mu_s B(z) \quad (41)$$

$$\mu_s = -\frac{e\hbar}{m_e c} s$$

Το πείραμα αυτό πραγματοποιήθηκε από τους Stern και Gerlach και στην ουσία επιβεβαίωσε την ύπαρξη του spin του ηλεκτρονίου.

Η ενέργεια των ατόμων μέσα σε ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο είναι συνάρτηση του  $z$ , οπότε θα είναι υπεύθυνη για την ύπαρξη δύναμης

$$F_z = -\frac{dU}{dz} = -\frac{\mu_B dB}{dz} m \quad (42)$$

κατά μήκος του άξονα  $z$ , που είναι προφανής η εξάρτησή της από τον κβαντικό αριθμό  $m$ . Με την επιβολή αυτού του πεδίου στη θεμελιώδη στάθμη η αρχική δέσμη χωρίστηκε σε δύο και επομένως υπάρχει κβαντικός αριθμός  $s$  που έχει την τιμή  $\frac{1}{2}$ . Γενικά κατά την έξοδο από μια συσκευή Stern- Gerlach οποιασδήποτε διεγερμένης κατάστασης των ατόμων του υδρογόνου θα προκύψουν  $2s+1$  δέσμες.

Ο κβαντικός αριθμός  $s$  ονομάζεται *spin* (ιδιοστροφορμή). Περιγράφεται από δύο κβαντικούς αριθμούς  $s$  και  $m_s$ , όπου το  $m_s$ , παίρνει τιμές από  $-s$  έως  $+s$ . Η τιμή

της στροφορμής λόγω της ιδιοπεριστροφής του ηλεκτρονίου δίνεται από τη σχέση  $\sqrt{s(s+1)}\hbar$  και η συνιστώσα κατά τη διεύθυνση του άξονα z είναι  $s_z = m_s\hbar$ . Τέλος η ολική στροφορμή ορίζεται ως  $j = l + s$ .

Λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση spin-τροχιάς, καθώς και την σχετικιστική διόρθωση της μάζας με την ταχύτητα εξάγεται ο τύπος του Sommerfeld για τη λεπτή υφή των ενεργειακών επιπέδων του ατόμου του υδρογόνου

$$E_{n,j} = -\frac{a^2}{2n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)$$

Το φυσικό νόημα του παραπάνω τύπο είναι ότι καταστάσεις διαφορετικού l (αλλά ίδιου n), που συνδυάζονται με το spin ώστε να δώσουν ίδια ολική στροφορμή, θα έχουν ίδια ενέργεια, τουλάχιστον μέχρι το έβδομο δεκαδικό ψηφίο.

## 1.8 Ατομικό Σύστημα μονάδων

Καλείται το σύστημα στο οποίο ισχύει  $\hbar = m = e = 1$ . Το σύστημα αυτό χρησιμοποιείται ευρύτατα στην ατομική φυσική και είναι γνωστό με τη συντομογραφία A.U. (Atomic Units). Στα πλαίσια του συστήματος αυτού η μονάδα μέτρησης ενός οποιουδήποτε φυσικού μεγέθους είναι ο μοναδικός εκείνος συνδυασμός των  $\hbar, m$  και  $e$  με τις διαστάσεις αυτού του φυσικού μεγέθους και αριθμητικό συντελεστή μονάδα. Έτσι οι ποσότητες  $\alpha_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \text{ \AA}$  και  $\epsilon = \frac{me^4}{\hbar} = 27,2 \text{ eV}$  είναι μονάδες μήκους και ενέργειας του ατομικού συστήματος μονάδων. Σε ατομικές μονάδες η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης του ατόμου γράφεται ως  $E_1 = -\frac{1}{2} \text{ A.U.} \equiv -\frac{1}{2} \times 27,6 \text{ eV} = -13,6 \text{ eV}$ .

Έτσι η ακτινική εξίσωση Schrödinger γράφεται στο ατομικό σύστημα μονάδων ως  $y'' + (2E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2})y = 0$ . Επίσης σε ατομικές μονάδες μπορούν να υπολογιστούν οι μέσες τιμές βασικών μεγεθών, όπως η μέση απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα για τη θεμελιώδη κατάσταση  $\langle r \rangle = 3/2 \text{ A.U.}$ . Η πιθανότερη απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα δίνεται από την πυκνότητα πιθανότητας και είναι  $r = 1 = \alpha_0$  σε ατομικές μονάδες και η αναμενόμενη τιμή στην θεμελιώδη κατάσταση της ποσότητας  $1/r$  είναι  $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{\alpha_0}$ .



## Κεφάλαιο 2

### Κβαντικός Αρμονικός Ταλαντωτής.

#### 2.1 Βασικές αρχές

Ο αρμονικός ταλαντωτής στην κλασική μηχανική είναι ένα από τα πιο απλά συστήματα. Περιγράφει την κίνηση ενός σώματος μάζας  $m$ , που υπόκειται σε δύναμη

$$F = -kx \quad (1),$$

δηλαδή ανάλογη της απομάκρυνσης από το ελκτικό κέντρο  $x = 0$ . Η εξίσωση κίνησης του σωματιδίου είναι  $m\ddot{x} = -kx$  και η λύση της εξίσωσης αυτής είναι  $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$  που αντιπροσωπεύει μια αρμονική ταλάντωση με συχνότητα  $\omega = \sqrt{k/m}$  και περίοδο  $T = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$ . Η δύναμη  $F$  απορρέει από το δυναμικό:

$$V = \frac{1}{2}kx^2 \quad (2).$$

Για τον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή χρησιμοποιείται η εξίσωση Schrödinger, αντί της εξίσωσης του Νεύτωνα

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0, \quad (3)$$

όπου  $m$  η μάζα του σωματιδίου.

Αν θεωρηθεί  $V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$  η εξίσωση παίρνει τη μορφή :

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi = 0 \quad (4)$$

Η Χαμιλτονιανή του σωματιδίου είναι:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \quad (5)$$

όπου  $\hat{x} = x$  ο τελεστής θέσης και  $\hat{p}$  ο τελεστής ορμής :

$$\hat{p} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (6)$$

Ο πρώτος όρος της εξίσωσης (5) αντιπροσωπεύει την κινητική ενέργεια του σωματιδίου. Ο δεύτερος αντιπροσωπεύει την δυναμική ενέργεια. Για τον υπολογισμό των ενεργειακών σταθμών και των αντίστοιχων ιδιοκαταστάσεων απαιτείται η επίλυση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (7)$$

Η λύσεις προκύπτουν ως εξής

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Όπου  $H_n$  είναι τα πολυώνυμα Hermite:

$$H_n = (-1)^n \frac{e^{x^2}}{dx^n} (e^{-x^2}) \quad (9).$$

Η ενέργεια σε κάθε ενεργειακή στάθμη δίνεται από:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (10).$$

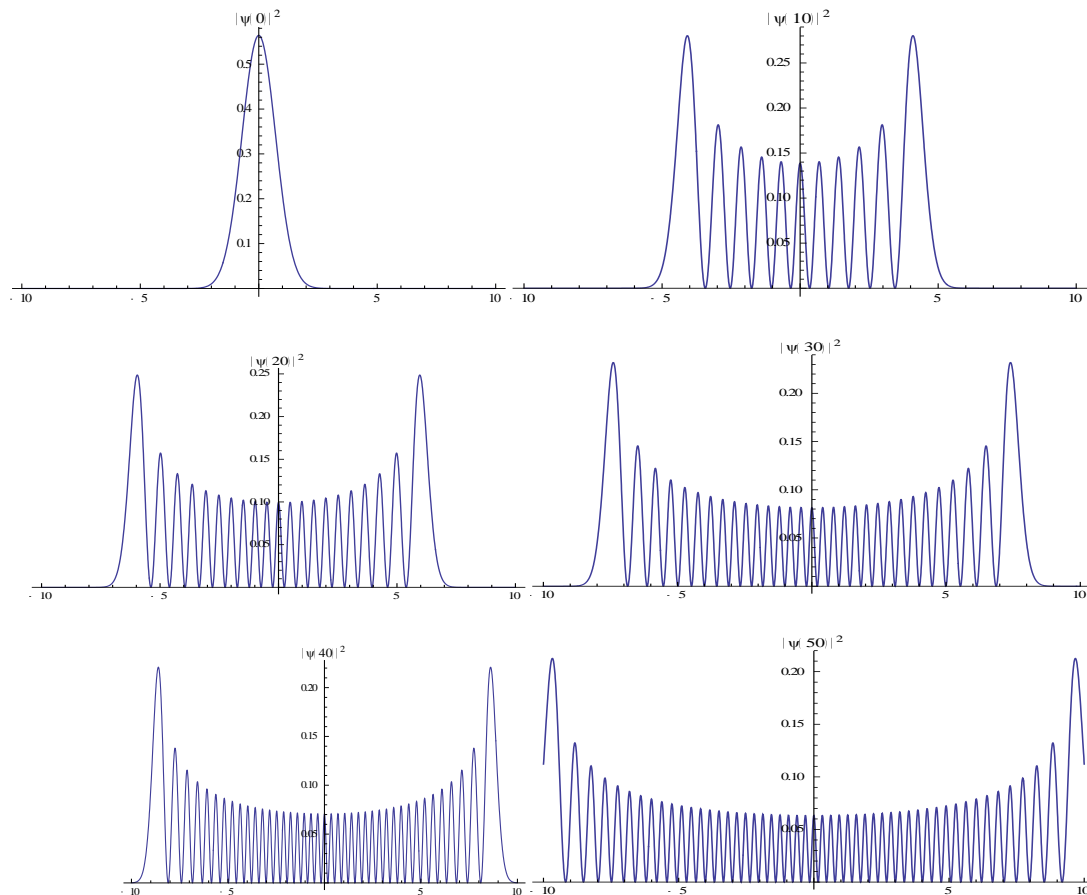
Οι παραπάνω εξισώσεις απλοποιούνται, αν χρησιμοποιηθεί η αδιάστατη μορφή τους με  $\hbar = \omega = m = 1$ , οπότε προκύπτει:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \quad (11).$$

Και για τις ιδιοκαταστάσεις και ιδιοενέργειες :

$$\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_n(x) \quad (12)$$

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (13).$$



Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση των πυκνοτήτων πιθανότητας για  $n=1, 10, 20, 30, 40, 50$ .

Αν συμβολιστούν οι ιδιοκαταστάσεις του ταλαντωτή ως  $|n\rangle$ , με  $n=0$  η θεμελιώδης κατάσταση,  $n=1$  η πρώτη διεγερμένη κ.ο.κ., τότε ορίζονται οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής του Paul Dirac ως:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{i}{m\omega} p \right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{i}{m\omega} p \right) \quad (15)$$

ή σε αδιάστατη μορφή :  $a = \sqrt{\frac{1}{2}} (x + ip)$ ,  $a^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}} (x - ip)$

και έχουν την εξής δράση πάνω στις ιδιοκαταστάσεις:

$$\alpha^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (16) \quad \text{και} \quad \alpha |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (17)$$

Ορίζεται επίσης ο τελεστής  $N = \alpha^\dagger \alpha$ , με τις παρακάτω ιδιότητες:

$$[\alpha, \alpha^\dagger] = 1, \quad [N, \alpha^\dagger] = \alpha^\dagger, \quad [N, \alpha] = -\alpha$$

Οπότε η Χαμιλτόνια μπορεί να εκφραστεί μέσω του  $N$  ως:

$$H = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (18.α)$$

Από τον παραπάνω τύπο προκύπτει για τις ιδιοενέργειες

$$\left(\alpha\alpha^\dagger + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \quad (18.β)$$

Αν εφαρμοστεί επανειλημμένως η (18.α), με σημείο εκκίνησης την θεμελιώδη κατάσταση, προκύπτει

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha^\dagger)^n |0\rangle \quad (19),$$

που γράφεται στην αναπαράσταση θέσης ως

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha^\dagger)^n \psi_0(x) \quad (20)$$

με

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

η θεμελιώδης κατάσταση σε αδιάστατη μορφή, όπου για να προκύψει η συγκεκριμένη μορφή, λήφθηκε υπόψη ότι η δράση του τελεστή  $\alpha$  θα πρέπει να εκμηδενίζει την ιδιοκατάσταση, αφού η θεμελιώδης είναι η χαμηλότερη ( $n = 0 \rightarrow \alpha\psi_0 = 0$ ).

Μέσω των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής μπορούν να εκφραστούν και τα μεγέθη θέση ( $x$ ) και ορμή ( $p$ )

$$x = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad p = \frac{a - a^\dagger}{\sqrt{2}} \quad (21).$$

## 2.2 Αβεβαιότητα του αρμονικού ταλαντωτή

Η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή είναι  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$  και όχι 0 όπως στον κλασικό αρμονικό ταλαντωτή. Αυτό συμβαίνει γιατί στη Χαμιλτονιανή του, υπάρχουν οι δύο όροι της κινητικής και τη μηχανικής

ενέργειας που δείχθηκαν παραπάνω. Το σωματίδιο, λοιπόν, έχει κινητική ενέργεια στην γειτονιά του  $x=0$ , εκεί δηλαδή που η δυναμική ενέργεια τείνει στο μηδέν. Η αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg ( $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ ), σε αυτή την περίπτωση, υποδεικνύει ότι η αβεβαιότητα της ορμής αυξάνεται, οπότε και η ολική ενέργεια αυξάνεται μέχρι ένα σημείο.

Παρακάτω κατασκευάζονται οι καταστάσεις του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή, λαμβάνοντας υπόψη την αρχή της αβεβαιότητας. Οι αβεβαιότητες θέσης και ορμής έχουν ως εξής:

$$\langle x \rangle = \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | a + a^\dagger | \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | \psi_{n-1} \rangle + \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle = 0 \quad (22)$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle \psi_n | x^2 | \psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n | a^2 + \alpha a^\dagger + a^\dagger a + (\alpha^\dagger)^2 | \psi_n \rangle \quad (23)$$

Οι τελεστές  $a^2$  και  $(\alpha^\dagger)^2$  αλληλοαναιρούνται και εισάγοντας στην (22) και τον τελεστή  $N$  γράφεται

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n | 2N + 1 | \psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) \\ &= x_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (24)$$

Όπου  $x_0$  το χαρακτηριστικό πλάτος του αρμονικού ταλαντωτή  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  και  $n = 0, 1, 2, \dots$

Η αβεβαιότητα της θέσης δίνεται τελικά από

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = x_0^2 \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (25)$$

Ομοίως υπολογίζεται η αβεβαιότητα της ορμής ως

$$\langle p \rangle = \langle \psi_n | p | \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | a - a^\dagger | \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | \psi_{n-1} \rangle - \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle = 0 \quad (26)$$

$$\langle p^2 \rangle = \langle \psi_n | p^2 | \psi_n \rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \psi_n | a^2 - \alpha a^\dagger - a^\dagger a + (\alpha^\dagger)^2 | \psi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (27)$$

Και τελικά

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{x_0^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (28)$$

Με πολλαπλασιασμό των σχέσεων (25) και (28) λαμβάνεται το αποτέλεσμα

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (29. \alpha)$$

και με πολλαπλασιασμό των (24) και (27) η σχέση της αβεβαιότητας μπορεί να γραφεί και:

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (29.\beta)$$

Η ισότητα ισχύει για τη θεμελιώδη κατάσταση. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης μπορεί να γραφεί σαν συνάρτηση του πλάτους  $x_0$  και η έκφρασή της είναι

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (30),$$

δηλαδή ένα Γκαουσιανό κυματοπακέτο με τυπική απόκλιση  $x_0$ .

Υπολογίζοντας τώρα τη μέση τιμή της ενέργειας ισχύει:

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\langle p^2 \rangle} \quad (31)$$

Η ελάχιστη τιμή του μεγέθους  $\langle p^2 \rangle$  είναι  $\frac{m\omega\hbar}{2}$ , τιμή που αν αντικατασταθεί στην (31) λαμβάνεται η ελάχιστη τιμή για την ενέργεια ως

$$E \geq \frac{1}{2m} \frac{m\omega\hbar}{2} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{2} \frac{2}{m\omega\hbar} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (32)$$

Δηλαδή

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad (33)$$

Το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η μέση τιμή της ενέργεια που μπορεί να έχει ένα φυσικό σύστημα είναι μεγαλύτερη ή ίση της ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης.

