1

Θεμελίωση της κβαντομηχανικής

1.1 Γραμμικοί διανυσματικοί χώροι

Όπως έχουμε μάθει στο εισαγωγικό μάθημα Κβαντομηχανικής στο προηγούμενο εξάμηνο, κάθε φυσικό σύστημα στο μικρόκοσμο περιγράφεται από μια μιγαδική συνάρτηση. Η συνάρτηση αυτή έχει όλη την πληροφορία για το φυσικό σύστημα και συνηθίζουμε να τη λέμε «κυματοσυνάρτηση» του συστήματος. Η κυματοσυνάρτηση περιγράφει πλήρως την κατάσταση του φυσικού συστήματος. Ακόμη, είδαμε ότι εάν δύο μιγαδικές συναρτήσεις $\Phi_1,\ \Phi_2$ είναι δυνατές καταστάσεις του συστήματος, τότε και κάθε γραμμικός συνδυασμός τους είναι μια δυνατή κατάσταση του συστήματος.
Τα μετρήσιμα φυσικά μεγέθη εκπροσωπούνται στην Κβαντομηχανική από μαθηματικές εκφράσεις, τους τελεστές. Οι τελεστές αυτοί έχουν σα βασική ιδιότητά τους τη γραμμικότητα.
Ξεκινάμε λοιπόν με τους γραμμικούς διανυσματικούς χώρους.

1.1.1 Ευκλείδειος τριδιάστατος χώρος, Υπόδειγμα ενός Γραμμικού Διανυσματικού χώρου

Ιδιότητες:

(α) Εάν τα διανύσματα $\mathbf{a}$ και $\mathbf{b}$ ανήκουν στον τριδιάστατο ευκλείδειο γραμμικό χώρο $\mathbb{S}$, τότε και το άθροισμά τους $\mathbf{a}+\mathbf{b}$ είναι διάνυσμα του χώρου $\mathbb{S}$.

Γενικότερα κάθε γραμμικός συνδυασμός $c_1\mathbf{a}+c_2\mathbf{b}$ είναι διάνυσμα του χώρου $\mathbb{S}$, όπου c_1, c_2 αυθαίρετοι σταθεροί πραγματικοί αριθμοί.

(β) Κάθε διάνυσμα $\mathbf{a}$ γράφεται στον τριδιάστατο γραμμικό χώρο σαν γραμμικός συνδυασμός τριών μοναδιαίων διανυσμάτων $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ και $\hat{\mathbf{e}}_3$, που λέμε ότι αποτελούν τη βάση του χώρου:

$$\mathbf{a} = a_1\hat{\mathbf{e}}_1 + a_2\hat{\mathbf{e}}_2 + a_3\hat{\mathbf{e}}_3$$

Τα τρία αυτά μοναδιαία διανύσματα τα επιλέγουμε έτσι ώστε να είναι μεταξύ τους κάθετα.

(γ) Το μέτρο του διανύσματος $\mathbf{a}$ δίνεται στον ευκλείδειο γραμμικό χώρο από τη σχέση:

$$|\mathbf{a}| = \left(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2\right)^{1/2}$$

(δ) Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων είναι ένας πραγματικός αριθμός και δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}|\,|\mathbf{b}|\cos\theta$$

όπου θ είναι η γωνία μεταξύ των δύο διανυσμάτων.

Για $\theta = \pi/2 \Rightarrow \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = 0 \Rightarrow$ ορθογώνια διανύσματα

(ε) Διανύσματα βάσης $\hat{\mathbf{e}}_k$

$$\hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij}$$

όπου δ_{ij} το σύμβολο του Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & = \text{ για } i \neq j \\ 1, & = \text{ για } i = j \end{cases}$$

Τα $\hat{\mathbf{e}}_k$ είναι ορθοκανονικά διανύσματα. Για δύο διανύσματα $\mathbf{a} = a_1\hat{\mathbf{e}}_1 + a_2\hat{\mathbf{e}}_2 + a_3\hat{\mathbf{e}}_3$, $\mathbf{b} = b_1\hat{\mathbf{e}}_1 + b_2\hat{\mathbf{e}}_2 + b_3\hat{\mathbf{e}}_3$ ισχύει:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$$

χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των ορθοκανονικών διανυσμάτων βάσης.

Κάθε σύνολο τριών γραμμικά ανεξάρτητων διανυσμάτων μπορεί να αποτελέσει βάση για τον τριδιάστατο γραμμικό χώρο.

