κ ε φ ά λ α ι ο

1

ΧΡΟΝΑΝΕΞΑΡΤΗΤΑ ΕΠΙΛΥΣΙΜΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ Ι

ΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΙ DARBOUX ΚΑΙ LIOUVILLE

1. Μετασχηματισμοί σε δευτεροτάξιες γραμμικές εξισώσεις: Η κανονική μορφή

Ξεκινάμε από την *τυπική μορφή* μιας δευτεροτάξιας γραμμικής (και ομογενούς) εξίσωσης

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0 \tag{1.1}$$

στην οποία ο συντελεστής της δευτέρας παραγώγου έχει γίνει μονάδα διαιρώντας με τον συντελεστή που τυχόν υπήρχε. Προκειμένου τώρα να μετασχηματίσουμε την (1.1) σε μια άλλη (ενδεχομένως επιλύσιμη) μορφή, τα μόνα εργαλεία που έχουμε στη διάθεσή μας είναι οι αλλαγές εξαρτημένης και ανεξάρτητης μεταβλητής: $y = f(Y)$ και $t = t(x)$ αντίστοιχα. Δεδομένου όμως ότι η εξίσωσή μας είναι γραμμική και ομογενής, και θέλουμε να παραμείνει τέτοια (διότι, βεβαίως, οι μη γραμμικές εξισώσεις είναι πολύ δυσκολότερες) οι μόνες αλλαγές εξαρτημένης μεταβλητής που έχει νόημα να χρησιμοποιήσουμε είναι εκείνες με τη *γραμμική και ομογενή μορφή*

$$y(x) = g(x)Y(x), \tag{1.2}$$

όπου $g(x)$ μια αυθαίρετη συνάρτηση που εναπόκειται σε μας να επιλέξουμε, ανάλογα με τον επιδιωκόμενο σκοπό. Εισάγοντας τη (1.2) στην (1.1) παίρνουμε

$$gY'' + (Pg + 2g')Y' + (g'' + Pg' + Qg)Y = 0, \tag{1.3}$$

από όπου είναι φανερό ότι αν διαλέξουμε το g ώστε να είναι

$$Pg + 2g' = 0 \;\Rightarrow\; g = \exp\left(-\frac{1}{2}\int P(x)\,dx\right), \tag{1.4}$$

η (1.3) θα καταλήγει στη λεγόμενη *κανονική μορφή*

$$Y'' + I(x)Y = 0, \tag{1.5}$$

στην οποία ο συντελεστής της πρώτης παραγώγου έχει μηδενιστεί, ενώ ο συντελεστής του Y έχει πάρει –όπως είναι εύκολο να δείτε– τη μορφή

$$I(x) = Q(x) - \frac{1}{2}P' - \frac{1}{4}P^2. \tag{1.6}$$

Θα δείξουμε τώρα ότι η αναγωγή σε κανονική μορφή –δηλαδή μια *μορφή χωρίς πρώτη παράγωγο*– είναι δυνατή και με χρήση μιας αλλαγής εξαρτημένης μεταβλητής $t = t(x)$ για μια κατάλληλη $t(x)$. Πράγματι, κάνοντας μια τέτοια αλλαγή στην (1.1) θα έχουμε τη νέα, ως προς t, εξίσωση(*)

$$t'^2\ddot{y} + \big(t'' + Pt'\big)\dot{y} + Qy = 0, \tag{1.7}$$

που έρχεται σε κανονική μορφή αν η συνάρτηση $t = t(x)$ εκλεγεί έτσι ώστε

$$t'' + Pt' = 0 \;\Rightarrow\; t(x) = \int e^{-\int P(x)dx}dx, \tag{1.8}$$

οπότε η (1.7) καταλήγει στην

$$\ddot{y} + \left(\frac{Q(x)}{e^{-2\int P(x)dx}}\right)_{x=x(t)} y = 0 \tag{1.9}$$

όπου, βέβαια, $x = x(t)$ είναι η αντίστροφη συνάρτηση της $t = t(x)$ όπως αυτή ορίζεται από την (1.8).

Για λόγους που θα γίνουν σύντομα κατανοητοί το πέρασμα από μια κανονική μορφή σε μια άλλη είναι μια πολύ χρήσιμη τεχνική για την οποία πρέπει να πούμε δυο λόγια σε τούτη την εισαγωγή. Η βασική ιδέα είναι πολύ απλή: Να κάνουμε στην εξίσωση

$$y'' + q(x)y = 0 \tag{1.10}$$

(*) Επειδή θα τις χρησιμοποιούμε συχνά από εδώ και μπρος, σημειώνουμε –για διευκόλυνση του αναγνώστη– τις σχέσεις

$$y' = t'\dot{y}, \qquad y'' = t'^2\ddot{y} + t''\dot{y},$$

όπου $y' \equiv dy/dx$ και $\dot{y} \equiv dy/dt$.

πρώτα μια αλλαγή ανεξάρτητης μεταβλητής $t = t(x)$ –η οποία την «βγάζει» από την κανονική μορφή– και εν συνεχεία να την επαναφέρουμε σε κανονική μορφή (διαφορετική όμως από την προηγούμενη) με τη συνήθη αλλαγή εξαρτημένης μεταβλητής $y = gY$. Και όπως μπορείτε να δείξετε μόνοι σας, το αποτέλεσμα θα είναι η νέα, ως προς t, εξίσωση

$$\ddot{Y}(t) + Q(t)Y(t) = 0, \tag{1.11}$$

όπου η σχέση της παλιάς προς τη νέα εξαρτημένη μεταβλητή θα δίνεται από τον τύπο

$$Y(t) = \frac{1}{\sqrt{\dot{x}(t)}} y\big(x(t)\big) \tag{1.12}$$

με $x = x(t)$ –ή $t = t(x)$– τη συνάρτηση που συνδέει τις ανεξάρτητες μεταβλητές x και t και η οποία μπορεί να είναι τυχούσα. Όσο για τη σχέση των $Q(t)$ και $q(x)$ αυτή θα περιγράφεται από τον τύπο

$$Q(t) = q\dot{x}^2 + \{x, t\}, \tag{1.13}$$

όπου $\{x, t\}$ η παράσταση

$$\{x, t\} \underset{\text{ορ}}{=} \frac{1}{2}\left(\frac{\ddot{x}}{\dot{x}}\right)^{\cdot} - \frac{1}{4}\left(\frac{\ddot{x}}{\dot{x}}\right)^2, \tag{1.14}$$

που είναι γνωστή στη βιβλιογραφία ως η *σβαρτσιανή* της συνάρτησης $x = x(t)$ και είχε μελετηθεί από τους μαθηματικούς στο πλαίσιο της θεωρίας των μιγαδικών συναρτήσεων, για την πολύ ενδιαφέρουσα ιδιότητά της να παραμένει αναλλοίωτη στους μετασχηματισμούς Möbius $w = (az + b)/(cz + d)$. Να είναι δηλαδή

$$\{x, t\} = \left\{\frac{ax + b}{cx + d}, t\right\}, \tag{1.15}$$

όπου a, b, c, d αυθαίρετες (και μιγαδικές εν γένει) σταθερές.

Όμως οι αλλαγές εξαρτημένης μεταβλητής που μπορούμε να πραγματοποιήσουμε σε μια γραμμική (και ομογενή) εξίσωση δεν περιορίζονται στη μορφή (1.2). Μπορούν να συμπεριλάβουν και τη γενικότερη γραμμική και ομογενή απεικόνιση

$$Y = Ly \tag{1.16}$$

στην οποία οι δύο εξαρτημένες μεταβλητές $y(x)$ και $Y(x)$ συνδέονται όχι απλώς μέσω της δράσης μιας συνάρτησης $g(x)$ –ή $1/g(x)$– αλλά ενός γραμμικού διαφορικού τελεστη L όπως, παραδείγματος χάριν, του

$$L = a(x)D^2 + b(x)D + c(x)$$

για τον οποίο θα είναι

$$Y = ay'' + by' + cy. \tag{1.17}$$

Δεδομένου όμως ότι η y ικανοποιεί εξ υποθέσεως μια δευτεροτάξια εξίσωση της μορφής(*)

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = 0 \tag{1.18}$$

θα είναι $y'' = -py' - qy$ και η (1.17) θα ξαναγράφεται ως

$$\begin{aligned} Y &= (b - ap)y' + (c - aq)y \\ &\equiv A(x)y' + B(x)y \equiv (AD + B)y \end{aligned}$$