### 2.3 Σύγκριση με τον κλασικό αρμονικό ταλαντωτή

Ο κλασικός αρμονικός ταλαντωτής έχει εξίσωση κίνησης

$$x(t) = q_0 \sin(\omega t) \quad (34)$$

Η ολική ενέργεια του συστήματος είναι σταθερή και δίνεται από

$$E = \frac{m\omega^2}{2} q_0^2, \quad (35)$$

όπου  $\omega$  είναι η γωνιακή συχνότητα και  $q_0$  το αρχικό πλάτος. Για τη σύγκριση με τον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή ορίζουμε την πυκνότητα πιθανότητας του ταλαντωτή ως συνάρτηση του  $x$ :

$$P_{class}(x) dx = \frac{dt}{T}, \quad (36)$$

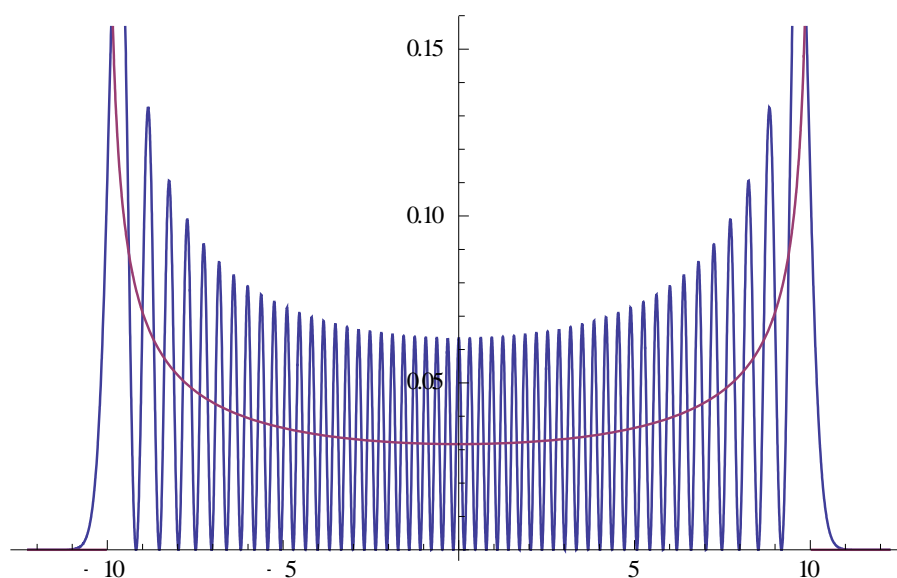
με  $dt$  το χρόνο που ο ταλαντωτής βρίσκεται στο στοιχειώδες  $dx$ , και  $T = 2\pi/\omega$  ο χρόνος μιας περιόδου. Με διαφορίση της (34) και αντικατάσταση στην (36) έχουμε τελικά:

$$P_{class}(x) = (2\pi q_0 \sqrt{1 - \left(\frac{x}{q_0}\right)^2})^{-1} \quad (36)$$

Με εξίσωση των (35) και (14), δηλαδή των εκφράσεων για την ενέργεια του κλασικού και κβαντομηχανικού συστήματος αντίστοιχα, εκφράζεται η σχέση μεταξύ του αρχικού πλάτους  $q_0$  και του χαρακτηριστικού πλάτους  $x_0$ :

$$q_0 = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} = \sqrt{2n+1} x_0. \quad (37)$$

Από τη σύγκριση των δύο εκφράσεων του ταλαντωτή εξάγεται το αποτέλεσμα ότι για χαμηλές ενέργειες και ιδιοκαταστάσεις τα δύο συστήματα διαφέρουν εμφανώς. Όμως για ιδιοκαταστάσεις με πολύ μεγάλο  $n$  οι πυκνότητες πιθανότητας μοιάζουν αρκετά. Παρακάτω παρουσιάζεται η πυκνότητα πιθανότητας του κβαντικού ταλαντωτή για  $n=50$  και του κλασικού σε συνάρτηση με το  $x$ . Οι δύο συναρτήσεις έχουν παρόμοια συμπεριφορά.



**Σχήμα 2.2:** Η κόκκινη γραμμή συμβολίζει την πυκνότητα πιθανότητας του κλασικού αρμονικού ταλαντωτή και η μπλε του κβαντικού για  $n=50$ .

---

### 2.3 Έκφραση μέσω πινάκων

Οι ιδιοσυναρτήσεις του κβαντικού ταλαντωτή μπορούν να εκφραστούν μέσω πινάκων. Αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα στο χώρο Hilbert. Αν συμβολιστεί κάθε ιδιοσυνάρτηση μόνο με το αντίστοιχο γράμμα  $n$  λαμβάνονται τα παρακάτω διανύσματα

$$\psi_0 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = |0\rangle, \quad \psi_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} = |1\rangle, \quad \psi_n \rightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = |n\rangle \quad (38)$$

Τα διανύσματα  $\{|n\rangle\}$  αποτελούν και αυτά ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα, το χώρο Fock. Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σε αυτό το χώρο επιτρέπουν την κατασκευή οποιασδήποτε κατάστασης από την θεμελιώδη.

Οι πιο σημαντικές σχέσεις είναι οι:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (39)$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha^\dagger)^n |0\rangle \quad (40)$$

$$\alpha^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (41)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (42)$$

$$N |n\rangle = \alpha^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \quad (43)$$

$$H |n\rangle = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \quad (44)$$

### 2.4 Σύμφωνες καταστάσεις

Οι σύμφωνες καταστάσεις, ή καταστάσεις Clauber, είναι ένα πολύ σημαντικό κομμάτι της κβαντικής οπτικής και ειδικά της φυσικής των λέιζερ. Στον Roy J. Clauber το 2005 απονεμήθηκε το βραβείο Νόμπελ για την συμβολή του στην κβαντική θεωρία της οπτικής συμφωνίας. Παρακάτω δίνεται μια συνοπτική περιγραφή των σύμφωνων καταστάσεων των δεσμών λέιζερ.



Η κατάσταση που περιγράφει μια δέσμη λέιζερ έχει απροσδιόριστο αριθμό φωτονίων, αλλά πολύ καλά εντοπισμένη φάση σε αντίθεση με μια κατάσταση από απόλυτα ορισμένο αριθμό σωματιδίων, που έχουν όμως απροσδιόριστη φάση.

ΟΡΙΣΜΟΣ : Μια σύμφωνη κατάσταση  $|\alpha\rangle$ , ή κατάσταση Glauber, ορίζεται ως ιδιοκατάσταση του τελεστή πλάτους, δηλαδή του τελεστή  $a$ , με ιδιοτιμές  $\alpha \in \mathbb{C}$

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (45)$$

Είναι οι καταστάσεις που βρίσκονται πιο κοντά στο κλασικό όριο από όλες τις υπόλοιπες. Ο τελεστής  $a$  δεν είναι ερμιτιανός και οι ιδιοτιμές του  $a$  δεν είναι απαραίτητα πραγματικοί αριθμοί.

Θεώρημα: α) Οι σύμφωνες καταστάσεις δεν έχουν καθορισμένη ενέργεια. Η μέση ενέργεια και η αβεβαιότητα ενέργειας του ταλαντωτή σε μια σύμφωνη κατάσταση  $|\alpha\rangle$  είναι ίση με 1:

$$\langle E \rangle = |\alpha|^2 + \frac{1}{2}, \quad \Delta E = |\alpha|.$$

β) Μη όντας ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας, οι σύμφωνες καταστάσεις θα γράφονται ως μια επαλληλία τέτοιων ιδιοκαταστάσεων. Συγκεκριμένα:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

Οι καταστάσεις  $|\alpha\rangle$  και  $|n\rangle$  είναι κανονικοποιημένες.

γ) Στην αναπαράσταση θέσης οι σύμφωνες καταστάσεις με  $\text{Im}\alpha=0$ , περιγράφονται από τις κυματοσυναρτήσεις

$$\psi_{\alpha}(x) \equiv \langle x|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{(x-\alpha\sqrt{2})^2}{2}}.$$

Απόδειξη: α)  $\langle E \rangle = \langle H \rangle = \left\langle \alpha \left| \left( a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) \right| \alpha \right\rangle = \langle \alpha | a^{\dagger} a | \alpha \rangle + \frac{1}{2} = \alpha^* \alpha + \frac{1}{2}$

Η αβεβαιότητα της ενέργειας υπολογίζεται ως:

$$(\Delta E)^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

με

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle &= \left\langle \alpha \left| \left( a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right)^2 \right| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \left| \left( a^{\dagger} a a^{\dagger} a + a^{\dagger} a + \frac{1}{4} \right) \right| \alpha \right\rangle \\ &= \langle \alpha | a^{\dagger} a a^{\dagger} a | \alpha \rangle + \langle \alpha | a^{\dagger} a | \alpha \rangle + \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Μια χρήσιμη παρατήρηση για την εκτέλεση τέτοιων υπολογισμών απορρέει από τη σχέση συζυγίας

$$\langle \alpha | a^{\dagger} = (a | \alpha \rangle)^{\dagger} = (a | a \rangle)^{\dagger} = \langle \alpha | a^*$$

---

1 Ισχύει  $\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{\alpha}$  για  $|\alpha| \gg 1$ .

η οποία υποδεικνύει ότι το συζυγές διάνυσμα  $\langle \alpha |$  είναι ιδιοδιάνυσμα του συζυγούς τελεστή  $a^\dagger$  με ιδιοτιμή  $\alpha^*$ , δηλαδή τη συζυγή της αρχικής. Οπότε μπορεί να γραφεί η παρακάτω σχέση

$$\langle \alpha | a^\dagger \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha^* a | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha$$

Και

$$\begin{aligned} \langle \alpha | a^\dagger a a^\dagger a | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \alpha^* a a^\dagger \alpha | \alpha \rangle \\ &= \alpha^* \alpha \langle \alpha | a^\dagger \alpha | \alpha \rangle = \dots = \alpha^* \alpha (\alpha^* \alpha + 1) = |\alpha|^4 + |\alpha|^2. \end{aligned}$$

Για το μέγεθος  $\langle H^2 \rangle$  η σχέση έχει ως εξής μετά τα προηγούμενα:

$$\langle H^2 \rangle = |\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + \frac{1}{4}$$

Και άρα

$$\begin{aligned} (\Delta E)^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 &= |\alpha|^4 + |\alpha|^2 + \frac{1}{4} - \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)^2 = |\alpha|^2 \\ \Rightarrow \Delta E &= |\alpha| \end{aligned}$$

β) Έστω  $|\alpha \rangle = \sum_n c_n |n \rangle$ ,

όπου  $c_n$  συντελεστές προσδιορίζονται παρακάτω:

από την (45) προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \alpha \sum_n c_n |n \rangle &= a \left( \sum_n c_n |n \rangle \right) = \sum_n c_n a |n \rangle = \sum_n c_n \sqrt{n} |n-1 \rangle \\ &= \sum_n c_{n+1} \sqrt{n+1} |n \rangle, \end{aligned}$$

Και τελικά η αναδρομική σχέση που δίνει του συντελεστές είναι

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n \Rightarrow c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

Η συνθήκη κανονικοποίησης δίνει το  $c_n$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 &= \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \right) |c_0|^2 = e^{|\alpha|^2} |c_0|^2 = 1 \Rightarrow \\ c_0 &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \Rightarrow$$

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

γ) Στην αναπαράσταση θέσης η εξίσωση ιδιοτιμών των σύμφωνων καταστάσεων  $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  παίρνει τη μορφή

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( x + \frac{d}{dx} \right) \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x)$$

Οι λύσεις της εξίσωσης σε κανονικοποιημένη μορφή είναι για  $\text{Im}\alpha=0$

$$\psi_\alpha(x) = \frac{e^{-\alpha^2}}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\left(\frac{x^2}{2} + \alpha\sqrt{2}x\right)} \equiv \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(x-\alpha\sqrt{2})^2/2}$$

Και για  $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ , τυχαίο μιγαδικό αριθμό

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{(x-\alpha_1\sqrt{2})^2}{2} + i\alpha_2\sqrt{2}x}$$

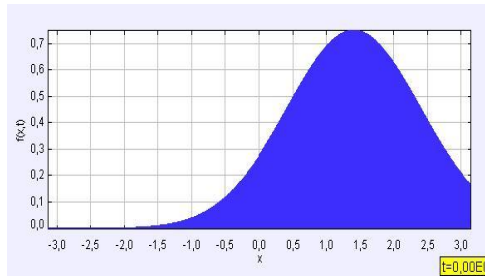
Συμπερασματικά, η ιδιοτιμή  $\alpha$  που χαρακτηρίζει τις σύμφωνες καταστάσεις είναι το κβαντικό ανάλογο του κλασικού πλάτους. Τα δύο μεγέθη συνδέονται με το σχέση  $A = \sqrt{2}\alpha$ , με  $A$  να συμβολίζει το πλάτος της κλασικής ταλάντωσης. Επίσης καθώς το  $\alpha$  τείνει στο άπειρο, δηλαδή στο όριο των μεγάλων πλατών, η αβεβαιότητα της ενέργειας μειώνεται πάρα πολύ και οι κβαντικές καταστάσεις καθορισμένου πλάτους, δηλαδή οι σύμφωνες καταστάσεις, γίνονται και καθορισμένης ενέργειας, αποκτούν δηλαδή κλασική συμπεριφορά.

Η πιθανότητες εμφάνισης των διαφόρων ιδιοκαταστάσεων δίνονται από τον τύπο

$$P_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2}}{n!}$$

Με υπολογισμούς εύκολα προκύπτει ότι για μεγάλα  $\alpha$ ,  $|\alpha| \geq 4$ , η πιθανότερη τιμή του  $n$  συνδέεται με το  $\alpha$  μέσω της σχέσης

$$n_{max} \approx \sqrt{|\alpha|}$$



Σχήμα 2.1: Αναπαράσταση του σύμφωνης κατάστασης του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή για  $t = 0$  και  $\alpha = 1 + i$ .

Στο ημικλασικό όριο των σχετικά μεγάλων  $\alpha$  η μορφή των σύμφωνων καταστάσεων περιγράφεται έναν ταλαντωτή που έχει εκτοπιστεί από τη θέση ισορροπίας του  $x=0$  και βρίσκεται στη μέση θέση  $x_0 = A = \alpha\sqrt{2}$  ενώ η μέση ορμή του είναι μηδέν και φυσικά και η μέση αρχική του ταχύτητα. Η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης διατηρεί τον Γκαουσιανό χαρακτήρα με το κέντρο να ταλαντώνεται περιοδικά, όπως στο αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα. Για μεγάλα  $\alpha$  η χρονική εξέλιξη θα διατηρεί το χαρακτήρα μιας σύμφωνης κατάστασης. Το ακόλουθο θεώρημα επιβεβαιώνει τα παραπάνω:

**ΘΕΩΡΗΜΑ:** Η χρονικά εξελιγμένη μορφή μιας σύμφωνης κατάστασης  $|\alpha\rangle$  είναι πάλι μια σύμφωνη κατάσταση  $|\alpha(t)\rangle$  με μιγαδικό πλάτος  $\alpha(t)$  ίσο με

$$\alpha(t) = \alpha e^{-it}$$

Απόδειξη: θα είναι

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= U(t) |\alpha\rangle = e^{-iHt} |\alpha\rangle \quad (\hbar = 1) \\ &= e^{-iHt} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-iHt} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{it}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-it})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \end{aligned}$$

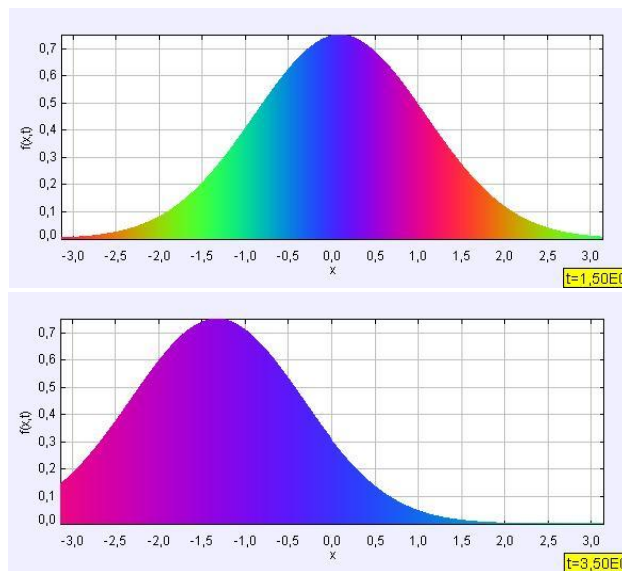
Η σταθερή φάση  $e^{-it}$  ως προς  $x$  μπορεί να αγνοηθεί και τότε το αποτέλεσμα γράφεται ως

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha(t))^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \equiv \alpha |\alpha(t)\rangle = \alpha e^{-it}$$

Με μιγαδικό πλάτος  $\alpha$  ( $\alpha(t) = \alpha(\cos t + i \sin t)$ ) η χρονικά εξελιγμένη κυματοσυνάρτηση, σε αντιστοιχία με την χρονοανεξάρτητη, περιγράφεται από την έκφραση

$$\psi_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{(x - \alpha\sqrt{2}\cos t)^2}{2} + i\alpha\sqrt{2}\sin t x}$$

που αντιστοιχεί σε μια ταλαντευόμενη Γκαουσιανή καμπάνα με στιγμιαίο κέντρο στο  $x_0 = \alpha\sqrt{2}\cos t$  και στιγμιαία μέση ορμή  $\langle p \rangle_t = \alpha\sqrt{2}\sin t$ , αποτελέσματα που είναι σε συμφωνία με τα κλασικά.



Σχήμα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση της σύμφωνης κατάστασης για  $\alpha = 1 + i$  μετά από χρόνο  $t = 1,5$  και  $t = 3,50$ . Το πλάτος παραμένει σταθερό. Η φάση συμβολίζεται χρωματικά.

## Κεφάλαιο 3

### Σύμφωνες Καταστάσεις του ατόμου του Υδρογόνου

#### 3.1 Σύμφωνες καταστάσεις

Από το προηγούμενο αιώνα η φυσική χρησιμοποιεί δύο τρόπους μελέτης και περιγραφής του φυσικού κόσμου. Ο πρώτος είναι μέσω της Κλασικής Φυσικής, όπου μελετώνται και διατυπώνονται οι κινήσεις και οι συμπεριφορές των αντικειμένων στο μακρόκοσμο. Τέτοια αντικείμενα είναι οι τροχοί, οι τροχαλίες, οι πλανήτες και οι γαλαξίες. Η Κλασική Φυσική μελετά φαινόμενα όπως η κρούση μεταξύ αντικειμένων του μακρόκοσμου, η τροχιά ενός δορυφόρου γύρω από τη γη, η ισορροπία ενός σώματος, και εξετάζει τη σχέση δράσης-αντίδρασης σε αυτά, ή οποία είναι συνήθως απόλυτα ορισμένη και οδηγεί σε ακριβή αποτελέσματα. Ο δεύτερος είναι μέσω της Κβαντικής Φυσικής, όπου μελετάται ο μικρόκοσμος, τα μόρια, τα άτομα και τα στοιχειώδη σωματίδια. Η Κβαντική Φυσική περιγράφει τη συμπεριφορά των σωματιδίων μέσω νόμων και σχέσεων που στηρίζονται στις πιθανότητες. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν δίνουν απάντηση στο ερώτημα του πόσο πιθανό είναι ένα ενδεχόμενο να συμβεί. Διατυπώνει τους νόμους που διέπουν τη μετάβαση των σωματιδίων σε χαμηλότερη ή υψηλότερη ενέργεια και την πιθανότητα εύρεσής τους σε επίπεδα ενέργειας διαφορετικά από αυτά που μελετά Κλασική φυσική δεν μπορεί να . Από πολύ νωρίς είχε διατυπωθεί ότι, οι νόμοι της Κβαντικής Φυσικής, θα έπρεπε να μπορούν υπό συγκεκριμένες συνθήκες (π.χ. μεγάλους κβαντικούς αριθμούς), να περιγράψουν και κλασικά φαινόμενα. Άλλωστε περιγράφουν τις ιδιότητες των συστατικών στοιχείων των σωμάτων του μακρόκοσμου. Έτσι, θα έπρεπε στο όρια των μεγάλων κβαντικών αριθμών να συμφωνούν με τα αποτελέσματα της κλασικής φυσικής (Αρχή της Αντιστοιχίας). Η ανάπτυξη της τεχνολογίας συντέλεσε στην όλο και λεπτομερέστερη παρατήρηση του μικρόκοσμου, γεγονός που ώθησε τη μελέτη και έβαλε τα θεμέλια για την ένωση των δύο θεωριών.