1.1.2 Ο Διανυσματικός Χώρος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων

Υπάρχουν και γραμμικοί χώροι απείρων διαστάσεων. Τα διανύσματα του Ευκλείδειου χώρου αντικαθίστανται από μιγαδικές συναρτήσεις $\Psi_n(x)$ και δίνουν έναν **συναρτησιακό χώρο**, χώρος Hilbert.
Τις **συναρτήσεις βάσης** αποτελεί κάθε πλήρης ομάδα ορθοκανονικών συναρτήσεων.

Ιδιότητες:

(α) Γραμμικότητα (είναι μια ιδιότητα που επιβάλλεται στο χώρο από τα πειράματα).

Εάν $\Phi_1(x)$ και $\Phi_2(x)$ ανήκουν στο χώρο S, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός

$$\Phi(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x)$$

ανήκει επίσης στο χώρο S, με c_1, c_2, μιγαδικές σταθερές.

(β) Εσωτερικό γινόμενο

$$\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle \underset{\text{ορισμός}}{=} \int \Phi_1^\star(x)\Phi_2(x)\,\mathrm{d}x$$

όπου $\Phi_1^\star(x)$ είναι η μιγαδική συζυγής της $\Phi_1(x)$,

και $\mathrm{d}x = \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3$, εάν οι συναρτήσεις ορίζονται στον τριδιάστατο Ευκλείδειο χώρο $\mathbb{R}^3$.

Το εσωτερικό γινόμενο έχει όλες τις καλές ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου:

- $\langle \Phi_1, \Phi_1 \rangle \geq 0$,
- $\langle \Phi_1, a\Phi_2 \rangle = a\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle$
- $\langle \Phi_1, \Phi_2 + \Phi_3 \rangle = \langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle + \langle \Phi_1, \Phi_3 \rangle$

Οι κυματοσυναρτήσεις του γραμμικού χώρου είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, δηλαδή $\langle \Phi, \Phi \rangle < \infty$. Εάν $\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle = 0$ λέμε ότι οι δύο συναρτήσεις είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.

(γ) Απεικόνιση του $\mathbb{S} \to \mathbb{S}$ μέσω μιας μαθηματικής πράξης, δηλαδή ενός τελεστή $\hat{A}$:

$$\hat{A}\Phi \to \Phi', \quad \Phi \in \mathbb{S} \Rightarrow \Phi' \in \mathbb{S}$$

$$\hat{A} = A\left(x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \ldots\right)$$

(δ) Γραμμικότητα των τελεστών της Κβαντομηχανικής

$$\hat{A}(c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 + c_3\Phi_3) = c_1(\hat{A}\Phi_1) + c_2(\hat{A}\Phi_2) + c_3(\hat{A}\Phi_3)$$

1.2 Τελεστές

(1) Πρόσθεση τελεστών που δρουν σε χώρο Hilbert

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}, \quad \text{δηλαδή}: \hat{C}\Phi = (\hat{A} + \hat{B})\Phi = \hat{A}\Phi + \hat{B}\Phi$$

(2) Πολλαπλασιασμός Τελεστών

$$\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B} \Rightarrow \hat{C}\Phi = \hat{A}(\hat{B}\Phi), \ \forall\Phi \in \mathbb{S}$$

(3) Μεταθέτες Τελεστών

$$\hat{D} = [\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow \hat{D}\Phi = \hat{A}(\hat{B}\Phi) - \hat{B}(\hat{A}\Phi)$$

(γενικά, $\hat{D} \neq 0$)

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}$$

Εάν για δύο τελεστές ο μεταθέτης τους είναι μηδέν, λέμε ότι οι δύο τελεστές μετατίθενται.

Παράδειγμα

$$\hat{A} = x, \quad \hat{B} = \frac{\partial}{\partial x},$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]\Phi = x\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}(x\Phi) = -\Phi$$

$$\Rightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -1$$

Οι τελεστές αυτοί δε μετατίθενται.

---

(4) **Αντίστροφος τελεστής** $\hat{A}^{-1}$

$$\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} = 1$$

$$(\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1})\Phi = \hat{A}(\hat{A}^{-1}\Phi) = \Phi = \hat{A}^{-1}(\hat{A}\Phi)$$

(5) **Ιδιοσυναρτήσεις** και **ιδιοτιμές** Τελεστή

Λύση της εξίσωσης $\hat{A}\Phi = a\Phi$ για έναν τελεστή $\hat{A}$.

Το Φ ονομάζεται **Ιδιοσυνάρτηση** του $\hat{A}$ και το a ονομάζεται **ιδιοτιμή** του $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στην Ιδιοσυνάρτηση Φ.