το οποίο σημαίνει ότι για τη διερεύνηση των μετασχηματισμών (1.16) μπορούμε να περιοριστούμε σε πρωτοτάξιους διαφορικούς τελεστές L, οπότε η (1.16) θα γράφεται ως

$$Y = (AD + B)y \equiv A(x)y' + B(x)y \tag{1.19}$$

ή, ισοδύναμα, ως

$$Y = A\left(y' + \frac{B}{A}y\right) \equiv A(y' + fy) \qquad f = B/A. \tag{1.20}$$

Δεδομένου όμως ότι οι μετασχηματισμοί του τύπου $Y = A(x)y$ έχουν ήδη μελετηθεί –εξίσωση (1.2)– μπορούμε να αγνοήσουμε τον παράγοντα $A(x)$ στην (1.20) και να περιοριστούμε μόνο στη μελέτη του γραμμικού μετασχηματισμού

$$Y = (D + f)y = y' + fy. \tag{1.21}$$

Παραλείποντας μια γενικότερη διερεύνηση των επιπτώσεων του μετασχηματισμού (1.21) σε μια τυχούσα δευτεροτάξια εξίσωση, θα δείξουμε τώρα ότι με χρήση αυτού του μετασχηματισμού –και με κατάλληλη εκλογή της συναρτήσεως f– μπορούμε να επιτύχουμε τη μετάβαση

$$y'' + q(x)y = 0 \quad \longrightarrow \quad Y'' + Q(x)Y = 0, \tag{1.22}$$

δηλαδή το *πέρασμα από μια κανονική μορφή σε μια άλλη* με την ίδια ανεξάρτητη μεταβλητή x. Σημειώστε όμως ότι τώρα δεν έχουμε την ευχέρεια να εκφράσουμε

(*) Σημειώστε ότι στην (1.18), αντίθετα με την (1.1), χρησιμοποιούμε για τους συντελεστές της εξίσωσης τα πεζά γράμματα p και q αντί των κεφαλαίων P και Q που είχαν χρησιμοποιηθεί αρχικά. Και ο λόγος είναι απλός. Εδώ θέλουμε να κρατήσουμε τα κεφαλαία γράμματα P και Q για τη μετασχηματισμένη εξίσωση ως προς Y, όπως ήδη κάναμε στην περίπτωση της εξίσωσης (1.10).

το y συναρτήσει του Y –παρά μόνο με χρήση ολοκληρωμάτων– οπότε η διαδικασία μετασχηματισμού της αρχικής εξίσωσης $y'' + qy = 0$ δεν μπορεί να γίνει με αντικατάσταση όπως παλιά –π.χ., όπως με την αλλαγή (1.2)– αλλά με αντικατάσταση του $Y = y' + fy$, στην τελική εξίσωση $Y'' + QY = 0$ με τον σκοπό να εκλεγούν κατάλληλα τόσο το Q όσο και η συνάρτηση μετασχηματισμού f ώστε η εξίσωση ως προς y που θα προκύψει να συμπίπτει με την αρχική. Σημειώστε ακόμα ότι στη διαδικασία αυτή θα εμφανιστεί και η τρίτη παράγωγος τής y η οποία θα πρέπει να επανεκφραστεί μέσω χαμηλότερων παραγώγων με χρήση της εξίσωσης που ικανοποιεί η y. Δηλαδή

$$y'' + qy = 0 \quad \Rightarrow \quad y''' = -(qy)' = -(qy' + q'y).$$

Εκτελώντας το παραπάνω «σχέδιο» θα έχουμε

$$\begin{aligned} Y'' + QY &= (y' + fy)'' + Q(y' + fy) = y''' + (fy)'' + Q(y' + fy) \\ &= -(qy' + q'y) + (fy'' + 2f'y' + f''y) + (Qy' + Qfy) \\ &= fy'' + (-q + 2f' + Q)y' + (-q' + f'' + Qf)y = 0 \end{aligned}$$

και διαιρώντας με f παίρνουμε την εξίσωση

$$y'' + \frac{Q + 2f' - q}{f}y' + \frac{(Qf + f'' - q')}{f}y = 0,$$

που θα συμπίπτει με την αρχική $(y'' + qy = 0)$ μόνο αν είναι

$$\frac{Q + 2f' - q}{f} = 0 \quad \Rightarrow \quad Q = q - 2f' \tag{1.23}$$

και

$$\frac{Qf + f'' - q'}{f} = q, \tag{1.24}$$

οπότε –λόγω και της (1.23)– η (1.24) θα γράφεται τελικά ως

$$\begin{aligned} f'' - 2ff' - q' = 0 \quad &\Rightarrow \quad (f' - f^2 - q)' = 0 \\ &\Rightarrow \quad f' - f^2 - q = c = \text{σταθερά}. \end{aligned} \tag{1.25}$$

Όμως η (1.25) είναι μια εξίσωση τύπου *Ricatti* (*) που μετατρέπεται σε μια γραμμική δευτεροτάξια εξίσωση με τον μετασχηματισμό

$$f = -\frac{u'}{u} \tag{1.26}$$

(*) Έτσι αποκαλούνται οι εξισώσεις της μορφής $y' = ay^2 + by + c$ των οποίων το δεύτερο μέλος είναι ένα δευτεροβάθμιο τριώνυμο ως προς y με συντελεστές a, b, c που υποτίθενται τυχούσες συναρτήσεις του x. Η ιδιαιτερότητα των εξισώσεων Ricatti έγκειται στο γεγονός ότι ανάγονται σε γραμμικές (2ας τάξεως) με τον μετασχηματισμό $y = -(1/a)(u'/u)$ που τις φέρνει στη μορφή $u'' - (b + (a'/a))u' + acu = 0$. Αποδείξτε το.

που όντως την μετατρέπει στη γραμμική εξίσωση

$$u'' + (q + c)u = 0, \tag{1.27}$$

που είναι η ίδια με την αρχική εξίσωση αλλά με το $q + c$ στη θέση του q και με c μια τυχούσα σταθερά. Ενώ βέβαια, σύμφωνα με τις (1.23) και (1.26), η μετασχηματισμένη μορφή της αρχικής εξίσωσης θα είναι η

$$Y'' + \left(q + 2\left(\frac{u'}{u}\right)'\right) Y = 0. \tag{1.28}$$

2. *Η εξίσωση Schrödinger: Από ένα επιλύσιμο δυναμικό σε ένα άλλο: Ο μετασχηματισμός Darboux*

Θα δείξουμε τώρα ότι το τελευταίο μας αποτέλεσμα, δηλαδή η απεικόνιση

$$y'' + qy = 0 \xrightarrow{Y=y'+fy} Y'' + QY = 0, \tag{1.29}$$

μπορεί να χρησιμοποιηθεί άμεσα για την κατασκευή μιας άπειρης αλυσίδας ακριβώς επιλύσιμων δυναμικών –δηλαδή ακριβώς επιλύσιμων εξισώσεων Schrödinger– με αφετηρία ένα από αυτά. Ξεκινάμε από την εξίσωση Schrödinger στη «μαθηματική γραφή»

$$y'' + \big(\lambda - v(x)\big)y = 0, \tag{1.30}$$

την οποία προτιμήσαμε έναντι της «φυσικής» μορφής

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\psi \equiv \psi'' + \big(\epsilon - U(x)\big)\psi = 0 \tag{1.31}$$

$$\big[\epsilon = 2mE/\hbar^2, \qquad U(x) = 2mV(x)/\hbar^2\big]$$

για λόγους που θα γίνουν σύντομα εμφανείς. Με την αντιστοιχία συμβόλων

$$\lambda \leftrightarrow \epsilon, \qquad y \leftrightarrow \psi$$

το πέρασμα από τη μια μορφή στην άλλη είναι, βεβαίως, τετριμμένο, όπως το ίδιο ισχύει και για τη μετατροπή των αποτελεσμάτων στις συνήθεις μονάδες, που είναι θέμα καθαρής διαστατικής ανάλυσης, αφού (πέρα από την αλλαγή συμβόλων) η (1.30) προκύπτει από την (1.31) επιλέγοντας ένα σύστημα μονάδων στο οποίο είναι

$$\hbar = 2m = 1.$$

Αν εφαρμόσουμε τώρα τα αποτελέσματα της προηγούμενης παραγράφου στην εξίσωση (1.30) –δηλαδή για $q(x) = \lambda - v(x)$– θα έχουμε την απεικόνιση

$$y'' + \big(\lambda - v(x)\big)y = 0 \;\longrightarrow\; Y'' + \big(\lambda - V(x)\big)Y = 0, \tag{1.32}$$