Ο πρώτος επιστήμονας που επίσημα καταπιάστηκε με την απόδειξη της Αρχής της Αντιστοιχίας ήταν ο Erwin Schrödinger. Το 1926 στη δημοσίευσή του διατύπωσε

στις σύμφωνες καταστάσεις του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή, Γκαουσιανά κυματοπακέτα ελάχιστης αβεβαιότητας που ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger και έχουν μέγιστη συμφωνία και κλασική συμπεριφορά. Οι καταστάσεις αυτές έχουν σχετική διασπορά (τυπική απόκλιση προς μέση τιμή), ίση και μικρή, σε υψηλές ενέργεια, για τα διανύσματα θέσης και ορμής. Επίσης, ενώ η αναμενόμενη τιμή των εξισώσεων κίνησης Heisenberg<sup>1</sup> είναι μηδέν για όλες τις ενέργειες, σε μια σύμφωνη κατάσταση οι αναμενόμενες τιμές των εξισώσεων κίνησης είναι ακριβώς οι κλασικές εξισώσεις κίνησης και έχουν μικρή διασπορά σε μεγάλες ενέργειες. Ο κβαντομηχανικός γραμμικός αρμονικός ταλαντωτής και οι σύμφωνες καταστάσεις του μπορούν να επεκταθούν, και έχουν επεκταθεί, σε πολλά φυσικά συστήματα όπως στη κβαντική οπτική και συστήματα που μελετούν μποζόνια. Τα κυματοπακέτα ελάχιστης αβεβαιότητας μελετήθηκαν από τον Roy J. Glauber το 1963 ο οποίος βασισμένος στις αρχές του Schrodinger διατύπωσε την θεωρία των σύμφωνων καταστάσεων στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο.

Η προσπάθεια του Schrodinger να επεκτείνει την θεωρία του ο ίδιος και στο σε πιο πολύπλοκα συστήματα δεν ήταν και τόσο επιτυχής λόγω “υπολογιστικών προβλημάτων”, όπως ο ίδιος αναφέρει. Για πολλά χρόνια η μελέτη των καταστάσεων ελάχιστης αβεβαιότητας έμεινε στο παρασκήνιο. Τελικά η ανάπτυξη της τεχνολογίας καθιστούσε πλέον δυνατή την εκτενέστερη μελέτη παλαιότερων ερωτημάτων πάνω στη κβαντική θεωρία.

Στα μέσα της δεκαετίας του ογδόντα το ενδιαφέρον για το κλασικό όριο της κβαντικής θεωρίας έγινε έντονο. Ένας από τους βασικούς λόγους που ώθησαν σε αυτό το ενδιαφέρον ήταν η ανακάλυψη των Parker και Stroud<sup>2</sup> ότι όταν ένα άτομο αλληλεπιδρά με παλμούς λέιζερ της τάξης των picoseconds ή femtoseconds, η τελική κατάσταση είναι μια σύμφωνη υπέρθεση Rydberg<sup>3</sup> καταστάσεων. *Rydberg άτομα* ονομάζονται τα υψηλά διεγερμένα άτομα που έχουν μεγάλους κυρίους κβαντικούς αριθμούς. Αντιστοίχως οι πολύ υψηλές ενεργειακές στάθμες ονομάζονται *Rydberg καταστάσεις*. Εξαιτίας της μεγάλης απόστασης των ή του ηλεκτρονίου σθένους από τον πυρήνα παρουσιάζουν συγκεκριμένες ιδιότητες, όπως το ότι έχουν χαμηλή ενέργεια σύνδεσης, διαταράσσονται και ιονίζονται εύκολα από εξωτερικά ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία, και τα εξωτερικά ηλεκτρόνια αντιμετωπίζουν ηλεκτρικό δυναμικό παρόμοιο με εκείνο του ατόμου του υδρογόνου. Τα άτομα Rydberg είναι ιδανικά για τη μελέτη του ημικλασικού ορίου καθώς, το μέγεθός τους μπορεί να φτάσει το μέγεθος ενός μικροσίπ. Το άτομο του υδρογόνου διεγερμένο στον κύριο κβαντικό αριθμό  $n=100$  φτάνει σε μέγεθος την τάξη του ενός μικρομέτρου.

Η υπέρθεση Rydberg καταστάσεων αποτελεί ένα κυματοπακέτο που για μερικές περιόδους Kepler έχει στοιχεία κλασικής τροχιάς ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα. Μετά από μερικές πλήρεις τροχιές χάνει τον κλασικό χαρακτήρα του, αλλά τον αποκτά ξανά μετά από συγκεκριμένους χρόνους γνωστοί ως *χρόνοι αναγέννησης*

---

<sup>1</sup> Ο Βέρνερ Χάιζενμπεργκ (Werner Heisenberg, Βύρτσμπουργκ 5 Δεκεμβρίου 1901 – Μόναχο 1 Φεβρουαρίου 1976), Γερμανός φυσικός, τιμήθηκε με το Βραβείο Νόμπελ Φυσικής του 1932.

<sup>2</sup> J. Parker και C.R. Stroud, Jr., Phys. Rev. Lett. 56, 716 (1986).

<sup>3</sup> Johannes Robert Rydberg, Σουηδός φυσικός (1854-1916)

(*revival times*). Το σημαντικότερο αποτέλεσμα αυτής της ανακάλυψης ήταν ότι η πλειοψηφία των αλληλεπιδράσεων τέτοιων παλμών λείζερ με την ύλη προκαλεί την παραγωγή κυματοπακέτων ελάχιστης αβεβαιότητας.

Στην ατομική φυσική η σύμφωνη ακτινοβολία χρησιμοποιείται για την μελέτη βασικών θεμάτων της κβαντικής φυσικής. Τα φαινόμενα που προκαλούνται από την αλληλεπίδραση δεσμών λείζερ και ατόμων και ο συνδυασμός ηλεκτρομαγνητικών πεδίων χαμηλών συχνοτήτων χρησιμοποιούνται για να φέρουν άτομα σε επιθυμητές καταστάσεις, κατάλληλες για την μελέτη συγκεκριμένων φαινομένων. Για παράδειγμα, ένα άτομο αλκαλίου σε κατάσταση Rydberg είναι το κατάλληλο για πειράματα αναστολής αυθόρμητης εκπομπής. Ένα κυματοπακέτο Rydberg<sup>1</sup> μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των αρχών κατά των οποίων ένα αντίστοιχο κλασικό σύστημα είναι χαστικό. Επίσης είναι κατάλληλο για τη μελέτη συστημάτων που μελετούν το συνδυαστικό κρίκο μεταξύ της κλασικής και την κβαντικής φυσικής, πειράματα όπως αυτό με το άτομο του υδρογόνου όπου μετά από εφαρμογή της δέσμης παρατηρείται κυματοπακέτο το οποίο κινείται σε κυκλική τροχιά γύρω από τον πυρήνα, σε συμφωνία με το κλασικό πλανητικό πρότυπο.

Η ύπαρξη σύμφωνων καταστάσεων στο άτομο του υδρογόνου, αντίστοιχων με αυτών του αρμονικού ταλαντωτή, έχει απορριφθεί από τον ίδιο τον Schrodinger. Η ενέργεια στο άτομο δεν είναι γραμμική συνάρτηση του κβαντικού αριθμού  $n$ . Αυτό όμως που δεν έχει απορριφθεί είναι η ύπαρξη καταστάσεων που είναι κοντά στο κλασικό πρότυπο, έστω για περιορισμένο χρονικό διάστημα. Η παρατήρηση και η μελέτη τους απαιτεί συγκεκριμένες συνθήκες και παραμέτρους η οποίες θα αναλυθούν παρακάτω. Οι καταστάσεις αυτές μπορούν να θεωρηθούν *σύμφωνες* αν λάβουμε υπόψη, ότι έχουν τα χαρακτηριστικά αυτών του αρμονικού ταλαντωτή, αλλά για πολύ μικρό χρονικό διάστημα, λόγω του δυναμικού του συστήματος.

Μια από τις σύγχρονες προσπάθειες κατασκευής ημικλασικών καταστάσεων του υδρογόνου έγινε από τον Brown<sup>2</sup>. Παρουσίασε ένα κυματοπακέτο κυκλικής τροχιάς. Το κυματοπακέτο αυτό είναι μια σύμφωνη υπέρθεση γκαουσιανών καταστάσεων του υδρογόνου, ελάχιστης αβεβαιότητας που εκτελεί κυκλική τροχιά. Οι καταστάσεις που χρησιμοποιεί στην υπέρθεση είναι όλες κυκλικές, δηλαδή ισχύει  $l=m=n-1$ . Η περίοδος και το μέγεθος της κυκλικής τροχιάς του κυματοπακέτου του Brown είναι ίδιες με αυτές που έχει ένα κλασικό μοντέλο ηλεκτρονίου, ίδιας ενέργειας, που κινείται γύρω από τον πυρήνα, θεωρώντας ότι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στο κέντρο μάζας του κυματοπακέτου. Ο Brown προέβλεψε ότι το κυματοπακέτο απλώνεται κατά μήκος της τροχιάς του σε ποσοστό ανάλογο του μεγέθους (αριθμός αναγεννήσεων/ κύριο κβαντικό αριθμό)<sup>1/2</sup>.

Πολλοί θεωρητικοί φυσικοί<sup>3</sup> καταπιάστηκαν με την απόδειξη της ύπαρξης και τη μαθηματική προτυποποίηση των ημικλασικών καταστάσεων του υδρογόνου. Οι διαφορετικές οπτικές γωνίες από τις οποίες εξετάστηκε το πρόβλημα καταλήγουν σε

<sup>1</sup> Κυματοπακέτο που αποτελείται από υψηλά διεγερμένες καταστάσεις.

<sup>2</sup> L.S. Brown, Am. J. Phys. 41, 525, (1973).

<sup>3</sup> Perelomov, Mostowski, οι Zlatev και Feng, οι Gerry και Kieffer, οι Barut και Girardello, οι Mc Anally και Bracken, οι Nieto, οι Kustaanheimo-Stiefel και πολλοί άλλοι.



μερικά κοινά αποτελέσματα. Το βασικότερο από αυτά είναι ότι ημικλασική κατάσταση αντίστοιχη του αρμονικού ταλαντωτή δεν μπορεί να υπάρξει για το δυναμικό του ατόμου του υδρογόνου. Για την κατασκευή ημικλασικών καταστάσεων απαιτείται υπέρθεση καταστάσεων διαφορετικών ενεργειών και μόνο τότε υπάρχει πιθανότητα εμφάνισης κυματοπακέτου που να έχει χαρακτηριστικά κεπλεριανής τροχιάς αλλά, όμως, ακόμα και σε αυτή την περίπτωση, η μορφή του αλλάζει στο χρόνο. Επίσης υπάρχουν όντως καταστάσεις που σε συγκεκριμένες μόνο χρονικές στιγμές προσεγγίζουν πολύ το κλασικό όριο. Κοινό χαρακτηριστικό όλων αυτών των καταστάσεων είναι ότι είναι απόλυτα ορισμένες στο επίπεδο  $x$ - $y$ , τυπικό χαρακτηριστικό σύμφωνης υπέρθεσης καταστάσεων υψηλής στροφορμής ( $l = |m|$ ).

Ο Brown είχε εξ αρχής διατυπώσει, λοιπόν, μια πολύ καλή προσέγγιση ημικλασικών καταστάσεων του ατόμου του υδρογόνου. Σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές και για μικρό χρονικό διάστημα το κυματοπακέτο κυκλικών τροχιών του Brown εμφανίζουν ελάχιστη αβεβαιότητα (στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών), και η κίνησή του περιγράφεται από Χαμηλτονιανές εξισώσεις. Την περισσότερη βέβαια διάρκεια της ζωής του δεν έχει κλασικά χαρακτηριστικά αλλά πολύπλοκη δυναμική, λόγω της διακριτικότητας των ενεργειακών σταθμών και τους νόμους διαχωρισμού τους.

### **3.2 Πειράματα για την παρατήρηση**

Υπάρχουν δύο κατηγορίες πειραμάτων που μπορεί να γίνει δυνατή η παρατήρηση τέτοιων καταστάσεων. Πειράματα όπου δέσμες λέιζερ της τάξης των picoseconds χρησιμοποιούνται για να διεγείρουν μια υπέρθεση σύμφωνων καταστάσεων Rydberg διαφόρων ενεργειών. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την δημιουργία κυματοπακέτων που στη δυναμική τους εμφανίζονται παράμετροι κλασικών Kepler τροχιών, τα οποία όμως δεν είναι χωρικά ορισμένα. Η δεύτερη κατηγορία είναι πειράματα όπου χαμηλόσυχνα πεδία χρησιμοποιούνται, σε συνδυασμό με δέσμη λέιζερ της τάξεως των nanoseconds για να προετοιμάσουν τα άτομα σε συγκεκριμένες διεγερμένες καταστάσεις υψηλής στροφορμής, ή υπέρθεση τέτοιων καταστάσεων ίδιας ενέργειας, και έχουν ως αποτέλεσμα καλά ορισμένα κυματοπακέτα, που όμως η δυναμική τους δε μπορεί να περιγραφεί.

Οι Parker και Stroud<sup>1</sup> προέβλεψαν ότι παλμός λέιζερ της τάξης των picoseconds συντονισμένος κοντά σε ένα πεδίο υδρογόνου Rydberg με κύριο κβαντικό αριθμό  $\bar{n} = 85$  θα έδινε μια σύμφωνη υπέρθεση καταστάσεων από 5 έως 10 Rydberg καταστάσεις. Όλες οι καταστάσεις έχουν ίδια μικρή στροφορμή  $l$  και  $m=0$ . Το κυματοπακέτο αυτό είναι εντοπισμένο στην ακτινική μεταβλητή αλλά καθόλου εντοπισμένο στις γωνιακές. Εκτελεί μια πλήρη περιστροφή σε χρόνο ίσο με μια περίοδο Kepler  $T_k = 2\pi\bar{n}^3$ . Κοντά στον παλμό, το κυματοπακέτο έχει ελάχιστη ακτινική αβεβαιότητα ( $\Delta r \Delta p = 0.53$  για  $\bar{n} = 85$ ). Κοντά στα νουκλεόνια

<sup>1</sup> J. Parker και C.R. Stroud, Jr., Phys. Rev. Lett. 56, 716 (1986).

διασκορπίζεται λόγω της επίδρασης του δυναμικού Coulomb. Μετά από λίγες περιόδους διασκορπίζεται τελείως και εντοπίζεται εν μέρη σε χρονικά διαστήματα που εξαρτώνται από το  $\bar{n}$ . Τελικά μετά από  $\bar{n}/3$  περιόδους αποκτά την αρχική του μορφή. Η συμπεριφορά αυτή επαναλαμβάνεται για πολύ μεγάλο χρονικό διάστημα, ακόμα και μετά από χρόνο  $\bar{n}^3 T_K$ . Τα πρώτα πειράματα για την παρατήρηση και μελέτη εντοπισμένων ακτινικά κυματοπακέτων πραγματοποιήθηκαν από τις ομάδες των Wolde<sup>1</sup> και Yeazell<sup>2</sup>.

### 3.3 Ιδιότητες του κυματοπακέτου

Ο Brown, όπως προαναφέρθηκε είχε προσεγγίσει κατά πολύ θεωρητικά τα χαρακτηριστικά ενός ημικλασικού κυματοπακέτου για το άτομο του υδρογόνου. Παρακάτω μελετάμε εκτενώς, με τρόπο ανάλογο της ανάλυσης που παρουσιάστηκε από την Zagorka D. Gaeta στην διατριβή της, τα χαρακτηριστικά των κυμάτων που διατύπωσε ο Brown. Η κατασκευή ενός κυματοπακέτου, που θα έχει κλασική συμπεριφορά για περιορισμένο χρονικό διάστημα, απαιτεί, όπως προαναφέρθηκε, υπέρθεση καταστάσεων υψηλής στροφορμής. Η σύμφωνη κατάσταση που προκύπτει δεν έχει ελάχιστη αβεβαιότητα σε όλη τη διάρκεια ζωής της, όπως η σύμφωνες καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή, αλλά η αβεβαιότητά της ποικίλει στο χρόνο. Αυτό οφείλεται στη Χαμιλτόνια του υδρογόνου, η οποία δεν είναι γραμμική συνάρτηση του  $n$ ,

$$H = -\frac{1}{2n^2} \quad (1)$$

όπου  $n$  ο κύριος κβαντικός αριθμός.

Η δυναμική ενός υδρογονοειδούς κυματοπακέτου είναι αντίστοιχη με τη δυναμική ενός Γκαουσιανού κυματοπακέτου ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που διαδίδεται σε ένα κοίλο πεδίο με μέση διασπορά. Παρακάτω μελετάτε το κυματοπακέτο για χρόνο  $t=0$ , η βραχυπρόθεσμη και μακροπρόθεσμη συμπεριφορά του καθώς και οι χρόνοι που εντοπίζεται και διασκορπίζεται στο χώρο.

#### 3.3.1 Συμπεριφορά για $t=0$

Ένα κυματοπακέτο κυκλικής τροχιάς είναι μια σύμφωνη υπέρθεση *κυκλικών καταστάσεων*, καταστάσεων δηλαδή για τις οποίες ισχύει:  $|\psi_{n, n-1, n-1}\rangle$ , και ορίζεται ως:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} g(n) |\psi_{n, n-1, n-1}\rangle, \quad (2)$$

όπου  $g(n)$  η συνάρτηση βάρους, η οποία έχει Γκαουσιανή κατανομή στο  $n$ :

<sup>1</sup> A. ten Wolde et al, Phys. Rev. Lett. 61, (1988).