Εάν οι Ιδιοτιμές είναι ένα διακριτό σύνολο, τότε το αριθμούμε και το συμβολίζουμε με a_n, οπότε

$$\Phi_n : \ \hat{A}\Phi_n = a_n\Phi_n$$

Εάν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ένας διαφορικός τελεστής τότε η **εξίσωση των ιδιοτιμών** αντιστοιχεί στη λύση μιας διαφορικής εξίσωσης.

Εάν σε μια ιδιοτιμή a του τελεστή $\hat{A}$ αντιστοιχούν δύο ή περισσότερες ιδιοσυναρτήσεις, γραμμικά ανεξάρτητες, οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές λέγονται **εκφυλισμένες**.

Οι συναρτήσεις $\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_k$ λέγονται **Γραμμικά Ανεξάρτητες** εάν, δοθείσης της

$$\beta_1\Phi_1 + \beta_2\Phi_2 + \ldots + \beta_k\Phi_k = 0$$

ισχύει

$$\beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_k = 0$$

(6) **Ερμιτιανός Τελεστής** $\hat{A}$ (ορισμός)

$$\int \Phi^\star(x)\Big(\hat{A}\Psi(x)\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}\Phi(x)\Big)^\star \Psi(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall\Phi, \Psi \in \mathbb{S}$$

αλλιώς από το συμβολισμό του εσωτερικού γινομένου γράφουμε:

$$\langle\Phi, \hat{A}\Psi\rangle = \langle\hat{A}\Phi, \Psi\rangle$$

(7) Συζυγής Τελεστής του $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}^\dagger$

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

$$\langle\Phi, \hat{A}\Psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\Phi, \Psi\rangle$$

Εφαρμογή: Υπολογισμός του $(\hat{A}\hat{B})^\dagger$.

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\hat{B}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \hat{B}\Psi\,\mathrm{d}x = \int \Big(\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

Όμως ισχύει επίσης:

$$\int \Phi^\star \Big(\hat{A}\hat{B}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = \int \Big((\hat{A}\hat{B})^\dagger\Phi\Big)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

επομένως

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$$

Εφαρμογή: $(A^\dagger)^\dagger = A$

$$\begin{aligned}\int \Phi^\star(A\Psi)\mathrm{d}x &= \int (A^\dagger\Phi)^\star\Psi\mathrm{d}x = \left(\int (A^\dagger\Phi)\Psi^\star\mathrm{d}x\right)^\star = \left(\int \Psi^\star(A^\dagger\Phi)\mathrm{d}x\right)^\star \\ &= \left(\int \Big((A^\dagger)^\dagger\Psi\Big)^\star \Phi\mathrm{d}x\right)^\star = \int \Phi^\star(A^\dagger)^\dagger\Psi\mathrm{d}x,\ \forall\Phi,\Psi \\ &\Rightarrow A = (A^\dagger)^\dagger\end{aligned}$$

(8) Αυτοσυζυγής Τελεστής είναι αυτός για τον οποίο ισχύει

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Ο αυτοσυζυγής τελεστής είναι και ερμιτιανός.

(9) Γενικά για μια συνάρτηση $g(\hat{A})$ ενός τελεστή $\hat{A}$ ισχύει:

Παίρνουμε τη συνάρτηση $g(x)$ και την αναπτύσουμε κατά Taylor γύρω από το μηδέν:

$$g(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) x^n$$

$$\Rightarrow g(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) \hat{A}^n$$

Παράδειγμα: Να υπολογιστεί ο τελεστής της μετάθεσης $T(\alpha)$ που ορίζεται από τη σχέση

$$T(\alpha)\Psi(x) = \Psi(x+\alpha)$$

Λύση:

$$\begin{aligned}\Psi(x+\alpha) &= \Psi(x) + \Psi'(x)\alpha + \frac{1}{2}\Psi''(x)\alpha^2 + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n\Psi(x)}{\mathrm{d}x^n} \\ &= e^{\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\Psi(x) = T(\alpha)\Psi(x)\end{aligned}$$

$$\Rightarrow T(\alpha) = e^{\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} \qquad \text{μετάθεση κατά } \alpha.$$

1.2.1 Ιδιότητες των Ερμιτιανών Τελεστών

(α) Το άθροισμα δύο Ερμιτιανών Τελεστών είναι Ερμιτιανός Τελεστής.