όπου η σχέση της αρχικής (y) με τη νέα (Y) κυματοσυνάρτηση θα δίνεται από τον τύπο

$$Y = y' - \frac{u'}{u}y \tag{1.33}$$

και η σχέση του αρχικού (v) με το νέο (V) δυναμικό, από την

$$V(x) = v(x) - 2\left(\frac{u'}{u}\right)', \tag{1.34}$$

όπου η *συνάρτηση μετασχηματισμού* u ικανοποιεί την εξίσωση

$$u'' + (\mu - v)u = 0, \tag{1.35}$$

δηλαδή την *αρχική εξίσωση Schrödinger*, αλλά με την τυχούσα παράμετρο μ στη θέση της αρχικής ιδιοτιμής λ. Και αυτό –δηλαδή η αντικατάσταση του λ με την τυχούσα παράμετρο μ– οφείλεται προφανώς στο γεγονός ότι στην εξίσωση (1.27) εμφανίζεται και η τυχούσα σταθερά c που προστίθεται στην ιδιοτιμή λ (αφού $q = \lambda - v(x)$) και τη μετατρέπει σε μια τυχούσα άλλη παράμετρο μ άσχετη πλέον με το λ. Και είναι σημαντικό να τονίσουμε εδώ ότι χάρις σε αυτό ακριβώς το γεγονός η νέα, ως προς Y, εξίσωση είναι πάλι μια εξίσωση Schrödinger με ένα νέο δυναμικό $V(x)$ που δεν εξαρτάται από το λ όπως απαιτείται. Διότι, βέβαια, αν το μ στην (1.35) ήταν πάλι το ίδιο το λ η λύση u θα εξαρτιόταν από αυτό –θα ήταν δηλαδή $u = u(x, \lambda)$– οπότε το ίδιο θα συνέβαινε και με το νέο δυναμικό (1.34). Θα ήταν $V = V(x, \lambda)$ και η $Y'' + (\lambda - V(x, \lambda))Y = 0$ δεν θα ήταν πλέον μια εξίσωση ιδιοτιμών τύπου Schrödinger.

Λόγω της μεγάλης σημασίας τους θα συνοψίσουμε τα προηγούμενα αποτελέσματα –που θα τα επικαλούμαστε στο εξής υπό τον συλλογικό τίτλο *ο μετασχηματισμός Darboux*– στον ακόλουθο πίνακα.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1.1 *Ο μετασχηματισμός Darboux*

$$y'' + (\lambda - v)y = 0 \;\longrightarrow\; Y'' + (\lambda - V)Y = 0$$

$$Y = y' - \frac{u'}{u}y, \qquad V = v - 2\left(\frac{u'}{u}\right)'$$

$$u'' + (\mu - v)u = 0$$

3. *Υπερδιαπερατά δυναμικά: Η απλούστερη δυνατή εφαρμογή του μετασχηματισμού Darboux*

Το απλούστερο δυνατό παράδειγμα εφαρμογής του μετασχηματισμού Darboux αντιστοιχεί προφανώς στην περίπτωση που το αρχικό δυναμικό $v(x)$ είναι μηδέν ή έχει μια σταθερή τιμή που μπορεί πάντα να γίνει μηδέν με κατάλληλη εκλογή της στάθμης αναφοράς των δυναμικών ενεργειών του προβλήματος. Με $v(x) = 0$ η εξίσωση Schrödinger για τη συνάρτηση μετασχηματισμού u θα γράφεται ως

$$u'' + \mu u = 0, \tag{1.36}$$

όπου μ μια αυθαίρετη παράμετρος που εναπόκειται σε μας να επιλέξουμε κατάλληλα. Από τον τύπο (1.34) για το νέο δυναμικό $V(x)$ είναι φανερό ότι αν επιθυμούμε το δυναμικό αυτό να μην έχει σημεία απειρισμού σε πεπερασμένα x –δηλαδή στο ανοικτό διάστημα $-\infty < x < +\infty$– θα πρέπει η συνάρτηση u να μην μηδενίζεται σε αυτό το διάστημα, οπότε το μ θα πρέπει να είναι αρνητικό ώστε οι λύσεις της (1.36) να είναι υπερβολικές και όχι τριγωνομετρικές συναρτήσεις που έχουν, βέβαια, άπειρα σημεία μηδενισμού στο $-\infty < x < +\infty$.

Θέτοντας $\mu = -\gamma^2 (< 0)$ η (1.36) έχει ως προφανή μη μηδενιζόμενη λύση την

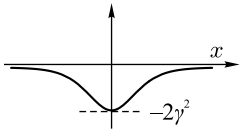
$$u = \cosh \gamma x \tag{1.37}$$

για την οποία ο μετασχηματισμός Darboux δίνει

$$Y = y' - \gamma \tanh \gamma x \cdot y \tag{1.38}$$

και

$$V(x) = -\frac{2\gamma^2}{\cosh^2 \gamma x} = \tag{1.39}$$



όπου στον τύπο (1.39) παραθέσαμε και τη μορφή του αντίστοιχου δυναμικού. Όπως βλέπετε, πρόκειται για ένα *πηγάδι δυναμικού* (potential well) και ως τέτοιο οφείλει να έχει *τουλάχιστον μία δέσμια κατάσταση*.(*) Πράγματι, όπως θα δείξουμε αμέσως –και τελείως γενικά– η εξίσωση Schrödinger για το δυναμικό $V(x)$ έχει ως λύση, για $\lambda = \mu = -\gamma^2$, τη συνάρτηση

$$Y = \frac{1}{u} = \frac{1}{\cosh \gamma x} = \tag{1.40}$$

(*) Αυτό ισχύει για κάθε μονοδιάστατο πηγάδι όσο ρηχό και αν είναι, υπό τον όρο ότι έχει «ισοϋψή χείλη» στο $\pm\infty$. Είναι δηλαδή $\lim_{x\to+\infty} V(x) = \lim_{x\to-\infty} V(x)$.

που έχει όλα τα χαρακτηριστικά μιας δέσμιας λύσης. Η γενική απόδειξη είναι πολύ απλή. Σημειώστε κατ' αρχάς ότι για την ειδική τιμή $\lambda = \mu$ ο τύπος του Darboux $Y = y' - (u'/u)y$ δεν δίνει και τις δύο λύσεις της νέας εξίσωσης Schrödinger διότι τότε είναι και $y = u$, οπότε θα έχουμε $Y = 0$. Όμως –ως εξίσωση 2ας τάξεως– η αρχική εξίσωση Schrödinger (πάντα για την ειδική περίπτωση $\lambda = \mu$) θα έχει εκτός από την $y_1 = u$ και μια δεύτερη λύση $y_2 = \overline{u}$ για την οποία ο μετασχηματισμός Darboux θα δώσει

$$Y = \overline{u}' - \frac{u'}{u}\overline{u} = \frac{\overline{u}'u - u'\overline{u}}{u} \equiv \frac{W(u,\overline{u})}{u} \sim \frac{1}{u}, \tag{1.41}$$

όπου $W(u,\overline{u}) \equiv u\overline{u}' - u'\overline{u}$ η *βρονσκιανή* των δύο λύσεων $y_1 = u$ και $y_2 = \overline{u}$ της εξίσωσης $y'' + (\mu - v)y = 0$ που θα είναι ίση με μια σταθερά αφού η εξίσωση δεν έχει όρο πρώτης παραγώγου.(*) Δείξαμε λοιπόν ότι όντως το νέο δυναμικό (1.39) που προκύπτει από το δυναμικό $v = 0$ με τον μετασχηματισμό Darboux, έχει μια δέσμια κατάσταση στη «θέση» $\lambda = -\gamma^2$ που αντιστοιχεί στην εκλεγείσα τιμή της παραμέτρου μ.

Όμως το πιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό του δυναμικού (1.39) –γνωστού και ως *δυναμικού Bargmann* (†)– είναι μια πολύ σπάνια ιδιότητά του που αποδίδεται με τον όρο *reflectionless potential* και σε ελληνική απόδοση *υπερδιαπερατό* ή *μη ανακλαστικό* ή και *διαφανές δυναμικό*.