<sup>2</sup> J. A. Yeazell et al, Phys. Rev. A 40, 5040 (19).

$$g(n) = \frac{1}{(2\pi\sigma_n^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right], \quad (3)$$

όπου  $\bar{n}$  η μέση τιμή και  $\sigma$  η τυπική απόκλιση της κατανομής.

Η κυματοσυνάρτηση της κατάστασης  $|\psi_{n, n-1, n-1}\rangle$ , είναι:

$\langle r, \theta, \varphi | \psi_{n, n-1, n-1}\rangle = \psi_{n, n-1, n-1}(r, \theta, \varphi) = c_n r^{n-1} e^{-r/n} \sin^{n-1} \theta e^{i(n-1)\varphi}$ ,  
και η σταθερά κανονικοποίησης ορίζεται ως:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\pi n^n n!}}. \quad (4)$$

Η επιλογή Γκαουσιανής συνάρτησης βάρους προκύπτει από το ότι μια ημικλασική κατάσταση πρέπει να είναι κυματοπακέτο ελάχιστης αβεβαιότητας. Κάθε κυματοπακέτο ελάχιστης αβεβαιότητας πρέπει να είναι Γκαουσιανό στο χώρο. Η κυματοσυνάρτηση ενός κυματοπακέτου κυκλικής τροχιάς σχετίζεται με τη συνάρτηση βάρους μέσω μετασχηματισμού Fourier με μεταβλητή μετασχηματισμού  $\varphi$  ( $e^{i(n-1)\varphi}$ ). Μπορούμε τώρα να δείξουμε ότι μια Γκαουσιανή υπέρθεση από κυκλικές τροχιές καταλήγει σε Γκαουσιανό κυματοπακέτο στο χώρο. Θεωρούμαι, προφανώς, ότι η όποια αναφορά γίνεται σε μεμονωμένες καταστάσεις (και όχι στο κυματοπακέτο) στην παρακάτω ανάλυση εννοούνται κυκλικές καταστάσεις. Η εξάρτηση από τα  $r$  και  $\theta$  της κυματοσυνάρτησης μπορεί να αγνοηθεί, γιατί στη περίπτωση όπου  $\bar{n} \gg 1$  ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r = n^2 \quad \text{και} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \theta = \frac{\pi}{2} \quad (5)$$

αφού οι γειτονικές κυκλικές τροχιές του κυματοπακέτου είναι εντοπισμένες σε αυτές τις δύο μεταβλητές.

Ισχύει επίσης

$$\lim_{r \rightarrow n^2} \frac{(c_n r^{n-1} e^{-\frac{r}{n}})}{c_{n+1} r^n e^{-\frac{r}{n+1}}} = 1$$

και

$$\lim_{\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{\sin^{n-1} \theta}{\sin^n \theta} = 1$$

οπότε μόνο η εξάρτηση από τη μεταβλητή  $\varphi$  παραμένει, στη μορφή  $i e^{i(n-1)\varphi}$ , δηλαδή ισχύει:

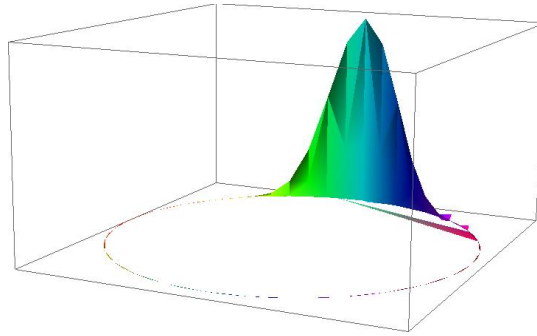
$$\Psi(\varphi, t=0) \propto \sum_{n=1}^{\infty} g(n) e^{i(n-1)\varphi} = \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right] e^{i(n-1)\varphi} \quad (6)$$

Η χρήση των μετασχηματισμών Fourier θα μας δώσουν πληροφορίες για την αρχική μορφή του κύματος στο χώρο. Στο άθροισμα παραπάνω μπορούμε να αντικαταστήσουμε το  $n=1$  με  $-\infty$ , αφού  $\bar{n} \gg \sigma_n$  και  $\bar{n} \gg 1$ . Οπότε η εξίσωση γράφεται:

$$\Psi(\varphi, t=0) \propto \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(x-\bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right] \delta(x-n) \exp[ix\varphi] dx \quad (7)$$

δηλαδή ως Διακριτός Μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης  $g(x)$ . Για χρόνο  $t=0$  θα προκύψει Γκαουσιανή συνάρτηση στο χώρο Fourier, με μεταβλητή μετασχηματισμού τη  $\varphi$ , σε κάθε ακέραιο πολλαπλάσιο του  $2\pi$ . Η κυματοσυνάρτηση σε καρτεσιανές συντεταγμένες είναι περιοδική στο  $\varphi$  με περίοδο  $2\pi$ . Με αντικατάσταση του αθροίσματος στην εξίσωση (6) από ολοκλήρωμα λαμβάνουμε ότι η μορφή του κυματοπακέτου είναι Γκαουσιανή με τυπική απόκλιση στη μεταβλητή  $\varphi$  ίση με  $1/(2\sigma_n)$ . Η πυκνότητα πιθανότητας είναι οπότε:

$$|\Psi(\varphi, t = 0)|^2 \propto \exp[-2\varphi^2 \sigma_n^2] \quad (8)$$



Εικόνα 1: Η πυκνότητα πιθανότητας του κυματοπακέτου για  $t = 0$  για  $\bar{n} = 360$  και  $\sigma_n = 2,5$ . Η συνάρτηση σχεδιάστηκε σε Mathematica.

### 3.3.2 Δυναμική του κυματοπακέτου

Η χρονοεξαρτώμενη κυματοσυνάρτηση του κυματοπακέτου είναι:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} g(n) |\psi_{n,n-1,n-1}\rangle \exp\left[i\frac{t}{2n^2}\right] \quad (9)$$

όπου πολλαπλασιάζουμε την συνάρτηση για  $t=0$  με τον παράγοντα του χρόνου. Η εξάρτηση από το  $n$  δεν είναι γραμμική. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η μορφή του κύματος να αλλάζει στο χρόνο, λόγω των άνισων αποστάσεων μεταξύ των ενεργειακών σταθμών. Για τη μελέτη της μορφής του ο όρος  $t/(2n^2)$  αναπτύσσεται σε σειρά Taylor γύρω από το  $\bar{n}$ :

$$\frac{t}{2n^2} = \frac{1}{2\bar{n}^2} \left[ 1 - 2\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right) + 3\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right)^2 - 4\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right)^3 + 5\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right)^4 - \dots \right], \quad (10)$$

όπου  $\Delta n = n - \bar{n} \ll \bar{n}$ . Τώρα ο κάθε όρος της σειράς μπορεί να μελετηθεί ξεχωριστά.

Ο πρώτος όρος είναι γραμμικός και από αυτόν εξαρτάται η μορφή του πακέτου στην αρχή της διάδοσης. Αν ληφθεί υπόψη μόνο αυτός η κυματοσυνάρτηση ακολουθεί την εξής μορφή:

$$\Psi(\varphi, t) \propto \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{(n - \bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right] \exp\left[in\left(\varphi - \frac{2\pi t}{T_K}\right)\right] \quad (11)$$

όπου  $T_K=2\pi\bar{n}^3$  είναι η περίοδος Kepler. Η μορφή αυτή δηλώνει ότι το κυματοπακέτο ελάχιστης αβεβαιότητας εκτελεί κυκλική τροχιά με περίοδο ίση με  $T_K$  και αποτελεί ημικλασική κατάσταση.

$$|\Psi_{class}(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} g(n) |\psi_{n,n-1,n-1}\rangle \times \exp\left[-i\frac{2\pi nt}{T_K}\right] \quad (12)$$

Μετά από μερικές περιόδους Kepler ο δεύτερος μη γραμμικός, ως προς  $n$ , όρος της σειράς λαμβάνει μέρος στη μορφή του κυματοπακέτου. Ο διασκορπισμός του είναι εμφανής, το πλάτος μικραίνει και μετά από λίγες ακόμα τροχιές η αρχή και το τέλος της κυματομορφής συγκρούονται. Η εξίσωση ακολουθεί τη μορφή:

$$\Psi(\varphi, t) \propto \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right] \exp\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{(4\sigma_n)^2} - \frac{i\pi t(n-\bar{n})^2}{T_{rev}}\right] \exp[inu] \quad (13)$$

όπου  $u = \varphi - 2\pi t/T_K$  είναι η γωνιακή μεταβλητή και  $T_{rev} = \bar{n}T_K/3$  είναι ο χρόνος επανεμφάνισης της κυματομορφής (*revival time*), έτσι όπως προέβλεψαν οι Parker και Stroud και επιβεβαίωσαν πειραματικά οι Yeazell και Stroud. Στο χρόνο αυτό η κυματομορφή αποκτά σχεδόν την αρχική της μορφή. Ο μετασχηματισμός Fourier της Γκαουσιανής κατανομής στο  $n$  στην παραπάνω συνάρτηση, είναι Γκαουσιανή κατανομή, με την μεταβλητή της να αυξάνεται σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\Delta\varphi^2 = \frac{1}{4\sigma_n^2} + \frac{(4\pi^2\sigma_n^2 t^2)}{T_{rev}^2} \quad (14)$$

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης αυτής δηλώνει ότι το κύμα διασκορπίζεται κατά μήκος της κυκλικής τροχιάς, μέχρις ότου η κεφαλή του κύματος συναντά το τέλος όπου το κύμα συγκρούεται με τον εαυτό του και συνεχίζει τη διάδοσή συμβάλλοντας με τον εαυτό του. Αποτέλεσμα αυτού είναι η εμφάνιση επιμέρους μεγίστων, μικρότερων από την αρχική μορφή του κυματοπακέτου. Οι χρόνοι εμφάνισης είναι  $t = p\frac{T_{rev}}{q}$ , όπου  $p$  και  $q$  είναι μεταξύ τους πρώτοι ακέραιοι αριθμοί. Το κυματοπακέτο σε αυτούς τους χρόνους περιέχει  $q$  κυματοπακέτα που ταξιδεύουν κατά μήκος της τροχιάς, εκτελώντας μια πλήρη περιστροφή σε χρόνο μιας περιόδου Kepler. Σε όλες τις επανεμφάνισεις του το κυματοπακέτο διαφέρει κατά ακέραιο πολλαπλάσιο του  $\pi$  από την αρχική φάση. Η κυματική εξίσωση σε μια επιμέρους αναβίωση δίνεται από τον τύπο:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{K=0}^{K-1} \alpha_K |\psi_{class}\left[t + \frac{K T_K}{K}\right]\rangle, \quad (15)$$

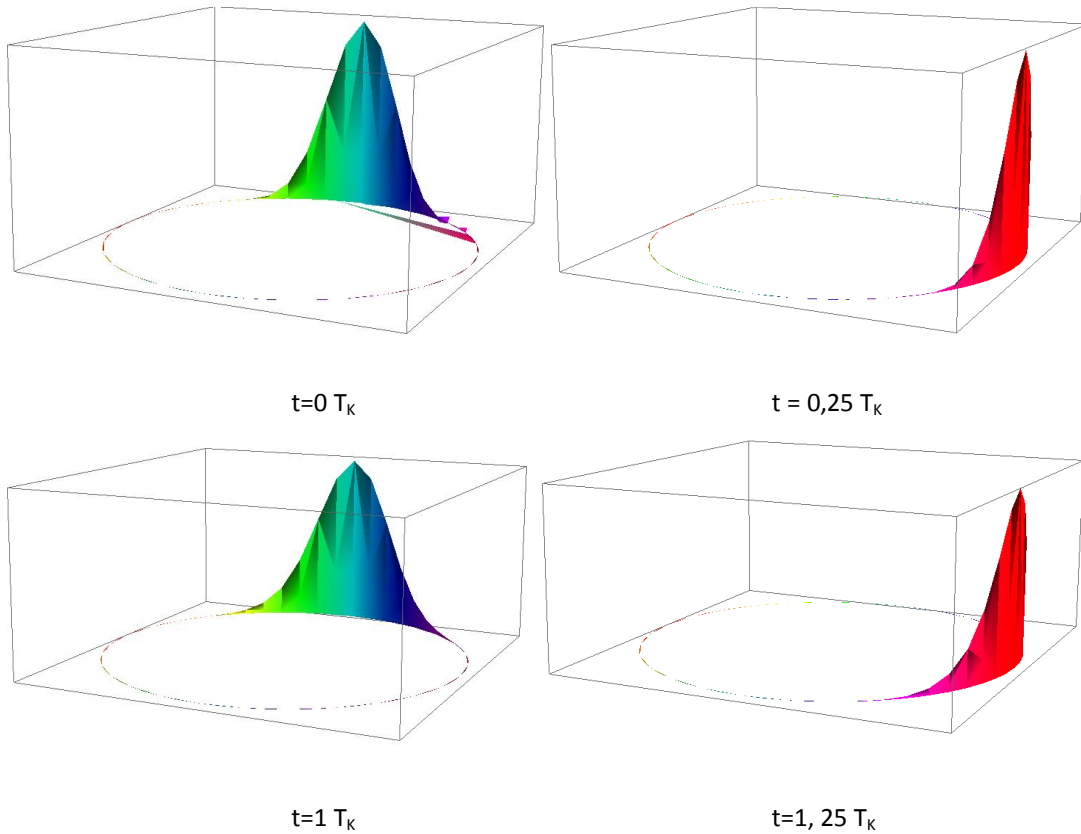
όπου  $\alpha_K$  ο παράγοντας της φάσης και  $K$  ο αριθμός των επιμέρους μεγίστων που παρουσιάζονται και  $\psi_{class}$  όπως αυτή ορίζεται στην εξίσωση (12) του παρόντος κεφαλαίου.

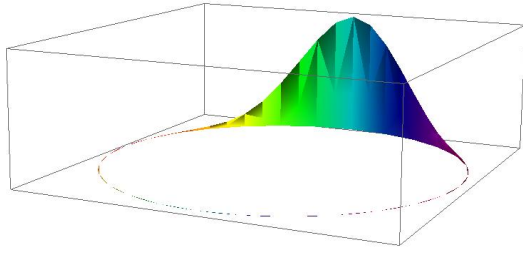
Η πρώτη επιμέρους αναβίωση εμφανίζεται μετά από χρόνο  $T_{rev}/K_{max}$ , όπου  $K_{max}$  είναι ο μέγιστος αριθμός επιμέρους μεγίστων που μπορούν να παρατηρηθούν σε ένα κυματοπακέτο και εξαρτάται από το αρχικό πλάτος του κυματοπακέτου. Ο αριθμός αυτός υπολογίζεται από

$$\frac{T_{rev}}{K_{max}} = T_{spread} + \frac{T_{spread}}{K_{max}} \quad (16)$$

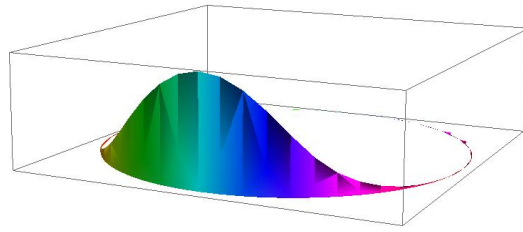
Και εξαρτάται από το αρχικό κυματοπακέτο. Μέγιστα που ξεπερνούν αυτόν τον αριθμό δεν είναι δυνατόν να παρατηρηθούν. Το  $T_{spread}$  είναι ο χρόνος μετά από τον οποίο το κύμα διασκορπίζεται τελείως και υπολογίζεται αν εξισωθεί το δεξί μέλος της εξίσωσης  $\Delta\varphi$  με  $\pi^2/3$ , που είναι η τιμή της διακύμανσης μιας τυχαίας μεταβλητής ομοιόμορφα κατανεμημένης στην κυκλική τροχιά.

Μετά από χρόνο ίση με  $T_K \bar{n}^2 / 2(\Delta n_{max})^3$  η συνεισφορά του τρίτου όρου του αναπτύγματος Taylor γίνεται αρκετά εμφανής, όπου  $\Delta n_{max} = n_{max} - \bar{n}$ . Ο κύριος κβαντικός αριθμός  $n_{max}$  αναφέρεται στην στάθμη με τη μεγαλύτερη διαφορά από το  $\bar{n}$ , η οποία είναι ικανή να συνεισφέρει σημαντικά στη μορφή του κυματοπακέτου. Εξαιτίας αυτής της συνεισφοράς παρατηρούνται φαινόμενα όπως μικρά μέγιστα που προηγούνται του κύριου μεγίστου σε μια πλήρη επανεμφάνιση του κύματος. Προκειμένου να αυξηθεί ο χρόνος που οι μη γραμμικοί όροι δεν έχουν συνεισφορά χρειάζεται να γίνει υπέρθεση των καταστάσεων με μια Γκαουσιανή συνάρτηση πιο απότομη από αυτή που χρησιμοποιήθηκε στην ανάλυση παραπάνω.