(β) Εάν οι δύο Ερμιτιανοί Τελεστές μετατίθενται τότε το γινόμενό τους είναι Ερμιτιανός Τελεστής

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$$

(γ) Οι ιδιοτιμές ενός Ερμιτιανού Τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί.

$$\int \Phi_n^\star \hat{A}\Phi_n \,\mathrm{d}x = a_n \int \Phi_n^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x$$

Ακόμη,

$$\begin{aligned}\int \Phi_n^\star \hat{A}\Phi_n \,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi_n)^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = \int (\alpha_n\Phi_n)^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x \\ = \alpha_n^\star \int \Phi_n^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x \\ \Rightarrow \alpha_n = \alpha_n^\star\end{aligned}$$

(δ) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός Ερμιτιανού Τελεστή είναι ορθοκανονικές.

$$\int \Phi_m^\star \hat{A}\Phi_n \,\mathrm{d}x = a_n \int \Phi_m^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x$$

$$\int \Phi_m^\star \hat{A}\Phi_n \,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi_m)^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = \alpha_m^\star \int \Phi_m^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x$$

αλλά $\alpha_m^\star = \alpha_m$
επομένως

$$(\alpha_n - \alpha_m) \int \Phi_m^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = 0$$

Εάν $a_n \neq a_m$ έχουμε:

$$\int \Phi_m^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = 0$$

Ακόμη η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\Phi = \alpha\Phi$ είναι γραμμική, άρα μπορούμε να πολλαπλασιάσουμε τις Φ κατάλληλα ώστε

$$\int \Phi_n^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow \int \Phi_m^\star \Phi_n \,\mathrm{d}x = \delta_{mn}$$

(ε) Επαλληλία, πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων για τους ερμιτιανούς τελεστές της Κβαντομηχανικής.

Στην Κβαντομηχανική δεχόμαστε ότι:

Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος A ενός φυσικού συστήματος αντιστοιχούμε έναν Ερμιτιανό Τελεστή. Οι ιδιοτιμές του τελεστή συμπίπτουν με όλες τις δυνατές τιμές του A κατά τη μέτρηση. Όλοι οι Ερμιτιανοί Τελεστές που χρησιμοποιούνται στην Κβαντομηχανική έχουν ένα πλήρες σύστημα Ιδιοσυναρτήσεων, δηλαδή $\forall \Phi \in \mathbb{S}$ έχουμε:

$$\Phi = \sum_n c_n \Phi_n,$$

όπου $\hat{A}\Phi_n = \alpha_n\Phi_n$ και $\int \Phi_n^\star \Phi_m \,\mathrm{d}x = \delta_{nm}$.

Υπολογισμός των συντελεστών c_n στο ανάπτυγμα της Φ:

$$\int \Phi_n^\star \Phi \,\mathrm{d}x = \sum_m c_m \int \Phi_n^\star \Phi_m \,\mathrm{d}x = \sum_m c_m \delta_{mn}$$

επειδή $\sum_m c_m \delta_{nm} = c_n$

$$\Rightarrow c_n = \int \Phi_n^\star \Phi \,\mathrm{d}x$$

(στ) Η αναμενόμενη (μέση) τιμή ενός ερμιτιανού τελεστή είναι πάντοτε πραγματικός αριθμός.

Έστω

$$\alpha = \int \Phi^\star(\hat{A}\Phi)\,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi)^\star \Phi\,\mathrm{d}x$$

$$\alpha^\star = \left[\int \Phi^\star(\hat{A}\Phi)\,\mathrm{d}x\right]^\star = \int \Phi(\hat{A}\Phi)^\star\,\mathrm{d}x = \alpha$$

Μπορεί να δειχτεί και το **αντίστροφο**:

Εάν η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ ως προς κάθε διάνυσμα του $\mathbb{S}$ είναι πραγματικός αριθμός, τότε ο τελεστής είναι ερμιτιανός.

Απόδειξη. Παίρνουμε δύο συναρτήσεις του $\mathbb{S}$, έστω τις Φ_1 και Φ_2 και φτιάχνουμε την $\Psi = \Phi_1 + \alpha\Phi_2$, με α αυθαίρετο αριθμό.

Η αναμενόμενη τιμή της $\hat{A}$ ως προς την Ψ είναι ένας πραγματικός αριθμός, δηλαδή:

$$\int \Psi^\star \hat{A}\Psi\,\mathrm{d}x = \left(\int \Psi^\star \hat{A}\Psi\right)^\star = \int (\hat{A}\Psi)^\star \Psi\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \int (\Phi_1 + \alpha\Phi_2)^\star \hat{A}(\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\,\mathrm{d}x = \int (\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\left[\hat{A}(\Phi_1 + \alpha\Phi_2)\right]^\star \mathrm{d}x.$$

$$\int \Phi_1^\star \hat{A}\Phi_1\,\mathrm{d}x + \alpha \int \Phi_1^\star \hat{A}\Phi_2\,\mathrm{d}x + \alpha^\star \int \Phi_2^\star \hat{A}\Phi_1\,\mathrm{d}x + |\alpha|^2 \int \Phi_2^\star \hat{A}\Phi_2\,\mathrm{d}x$$

$$= \int \Phi_1(\hat{A}\Phi_1)^\star\,\mathrm{d}x + \alpha \int \Phi_2(\hat{A}\Phi_1)^\star\,\mathrm{d}x + \alpha^\star \int \Phi_1(\hat{A}\Phi_2)^\star\,\mathrm{d}x + |\alpha|^2 \int \Phi_2(\hat{A}\Phi_2)^\star\,\mathrm{d}x$$