Μια σύντομη εισαγωγή στις σχετικές έννοιες είναι αναγκαία και συμπυκνώνεται επαρκώς στο Σχήμα 1.1.

Θα δείξουμε τώρα ότι ειδικά για το πηγάδι δυναμικού που βρήκαμε –εξίσωση (1.39)– το πλάτος ανάκλασης $r(k)$ θα μηδενίζεται και επομένως το σωματίδιο θα έχει μηδενική πιθανότητα να ανακλαστεί οποιαδήποτε και αν είναι η ενέργειά του ή ο «κυματαριθμός» k που την προσδιορίζει μέσω της σχέσης $\epsilon \equiv \lambda = k^2$. Γι' αυτό το σκοπό εισάγουμε στη σχέση (1.38) τη λύση $y_k = e^{ikx}$ της αρχικής εξίσωσης Schrödinger για $\lambda = k^2$ (θετικές ενέργειες) και παίρνουμε

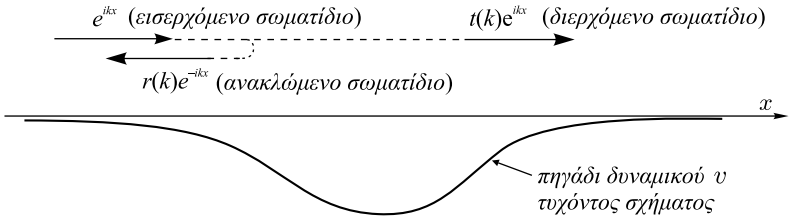
$$Y_k = y_k' - \gamma \tanh \gamma x \cdot y_k = (ik - \gamma \tanh \gamma x)e^{ikx}, \tag{1.42}$$

(*) Υπενθυμίζουμε στον αναγνώστη ότι για τη βρονσκιανή $W = y_1 y_2' - y_1' y_2$ δύο γραμμικά ανεξάρτητων λύσεων y_1 και y_2 της εξίσωσης $y'' + Py' + Qy = 0$ ισχύει ο λεγόμενος *τύπος του Abel*

$$W = e^{-\int P(x)dx},$$

από όπου είναι προφανές ότι για τις δύο λύσεις μιας εξίσωσης στην κανονική μορφή $y'' + q(x)y = 0$ θα είναι $W =$ σταθερά.

(†) Στην πραγματικότητα το δυναμικό Bargmann έχει τη γενικότερη μορφή $V(x) = -V_0/\cosh^2 \gamma x$ με τα V_0 και γ ανεξάρτητες παραμέτρους. Και αν το V_0 παίρνει μια οποιαδήποτε από τις διάκριτες τιμές $n(n+1)2m\gamma^2/\hbar^2$ τότε το δυναμικό Bargmann έχει την επιπλέον ιδιότητα της υπερδιαπερατότητας την οποία θα συζητήσουμε τώρα.



Σχημα 1.1: *Το πρόβλημα της μονοδιάστατης σκέδασης*: Ένα σωματίδιο που προσπίπτει εξ αριστερών στο τυχόν πηγάδι δυναμικού $v(x)$ έχει πάντα μια πιθανότητα να ανακλαστεί και μια (συμπληρωματική) πιθανότητα να «περάσει». Το εισερχόμενο σωματίδιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση e^{ikx}, το ανακλώμενο από την $r(k)e^{-ikx}$ –όπου $r(k)$ το *πλάτος ανάκλασης* (reflection amplitude)– και το διερχόμενο από την $t(k)e^{ikx}$, όπου $t(k)$ το *πλάτος διέλευσης* (transmission amplitude). Ενώ οι σχετικές πιθανότητες θα είναι $|r(k)|^2$ και $|t(k)|^2$ αντίστοιχα.

οπότε για $x \to \pm\infty$ –δηλαδή στη λεγόμενη *περιοχή σκέδασης* ($\equiv$ μακριά από το σκεδάζον δυναμικό)– θα έχουμε

$$Y_k^{(\pm)} \equiv Y_k(\text{για } x \to \pm\infty) = (ik \mp \gamma)e^{ikx} \tag{1.43}$$

απ' όπου είναι φανερό ότι η *λύση σκέδασης* Y_k του νέου δυναμικού $V(x)$ δεν περιέχει πουθενά –και ειδικότερα στην περιοχή $x \to -\infty$ (αριστερά του σκεδάζοντος δυναμικού)– ανακλώμενο κύμα e^{-ikx} και επομένως το πλάτος ανάκλασης είναι όντως μηδενικό για κάθε τιμή του k, όπως υποσχεθήκαμε να δείξουμε. Οποιαδήποτε και αν είναι η ενέργειά του το σωματίδιο που προσπίπτει πάνω στο δυναμικό (1.39) δεν έχει καμιά πιθανότητα να ανακλαστεί!

Σημειώστε ακόμα ότι από τις (1.43) έπεται αμέσως(*) ότι το πλάτος διέλευσης $t(k)$ θα ισούται με

$$t(k) = \frac{ik - \gamma}{ik + \gamma} \tag{1.44}$$

και είναι ένας μιγαδικός αριθμός με απόλυτη τιμή μονάδα, όπως θα έπρεπε να αναμένεται, αφού η πιθανότητα ανάκλασης είναι μηδέν και άρα η πιθανότητα διέλευσης ίση με ένα.

(*) Δεδομένου ότι η λύση σκέδασης –δείτε σχήμα 1.1– έχει συμφωνηθεί να κανονικοποιείται έτσι ώστε το εισερχόμενο κύμα e^{ikx} να έχει συντελεστή μονάδα, η λύση (1.42) θα πρέπει (σύμφωνα με την (1.43), η οποία δίνει $Y_k^{(-)} = (ik+\gamma)e^{ikx}$), να διαιρεθεί με $ik+\gamma$ οπότε ο συντελεστής του διερχόμενου κύματος θα γίνει $(ik - \gamma)/(ik + \gamma)$.

Σημειώστε επίσης ότι η $u = \cosh \gamma x = (e^{\gamma x} + e^{-\gamma x})/2$ δεν είναι η πιο γενική μη μηδενιζόμενη λύση της (1.36) (με $\mu = -\gamma^2$) που μπορούσαμε να έχουμε χρησιμοποιήσει για την εφαρμογή του μετασχηματισμού Darboux. Η πιο γενική τέτοια λύση είναι η(*)

$$u = e^{\gamma x} + ce^{-\gamma x} \qquad (c > 0) \tag{1.45}$$

για την οποία το αντίστοιχο δυναμικό είναι

$$V(x) = -8c\gamma^2 \frac{e^{2\gamma x}}{(e^{2\gamma x} + c)^2} \tag{1.46}$$

και έχει πάλι τη μορφή ενός πηγαδιού, όχι όμως συμμετρικού ως προς την αρχή όπως προηγουμένως. Στην πραγματικότητα το δυναμικό (1.46) δεν είναι παρά μια *μετατοπισμένη μορφή* του δυναμικού (1.39), όπως μπορείτε εύκολα να επιβεβαιώσετε κάνοντας στην (1.46) την αντικατάσταση $c = \exp(2\gamma a)$ οπότε θα είναι $V(x) = -2\gamma^2/\cosh^2(x - a)$. Ανεξαρτήτως όμως αυτού του ειδικού γεγονότος (όντως ειδικού όπως θα δούμε αργότερα) το σίγουρο είναι ότι η (1.46) περιγράφει μια μονοπαραμετρική οικογένεια δυναμικών που έχουν όλα τον ίδιο συντελεστή ανάκλασης (μηδέν στην περίπτωσή μας) τις ίδιες δέσμιες καταστάσεις (μία στην περίπτωσή μας) και επίσης το ίδιο πλάτος διέλευσης, όπως μπορείτε μόνοι σας να δείτε.

Από φυσικής πλευράς (αλλά όχι μόνο) αυτό είναι ένα πολύ βαθύ αποτέλεσμα παρότι τετριμμένο στην παρούσα ειδική περίπτωση. Σημαίνει ότι η γνώση του πλάτους ανάκλασης $r(k)$ –για κάθε k– αλλά και των «θέσεων» των δέσμιων καταστάσεων δεν αρκεί για τον μονοσήμαντο προσδιορισμό του δυναμικού $v(x)$. Μπορεί να υπάρχουν όχι μόνο ένα αλλά *άπειρα* δυναμικά $v(x)$ που έχουν τα ίδια παραπάνω φυσικά χαρακτηριστικά και όμως δεν ταυτίζονται! Ώστε ευλόγως να τίθεται το ερώτημα: Τι άλλα φασματικά δεδομένα θα πρέπει να γνωρίζουμε ώστε να είναι δυνατός ο μονοσήμαντος προσδιορισμός του σχετικού δυναμικού; Το ερώτημα αυτό βρίσκεται στην καρδιά του λεγόμενου *αντίστροφου προβλήματος σκέδασης* (inverse scattering problem) για το οποίο θα έχουμε πολλά να πούμε στη συνέχεια του βιβλίου.