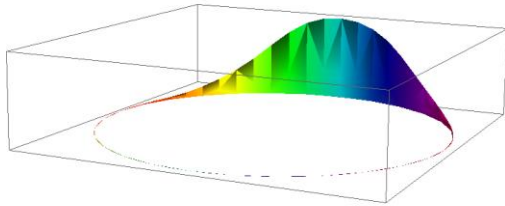




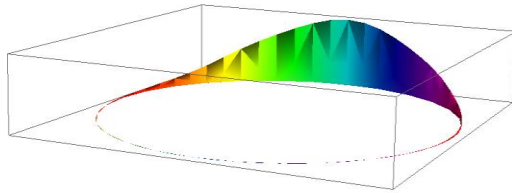
$t = 2 T_K$



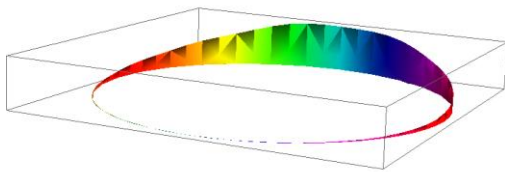
$t = 2,5 T_K$



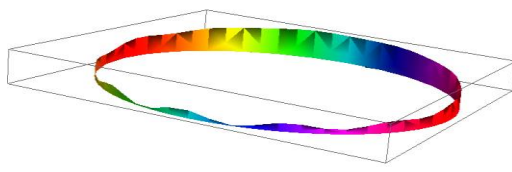
$t = 3 T_K$



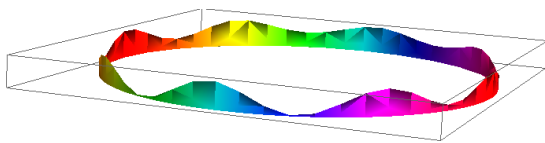
$t = 4 T_K$



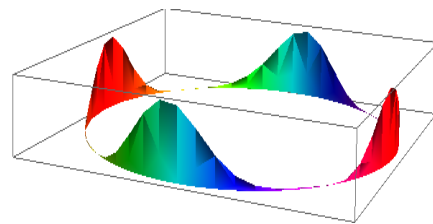
$t = 6 T_K$



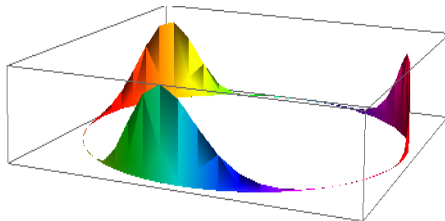
$t = 10 T_K$



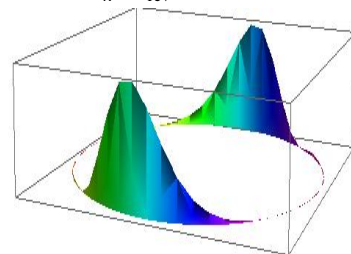
$t = 15 T_K$



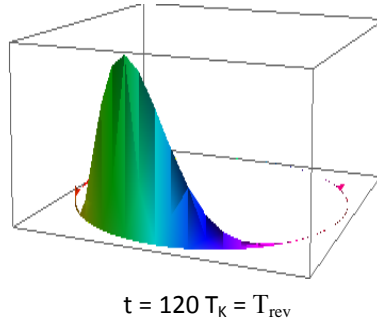
$t = 30 T_K = T_{rev}/4$



$t = 40 T_K = T_{rev}/3$



$t = 60 T_K = T_{rev}/2$



**Εικόνα 2:** Οι παραπάνω εικόνες δείχνουν τη χρονική εξέλιξη του κύματος, για  $\bar{n} = 360$  και  $\sigma_n = 2.5$ , από χρόνο  $0$   $T_K$  μέχρι  $T_{rev} = \frac{\bar{n}}{3} T_K$ . Το κύμα αρχικά είναι εντοπισμένο ως ένα Γκαουσιανό κυματοπακέτο. Μετά από κάποιο χρόνο, σε λιγότερο από 2 περιόδους Kepler, το πλάτος μειώνεται αισθητά. Στη συνέχεια διασκορπίζεται στην τροχιά του και τελικά αλληλεπιδρά με τον εαυτό. Σε χρόνο  $10 T_K$  έχει ήδη συναντήσει τον εαυτό του και σε  $15 T_K$  έχει διασκορπιστεί πλήρως. Η αλληλεπίδραση αυτή έχει ως αποτέλεσμα επιμέρους εντοπισμούς σε χρόνους  $T_{rev}/4$ ,  $T_{rev}/3$  και  $T_{rev}/2$ . Ο αριθμός των μεγίστων είναι ίσος με τον αριθμό που διαιρείται το  $T_{rev}$ . Σε χρόνο ίσο με  $T_{rev}$  κυματοπακέτο εντοπίζεται ξανά με διαφορά φάσης  $\pi$ . Οι εικόνες κατασκευάστηκαν σε Mathematica με χρήση της εφαρμογής που αναπτύσσεται και παρουσιάζεται παρακάτω.

Ένας ακόμα τρόπος να μελετηθεί η μορφή και η συμπεριφορά του κύματος είναι να εφαρμοστεί Διακριτός Μετασχηματισμός Fourier με  $t = pT_{rev}/q$  στη χρονοεξαρτώμενη εξίσωση του κυματοπακέτου λαμβάνοντας υπόψη μόνο τους δύο πρώτους όρους του αναπτύγματος Taylor. Με τη διαδικασία αυτή προκύπτει ότι στον  $p/q$  επιμέρους εντοπισμό του κυματοπακέτου, με  $p$  και  $q$  μεταξύ τους πρώτοι αριθμοί, περιέχονται  $q$  μέγιστα περίπου ίδιου πλάτους με το αρχικό. Τα μέγιστα αυτά κατανέμονται σε διαστήματα  $2\pi/q$ . Επίσης, οι επανεμφανίσεις με  $p$  περιττό αριθμό είναι μετατοπισμένες κατά  $\pi$  σε σχέση με τις επανεμφανίσεις με ίδιο  $q$  και  $p$  άρτιο. Το πιο σημαντικό αποτέλεσμα που προκύπτει από αυτήν την ανάλυση είναι ότι, αφού  $2\pi t/T_K$  αντιπροσωπεύει τη θέση ενός κλασικού ηλεκτρονίου που κινείται σε κυκλική τροχιά γύρω από τον πυρήνα με ενέργεια ίση με  $-1/2n^2$ , η μετατόπιση  $\pi$  δηλώνει τη διαφορά θέσης σε χρόνο  $t$ , μεταξύ του κυματοπακέτου ελάχιστης αβεβαιότητας και ενός κλασικού ηλεκτρονίου, που βρισκόταν στην ίδια θέση με το κυματοπακέτο σε χρόνο  $t=0$ .

### 3.3.3 Αβεβαιότητα του κυματοπακέτου

Παρακάτω εξετάζεται η αβεβαιότητα των βαθμών ελευθερίας του κυματοπακέτου. Δείχνεται ότι η αβεβαιότητα είναι συνάρτηση του  $\bar{n}$  και τείνει στο  $1/2$  (σε ατομικές μονάδες) καθώς το  $\bar{n}$  τείνει στο άπειρο.

Πρώτα υπολογίζεται η αβεβαιότητα στις μεταβλητές  $r$  και  $\theta$  για μια κατάσταση κυκλικής τροχιάς στο άτομο του υδρογόνου,  $|\psi_{n, n-1, n-1}\rangle$ . Στην κατάσταση αυτή η κυματοσυνάρτηση είναι εντοπισμένη στις δύο αυτές μεταβλητές.



Χρησιμοποιώντας τις αναμενόμενες τιμές για το  $r$  και  $r^2$  της συγκεκριμένης κατάστασης, η αβεβαιότητα στην ακτινική μεταβλητή υπολογίζεται ως:

$$(\Delta r)_n = \frac{n\sqrt{2n+1}}{2} \quad (17)$$

Η αναμενόμενη τιμή της ορμής  $\langle p \rangle$  είναι μηδέν. Για το  $p_r^2$  έχω:

$$p_r^2 = \frac{2}{r} - 2H - \frac{L^2}{r^2} \quad (18)$$

και η αναμενόμενη τιμή  $\langle p_r^2 \rangle_n$  είναι:

$$\langle p_r^2 \rangle_n = 2 \langle \frac{1}{r} \rangle - 2 \langle H \rangle_n - \langle L^2 \rangle_n \langle \frac{1}{r^2} \rangle_n \quad (19)$$

αφού  $[L^2, r]=0$ , οπότε λόγω μετάθεσης προκύπτει ο τελευταίος όρος της εξίσωσης. Το γινόμενο της αβεβαιότητας ως προς την ακτινική συντεταγμένη είναι ίσο με:

$$(\Delta r \Delta p_r)_n = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1}{2n} \right] + O \left[ \frac{1}{n^2} \right], \quad (20)$$

όπου χρησιμοποιήθηκαν τα γνωστά αποτελέσματα για τις ποσότητες  $\langle r^{-1} \rangle^1$  και  $\langle r^{-2} \rangle^2$ .

Το αποτέλεσμα αυτό, αυξάνεται λίγο στο κυματοπακέτο, δεδομένου ότι έχουμε υπέρθεση καταστάσεων και μια Γκαουσιανή συνάρτηση βάρους. Η αβεβαιότητα στην ακτινική μεταβλητή  $r$  υπολογίζεται αν αντικατασταθεί το άθροισμα στο  $n$  στην κυματική εξίσωση με ολοκλήρωμα και λαμβάνοντας υπόψη ότι τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα των  $r$  και  $\theta$  είναι μηδενικά στη βάση  $[H, L^2, L_z]$ . Οπότε η αβεβαιότητα είναι (σε ακρίβεια του πρώτου όρου  $1/\bar{n}$ ):

$$\Delta r = [(\Delta r)_{\bar{n}}^2 + 4\bar{n}^2 \sigma_n^2]^{1/2}, \quad (21)$$

όπου  $\sigma_n$  η τυπική απόκλιση της Γκαουσιανής κατανομής στην εξίσωση ορισμού της κυματομορφής. Η αβεβαιότητα στην ακτινική ορμή μπορεί να υπολογιστεί στον ίδιο βαθμό ακρίβειας αναπτύσσοντας σε σειρά Taylor το  $\langle p_r^2 \rangle_n$  στη γειτονιά του  $\bar{n}$  και αντικαθιστώντας το άθροισμα με ολοκλήρωμα. Το αποτέλεσμα που λαμβάνεται είναι:

$$\Delta p_r = \left[ \frac{1}{2\bar{n}^2} + \left[ 1 + \frac{1}{\bar{n}} \right] + O \left[ \frac{1}{\bar{n}^5} \right] \right]^{1/2}. \quad (22)$$

Το γινόμενο της αβεβαιότητας στον ακτινικό βαθμό ελευθερίας είναι ίσο με:

$$\Delta r \Delta p_r = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1}{2\bar{n}} + \frac{4\sigma_n^2}{\bar{n}} \right] + O \left[ \frac{1}{\bar{n}^2} \right]. \quad (23)$$

Για  $\sigma_n=2.5$  και  $\bar{n} = 80, 320, 1000$  το αποτέλεσμα που προκύπτει από τον παραπάνω τύπο είναι 0,642 , 0,539 και 0,513 αντίστοιχα.

Η αναμενόμενη τιμή της αζιμούθια γωνίας  $\theta$  για μια κυκλική κατάσταση είναι  $\langle \theta \rangle = \pi/2$ . Η αναμενόμενη τιμή του τετραγώνου της  $\theta$  είναι:

<sup>1</sup>  $\langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{n^2 a_0}$ , όπου  $a_0$  η ακτίνα Bohr ίση με 1 σε ατομικές μονάδες.

<sup>2</sup>  $\langle r^{-2} \rangle = \frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3 a_0^2}$ , όπου  $a_0$  η ακτίνα Bohr ίση με 1 σε ατομικές μονάδες και  $l = n-1$  για τις κυκλικές καταστάσεις.

$$\langle \theta^2 \rangle_n = \frac{\pi^2}{4} + 2 \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} \quad (24)$$

και η αβεβαιότητα σε αυτό το μέγεθος είναι ίση με την τετραγωνική ρίζα της παραπάνω εξίσωσης. Το άθροισμα βρίσκεται μεταξύ των ορίων:

$$\frac{1}{4(n+1)} \left(1 + \frac{3}{2(n+2)}\right) < \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} < \frac{1}{4n} \left(1 + \frac{3}{2(n+2)}\right). \quad (25)^1$$

Η αναμενόμενη τιμή στις αζιμούθιας ορμής  $L_\theta$  είναι μηδέν. Η αναμενόμενη τιμή του τετραγώνου της είναι:

$$\langle L_\theta^2 \rangle_n = \langle L^2 \rangle_n - \langle L_z^2 \rangle_n \langle \frac{1}{(\sin\theta)^2} \rangle_n = \frac{n-1}{2},$$

αφού  $[L_z, \theta]=0$ . Το γινόμενο αβεβαιότητας στο  $\theta$  είναι τελικά:

$$(\Delta\theta \Delta L_\theta)_n = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{4n}\right] + O\left[\frac{1}{n^2}\right]. \quad (26)$$

Οι εξισώσεις (27) και (28) προέκυψαν χρησιμοποιώντας την ίδια διαδικασία με αυτήν που εφαρμόστηκε για την ορμή. Έτσι αποδεικνύεται ότι τα γινόμενα αβεβαιότητας του κυματοπακέτου είναι ίδια με αυτά μιας μεμονωμένης κυκλικής τροχιάς, αν αντικαταστήσουμε στην τελευταία εξίσωση το  $n$  με  $\bar{n}$ .

Όταν ένα άτομο βρίσκεται σε κατάσταση  $|\psi_{n, n-1, n-1}\rangle$  η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου μεταξύ  $\phi$  και  $\phi+d\phi$  είναι ομοιόμορφα κατανομημένη γύρω από τον κύκλο ακτίνας  $n^2$ , με αναμενόμενη τιμή ίση με  $\pi$  και τυπική απόκλιση ίση με  $\pi/\sqrt{3}$ . Ένα κυματοπακέτο εντοπισμένο στη  $\phi$  μεταβλητή κατασκευάζεται από σύμφωνη υπέρθεση κυκλικών καταστάσεων. Η αβεβαιότητα στη πολική γωνία είναι πολύπλοκη στον υπολογισμό. Παρακάτω δίνονται μερικές αριθμητικές τιμές. Η αβεβαιότητα της ποσότητας  $L_z$  ενός τέτοιου κυματοπακέτου είναι ίση με  $\sigma_n$ . Το γινόμενο της αβεβαιότητας κυματοπακέτων με  $\sigma_n = 2,5$  και  $\bar{n} = 80$  και  $320$  είναι αντίστοιχα  $0,635$  και  $0,5125^2$

Από την μελέτη των γινομένων αβεβαιότητας του κυματοπακέτου του Brown προέκυψε ότι έχει ελάχιστη αβεβαιότητα. Η αβεβαιότητά του είναι αντιστρόφως ανάλογη του  $\bar{n}$  και τείνει στο μηδέν στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών.

Η παραπάνω μελέτη του κλασικού ορίου του ατόμου του υδρογόνου έδειξε ότι ο κβαντομηχανική φύση του συστήματος είναι πάντα παρούσα, παρόλα τα κλασικά χαρακτηριστικά που μπορεί να εμφανίζονται. Η κλασική συμπεριφορά του, εκφράζεται με τις αναβιώσεις του κυματοπακέτου, όπου ένα εντοπισμένο κύμα ταξιδεύει κατά μήκος της Κεπλεριανής τροχιάς, ενώ η κβαντομηχανική με τη διασπορά του κατά μήκος της τροχιάς και τις επιμέρους αναβιώσεις του πακέτου. Στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών το σύστημα έχει όλες τις ιδιότητες μιας ημικλασικής κατάστασης, όμως μόνο για όσο χρόνο μπορούν να αγνοηθούν οι μη γραμμικοί όροι της Χαμιλτόνιας. Η επίδραση αυτών των όρων μετά από κάποιο χρονικό διάστημα δίνει τελικά κβαντομηχανικό χαρακτήρα στο σύστημα.

<sup>1</sup> Z.D. Gaeta. Classical Limit of a Hydrogen Atom, University of Rochester, N.Y. (1995)

<sup>2</sup> Gaeta and Stroud, Phys. Rev.A, 42, 6308

Οι εξισώσεις που περιγράφουν το κυματοπακέτο μπορούν να μελετηθούν στην επόμενη εφαρμογή για διαφορετικές μέσες τιμές και τυπικές αποκλίσεις. Για σύγκριση των αποτελεσμάτων δίνεται και η προσομοίωση της προσεγγιστικής κλασικής  $\Psi_{class}(t)$  που ορίζεται από τη σχέση (12) της παραγράφου 3.4.2 και στην ουσία αποτελεί το ιδανικό ημικλασικό άτομο του υδρογόνου.

### **3.3.4 Άλλες διατυπώσεις- Σχολιασμοί**

Οι σύμφωνες καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή, από τη στιγμή της διατύπωσής τους από τον Schrödinger, έγιναν αντικείμενο μελέτης για πολλούς επιστήμονες. Ως ημικλασικές καταστάσεις, ήταν οι κατάλληλες για να μελετηθεί η Αρχή της Αντιστοιχίας. Επίσης, εφαρμόστηκαν στην κβαντική οπτική, κυρίως στην αναπαράσταση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Στη βιβλιογραφία διατυπώνονται οι σύμφωνες καταστάσεις με πολλούς διαφορετικούς τρόπους, και οι προσπάθειες της γενίκευσής τους σε συστήματα όπου η ενέργεια δεν είναι γραμμική συνάρτηση του κβαντικού αριθμού, όπως το άτομο του υδρογόνου είναι εξίσου πολλές.

Η βιβλιογραφία για τις προσπάθειες εξαγωγής των σύμφωνων καταστάσεων του υδρογόνου μπορούν να χωριστεί σε δύο μεγάλες κατηγορίες. Στην πρώτη κατηγορία οι συγγραφείς διατυπώνουν τις καταστάσεις αυτές ως υπερθέσεις στάσιμων ιδιοκαταστάσεων, και συζητούν εκτενώς την εξέλιξη του συστήματος σε φυσικό χρόνο.

Στη δεύτερη κατηγορία ανήκουν αρχικά οι Nieto και Simmons<sup>1</sup> που προσπάθησαν να κατασκευάσουν τις καταστάσεις για διάφορα δυναμικά. Αργότερα οι Bhaumik et al<sup>2</sup> αναλύουν την κατασκευή σύμφωνων καταστάσεων μέσω μετασχηματισμού του χρονικά ανεξάρτητου τρισδιάστατου προβλήματος του υδρογόνου σε σύστημα τεσσάρων αρμονικών ταλαντωτών χρονικά ανεξάρτητων επίσης. Αντίστοιχο μετασχηματισμό χρησιμοποίησαν και οι Duru, Kleinert και Gerry<sup>3</sup>, οι οποίοι επισήμαναν ότι το σύστημα τεσσάρων αρμονικών ταλαντωτών εξελίσσεται σύμφωνα με ένα νέο παραμετρικό χρόνο και όχι σε φυσικό χρόνο. Οι Toyoda και Wakayama<sup>4</sup> διατύπωσαν αντίστοιχα τις σύμφωνες καταστάσεις χρησιμοποιώντας συμμετρία  $SU(2) \times SU(2)$ .