Ισχύει για κάθε $\alpha \Rightarrow$

$$\int \Phi_1^\star(\hat{A}\Phi_2)\,\mathrm{d}x = \int (\hat{A}\Phi_2)^\star \Phi_1\,\mathrm{d}x \quad \forall \Phi_1, \Phi_2$$

Επομένως ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. □

1.2.2 Δύο προτάσεις για τη σύνδεση μεταξύ Πειράματος και Θεωρίας

1. Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ που είναι συνάρτηση της θέσης ($\mathbf{r}$) και της ορμής ($\mathbf{p}$) αντιστοιχεί ένας Ερμιτιανός Κβαντικός Τελεστής $\hat{A}(\hat{r}, \hat{p})$ που φτιάχνεται βάζοντας όπου $\hat{r} = \mathbf{r}$ και $\hat{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$.
2. Οι τιμές ενός μετρήσιμου φυσικού μεγέθους $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ ισούνται με τις ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή $\hat{A}(\hat{r}, \hat{p})$, που υπολογίζονται από την αντίστοιχη εξίσωση ιδιοτιμών

$$\hat{A}(\mathbf{r}, -i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

Παράδειγμα 1. Δείξτε ότι ο τελεστής της ορμής $\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ είναι ερμιτιανός στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.

Λύση:

Για να είναι κανονικοποιημένες οι συναρτήσεις πρέπει να τείνουν στο μηδέν για $x \to \pm\infty$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star(\hat{p}_x\Phi_2)\,\mathrm{d}x &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star \frac{\mathrm{d}\Phi_2}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x \\
&= (-i\hbar)\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\Phi_1^\star\Phi_2)\,\mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\Phi_1^\star}{\mathrm{d}x}\Phi_2\,\mathrm{d}x\right)\right] \\
&= (-i\hbar)\left[\Phi_1^\star\Phi_2\right]\Big|_{-\infty}^{+\infty} + (i\hbar)\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\Phi_1}{\mathrm{d}x}\right)^\star \Phi_2\,\mathrm{d}x \\
&= \text{μηδέν } + \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}\Phi_1}{\mathrm{d}x}\right)^\star \Phi_2\,\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{p}_x\Phi_1)^\star \Phi_2\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Θα χρησιμοποιώ πολλές φορές τους τελεστές p_x, p_y, p_z της ορμής χωρίς το σύμβολο ˆ από επάνω.

Παράδειγμα 2. Εάν για το **δυναμικό** (δυναμική ενέργεια) ισχύει $V^\star = V$, τότε ο τελεστής της Ολικής Ενέργειας, δηλαδή η **Χαμιλτονιανή** $\hat{H}$ **του συστήματος είναι ερμιτιανός τελεστής** στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

Ας πάρουμε μόνο την $p_x = -i\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ και $\hat{V} = V(x)$.

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star \hat{H} \Phi_2 \,\mathrm{d}x &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star p_x^2 \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_1^\star V(x) \Phi_2 \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} (p_x \Phi_1)^\star p_x \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} (V(x)\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} (p_x^2 \Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} (V(x)\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{H}\Phi_1)^\star \Phi_2 \,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Όμοια για τα p_y^2 και p_z^2. Ακόμη, $p_x^2 \Phi_2(x) \equiv p_x(p_x \Phi_2)$.
Εάν $\Phi_2 \to 0$ για $x \to \pm\infty$ και το $\mathrm{d}\Phi_2/\mathrm{d}x \to 0$, $x \to \pm\infty$.