Θα κλείσουμε τούτη την παράγραφο με κάποια αναγκαία σχόλια.

Σχολιο 1: Κοιταγμένη από μια ορισμένη σκοπιά η βασική ιδιότητα του δυναμικού που κατασκευάσαμε –δηλαδή η μη ανακλαστικότητά του– θα έπρεπε να αναμένεται. Του κληροδοτήθηκε από το αρχικό δυναμικό $v = 0$ που είναι βεβαίως το προφανές (και αυτονόητο) υπόδειγμα ενός υπερδιαπερατού δυναμικού.

(*) Δεν εξετάζουμε την εκδοχή $u = c_1 e^{\gamma x} + c_2 e^{-\gamma x}$ διότι ένας αριθμητικός πολλαπλασιαστικός παράγοντας στη συνάρτηση u δεν παίζει κανένα ρόλο στο μετασχηματισμό Darboux, αφού εκεί μόνο η παράσταση u'/u έχει σημασία.

Σχολιο 2: Η εφαρμογή του μετασχηματισμού Darboux δεν σταματάει βεβαίως στο πρώτο βήμα της. Μπορεί να συνεχίζεται επ' άπειρον θεωρώντας κάθε φορά το δυναμικό που «φτιάξαμε» ως το αρχικό και εφαρμόζοντας εκ νέου την ίδια τεχνική. Όπως θα δούμε στο μεθεπόμενο κεφάλαιο (αλλά και στην παράγραφο που ακολουθεί) η έξυπνη εφαρμογή αυτού του «αλγορίθμου» –ιδιαίτερα στο δεύτερο βήμα του– εμπεριέχει κάποιες πολύ ενδιαφέρουσες δυνατότητες.

4. *Ιδιόμορφα δυναμικά: Μια δεύτερη στοιχειώδης εφαρμογή του μετασχηματισμού Darboux*

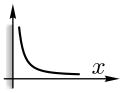
Ας διευκρινήσουμε κατ' αρχάς ότι με τον όρο *ιδιόμορφα δυναμικά* (singular potentials) εννοούμε δυναμικά που απειρίζονται σε ένα ή περισσότερα σημεία του άξονα x. Και, ως συνέπεια αυτού του γεγονότος, η κίνηση του κβαντικού σωματιδίου που υπόκειται σε ένα τέτοιο δυναμικό περιορίζεται στο διάστημα μεταξύ δύο σημείων απειρισμού, αφού το δυναμικό λειτουργεί τότε ως άπειρο φράγμα σε αυτά τα σημεία, που εμποδίζει το σωματίδιο να περάσει από την άλλη μεριά. (Ο καθαρά μαθηματικός μηχανισμός που επιβάλλει αυτό τον εγκλωβισμό θα συζητηθεί λίγο αργότερα.)

Επιλύσιμα ιδιόμορφα δυναμικά μπορούν, βεβαίως, να παραχθούν «αφθόνως» με τον μετασχηματισμό Darboux αρκεί να επιλεγούν λύσεις $u(x)$ της βοηθητικής εξίσωσης Schrödinger $u'' + (\mu - v(x))u = 0$, με ένα ή περισσότερα σημεία μηδενισμού στον άξονα x. Παίρνοντας πάλι ως αφετηρία το μηδενικό δυναμικό $v(x) = 0$, μερικά ενδεικτικά παραδείγματα θα είναι τα εξής:

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1: $\big(v(x) = 0, \mu = 0\big)$

Με $v(x) = 0$ και $\mu = 0$ η βοηθητική εξίσωση Schrödinger $u''+(\mu-v(x))u = 0$ καταλήγει στην $u'' = 0 \Rightarrow u = x$ και επομένως

$$V(x) = 0 - 2\left(\frac{1}{x}\right)' = \frac{2}{x^2} =$$



(1.47)

Βρίσκουμε δηλαδή ένα *απωστικό δυναμικό*, με απειρισμό του τύπου $1/x^2$, που υποχρεώνει το σωματίδιο να κινηθεί μόνο πάνω στον θετικό ημιάξονα x. Το ενεργειακό φάσμα σε ένα τέτοιο δυναμικό είναι βεβαίως συνεχές και θα εκτείνεται στο διάστημα $0 < \lambda < \infty$. Όσο για τις κυματοσυναρτήσεις Y_k που ικανοποιούν και τη συνοριακή συνθήκη $Y_k(0) = 0$ –αυτονόητη από φυσική άποψη αφού το σωματίδιο δεν μπορεί να περάσει στα αρνητικά x– αυτές θα προκύπτουν από τον τύπο

$$Y_k = y_k' - \frac{u'}{u}y_k = y_k' - \frac{1}{x}y_k \tag{1.48}$$

θέτοντας $y_k = \sin kx$, που δεν είναι παρά η λύση της αρχικής εξίσωσης Schrödinger (με $\lambda = k^2$) που ικανοποιεί επίσης της συνθήκη μηδενισμού στο αδιαπέραστο τοίχωμα στο $x = 0$. Θα είναι λοιπόν, βάσει της (1.48),

$$Y_k = k\cos kx - \frac{1}{x}\sin kx.$$

Αν θέλουμε τώρα να προχωρήσουμε τον μετασχηματισμό Darboux ένα βήμα πιο πέρα, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τις λύσεις $\mathcal{U}(x)$ της νέας βοηθητικής εξίσωσης Schrödinger(*)

$$\mathcal{U}'' + \left(\mu - \frac{2}{x^2}\right)\mathcal{U} = 0 \tag{1.49}$$

και να υπολογίσουμε το νέο δυναμικό $U(x)$ βάσει του τύπου

$$U(x) = V(x) - 2\left(\frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}}\right)'. \tag{1.50}$$

Επιλέγοντας πάλι την τιμή $\mu = 0$, η (1.49) γίνεται μια εξίσωση Euler με λύσεις x^2 και x^{-1}, εκ των οποίων η πρώτη –εισαγόμενη στην (1.50) με $V(x) = 2/x^2$– δίνει

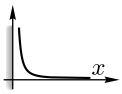
$$U(x) = \frac{6}{x^2} \equiv \frac{2\cdot 3}{x^2} \tag{1.51}$$

και είναι φανερό πλέον από την (1.51) ότι η συνέχιση του αλγορίθμου Darboux πάνω στην ίδια «τροχιά» θα δώσει –ύστερα από n βήματα– το δυναμικό $n(n+1)/x^2$, που δεν είναι παρά το γνωστό από την τριδιάστατη κεντρική κίνηση *φυγόκεντρο δυναμικό* με τις γνωστές κβαντωμένες τιμές της στροφορμής του σωματιδίου. Τέλος, διερευνήστε μόνοι σας τι συμβαίνει αν στο δεύτερο στάδιο εφαρμογής του αλγορίθμου επιλέξουμε τη λύση $\mathcal{U}(x) = x^{-1}$, και βγάλτε τα αναγκαία γενικά συμπεράσματα.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2: $\big(v(x) = 0, \mu < 0\big)$

Μένοντας στο $v(x) = 0$ ως αρχικό δυναμικό, αλλά με $\mu = -\gamma^2$ στη βοηθητική εξίσωση Schrödinger, θα έχουμε τώρα ως λύση με μηδενικά την $u = \sinh\gamma x$, οπότε το νέο ιδιόμορφο δυναμικό θα είναι το

$$V(x) = 0 - 2\left(\frac{\gamma\cosh\gamma x}{\sinh\gamma x}\right)' = \frac{2\gamma^2}{\sinh^2\gamma x} = \tag{1.52}$$



(*) Οποτεδήποτε χρειαστεί να «προχωρήσουμε» τον μετασχηματισμό Darboux ένα ακόμα βήμα, θα χρησιμοποιούμε τα σύμβολα $\mathcal{U}, U$ και Ψ για τη λύση της βοηθητικής εξίσωσης Schrödinger, το δυναμικό και τη νέα κυματοσυνάρτηση αντίστοιχα.