Το σύστημα των τεσσάρων αρμονικών ταλαντωτών έχει τέσσερις βαθμούς ελευθερίας σε αντίθεση με το άτομο του υδρογόνου που έχει τρεις. Κάποιοι συγγραφείς απλοποίησαν τον παραπάνω βαθμό ελευθερίας, θεωρώντας ότι η μιγαδική ορμή αυτού του βαθμού είναι μηδέν. Η παραδοχή αυτή δίνει σωστό ενεργειακό φάσμα για το άτομο του υδρογόνου, αλλά αμφισβητείται η ορθότητα των κυματοσυναρτήσεων που προκύπτουν.

Η φύση του προβλήματος, μέχρι τουλάχιστον το 2001, άφηνε την πειραματική παρατήρηση ένα ανοιχτό θέμα. Οι προϋποθέσεις προετοιμασίας που απαιτούνται στα

<sup>1</sup> M.M. Nieto and L.M. Simmons, Jr., Phys. Rev. Lett. 41, 207 (1978).

<sup>2</sup> D. Bhaumik, B. Dutta-Roy, and G. Ghosh, J. Phys. A 19, 1355 (1986).

<sup>3</sup> H Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. 84B (1979) 185 και C.C. Gerry, Phys. Rev. A (1988)

<sup>4</sup> Toyoda and Wakayama, Phys Rev. A 59, (1999) 1021

άτομα του υδρογόνου είναι συγκεκριμένες και οι πιθανότητες παρατήρησης τελικά, όντως σύμφωνων καταστάσεων, είναι μικρές και πολλές φορές αμφισβητήσιμες.

Ο Glauber<sup>1</sup> έδωσε ιδιαίτερη έμφαση στη μαθηματική προτυποποίηση των σύμφωνων καταστάσεων του ατόμου του υδρογόνου. Παρά τους δύσκολους και χρονοβόρους μαθηματικούς υπολογισμούς, τελικά ήταν δυνατή η οπτικοποίηση αυτών των καταστάσεων. Ο Glauber επεσήμανε, ανάμεσα σε αρκετά ακόμα σημεία, ότι ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό είναι η ελάχιστη αβεβαιότητα που χαρακτηρίζει αυτές τις καταστάσεις. Οι “squeezed states” ήταν άμεση απόρροια αυτής της θεώρησης οι οποίες χρησιμοποιούνται συχνά στις περιγραφές κβαντικών φαινομένων σε εργαστηριακά πειράματα. Η ομάδα Nieto, θεωρώντας ως σημαντικότερο παράμετρο την ελάχιστη αβεβαιότητα, για να είναι μια κατάσταση ημικλασική, προσανατολίστηκε προς αυτή την κατεύθυνση και εξήγαγε ένα σύνολο καταστάσεων<sup>2</sup>.

Η καταστάσεις που παρουσιάστηκαν από τον Klauder<sup>3</sup> είναι καθαρά μαθηματικές και δεν δίνονται γενικοί φυσικοί μηχανισμοί οι οποίοι θα κατέληγαν στο να παρατηρηθούν αυτές οι καταστάσεις στο εργαστήριο. Όμως υπάρχει ένας τέταρτος βαθμός ελευθερίας ο οποίος, αν όντως υπάρχει, θα προκύπτει από τη φυσική του προβλήματος για την ύπαρξη σύμφωνων καταστάσεων. Οι Gazeau και Klauder<sup>4</sup> προσπάθησαν να ορίσουν αυτόν τον τέταρτο βαθμό μέσω σύνδεσης των κβαντικών μεταβλητών και των κλασικών μεταβλητών με κύρια τη μεταβλητή της γωνίας. Δυστυχώς όμως κατέληξαν σε ένα αποτέλεσμα που μπορεί να εφαρμοστεί για τον αρμονικό κβαντικό ταλαντωτή και λίγα ακόμα συστήματα, αλλά όχι στο άτομο του υδρογόνου. Ένας βαθμός ελευθερίας παραμένει και στην κατασκευή του Fox<sup>5</sup>, ο οποίος διατυπώνει τις Γκαουσιανές σύμφωνες καταστάσεις, αφήνοντας το πλάτος της Γκαουσιανής αυθαίρετο. Δεν δίνονται κριτήρια μέσω των οποίων θα επιλεγεί το πλάτος της Γκαουσιανής.

Οι Bo-Wei Xu και Guo-Hui Ding<sup>6</sup> παρουσίασαν σύμφωνες καταστάσεις του γενικού προβλήματος Coulomb με μια επέκταση στο άτομο του υδρογόνου, ισχυριζόμενοι ότι δεν παρουσιάζουν διασπορά στο χρόνο. Χρησιμοποίησαν παραβολικές συντεταγμένες και το πρότυπο των τεσσάρων αρμονικών ταλαντωτών.

Η εύρεση ημικλασικών καταστάσεων με συνεχή κλασικό χαρακτήρα είναι αδύνατη, κυρίως γιατί η γραμμικότητα της ενέργειας και του κβαντικού αριθμού του αρμονικού ταλαντωτή δεν έχει σχέση με τη μη γραμμικότητα της ενέργειας στο σύστημα του ατόμου του υδρογόνου. Αυτό αποτέλεσε και τη μεγάλη πρόκληση για την επιστημονική κοινότητα. Οι ημικλασικές καταστάσεις που εξήγαγαν κάποιοι συγγραφείς αμφισβητήθηκαν. Παράδειγμα αποτελεί η περίπτωση του Klauder όπου κατασκεύασε καταστάσεις δίνοντας έμφαση στην ιδιότητα ότι παράγοντας του

---

<sup>1</sup> R.J. Glauber, Phys. Rev. 131, 2766 (1963).

<sup>2</sup> M.M. Nieto and L.M. Simmons, Jr., Phys. Rev Lett. 41, 207 (1978)

<sup>3</sup> J.R. Klauder, J. Math. Phys. A 28 (1995) 7019

<sup>4</sup> Gazeau and J.R. Klauder, J. Phys. A 32 (1999) 123

<sup>5</sup> R.F. Fox, Phys. Rev. A 59, 3241(1998)

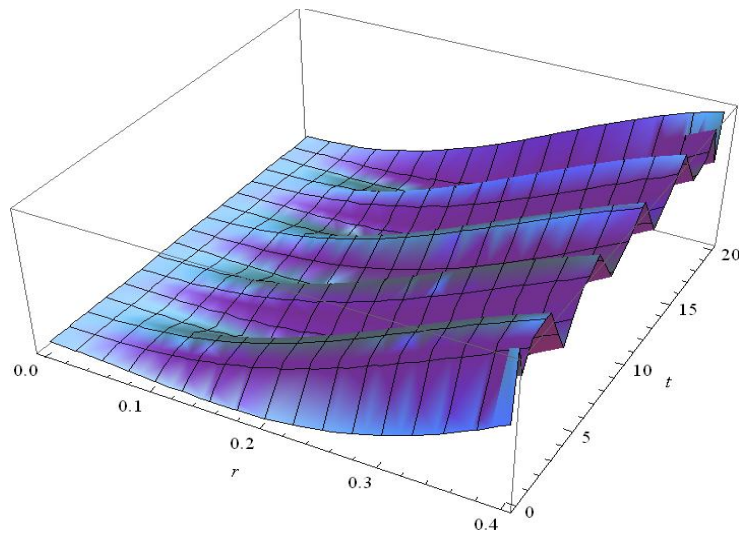
<sup>6</sup> Xu and Ding, Phys.,Rev., A, 62, (2000)

χρόνου  $e^{-iHt}$  δεν επηρεάζει τον ημικλασικό χαρακτήρα των καταστάσεων. Όμως οι Bellomo και Stroud έδειξαν ότι ιδιότητες, όπως η περιοδικότητα των σύμφωνων καταστάσεων και η κλασικότητα που παρουσιάζουν οι αναμενόμενες τιμές των μεταβλητών, δεν ικανοποιούνται, και είναι εξίσου σημαντικές για το χαρακτηρισμό αυτών των καταστάσεων ως σύμφωνων.

Οι Curado, Rego-Monteiro, Rodrigues και Hassouni<sup>1</sup> παρουσίασαν το 2006 σύμφωνες καταστάσεις για το άτομο του υδρογόνου ακολουθώντας την μέθοδο του Klauder. Οι ενεργειακές στάθμες του υδρογόνου εξαρτώνται από ένα μόνο κβαντικό αριθμό, τον κύριο και η αβεβαιότητα της ορμής παραμένει σταθερή στη διάρκεια του χρόνου, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Οι καταστάσεις ορίστηκαν ως

$$|r, \gamma\rangle = N(r) \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{r^{n-1} \exp(-i\gamma \varepsilon_n)}{\prod_{i=1}^{n-1} (\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_1)^{\frac{1}{2}}} |n\rangle,$$

όπου  $N(r)$  η σταθερά κανονικοποίησης. Η διακύμανση της ορμής ορίζεται ως  $(\Delta\rho)^2 = \langle r, \gamma | \rho^2 | r, \gamma \rangle - (\langle r, \gamma | \rho | r, \gamma \rangle)^2$  και υπολογίζεται με χρήση της σχέσης  $\langle \rho, \theta, \varphi | n, l, m \rangle = \Psi_{n,lm}(\rho, \theta, \varphi)$ .



Εικόνα : Τρισδιάστατη απεικόνιση του  $\Delta\rho$  για  $0 \leq r \leq 0.4$  και  $0 \leq t \leq 20$ , σύμφωνα με τη μαθηματική διατύπωση που παραθέτουν οι Curado, Rego-Monteiro, Rodrigues και Hassouni στη δημοσίευσή τους για τις σύμφωνες καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου. Το σχήμα σχεδιάστηκε στο Mathematica. Παρατηρείται σταθερότητα στη συμπεριφορά του  $\Delta\rho$ .

<sup>1</sup> E.M.F. Curado et al, Phs. A 371 (2006) 16-19

## Κεφάλαιο 4

### Προσομοίωση των κυματοσυναρτήσεων

#### 4.1 Φυσικές επιστήμες και υπολογιστής

Η χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή στις θετικές επιστήμες έδωσε και συνεχίζει να δίνει νέα ώθηση στην εξέλιξη τόσο των επιστημών, όσο και των ίδιων των υπολογιστών και των υπολογιστικών συστημάτων. Κατά το παρελθόν ένα από τα βασικότερα προβλήματα της φυσικής και των μαθηματικών ήταν οι χρονοβόρες και πολύπλοκες πράξεις. Ειδικά η μαθηματική προτυποποίηση των κβαντομηχανικών συστημάτων απαιτούσε και απαιτεί ιδιαίτερα πολύπλοκες πράξεις και προσεγγίσεις. Η εξέλιξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών και η ευρεία χρήση τους σε καθημερινό επίπεδο έδωσαν νέα πνοή στις θετικές επιστήμες.

Προγράμματα και εφαρμογές κατάλληλα για μαθηματικούς φυσικούς και μηχανικούς, καθώς και γλώσσες προγραμματισμού ή τυποποιημένες μέθοδοι ανάλυσης προβλημάτων αναπτύχθηκαν και έδωσαν σε ερευνητές, καθηγητές, φοιτητές και μαθητές χρήσιμα εργαλεία. Πλέον οι μαθηματικές πράξεις ρουτίνας πέρασαν στη “δικαιοδοσία” του υπολογιστή, αφήνοντας χρόνο και χώρο για περαιτέρω μελέτη και κυρίως για πληρέστερη κατανόηση φαινομένων ακόμα και με την πρώτη επαφή με αυτά. Οι πιο διαδεδομένες μέθοδοι είναι η μέθοδος Monte Carlo, η μέθοδος Runge Kutta, η αριθμητική γραμμική άλγεβρα, οι μετασχηματισμοί Fourier και Taylor που εύκολα τυποποιούνται μέσω υπολογιστή και πολλές άλλες. Επίσης γλώσσες προγραμματισμού αναπτύχθηκαν αποκλείστηκα για χρήση στις θετικές επιστήμες όπως οι MATLAB, Mathematica, Python, SciLab, COMSOL Multiphysics και αρκετές άλλες.

Όλα τα παραπάνω χρησιμοποιούνται για συγκέντρωση και ανάλυση δεδομένων, βελτιστοποίηση, μοντελοποίηση, πρόβλεψη, προσομοίωση, οπτικοποίηση, υπολογιστική βοήθεια, κατανόηση μοντέλων, μελέτη μελλοντικής συμπεριφοράς. Προφανώς είναι αδύνατον να αναφερθεί το σύνολο των χρήσεων τέτοιων μεθόδων, καθώς μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό ενός αριθμητικού αποτελέσματος, μέχρι την πρόβλεψη σεισμών και κλιματικών αλλαγών ή μελέτη στοιχειωδών σωματιδίων σε εξειδικευμένα εργαστήρια.

Η δυνατότητα των υπολογιστών να εκτελούν επαναλαμβανόμενες πολύπλοκες πράξεις, μέσω κατάλληλου προγραμματισμού, διεύρυνε το σύνολο των προβλημάτων που μπορούν να επιλυθούν με τη χρήση τους. Η βελτιστοποίηση των μεθόδων και των λογισμικών που χρησιμοποιούνται καθιστά πλέον δυνατή την επίλυση σχεδόν κάθε προβλήματος. Οι προσεγγίσεις που απαιτούνται στον ορισμό των μεταβλητών και των συναρτήσεων είναι όλο και λιγότερες, γεγονός που ελαχιστοποιεί το ενδεχόμενο λάθους και φυσικά διευκολύνει τον ίδιο τον χρήστη, αφού του δίνει την δυνατότητα να επικεντρωθεί στο πρόβλημα και όχι στις απαιτήσεις των λογισμικών. Είναι, βέβαια, γεγονός ότι οι προσεγγίσεις μπορούν να ελαχιστοποιηθούν, όχι όμως και να παραληφτούν. Έτσι, είναι δόκιμο, να γίνεται έλεγχος σε οποιοδήποτε προκύπτει αποτέλεσμα. Ειδικότερα, η προσομοίωση πειραμάτων ή φυσικών φαινομένων χρήζει τέτοιου ελέγχου. Το πραγματικό φαινόμενο δε μπορεί παρά να έχει αποκλίσεις από το κατασκευασμένο, μιας και οι παράμετροι που μπορεί να εμπλακούν σε ένα πραγματικό πείραμα ή φαινόμενο είναι πολλές φορές απρόβλεπτοι και απροσδιόριστοι.

Οι σύγχρονοι υπολογιστές και η φυσική επιστήμη συνεργάστηκαν για να καλύψουν του κενό μεταξύ θεωρητικής και πειραματικής φυσικής. Η υπολογιστική φυσική είναι ένα βήμα μετά από την πρώτη και ένα βήμα πριν από την δεύτερη. Βοηθά στην μαθηματική προτυποποίηση και προετοιμάζει το ενδεχόμενο πείραμα. Οι ανάγκες της πολύπλοκης αυτής επιστήμης έκανε τον υπολογιστή αναπόσπαστο κομμάτι της, βοηθώντας τον ταυτόχρονα να εξελιχθεί και αλλάζοντας καταλυτικά τον τρόπο και τον λόγο χρήσης του.

Ο κατάλογος των φαινομένων της φυσικής που έχουν μέχρι την παρούσα στιγμή προσομοιωθεί και αναλυθεί μέσω υπολογιστή είναι ατελείωτος και διαρκώς αυξανόμενος. Εφαρμογές που αφορούν τομείς όπως την βιοφυσική, τη σωματιδιακή φυσική και πολλούς ακόμα τομείς. Οι εξέλιξη των κβαντικών υπολογιστών και η όλο και μεγαλύτερη αύξηση της χωρητικότητας με αρκετά χαμηλό κόστος συνέβαλαν αρκετά σε αυτό τα τελευταία χρόνια. Η ανάπτυξη σε αυτόν τον τομέα συνεχίζεται και αναμένεται να επιδείξει σημαντικά δείγματα έργου.

Η προηγμένη έρευνα όμως δεν είναι η μόνη που ωφελήθηκε από την είσοδο των υπολογιστών στις φυσικές επιστήμες. Το πιο ευρύ πεδίο εφαρμογής της πληροφορικής στην εκπαίδευση αποτελεί η διδασκαλία των φυσικών επιστημών. Εργαστήρια με χρήση υπολογιστή, φύλλα εργασίας, προσομοιώσεις και εφαρμογές πολυμέσων εισάγουν τους μαθητές όλων των βαθμίδων της εκπαίδευσης στις έννοιες των φυσικών επιστημών με τρόπο ιδιαίτερο ενεργητικό και ευχάριστο. Ιδιαίτερα στην πρωτοβάθμια και δευτεροβάθμια εκπαίδευση, η χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή προτείνεται και υιοθετείται από μεγάλο αριθμό εκπαιδευτικών. Το εκάστοτε φαινόμενο γίνεται εικόνα και το πείραμα με το οποίο παρατηρήθηκε πράξη, αφήνοντας πίσω την παθητική διδασκαλία. Η δυσκολία της κατανόησης περιορίζεται ενώ ταυτόχρονα αναπτύσσονται η κριτική σκέψη και καινούριες δεξιότητες που αφορούν την επίλυση προβλημάτων και τη χρήση και εξοικείωση με τις νέες τεχνολογίες. Οι εφαρμογές που χρησιμοποιούνται ή μπορούν να χρησιμοποιηθούν στα πλαίσια της σχολικής εκπαίδευσης αφορούν κεφάλαια της διδασκόμενης ύλης, όπως οι νόμοι του Νεύτωνα, ή ακόμα και κεφάλαια πέραν αυτής, που έχουν όμως ιδιαίτερο ενδιαφέρον, όπως η προσομοίωση των ατομικών συγκρούσεων στο πείραμα του CERN.