1.3 Βασικές Στατιστικές Έννοιες

1.3.1 Μέση τιμή

Έχουμε ένα στατιστικό μέγεθος A που παίρνει διακριτές τιμές $a_1, a_2, \ldots, a_\nu$. Σε μια σειρά μετρήσεων N έχουμε N_1 φορές το $a_1, \ldots, N_\nu$ φορές το a_ν. Η μέση τιμή του A δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \frac{N_1 a_1 + \ldots + N_\nu a_\nu}{N} = a_1 \frac{N_1}{N} + \ldots + a_\nu \frac{N_\nu}{N} \\ &= a_1 f_1 + \ldots + a_\nu f_\nu = \sum_{k=1}^{\nu} a_k f_k\end{aligned}$$

όπου f_k οι συχνότητες εμφάνισης της k τιμής. Αν το $N \to \infty$ τότε $f_k \to P_k$, που είναι η πιθανότητα εμφάνισης της τιμής.

$$\Rightarrow \langle A\rangle = a_1 P_1 + \ldots + a_\nu P_\nu = \sum_{k=1}^{\nu} a_k P_k$$

και

$$\sum_{k=1}^{\nu} P_k = 1$$

Για μια τυχούσα συνάρτηση $G(A)$ ενός στατιστικού μεγέθους A, οι δυνατές τιμές είναι οι $g_\nu = G(a_\nu)$

$$\Rightarrow \langle G(A)\rangle = \sum_{k=1}^{\nu} g_k P_k = \sum_{k=1}^{\nu} G(a_k) P_k$$

1.3.2 Συνεχής Κατανομή, Πυκνότητα Πιθανότητας

Εάν οι τιμές που παίρνει ένα στατιστικό μέγεθος A είναι συνεχείς, τότε ορίζουμε την πιθανότητα να βρεθεί η τιμή του A σε ένα διάστημα απειροστό γύρω από κάποια τιμή a, δηλαδή στο διάστημα

$$\left(a - \frac{da}{2}, a + \frac{da}{2}\right) \text{ ίση με } P(a)da$$

όπου

$$\Rightarrow P(a) = \text{ πυκνότητα πιθανότητας}$$

$$\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a P(a) da$$

$$P(a_1 < a < a_2) = \int_{a_1}^{a_2} P(a)\, da$$

και

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(a)\, da = 1$$

Για μια τυχούσα συνάρτηση $G(A)$ του στατιστικού μεγέθους A:

$$\langle G(A)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G(a) P(a)\, da$$

1.3.3 Διασπορά $(\Delta A)^2$ και Τυπική Απόκλιση ΔA

$$(\Delta A)^2 = \langle \big(A - \langle A\rangle\big)^2 \rangle, \quad \Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle}$$

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a - \langle A\rangle)^2 P(a)\, da \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 P(a)\, da - 2\langle A\rangle \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} a P(a)\, da}_{\langle A\rangle} + \langle A\rangle^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} P(a)\, da}_{=1} \\ &= \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\end{aligned}$$

Για διακριτή κατανομή έχουμε:

$$
\begin{aligned}
(\Delta A)^2 &= \sum_{k=1}^{\nu}(a_k - \langle A\rangle)^2 P(a_k) \\
&= \sum_k a_k^2 P_k - 2\langle A\rangle \sum_k a_k P_k + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2 \\
&= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2
\end{aligned}
$$

Εάν η διασπορά μιας στατιστικής κατανομής είναι μηδέν, τότε η κατανομή αποτελείται από μία μόνο τιμή με πιθανότητα 1. Άρα όλες οι μετρήσεις θα δίνουν σαν αποτέλεσμα αυτή την μοναδική τιμή.

$$(\Delta A)^2 = 0 \Rightarrow a = \langle A\rangle$$

Απόδειξη για διακριτή κατανομή.

$$\sum_{\kappa=1}^{\nu} (a_k - \langle A\rangle)^2 P_\kappa = 0$$

αλλά $P_\kappa \geq 0$ και $(a_\kappa - \langle A\rangle)^2 \geq 0$ οπότε

$$\langle A\rangle = a_{\kappa 0} \quad \text{και} \quad P_{\kappa 0} = 1,\ P_\kappa = 0 \ \text{ για κάθε } k \neq k_0,$$

διότι $\sum_\kappa P_\kappa = 1.$ □

1.3.4 Στατιστικές Ροπές

Στατιστική Ροπή τάξης n (n-οστής τάξης) μιας στατιστικής κατανομής ονομάζουμε τη μέση τιμή της νιοστής δύναμης της στατιστικής μεταβλητής.

$$I_n = \langle A^n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a^n P(a)\, da$$

Ξέροντας τις στατιστικές ροπές I_n ($n = 1, 2, \ldots, \infty$) μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της τυχούσας συνάρτησης $G(A)$ που μπορεί να αναπτυχθεί σε δυναμοσειρά Taylor.
Εάν θεωρήσουμε τη συνάρτηση $F(A, \xi) = e^{i\xi A}$, τότε

$$
\begin{aligned}
f(\xi) = \langle e^{i\xi A}\rangle &= \langle \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!} A^n \rangle \\
&= \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!} \langle A^n\rangle = \sum_n \frac{(i\xi)^n}{n!} I_n
\end{aligned}
$$