πήραμε δηλαδή ξανά ένα απωστικό δυναμικό με την ίδια συμπεριφορά όπως πριν –δηλαδή $2/x^2$– για μικρά x. Και αν συνεχίσετε τον αλγόριθμο πάνω στην ίδια «τροχιά» –δηλαδή με το ίδιο μ και με τη λύση που έχει κόμβο στο $x = 0-$ θα καταλήξετε, ύστερα από n βήματα, στο δυναμικό $n(n+1)\gamma^2/\sinh^2\gamma x$, που συμπεριφέρεται επίσης ως $n(n+1)/x^2$ για μικρά x. Υπάρχει βεβαίως και η δυνατότητα να επιλέξουμε στο δεύτερο βήμα είτε ένα διαφορετικό μ είτε μια διαφορετική λύση για το ίδιο μ, αλλά τη σχετική διερεύνηση θα την αφήσουμε σ' εσάς. Σκεφτείτε απλώς ότι οι λύσεις της δεύτερης βοηθητικής εξίσωσης Schrödinger θα προκύπτουν επίσης με εφαρμογή του μετασχηματισμού Darboux αν $\mu_2 \neq \mu_1 = \mu$ ή θα κατασκευαστούν χωριστά αν $\mu_2 = \mu_1 = \mu$ λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι τότε η μία λύση θα είναι η $\mathcal{U}_1 = (\sinh\gamma x)^{-1}$ και η δεύτερη θα βρεθεί με εφαρμογή του τύπου $y_2 = y_1\int(W(x)/y_1^2)dx$ που δίνει τη δεύτερη λύση μιας δευτεροτάξιας γραμμικής εξίσωσης όταν η πρώτη είναι ήδη γνωστή. ($W(x)$ είναι, βεβαίως, η βρονσκιανή της εξίσωσης και θα ισούται με μονάδα στην περίπτωσή μας. Γιατί;)

Σημειώστε τέλος ότι και τούτο το δυναμικό –όπως και το προηγούμενο– έχει αποκλειστικά συνεχές φάσμα, με $\lambda = k^2$, και οι σχετικές *λύσεις σκέδασης* –που ικανοποιούν και τη συνοριακή συνθήκη $Y_k(0) = 0-$ θα είναι οι

$$Y_k = y_k' - \frac{\gamma}{\tanh\gamma x}y_k\Big|_{y_k=\sin kx} = k\cos kx - \gamma\frac{\sin kx}{\tanh\gamma x}$$

και πράγματι μηδενίζονται για $x \to 0$, όπως μπορείτε εύκολα να δείτε. Ενώ στην ασυμπτωτική περιοχή $x \to +\infty$ θα έχουμε

$$Y_k^{(+)} = k\cos kx - \gamma\sin kx \equiv \sqrt{k^2+\gamma^2}\,\sin(kx+\delta),$$

όπου

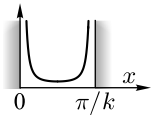
$$\delta = \delta(k) = -\tan^{-1}(k/\gamma)$$

είναι η λεγόμενη *φασική μετατόπιση* (phase shift), η οποία «μετράει» την επίδραση του εξεταζόμενου δυναμικού πάνω σε ένα σωματίδιο που σκεδάζεται από αυτό.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3: $\big(v(x) = 0, \mu > 0\big)$

Θέτοντας τώρα $\mu = k^2$ στη βοηθητική εξίσωση Schrödinger, θα έχουμε ως λύσεις με μηδενικά –και μάλιστα με *άπειρα μηδενικά*– τις $\sin kx$ και $\cos kx$. Επιλέγοντας την πρώτη παίρνουμε

$$V(x) = 0 - 2\left(\frac{k\cos kx}{\sin kx}\right)' = \frac{2k^2}{\sin^2 kx} = \tag{1.53}$$



βρίσκουμε δηλαδή ένα *απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού* στο διάστημα $0 < x < \pi/k$, το οποίο όμως δεν είναι πια «απότομο» όπως το γνωστό –όπου το δυναμικό «πηδάει» ασυνεχώς από το μηδέν στο άπειρο στα σημεία $x = 0$ και $x = L-$ αλλά *ομαλό*, αφού περιγράφεται από μια συνεχή συνάρτηση που πλησιάζει κατά συνεχή τρόπο το άπειρο στα

συγκεκριμένα σημεία. Όπως είναι φανερό από τη μορφή του, το δυναμικό (1.53) θα έχει αποκλειστικά *διάκριτο φάσμα*, με ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις που θα προκύψουν από τον μετασχηματισμό Darboux $Y = y' - (u'/u)y$ αν σκεφτούμε ότι για να ικανοποιεί η $Y(x)$ τις συνοριακές συνθήκες $Y(0) = Y(L) = 0$ θα πρέπει να τις ικανοποιεί επίσης και η $y(x)$. Έτσι οι ιδιοτιμές του νέου (ομαλού) απειρόβαθου πηγαδιού θα είναι όπως και του γνωστού, δηλαδή οι

$$\lambda_n = n^2,$$

όπου δεχτήκαμε για λόγους απλότητας ότι $k = 1 \Rightarrow L = \pi$. Στις ίδιες μονάδες οι ιδιοσυναρτήσεις y_n του αρχικού πηγαδιού θα είναι οι

$$y_n = \sin nx$$

και του νέου οι

$$Y_n = y_n' - \frac{\cos x}{\sin x} y_n = n \cos nx - \frac{\cos x}{\sin x} \sin nx. \tag{1.54}$$

Σημειώστε όμως ότι για $n = 1$ η (1.54) δίνει $Y_1 = 0$ όπως θα έπρεπε να αναμένεται, αφού τότε είναι $\lambda = \mu(= k^2) = 1$ και όπως γνωρίζουμε ο μετασχηματισμός Darboux δεν δίνει τη λύση σε αυτή την περίπτωση. Δεδομένου ακόμα ότι η $1/u$ για $u = \sin x$ δεν έχει τα «προσόντα» μιας δέσμιας κατάστασης, το συμπέρασμα από τα παραπάνω είναι ότι το νέο απειρόβαθο πηγάδι που κατασκευάσαμε έχει όλες τις ιδιοτιμές του παλιού πλην της πρώτης. Θα είναι δηλαδή

$$\lambda_n = n^2 \qquad n \geqq 2 \tag{1.55}$$

Ως έλεγχο αυτού του συμπεράσματος ας δούμε αν όντως ο τύπος (1.54) με $n = 2$ δίνει μια ιδιοσυνάρτηση Y_2 με τα απαιτούμενα χαρακτηριστικά μιας *θεμελιώδους καταστάσεως* όπως θα πρέπει να είναι η $n = 2$ σύμφωνα με την (1.55). Θα έχουμε

$$Y_2 = 2\cos 2x - \frac{\sin x}{\cos x} \sin 2x = 2(\cos^2 x - \sin^2 x) - \frac{\cos x}{\sin x} \cdot 2 \sin x \cos x$$

$$\Rightarrow \quad Y_2 = -2 \sin^2 x \sim \sin^2 x$$

και πράγματι η ιδιοσυνάρτηση αυτή μηδενίζεται *μόνο* στα άκρα $x = 0$ και $x = \pi$ του διαστήματος $0 < x < \pi$ και άρα αντιπροσωπεύει τη θεμελιώδη κατάσταση του νέου πηγαδιού.

Διαπιστώνουμε έτσι –όχι χωρίς ικανοποίηση– ότι ο μετασχηματισμός Darboux μπορεί να μας δώσει «δυναμικά-απογόνους» όχι μόνο της αδέσμευτης ελεύθερης κίνησης (τα υπερδιαπερατά δυναμικά) αλλά και της περιορισμένης σε ένα διάστημα ελεύθερης κίνησης, οπότε τα «δυναμικά-απόγονοι» είναι τα ομαλά απειρόβαθα πηγάδια που βρήκαμε πριν. Και μπορείτε επίσης να δείτε μόνοι σας ότι η συνέχιση του αλγορίθμου Darboux πάνω στην ίδια «τροχιά» μπορεί να δώσει όλη την οικογένεια δυναμικών της μορφής $N(N+1)/\sin^2 x$, όπου το N θα δηλώνει τώρα το πλήθος των δέσμιων καταστάσεων του αρχικού πηγαδιού που έχουν «αφαιρεθεί». Θα είναι δηλαδή πάλι $\lambda_n = n^2$ αλλά με $n \geqq N + 1$. Ενώ τα ίδια αποτελέσματα θα ισχύουν και για την οικογένεια δυναμικών $N(N+1)/\cos^2 x$ που προκύπτουν με επιλογή της λύσης $u = \cos x$. Και τα οποία βέβαια δεν είναι παρά μια μετατοπισμένη (κατά $\pi/2$) μορφή των προηγούμενων.