Στη συγκεκριμένη εργασία αναπτύσσεται εφαρμογή βασισμένη στο άτομο του υδρογόνου. Η εφαρμογή αυτή έχει ως στόχο να επιδείξει ένα μικρό δείγμα των

δυνατοτήτων που δίνει η χρήση της Mathematica στην φυσική επιστήμη. Με χρήση απλών εντολών μπορεί κανείς να μοντελοποιήσει τις πρώτες διεγερμένες στάθμες του ατόμου και να μελετήσει τις σύμφωνες καταστάσεις του. Σε επίπεδο ανάπτυξης της εφαρμογής δίνεται η δυνατότητα εξοικείωσης τόσο με την γλώσσα όσο και με το φαινόμενο. Η περιήγηση στις εντολές της γλώσσας και οι συνεχείς δοκιμές ώστε το αποτέλεσμα να είναι το επιθυμητό μου πρόσφεραν την εξοικείωση αυτή και μου άνοιξαν το δρόμο για περαιτέρω χρήση της γλώσσας αλλά και λεπτομερέστερη μελέτη των τύπων της κβαντικής φυσικής. Η μελέτη των σύμφωνων καταστάσεων ήταν το δυσκολότερο κομμάτι. Η σωστή σύνταξη των τύπων επέφερε τελικά το αναμενόμενο αποτέλεσμα επιβεβαιώνοντας την θεωρητική ανάλυση, χωρίς την χρονοβόρα ενασχόληση με προσεγγίσεις και κατανομές. Ο υπολογιστής ελαχιστοποίησε τον χρόνο μελέτης της προτεινόμενης στην βιβλιογραφία εξίσωσης για τις σύμφωνες καταστάσεις. Ο χρήστης, που σε δεύτερο στάδιο θα μπορέσει να χρησιμοποιήσει την εφαρμογή, μπορεί να μελετήσει στην οθόνη του υπολογιστή του τις διεγερμένες καταστάσεις ενός ατόμου ως εισαγωγή στην κβαντική φυσική. Οι σύνθετες και οι σύμφωνες καταστάσεις είναι ιδανικές για περαιτέρω μελέτη. Θα μπορούσε επίσης να χρησιμοποιηθεί κατά τη διάρκεια παράδοσης αντίστοιχων κεφαλαίων σε φοιτητές ή ακόμα και μαθητές, μιας και οι στάθμες των ατόμων διδάσκονται ήδη από τις τάξεις του γυμνασίου. Η εφαρμογή συνοδεύεται, όπως συνηθίζεται, από φύλλο οδηγιών ώστε να μπορεί κανείς χωρίς περαιτέρω υποδείξεις να τη χρησιμοποιεί. Προσωπικά, θεωρώ, πως η κατανόηση του φαινομένου όχι μόνο ως μαθηματικούς τύπους προς ανάλυση, αλλά και ως οπτικοποιημένου μοντέλου, είναι ένα χρήσιμο εργαλείο στα χέρια φοιτητών και μαθητών.

## 4.2 Χρήση της Mathematica

Για την δημιουργία των μικροεφαρμογών χρησιμοποιήθηκε η Mathematica 8.0. Η πληθώρα παραδειγμάτων που παρατίθενται στην βοήθεια της εφαρμογής και η μεγάλη ποικιλία συναρτήσεων που διαθέτει διευκολύνουν τον χρήστη. Η γλώσσα Mathematica είναι μια συνεχώς εξελισσόμενη γλώσσα που ήδη από τις πρώτες εκδόσεις της είχε τη δυνατότητα να χειρίζεται αφηρημένες μαθηματικές έννοιες με μεγάλη ταχύτητα και εξαιρετική ακρίβεια στα αποτελέσματα. Επίσης, διαθέτει πληθώρα επιλογών και εντολών που στέφουν με επιτυχία τη γραφική απεικόνιση πληθώρας αποτελεσμάτων, σε δισδιάστατη ή τρισδιάστατη μορφή.

Αρχικά παρουσιάζεται η οπτικοποίηση των σταθμών του ατόμου του υδρογόνου σε τρισδιάστατη μορφή. Η συνάρτηση που ορίζει τον σχεδιασμό αυτών είναι η εξίσωση

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \left[ (2kr)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-kr} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

$k = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar}} = Z/na_0$ , όπου  $Z=1$  για το άτομο του υδρογόνου (ατομικός αριθμός) και  $a_0$  η ακτίνα Bohr που ισούται με  $\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ , σε ατομικές μονάδες όπου  $\hbar = e = m = 1$ . Οι ατομικές μονάδες απλοποιούν τη συνάρτηση, αποφεύγεται η πολυπλοκότητα στις πράξεις εντός της εφαρμογής και βελτιστοποιείται ο χρόνος απόδοσης του αποτελέσματος, χωρίς το αποτέλεσμα να διαφέρει από το απαιτούμενο. Ο



χρωματισμός του σχήματος γίνεται σύμφωνα με τον κανόνα χρωματισμού γωνιών στο μιγαδικό επίπεδο και ο οποίος αναφέρεται σχηματικά στην Εικόνα 2 του κεφαλαίου 1. Η Mathematica δίνει τη δυνατότητα χρήσης αυτομάτως αυτού του κανόνα με εντολή που μπορεί να χρησιμοποιηθεί μέσα σε Plot είτε τρισδιάστατο, είτε δισδιάστατο. Η συνάρτηση που εισέρχεται μέσα στην εντολή Plot3D και τελικά απεικονίζεται είναι η πυκνότητα πιθανότητας της παραπάνω συνάρτησης.

Τα notebook SimpleHydrogenAtom.nb, SameEnergylevel.nb,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,0,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[3,1,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ ,  $\Psi[3,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ , CoherentStates1.nb, CoherentStates2.nb, PsiClassic.nb, coherentstates2D.nb, χρησιμοποιούνται για τον ορισμό των συναρτήσεων που σχεδιάζονται, και καλούνται σε ένα αρχικό notebook με το όνομα hydr+agt.nb. Με την εκτέλεση της εφαρμογής ανοίγει και ένα παράθυρο οδηγιών και δραστηριοτήτων.

Στο notebook SimpleHydrogenAtom.nb η εντολή που χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή του απλού ατόμου του υδρογόνου είναι η **Parametric Plot 3D[]**, η οποία δέχθηκε ως όρισμα την απόλυτη τιμή της παραπάνω σχέσης με χρήση της εντολής **Abs[]**. Η εντολή **Parametric Plot 3D[]** προτιμήθηκε στην συγκεκριμένη περίπτωση καθώς χρησιμοποιήθηκαν οι παραμετρικές εξισώσεις  $x = \text{Cos}[p]\text{Sin}[t]$ ,  $y = \text{Cos}[p]\text{Sin}[t]$ ,  $z = \text{Cos}[p]$  για μετατροπή των καρτεσιανών συντεταγμένων σε σφαιρικές, με σκοπό τη δημιουργία του σφαιρικού φλοιού του ατόμου. Με την εντολή **Evaluate[]**, οι σφαιρικές συντεταγμένες διατιμήθηκαν σύμφωνα με την κυματοσυνάρτηση των σταθμών του υδρογόνου, δίνοντας το αναμενόμενο αποτέλεσμα. Προφανώς θα υπάρχει και άλλος τρόπος συνδυασμού εντολών για την επίτευξη του ίδιου αποτελέσματος. Η συνάρτηση σχεδιάζεται στα διαστήματα  $\varphi \in (0, 2\pi)$  και  $\theta \in (0, \pi)$ .

Οι κβαντικοί αριθμοί επιλέγονται σε όλες τις μικροεφαρμογές από τον χρήστη. Αυτό επιτυγχάνεται με χρήση της εντολής **Manipulate[]**, η οποία δίνει τη δυνατότητα να οριστεί μια μεταβλητή της οποίας η τιμή θα μπορεί να καθοριστεί κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης της εφαρμογής. Οι επιλεγόμενες τιμές διαβάζονται από τα Plots και κατασκευάζουν τις συναρτήσεις. Η δυνατότητα επιλογής των κβαντικών αριθμών δεν είναι αυθαίρετη ή απεριόριστη. Δίνεται ένα εύρος τιμών για τον κύριο κβαντικό αριθμό, και βήμα ένα, και σύμφωνα με αυτό καθορίζονται οι τιμές για τους άλλους δύο κβαντικούς αριθμούς. Οι εντολές **If[]**, που χρησιμοποιούνται εντός της **Manipulate[]**, παρέχουν τους κατάλληλους περιορισμούς για τους  $n, l, m$ . Προφανώς ορίζεται μέσω των εντολών **If** ότι  $l \leq n - 1$  και  $|m| \leq l$ .

Η αρχική εικόνα δίνει την εικόνα της θεμελιώδους στάθμης ενώ δίπλα ακριβώς σχεδιάζεται και η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας της ίδιας στάθμης χρησιμοποιώντας την πυκνότητα πιθανότητας της ακτινικής συνάρτησης

$$R(r) = \left[ (2kr)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-kr} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr)$$

σε ατομικές μονάδες. Χρησιμοποιείται για τον σχεδιασμό της η εντολή **Plot[]** και η εντολή **Abs[]** για να ορίσει την πυκνότητα πιθανότητας. Η εντολή **Manipulate[]**

ορίζει τους κβαντικούς αριθμούς ταυτόχρονα και στις δύο συναρτήσεις (την ακτινική και την γενική κυματοσυνάρτηση).

Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει την στάθμη που επιθυμεί επιλέγοντας αρχικά τον κύριο κβαντικό αριθμό  $n$ . Αυτομάτως συγκεκριμενοποιούνται οι επιλογές για τον κβαντικούς αριθμούς  $l$  και  $m$  και εμφανίζεται η τιμή της ενέργειας για τη στάθμη αυτή. Για το επιλεγόμενο  $l$  συγκεκριμενοποιούνται αυτομάτως και οι επιλογές για τον κβαντικό αριθμό  $m$ . Η επιλογή των κβαντικών σταθμών περιορίζεται μέχρι  $n = 5$ .

Σε νέο παράθυρο δίνονται οδηγίες σχετικά με τη χρήση και ενδεικτικά μερικές δραστηριότητες που μπορούν να πραγματοποιηθούν, όπως η παρατήρηση του ενεργειακού εκφυλισμού και ο περιορισμός στην επιλογή των  $l$  και  $m$ .

Στη συνέχεια δίνεται η δυνατότητα να παρατηρήσει κανείς την πρόσθεση καταστάσεων ίδιας ενέργειας καθώς και τη σχηματική αναπαράσταση της υπέρθεσης δύο καταστάσεων οποιοσδήποτε ενέργειας στα notebooks SameEnergyLevel.nb,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,0,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[3,1,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ ,  $\Psi[3,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ . Οι εντολές που καθορίζουν το σχηματισμό αυτών των σύνθετων καταστάσεων είναι οι ίδιες με τις προαναφερόμενες, με κατάλληλους όμως συνδυασμούς και περιορισμούς. Οι κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες.

Το μενού Coherent States αναφέρεται στις σύμφωνες καταστάσεις. Οι επιλογές Coherent States1, Coherent States2, Coherent States2D, οι οποίες αντιστοιχούν στα ομώνυμα notebooks, απεικονίζουν σε τρισδιάστατη και δισδιάστατη μορφή αντίστοιχα τη χρονική εξέλιξη της πυκνότητας πιθανότητας στην εξίσωση

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} g(n) |\psi_{n,n-1,n-1}\rangle \exp\left[i\frac{t}{2n^2}\right] \quad \text{με}$$

$$g(n) = \frac{1}{(2\pi\sigma_n^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{(n-\bar{n})^2}{4\sigma_n^2}\right] \quad \text{και}$$

$\langle r, \theta, \varphi | \psi_{n, n-1, n-1} \rangle = \psi_{n, n-1, n-1}(r, \theta, \varphi) = c_n r^{n-1} e^{-r/n} \sin^{n-1} \theta e^{i(n-1)\varphi}$ , όπου  $n$  ο κύριος κβαντικός αριθμός. Η άθροιση γίνεται για δεκαέξι καταστάσεις. Καταστάσεις που η τιμή του  $n$  διαφέρει πολύ από το  $\bar{n}$  μπορούν να παραλειφτούν, αφού η συνάρτηση βάρους για μεγάλες διαφορές θα δώσει αποτελέσματα πολύ μικρότερων τάξεων μεγέθους. Επίσης, η άθροιση άπειρων συναρτήσεων καθυστερεί πολύ την εκτέλεση της εφαρμογής. Οι καταστάσεις που χρησιμοποιεί στην υπέρθεση είναι όλες κυκλικές, δηλαδή ισχύει  $l = m = n - 1$ .

Η συνάρτηση αρχικά γίνεται όρισμα σε μια εντολή Sum[] για να γίνει η άθροιση των 16 καταστάσεων. Κάθε κατάσταση χαρακτηρίζεται από το  $n$ . Οι καταστάσεις που τελικά επιλέγονται για την άθροιση είναι εκείνες με  $n$  πολύ κοντά στην περιοχή του  $\bar{n}$ . Στη συνέχεια η εντολή Abs[] ορίζει την πυκνότητα πιθανότητας.

Τελικά η συνάρτηση σχεδιάζεται μέσω της [Plot3D\[\]](#) για την επιλογή «Coherent States 1». Η συνάρτηση είναι κανονικοποιημένη. Οι άξονες x-y έχουν τιμές γωνιών από  $-\pi$  μέχρι  $\pi$  για την μεταβλητή  $\varphi$  και από  $0$  μέχρι  $\pi$  για την μεταβλητή  $\theta$ . Στον άξονα z αντιστοιχεί το πλάτος ενώ είναι εμφανές το πάχος της συνάρτησης. Η μεταβλητή t ορίζει τον χρόνο. Με την εντολή Manipulate δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να ορίσει την μέση τιμή που επιθυμεί, καθώς και την τυπική απόκλιση. Δίνεται δυνατότητα επιλογής συγκεκριμένων τιμών που αναφέρονται στην βιβλιογραφία και επιβεβαιώνονται. Μετά από πληθώρα δοκιμών διαπιστώθηκε ότι για την συγκεκριμένη συνάρτηση οι τιμές για το μέσο  $n$  πρέπει να είναι αρκετά μεγάλες, ώστε να είναι δυνατή η παρατήρηση τόσο της πλήρους αναβίωσης, όσο και των επιμέρους αναβιώσεων.

Στο «Coherent States 2» παρουσιάζεται η εξέλιξη της κυματομορφής σε κυκλική κίνηση. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκε η εντολή [Parametric Plot3D\[\]](#), ή οποία επέβαλε στην κυματοσυνάρτηση να εκτελεί κυκλική τροχιά στο επίπεδο x-y. Χρησιμοποιούνται οι πολικές συντεταγμένες με παραμετρικές εξισώσεις  $x=\text{Cos}[p]$ ,  $y=\text{Sin}[p]$  και z την απόλυτη τιμή της κυματοσυνάρτησης στο τετράγωνο. Η συγκεκριμένη μορφή είναι το ίδιο ακριβής και περισσότερο κατανοητή από τον χρήστη, αποδίδει όμως τα αποτελέσματα σε περισσότερο χρόνο, τουλάχιστον σε συμβατικούς υπολογιστές.

Αρχικά υπάρχει προτείνεται η επιλογή της μέσης τιμής του  $n$ , καθώς και της τυπικής απόκλισης. Στη συνέχεια μπορεί κανείς να παρατηρήσει την χρονική εξέλιξη του κυματοπακέτου. Η κυματοσυνάρτηση παραμένει εντοπισμένη για ελάχιστες τροχιές Κέπλερ. Μια τροχιά Κέπλερ ολοκληρώνεται σε κάθε ακέραια τιμή της μεταβλητής t, η οποία μετρείται σε μονάδες  $T_K$  (περίοδος Κέπλερ). Το κύμα, στη συνέχεια, διασκορπίζεται στην τροχιά του και εντοπίζεται ολικά ξανά μετά από χρόνο  $T_{rev}$  ίσο με το πηλίκο του μέσου  $n$  με τον αριθμό τρία και με διαφορά φάσης  $\pi$  από την αρχική κυματοσυνάρτηση. Σε ενδιάμεσους χρόνους εντοπίζεται μερικώς. Οι χρόνοι αυτοί είναι ίσοι με  $T_{rev}/4$ ,  $T_{rev}/3$  και  $T_{rev}/2$ , όπου παρατηρούνται τέσσερα, τρία και δύο αντίγραφα μικρότερου πλάτους του αρχικού κύματος αντίστοιχα. Έστω ότι ο χρήστης επιλέγει  $nm = 360$  και  $sn = 2.5$ . Η χρονική εξέλιξη της συγκεκριμένης συνάρτησης φαίνεται με την επιλογή Play κάτω από το time. Αρχικά το κυματοπακέτο θα αρχίσει να διασκορπίζεται, μέχρις ότου διασκορπιστεί πλήρως. Αργότερα σε χρόνο  $time = 30$  θα διακρίνονται εμφανώς τέσσερα μέγιστα, σε  $time = 40$  θα διακρίνονται 3 μέγιστα, σε  $time = 60$  δύο μέγιστα και τελικά σε  $time = 120 = T_{rev}$  η κυματοσυνάρτηση θα επανεμφανιστεί πλήρως με διαφορά φάσης  $\pi$  από την αρχική για  $time = 0$ .

## Κεφάλαιο 5

### Κώδικας της Εφαρμογής

#### 5.1 Δομή της εφαρμογής

Με την εκτέλεση της εφαρμογής εμφανίζεται ένα κεντρικό παράθυρο με τίτλο «Hydrogen Atom», το οποίο περιέχει (καλεί), όλες τις μικροεφαρμογές που ορίστηκαν. Τα SimpleHydrogenAtom.nb, SameEnergylevel.nb,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,0,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[3,1,0].nb$ ,  $\Psi[1,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ ,  $\Psi[3,0,0] + \Psi[2,1,0].nb$ , CoherentStates1.nb, CoherentStates2.nb, PsiClassic.nb, coherentstates2D.nb, χρησιμοποιούνται για τον ορισμό των συναρτήσεων που σχεδιάζονται. Μέσω των τριών menu μπορεί κανείς να περιηγηθεί στις εφαρμογές. Οι τίτλοι των επιλογών των menu, αλλά και το παράθυρο των οδηγιών-δραστηριοτήτων που εμφανίζεται μαζί με την εκτέλεση διευκολύνει την περιήγηση και την χρήση.