Η συνάρτηση $f(\xi)$ ονομάζεται **χαρακτηριστική συνάρτηση** της στατιστικής κατανομής.

$$f(\xi) = \langle e^{i\xi A}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi a} P(a)\, da$$

και

$$P(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi) e^{-i\xi a} \mathrm{d}\xi$$

$$\Rightarrow I_n \to f(\xi) \to P(a)$$

1.4 Εξίσωση του Schrödinger

Ένα σωματίδιο περιγράφεται στην Κβαντομηχανική από μια μιγαδική συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ του χώρου και του χρόνου, που ονομάζεται κυματοπακέτο ή **κυματοσυνάρτηση**.
Αυτή η κυματοσυνάρτηση περιέχει όλη την πληροφορία για το σύστημα.
Η διαφορική εξίσωση που μας δίνει ως λύση την $\Psi(\mathbf{r}, t)$ για ένα σωματίδιο που βρίσκεται υπό την επίδραση δυνάμεων είναι η εξίσωση του Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

Η εξίσωση αυτή δεν είναι συνέπεια κάποιου άλλου φυσικού νόμου. Αυτή η εξίσωση *είναι* ο βασικός φυσικός νόμος.
Παίρνοντας κλασσικά την ολική ενέργεια ενός σώματος, όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, έχουμε:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$$

Παίρνοντας και τον τελεστή της ορμής,

$$\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

έχουμε

$$\hat{H}(\mathbf{r},t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)$$

γενικεύοντας και για χρονικά μεταβαλλόμενες δυνάμεις. Αυτή η έκφραση είναι η Χαμιλτονιανή H του συστήματος. Οπότε η εξίσωση του Schrödinger γράφεται ως εξής:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Μπορούμε να βρούμε μια αντιστοιχία μεταξύ της *ορμής και ενέργειας* ενός σωματιδίου με το *μήκος κύματος και τη συχνότητα* για ένα κύμα, όταν $V(\mathbf{r},t) = 0$:

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}\Psi = E\Psi$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{κλασσικά}$$

Εαν $\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ επίπεδο μονοχρωματικό κύμα,

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \nu = \frac{E}{h}$$

$$\omega = 2\pi\nu \qquad \text{και} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = ik\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = (ik)^2\Psi = -k^2\Psi$$

Συνεπώς για να ικανοποιεί αυτό το κύμα την εξίσωση του Schrödinger έχουμε:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi$$

και επειδή $E = p^2/2m$ κλασσικά, θα έχουμε:

$$p = \hbar k \Rightarrow p = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \qquad \text{Σχέση του De Broglie}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}$$

h είναι η σταθερά του Planck και ισούται με $6,63\times10^{-34}$ Joule · sec.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05\cdot10^{-34}\,\text{Joule}\cdot\text{sec.}$$

Ιστορικά τα πράγματα πηγαίνουν ανάποδα:
De Broglie⇒ σε κάθε σωματίδιο έχουμε

$$\lambda = h/p, \quad \nu = \frac{E}{h} \quad \text{και} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Άρα ποια διαφορική εξίσωση δίνει τη λύση;
Εξίσωση από τον Schrödinger⇒

$$\text{ορμή}\, p = \text{ διαφορικός τελεστής } = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

1.4.1 Λύση της Εξίσωσης του Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \tag{1.1}$$

Η εξίσωση του Schrödinger μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Αναζητούμε λοιπόν λύση της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$$

Τέτοια λύση υπάρχει μόνον όταν $V = V(\mathbf{r})$. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (1.1), όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, βρίσκουμε:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi\right]\Phi = i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}\Psi$$

Διαιρούμε και τα δύο μέλη με τη $\Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$ οπότε παίρνουμε,

$$\underbrace{\frac{\hat{H}\Psi(\mathbf{r})}{\Psi(\mathbf{r})}}_{\substack{\text{συνάρτηση}\\ \text{μόνο των } x,y,z}} = \underbrace{i\hbar\frac{1}{\Phi}\frac{\partial\Phi}{\partial t}}_{\text{συνάρτηση μόνο του } t}$$

Ισχύει η ισότητα για κάθε x, y, z, t. Άρα κάθε όρος είναι ένας σταθερός αριθμός, έστω W. Επομένως παίρνουμε τις σχέσεις:

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\Psi = W\Psi \\ \\ i\hbar\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t} = W\Phi(t) \quad \Rightarrow \quad \Phi(t) = e^{-iWt/\hbar} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iWt/\hbar}$$

Ποια είναι η φυσική σημασία της σταθεράς W; Η W είναι η ενέργεια E του σωματιδίου στην κατάσταση $\Psi(\mathbf{r})$, όπως εύκολα φαίνεται από τα προηγούμενα όταν $V = 0$. Επομένως,

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \tag{1.2}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{1.3}$$

Άρα E είναι μια ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής και $\Psi(\mathbf{r})$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα ή ιδιοσυνάρτηση. Λύνουμε λοιπόν πρώτα την (1.2) και τότε η (1.3) μας δίνει τη χρονική εξάρτηση.