Στην επόμενη παράγραφο θα έχουμε την ευκαιρία να δούμε ότι όχι μόνο το δυναμικό Bargmann με τυχούσα ισχύ, αλλά και τα ομαλά απειρόβαθα πηγάδια τούτης της παραγράφου είναι ακριβώς επιλύσιμα με τυχούσα ισχύ V_0 και όχι μόνο για τις τιμές $N(N+1)$ που δίνει ο μετασχηματισμός Darboux. Και θα επιβεβαιωθεί έτσι κάτι που ήδη υποψιάζεται ο αναγνώστης. Ότι ο μετασχηματισμός Darboux παράγει δυναμικά με κάποιες πολύ ειδικές ιδιότητες. Ποιες να είναι άραγε αυτές στην τωρινή περίπτωση;

5. *Τα «αρχικά» επιλύσιμα δυναμικά. Ο μετασχηματισμός Liouville*

Το αυτονόητο ερώτημα που τίθεται από τα προηγούμενα είναι βεβαίως τούτο. Ποια είναι τα «δυναμικά εκκίνησης» για την εφαρμογή του *αλγορίθμου Darboux*; (*) Δηλαδή, ποια είναι τα αρχικά επιλύσιμα δυναμικά επί των οποίων θα εφαρμοστεί ο αλγόριθμος για να παράξει νέα; Από την πλευρά ενός μαθηματικού μπορεί να τεθεί και ένα άλλο ερώτημα: Γιατί θα πρέπει να μας απασχολήσει τόσο πολύ η εξίσωση Schrödinger; Πέραν των εφαρμογών της, έχει κάτι το ειδικό ως καθαρά μαθηματική εξίσωση ώστε να αξίζει να προσελκύσει την προσοχή μας και από μαθηματικής σκοπιάς; Παραδόξως οι απαντήσεις και στα δύο αυτά ερωτήματα είναι αλληλένδετες. Αρχίζοντας με το δεύτερο ερώτημα θα δείξουμε αμέσως ότι:

ΘΕΩΡΗΜΑ: *Κάθε εξίσωση ιδιοτιμών δεύτερης τάξης –δηλαδή κάθε εξίσωση της μορφής–*

$$Ly = \lambda y : L = a(x)D^2 + b(x)D + c(x) \tag{1.56}$$

μπορεί πάντα να αναχθεί στην εξίσωση Schrödinger

$$y'' + \big(\lambda - v(x)\big)y = 0 \tag{1.57}$$

για κάποιο κατάλληλο δυναμικό $v(x)$.

Η απόδειξη είναι πολύ απλή. Πηγαίνοντας όλους τους όρους στο πρώτο μέλος και διαιρώντας με τον συντελεστή $a(x)$ της δευτέρας παραγώγου, η (1.56) γράφεται στην ισοδύναμη μορφή

$$y'' + P(x)y' + \big(Q_0(x) + \lambda Q_1(x)\big)y = 0, \tag{1.58}$$

όπου $P(x) = b(x)/a(x)$, $Q_0(x) = c(x)/a(x)$ και $Q_1(x) = -1/a(x)$. Όμως η (1.58) μετατρέπεται αμέσως στην κανονική μορφή

$$Y'' + I(x,\lambda)Y = 0 \tag{1.59}$$

(*) Αυτή θα είναι στο εξής μια εναλλακτική ονομασία του *μετασχηματισμού Darboux* η οποία λαμβάνει υπ' όψιν και το γεγονός ότι πρόκειται στην ουσία για μια αλγοριθμική διαδικασία που μπορεί να εφαρμοστεί «κατ' εξακολούθησιν».

με το γνωστό μετασχηματισμό $y = gY$, όπου $g = \exp(-\frac{1}{2}\int P(x)dx)$ και

$$I(x,\lambda) = \lambda Q_1 + Q_0 - \frac{1}{2}P' - \frac{1}{4}P^2. \tag{1.60}$$

Έτσι η (1.56) παίρνει τελικά τη λεγόμενη *μορφή Liouville*

$$y'' + \big(\lambda w - v(x)\big)y = 0, \tag{1.61}$$

που είναι όπως μια εξίσωση Schrödinger αλλά με την ιδιοτιμή λ να έχει πολλαπλασιαστεί με μια *συνάρτηση βάρους* $w(x)$ που αποκαλείται έτσι διότι εμφανίζεται στο εσωτερικό γινόμενο των ιδιοσυναρτήσεων, το οποίο, αντί της συνήθους μορφής $\int y_n^* y_m dx$, γράφεται τώρα ως $\int w(x) y_n^* y_m dx$.(*) Σύμφωνα με την (1.60) θα είναι λοιπόν

$$w(x) = Q_1, \qquad v(x) = \frac{1}{2}P' + \frac{1}{4}P^2 - Q_0. \tag{1.62}$$

Το τελευταίο βήμα είναι να δείξουμε ότι μια εξίσωση τύπου Liouville, όπως η (1.61), μπορεί να αναχθεί στην εξίσωση Schrödinger, δηλαδή πάλι σε μια εξίσωση τύπου Liouville αλλά με $w = 1$. Γι' αυτό το σκοπό δεν έχουμε παρά να εφαρμόσουμε τον μετασχηματισμό της § 1 (εξ. (1.10)-(1.14))

$$y'' + qy = 0 \xrightarrow{Y(t)=y(x(t))/\sqrt{\dot{x}(t)}} \ddot{Y} + Q(t)Y = 0, \tag{1.63}$$

όπου $Q(t) = q\dot{x}^2 + \{x,t\}$ με $\{x,t\}$ όπως στην (1.14). Έτσι θα έχουμε

$$\ddot{Y} + \big((\lambda w - v)\dot{x}^2 + \{x,t\}\big)Y = 0, \tag{1.64}$$

οπότε αν η συνάρτηση μετασχηματισμού $x(t)$ εκλεγεί έτσι ώστε

$$w\dot{x}^2 = 1 \;\Rightarrow\; \frac{dt}{dx} = \sqrt{w(x)} \;\Rightarrow\; t(x) = \int \sqrt{w(x)}\,dx, \tag{1.65}$$

τότε η (1.64) θα γράφεται ως

$$\ddot{Y} + \big(\lambda - V(t)\big)Y = 0, \tag{1.66}$$

(*) Και βέβαια ως προς αυτό το εσωτερικό γινόμενο οι ιδιοσυναρτήσεις της (1.61) που ικανοποιούν κάποιες κλάσεις συνοριακών συνθηκών –π.χ. τις $y(a) = y(b) = 0$– είναι *ορθογώνιες*. Είναι δηλαδή

$$(y_n, y_m) = \int_n^b w(x) y_n^*(x) y_m(x)\,dx = 0$$

όπου y_n και y_m οι λύσεις της (1.61) που αντιστοιχούν στις διαφορετικές ιδιοτιμές λ_n και λ_m.

δηλαδή ως μια εξίσωση Schrödinger ως προς τη μεταβλητή t και με ένα νέο δυναμικό $V(t)$ ίσο με

$$V(t) = \left.\frac{v(x)}{w(x)}\right|_{x=x(t)} - \{x,t\} \tag{1.67}$$

που γράφεται επίσης ως

$$V(t) = \left(\frac{v(x) - \{t,x\}}{w(x)}\right)_{x=x(t)} \tag{1.68}$$

αν ληφθεί υπ' όψιν ότι (δείξτε το)

$$\{x,t\} = \frac{\{t,x\}}{t'^2} = \frac{\{t,x\}}{w(x)}. \tag{1.69}$$

Δείξαμε λοιπόν ότι πράγματι κάθε εξίσωση ιδιοτιμών της γενικής μορφής $Ly = \lambda y$ –όπου L ένας τυχών δευτεροτάξιος διαφορικός τελεστής– μπορεί να αναχθεί στην εξίσωση Schrödinger η οποία αποκτά έτσι και ένα καθαρά μαθηματικό περιεχόμενο. *Είναι η θεμελιώδης εξίσωση του προβλήματος ιδιοτιμών δευτέρας τάξεως.* Ή διαφορετικά: *Είναι η κανονική μορφή του προβλήματος ιδιοτιμών δευτέρας τάξεως.*

Για προφανείς λόγους ο μετασχηματισμός που μας οδήγησε στο παραπάνω αποτέλεσμα –που είναι ξανά μια μετάβαση από μια κανονική μορφή σε μια άλλη (τύπος (1.63))– θα αποκαλείται στο εξής (για λόγους εύκολης συνεννόησης) *μετασχηματισμός Liouville* και θα αποτελέσει –μαζί με τον *μετασχηματισμό Darboux*– ένα από τα βασικά μας εργαλεία για την ακριβή επίλυση, ή τη μελέτη, της εξισώσεως Schrödinger.