Ο κώδικας εκτέλεσης των αρχικών παραθύρων είναι:

(\*Βασικές συναρτήσεις που ορίζουν το σχεδιασμό των σταθμών του υδρογόνου και των σύμφωνων καταστάσεων\*)

$$g2[n\_nm\_sn_] := 1/(4Pisn^2)^{1/4} \text{Exp} \left[ -\frac{(n - nm)^2}{4sn^2} \right];$$

$$\text{psiclass}[n\_nm\_sn,r\_phi\_thita\_] := g2[n, nm, sn] r^{(n-1)} (\text{Sin}[thita])^{(n-1)} \text{Exp}[I(n-1)phi];$$

$$\text{psi78}[r\_t\_p\_n\_nm\_sn2\_]: \\ = \text{Exp}[-(n - nm)^2./(4. sn2^2.)](1/(4. Pi^4.))r^{(n-1)} \text{Exp}[-r/n](\text{Sin}[t])^{(n-1)} \text{Exp}[I(n-1)p];$$

$$\text{psi90}[r\_t\_p\_n\_nm\_sn2\_]:= \text{Exp}[-(n-nm)^2./(4. sn2^2.)]$$

$$(1/(4 \cdot \text{Pi}^4)) r^{(n-1)} \text{Exp}[-r/n] (\text{Sin}[t])^{(n-1)} \text{Exp}[I (n-1)p];$$

(\*Εισαγωγή των notebook όπου σχεδιάζονται οι συναρτήσεις στο notebook που θα ορίσει το αρχικό παράθυρο\*)

```
DocumentNotebook[
  CellGroup[
    {TextCell["Hydrogen Atom", CellFrame->{{2,2},{2,7}},
      FontColor->Red, FontSize->20, TextAlignment->Center],

    Button["Simple Hydrogen Atom",
      NotebookOpen[ToFileName[Directory[], "Simple Hydrogen
      Atom.nb"]],
      ImageSize->{Automatic,50}, Alignment->Center],

    ActionMenu["Combinations",
      {"Same Energy level" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "Same Energy level.nb"]],
      "\Psi[1,0,0]+\Psi[2,0,0]" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "\Psi[1,0,0]+\Psi[2,0,0].nb"]],
      "\Psi[1,0,0]+\Psi[3,1,0]" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "\Psi[1,0,0]+\Psi[3,1,0].nb"]],
      "\Psi[1,0,0]+\Psi[2,1,0]" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "\Psi[1,0,0]+\Psi[2,1,0].nb"]],
      "\Psi[3,0,0]+\Psi[2,1,0]" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "\Psi[3,0,0]+\Psi[2,1,0].nb"]],

      ,ImageSize->{Automatic,50}},

    ActionMenu["Coherent States",
      {"Coherent States 1" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "Coherent States 1.nb"]],
      "Coherent States 2" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "Coherent States 2.nb"]],
      "Classical evolution" :> NotebookOpen[ToFileName[Directory[],
        "PsiClassic.nb"]],
      },
      ImageSize->{Automatic,50}}

  ], Alignment->Center, Background->GrayLevel[.8], Editable->False]

CreateWindow[
  %, WindowTitle->"Hydrogen", WindowSize->{500,400}]
```

(\*Δημιουργία παραθύρου, καθορισμός μεγεθών και συγγραφή κειμένου,\*)

```
CreateWindow[DocumentNotebook[
```

{TextCell["Στο διπλανό παράθυρο με την επιλογή << Simple Hydrogen Atom >> απεικονίζεται η πυκνότητα πιθανότητας της κυματοσυνάρτησης του ατόμου του υδρογόνου"],

TextCell[Style[
$$|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 = \frac{[(2kr)^3 (n-l-1)! / (2n[(n+l)!]^3)]^{1/2} e^{-kr} (2kr)^l}{L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) Y_{l,m}(\theta,\varphi)^2}$$
, Italic, 11, Bold, Blue, Background → LightBlue]],

TextCell["Το ουδέτερο άτομο του υδρογόνου αποτελείται από ένα πρωτόνιο και ένα ηλεκτρόνιο.

Οπου n, l, m είναι κβαντικοί αριθμοί που καθορίζουν την στάθμη και τον προσανατολισμό του ατόμου.

Απεικονίζεται επίσης η πυκνότητα πιθανότητας της ακτινικής συνάρτησης"],

TextCell[Style[" $R(r)^2 = \frac{[(2kr)^3 (n-l-1)! / (2n[(n+l)!]^3)]^{1/2} e^{-kr} (2kr)^l}{L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr)^2}$ ", Italic, Bold, Blue, 11, Background → LightBlue]], TextCell["σε διπλανό σχεδιάγραμμα.

Η ακτινική κυματοσυνάρτηση εξαρτάται μόνο από τα n και l.",

TextCell["Δραστηριότητα 1η Επιλέξτε τον κύριο κβαντικό αριθμό. Παρατηρήστε την τιμή της ενέργειας.

Επιλέξτε τον κβαντικό αριθμό l. Το εύρος των τιμών που σας δίνεται για το l είναι συγκεκριμένο.

Παρατηρήστε το. Έχουν άμεση σχέση με την επιλογή του n. Παρατηρήστε την τιμή της ενέργειας μετά

από αυτήν την αλλαγή. Επιλέξτε τον κβαντικό αριθμό m. Οι επιλογές είναι περιορισμένες και έχουν

άμεση σχέση με την επιλογή του l που κάνατε. Παρατηρήστε την τιμή της ενέργειας. Με σταθερό n

αλλάξτε τις τιμές των l και m. Η τιμή της ενέργειας παραμένει σταθερή. Αλλάξτε την τιμή του n και

παρατηρήστε την αλλαγή στο εύρος των τιμών των l και m. Η τιμή της ενέργειας άλλαξε.

Εξαρτάτε μόνο από το n! Δραστηριότητα 2η Στο μενού << Combinations >> επιλέξτε

<< Same Energy level

>>. Δίνεται η σχηματική αναπαράσταση της πρόσθεσης πολλών καταστάσεων ίδιας ενέργειας.

Παραμένει σφαιρική!

Δραστηριότητα 3 Στο μενού << Combinations

>> επιλέξτε κάποιον από τους συνδιασμούς και δείτε την αναπαράστασή της υπέρθεσής

τυχαίων καταστάσεων.

Δραστηριότητα 4 Παρατηρήστε την χρονική εξέλιξη των μιας σύμφωνης υπέρθεσης καταστάσεων του ατόμου του υδρογόνου. Το κυματοπακέτο αποτελείτε από κυκλικές καταστάσεις.

Η χρονική εξέλιξη μπορεί να παρατηρηθεί σε δύο μορφές. Κυκλικά ή σε ευθεία γραμμή, όπου οι

άξονες αντιπροσωπεύουν γωνίες. Αξιοσημείωτος είναι ο χρόνος αναβίωσης, όπου είναι ίσος με το

πηλίκο του μέσου n με τον αριθμό τρια. Με βάση αυτόν τον χρόνο μπορεί κανείς να υπολογίσει και

τους χρόνους των επιμέρους εντοπισμών.", CellFrame → {{2,2}, {2,7}}, Background →

LightPink}}, TextAlignment → Left, FontColor → Black, FontSize → 15, WindowTitle →

"hydrogen atom", Editable → False]] (\*Δημιουργία παραθύρου με επεξηγήσεις και

δραστηριότητες\*)

## 5.2 Ορισμός Μικροεφαρμογών

Παρακάτω φαίνονται οι εντολές που χρησιμοποιήθηκαν για τον σχεδιασμό της κάθε

συνάρτησης. Τα notebook SimpleHydrogenAtom.nb, SameEnergylevel.nb, Ψ[1,0,0] +

Ψ[2,0,0].nb, Ψ[1,0,0] + Ψ[3,1,0].nb, Ψ[1,0,0] + Ψ[2,1,0].nb, Ψ[3,0,0] + Ψ[2,1,0].nb,

CoherentStates1.nb, CoherentStates2.nb, PsiClassic.nb, coherentstates2D.nb, που τις εκτελούν καλούνται στο notebook του αρχικού παραθύρου με το όνομα Hydrogen.

(\*Στάθμες του ατόμου του υδρογόνου και ακτινική κυματοσυνάρτηση\*)

DocumentNotebook[

(\*Περιορισμοί στην δυνατότητα επιλογής κβαντικών αριθμών.\*)

Manipulate[

If[ $l > n, l = n - 1$ ];

If[ $m < -l, m = -l$ ];

If[ $m > l, m = l$ ];

If[ $n < 2, l = 0$ ];

GraphicsRow[

{ParametricPlot3D[

Evaluate [

{Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}

Abs[Sqrt[(2/n)^3 (n - l - 1)!/(2n((n + l)!)^3)]

Exp[-1/n] (2/n)^l

LaguerreL[n - l - 1, 2l + 1, 2/n]

SphericalHarmonicY[l, m, t, p]

],

{p, -Pi, Pi}, {t, 0, Pi},

ColorFunction -> Hue, Axes -> False

],

Plot[

1^2 Abs[Sqrt[(2/n)^3 (n - l - 1)!/(2n((n + l)!)^3)]

Exp[-r/n] (2r/n)^l

LaguerreL[n - l - 1, 2l + 1, 2r/n]^2 \* 10^(-14),

{r, 0, 35},

PlotRange -> All,

PlotLabel -> "r^(2) Rnl^(2) 10^-14

]],

PlotLabel -> En = (-13.6/n^2) eV

],

{{l, 0, 1}, 0, n - 1, 1},

{{m, 0, m}, -l, l, 1},

{{n, 1, "n"}, 1, 8, 1},

Background -> RGBColor[1, .5, .1]

]

(\*Σχεδιασμός αθροίσματος σταθμών ίδιας ενέργειας και σταθμών τυχαίας επιλογής\*)

Manipulate[

```

SphericalPlot3D[
  Sum [
    Abs [
      Sqrt[(2/n)^3 (n - l - 1)!/(2n(n + l)!)]
      Exp[-1/(2n)]1^l
      LaguerreL[n - l - 1,2l + 1,1]
      SphericalHarmonicY[l, m, t, p]]^2,
      {l, 0, n - 1}, {m, -l, l}], {p, -Pi, Pi}, {t, 0, Pi}
    ],
  {n, 1,3,1},
  SaveDefinitions -> True
]

```

```

CreateWindow[
DocumentNotebook[%], WindowTitle -> "Same Energy level"]□

```

```

DocumentNotebook[
  ParametricPlot3D[
    Evaluate[
      {Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}
      864/3457 Abs[kan3[1,0,0, t, p, 1 +
      kan4[2,1,1, t, p, 1]]^2],
      {t, 0, Pi}, {p, 0,2Pi},
      PlotRange -> All, ColorFunction -> Hue, Axes -> False]
    ]

```

```

DocumentNotebook[
  ParametricPlot3D[
    Evaluate[
      {Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}
      32/129 Abs[kan3[1,0,0, t, p, 1] +
      kan4[2,0,0, t, p, 1]]^2],
      {t, 0, Pi}, {p, 0,2Pi},
      PlotRange -> All, ColorFunction -> Hue, Axes -> False]
    ]

```

```

DocumentNotebook[
  ParametricPlot3D[
    Evaluate[
      {Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}
      864/3457 Abs[kan3[1,0,0, t, p, 1] +
      kan4[2,1,0, t, p, 1]]^2],
      {t, 0, Pi}, {p, 0,2Pi},
      PlotRange -> All, ColorFunction -> Hue, Axes -> False]
    ]

```

```

DocumentNotebook[
  ParametricPlot3D[
    Evaluate[

```



```

{Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}
69894/113 Abs[kan3[3,0,0, t, p, 1] +
kan4[2,1,0, t, p, 1]]^2,
{t, 0, Pi}, {p, 0, 2Pi},
PlotRange → All, ColorFunction → Hue, Axes → False]
]

```

```

DocumentNotebook[
  ParametricPlot3D[
    Evaluate[
      {Cos[p]Sin[t], Sin[p]Sin[t], Cos[t]}
      279936/1119745 Abs[kan3[1,0,0, t, p, 1] +
      kan4[3,1,0, t, p, 1]]^2,
      {t, 0, Pi}, {p, 0, 2Pi},
      PlotRange → All, ColorFunction → Hue, Axes → False]
    ]

```

(\*Σχεδιασμός σύμφωνων καταστάσεων \*)

```

psi78[r_, t_, p_, n_, nm_, sn2_] :=
Exp[-(n - nm)^2./ (4. sn2^2.)] (1/ (4. Pi^4.)) r^{n-1} Exp[-r/n] (Sin[t])^{(n - 1)} Exp[I(n -
1)p];
(*ορισμός κυματοσυνάρτησης*)

```

```

Manipulate[
  Plot3D[
    Abs[Sum[
      4.74122 Pi^2 psi78[1, t, p, n, nm, sn]
      Exp[I time (2Pi nm^3)/ (2. n^2)]
      , {n, nm-8, nm+8, 1}]]^2,
      {p, -Pi, Pi}, {t, 0, Pi},
      PlotRange → All, Mesh → None,
      ColorFunction →
      Function[{ p}, Hue[ p]]
    ],
    {time, 0, 130., 0.1 },
    {nm, {360., 111., 150., 300.}},
    {sn, {2.5, 2, 3, 4}}
  ]
  (*σχεδίαση στο χώρο, απεικόνιση μετακίνησης σε ευθεία γραμμή.*)

```

```

CreateWindow[
  DocumentNotebook[%], WindowTitle → "Coherent States 1"]

```

```

Manipulate[
  ParametricPlot3D[
    { Sin[ p ], Cos[ p ], Abs[Sum[4.74 Pi^2.
psi78[1, t, p, n, nm, sn]
Exp[I time (2.Pi nm^3.) / (2. n^2.)],

```

```

    {n, nm-8., nm+8., 1}}]^2},
    {p, 0, 2 Pi }, {t, 0, Pi},
    PlotRange→ All, Mesh→None,
    ColorFunction →Function[{p}, Hue[ p]],
    Axes→ False
    ],
    {time, 0., 130. },
    {nm, { 360., 111., 150., 300., 80.}},
    {sn, {2.5, 2, 1.5, 3.}}]
    }}}]

```

(\*σχεδίαση στο χώρο, απεικόνιση μετακίνησης κυκλικά\*)

```

CreateWindow [
    DocumentNotebook[%], WindowTitle→"Coherent States 2"]

```

```

g2[n_, nm_, sn_] := 1/(4Pisn^2)^(1/4) Exp[-(n - nm)^2/(4sn^2)];

```

```

psiclass[n_, nm_, sn_, r_, phi_, thita_] :=
    g2[n, nm, sn]r^(n - 1)Exp[-r/n](Sin[thita])^(n - 1)Exp[I(n
    - 1)phi];

```

```

Manipulate[
    Plot3D[
    Abs[Sum[
        4.77 Pi psiclass[n, nm, sn, r, phi, thita]
        Exp[I t (2Pi nm^3)/(2nm^2) (1- 2 ( n-nm)/nm)],
        {n, nm-7, nm+7, 1}]
    ]^2,
    {phi, -Pi, Pi}, {thita, 0, Pi},
    PlotRange→ All,
    ColorFunction→Function[{phi}, Hue[phi] ]
    ],
    {nm, {360, 111, 150, 300}},
    {sn, {2.5, 2, 3, 4}}, {r, 1, 10, 1}, {t, 0, 100}
    ]

```

```

CreateWindow[
    DocumentNotebook[%]]

```

(σχεδιασμός σε δύο διαστάσεις για ταχύτερη παρατήρηση)

```

psi90[r_, t_, p_, n_, nm_, sn2_] :=
    Exp[-(n - nm)^2./(4. sn2^2.)](1/(4. Pi^4.))r^(n
    - 1)Exp[-r/n](Sin[t])^(n - 1)Exp[I(n - 1)p];

```

```

DocumentNotebook[
    Manipulate[
        Plot[
            Abs[
                Sum[ 4.74122 Pi^2

```

```

psi90[1,1/2Pi,p,n,nvalue,StDeviation]
Exp[I time (2Pi nvalue^3)/(2. n^2)],
{n,nvalue-8,nvalue+8,1}]]^2,
{p,-Pi, Pi},
PlotRange→ All,Mesh→None,
ColorFunction →Function[{ p},
Hue[ p]],
Filling→ Bottom],
{time,0,130.,0.1 },
{nvalue,{360.,111.,150.,300. }},
{StDeviation,{2.5,2 ,3,4}}]
]

```

## Βιβλιογραφία

Zagorka D. Gaeta, *Classical Limit of a Hydrogen Atom*, University of Rochester, New York 1995.

Σ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική 1*, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, 2007

Σ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική 2*, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, 2008

Σ. Τραχανάς, *Mathematica και Εφαρμογές*, Παν/κές Εκδόσεις Κρήτης, 2001

Γ. Ανδριτσόπουλος, *Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική*, Ιωάννινα 1984

Z.D.Gaeta and C.R.Stroud, *Phys. Rev. A*, 42, 6308 (1990)

E.M.F. Curado et all, *Phs. A* 371 (2006) 16-19

Bo-Wei Xu and Guo-Hui Ding, *Phys. Re. A*, 62, 022106 (2000)

N. Unal, *Turk J Phys*, 24 (2000), 463-472

J.R. Klauder, *J. Math. Phys. A* 28 (1995) 7019

J. A. Yeazell et all, *Phys. Rev. A* 40, 5040 (19).

J. A. Yeazell and C.R. Stroud, *Phys Rev. Lett.*, 60 (1988)

R.A.Serway, C.J.Moses, C.A.Moyer, Σύγχρονη Φυσική, μετάφραση Σ.Παπαδόπουλος, Κ. Ράπτης, Γ. Ζουπάνος, Ε. Λιαροκάπης, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1999

Διαδικτυακός τόπος <http://en.wikipedia.org>

Διαδικτυακές πηγές σχετικά με τις σύμφωνες καταστάσεις:

[http://www.chemistry.mcmaster.ca/esam/Chapter\\_3/intro.html](http://www.chemistry.mcmaster.ca/esam/Chapter_3/intro.html)

<http://digitalschool.minedu.gov.gr/index.php>

<http://www.optics.rochester.edu/~stroud/>

Ιστοσελίδα με εφαρμογές Mathematica: <http://demonstrations.wolfram.com/>

<http://www.wolfram.com/>