Για τη χρήση του μετασχηματισμού Liouville ως εργαλείου επίλυσης, η βασική ιδέα είναι πολύ απλή. Από κάθε ακριβώς επιλύσιμη εξίσωση της μορφής (1.61) που συμβαίνει να γνωρίζουμε, να δημιουργούμε μια ακριβώς επιλύσιμη εξίσωση Schrödinger –δηλαδή ένα ακριβώς επιλύσιμο δυναμικό– χρησιμοποιώντας αυτό το μετασχηματισμό. Μερικά παραδείγματα θα σας πείσουν πόσο «παραγωγική» μπορεί να είναι αυτή η ιδέα.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1: Ξεκινάμε από την εξίσωση

$$y'' + \left(A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}\right) y = 0 \tag{1.70}$$

που γνωρίζουμε ότι είναι ακριβώς επιλύσιμη, αφού πρόκειται για την εξίσωση Schrödinger

$$y'' + \left(\lambda - \left(-\frac{g}{x} + \frac{G}{x^2}\right)\right) y = 0 \tag{1.71}$$

για το δυναμικό Coulomb $(-g/x)$ σε συνδυασμό με τον φυγόκεντρο όρο (G/x^2) αλλά με τυχούσα ισχύ G αντί της συνήθους έκφρασης $\hbar^2\ell(\ell+1)/2m$ που εμφανίζεται στην ακτινική εξίσωση του γνωστού τριδιάστατου προβλήματος (βλ., π.χ., Σ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική* Ι, σελ. 382). Και δεδομένου ότι οι παράμετροι λ, g και G στην (1.71) είναι κατ' αρχήν αυθαίρετες, η εξίσωση (1.70) είναι ακριβώς επιλύσιμη για κάθε δυνατή τιμή των A, B και C.(*)

Ένα παράδειγμα εφαρμογής του μετασχηματισμού Liouville στην (1.70) είναι να την γράψουμε ως

$$y'' + \left(\frac{\lambda}{x^2} + A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}\right) y = 0 \tag{1.72}$$

που είναι, βέβαια, η ίδια με την (1.70) αφού ο πρώτος και ο τελευταίος όρος μέσα στην παρένθεση αθροίζονται στον $(\lambda + C)/x^2$ που είναι ξανά ο αρχικός όρος, εφόσον το $\lambda + C$ είναι πάλι μια αυθαίρετη σταθερά.

Με $w(x) = 1/x^2$ θα έχουμε

$$t = \int \sqrt{w(x)}\, dx = \int \frac{dx}{x} = \ln x \;\Rightarrow\; x = e^t \;\Rightarrow\; \{x, t\} = -1/4$$

και επομένως (αγνοώντας πρόσημα –αφού οι εμφανιζόμενες παράμετροι είναι αυθαίρετες– και προσθετικές σταθερές που δεν έχουν φυσική σημασία) θα έχουμε

$$V(t) = \left.\frac{A + \dfrac{B}{x} + \dfrac{C}{x^2}}{1/x^2}\right|_{x=e^t} - \{x, t\} = Ae^{2t} + Be^t$$

και αν επανέλθουμε σε φυσικό συμβολισμό για τη μαθηματική μεταβλητή t(†) –την πούμε x αντί t– παίρνουμε τελικά ως επιλύσιμο δυναμικό το λεγόμενο *δυναμικό Morse*

$$V(x) = Ae^{-2\lambda x} + Be^{-\lambda x}, \tag{1.73}$$

όπου κάναμε επιπλέον και την ανακλιμάκωση $x \to \lambda x$ η οποία σίγουρα δεν επηρεάζει την επιλυσιμότητα, αφού είναι πρακτικά ισοδύναμη με απλή αλλαγή μονάδων.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2: (Χωρίς λόγια!)

εξίσωση εκκίνησης: $y'' + \left(A + \dfrac{B}{x} + \dfrac{C}{x^2}\right) y = 0 \;\Rightarrow$

(*) Όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, η ακριβής επιλυσιμότητα της (1.70) θα είναι προφανής και χωρίς καμιά προηγούμενη σχετική γνώση.

(†) Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να έχουμε αποκαλέσει τη μεταβλητή της αρχικής εξίσωσης ως t και τη νέα ως x αλλά αυτές είναι διαδικαστικές λεπτομέρειες χωρίς ουσιώδες περιεχόμενο.

εξίσωση τύπου Liouville: $y'' + \left(\frac{\lambda}{x} + A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}\right) y = 0 \;\Rightarrow$

$$\Rightarrow\; w(x) = \frac{1}{x} \;\Rightarrow\; t = \int \frac{dx}{\sqrt{x}} \sim x^{1/2} \;\Rightarrow\; x = t^2$$

$$\Rightarrow\; \{x,t\} = \frac{1}{2}\left(\frac{\ddot{x}}{\dot{x}}\right)^{\cdot} - \frac{1}{4}\left(\frac{\ddot{x}}{\dot{x}}\right)^2 = -\frac{3}{4t^2}$$

$$\Rightarrow\; V(t) = \left.\frac{A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}}{(1/x)}\right|_{x=t^2} - \{x,t\}$$

$$= At^2 + \frac{B}{t^2} + \text{σταθερά}$$

$$\Rightarrow\; V(x) = Ax^2 + \frac{B}{x^2} \tag{1.74}$$

όπου στα παραπάνω υιοθετήσαμε μια σειρά αυτονόητων απλοποιήσεων και συμβάσεων όπως, π.χ., το να αγνοούμε τον τυχόν αριθμητικό συντελεστή στη σχέση του t με το x ή αντίστροφα και επίσης να μετονομάζουμε συνεχώς (επί το κομψότερο) τις σταθερές A, B, C εφόσον είναι αυθαίρετες, ή να αγνοούμε προσθετικές σταθερές στην έκφραση του τελικού δυναμικού που δεν έχουν φυσική (ή άλλη) σημασία. Το αποτέλεσμα (1.74) είναι, βέβαια, πολύ αξιομνημόνευτο. Πρόκειται για τον αρμονικό ταλαντωτή με τον γνωστό κεντρόφυγο όρο. Και προήλθε βεβαίως από το δυναμικό Coulomb μέσω του μετασχηματισμού Liouville. Φτάσαμε έτσι στο πολύ ενδιαφέρον συμπέρασμα ότι τα δυναμικά Coulomb και αρμονικού ταλαντωτή είναι διασυνδεόμενα –δηλαδή μπορούν να απεικονιστούν το ένα στο άλλο– και άρα οι λύσεις του ενός μπορούν να εκφραστούν μέσω των λύσεων του άλλου. Το οποίο σημαίνει, μεταξύ άλλων, ότι τα σχετικά πολυώνυμα Laguerre και Hermite συνδέονται μεταξύ τους με τον τρόπο που υποδεικνύουν οι παραπάνω πράξεις. Ας μην εκπλαγεί λοιπόν ο αναγνώστης αν συναντήσει «διασυνδέσεις» τέτοιου τύπου στη βιβλιογραφία. Σύμφωνα με τα παραπάνω θα πρέπει να τις περιμένει.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3: (Πάλι με την ίδια αρχική εξίσωση.)

εξίσωση εκκίνησης: $y'' + \left(A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}\right) y = 0 \;\Rightarrow$

εξίσωση τύπου Liouville: $y'' + \left(\lambda\left(1 + \frac{1}{x^2}\right) + A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2}\right) y = 0$

$$\Rightarrow\; t = \int \sqrt{1 + \frac{1}{x^2}}\, dx = \sqrt{1+x^2} + \ln \frac{x}{1 + \sqrt{1+x^2}} \tag{1.75}$$