1.4.2 Στατιστική ερμηνεία της Κυματοσυνάρτησης

Όταν κάνουμε μια μέτρηση δε μπορούμε να βρούμε ακριβώς τη θέση x που βρίσκεται το σώμα. Αυτό που μπορούμε να βρούμε είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σώμα σε αυτήν τη θέση, και αυτή η πιθανότητα είναι ανάλογη με την κυματοσυνάρτηση. Όσο μεγαλύτερη η κυματοσυνάρτηση σε ένα σημείο, τόσο μεγαλύτερη η πιθανότητα.

Η κυματοσυνάρτηση εκφράζει ένα **πλάτος πιθανότητας** *(κατά Born), της οποίας το τετράγωνο της απόλυτης τιμής δίνει την* **πυκνότητα της πιθανότητας** *να βρεθεί ένα σύστημα σε μια περιοχή του χώρου, κάποια χρονική στιγμή*

$$P(\mathbf{r},t) = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$$

Η ολική πιθανότητα να βρίσκεται το σωμάτιο τη χρονική στιγμή t κάπου μέσα στο χώρο εκφράζεται από το ολοκλήρωμα

$$C = \int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{d}^3x$$

και αυτή η πιθανότητα πρέπει να είναι μονάδα. Άρα αυτό το ολοκλήρωμα πρέπει να συγκλίνει για κάθε t. Με αυτό τον τρόπο κανονικοποιούμε την κυματοσυνάρτηση ώστε να δίνει πιθανότητα ένα. Συναρτήσεις με αυτή την ιδιότητα ονομάζονται **τετραγωνικά ολοκληρώσιμες**.

Θα δείξουμε τώρα ότι το C είναι ανεξάρτητο του χρόνου (για μία διάσταση μόνο).

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

αλλά

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

και

$$-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = (\hat{H}\Psi)^*$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \qquad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi)^*$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{H}\Psi)^*\Psi\,\mathrm{d}x - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(\hat{H}\Psi)\,\mathrm{d}x$$

Ο τελεστής $\hat{H}$ είναι ερμιτιανός

$$\Rightarrow \int(\hat{H}\Psi)^*\Psi\,\mathrm{d}x = \int \Psi^*(\hat{H}\Psi)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = 0$$

και η ολική πιθανότητα $\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Άρα κανονικοποιώντας για ένα συγκεκριμένο $t = t_0$ ισχύει για κάθε t.

1.4.3 Ιδιότητες των Κυματοσυναρτήσεων

α) Οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r},t)$ που περιγράφουν ένα φυσικό σύστημα σε μια κατάσταση και οι ιδιοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r})$ του τελεστή $\hat{H}$ της ολικής ενέργειας, καθώς και οι πρώτες παράγωγοί τους πρέπει να είναι συνεχείς, μονότιμες και πεπερασμένες σε όλο το χώρο ορισμού των. (Για να είναι δεκτές λύσεις της $\hat{H}\Psi = E\Psi$)
Ακόμη, θέλουμε το

$$\int_V \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{d}^3x$$

να είναι πεπερασμένο. Δηλαδή ο γραμμικός χώρος των κυματοσυναρτήσεων αποτελείται από τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες μιγαδικές συναρτήσεις.
Έστω ότι πάμε σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\mathrm{d}^3x = r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$$

Εάν $|\Psi(r)| \xrightarrow[r\to\infty]{} r^\alpha$ τότε,

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi \xrightarrow[r\to\infty]{} r^{2\alpha}$$

$$\Rightarrow \int \Psi^*\Psi\mathrm{d}^3x \xrightarrow[r\to\infty]{} \int r^{2\alpha+2}\,\mathrm{d}r$$

Για να συγκλίνει αυτό το ολοκλήρωμα θέλουμε

$$2\alpha + 2 < -1 \Rightarrow 2\alpha + 3 < 0$$

$$\Rightarrow \alpha < -\frac{3}{2}$$

Εάν $2\alpha + 2 = -1$ τότε

$$\int \frac{\mathrm{d}r}{r} \simeq \ln r,$$

το οποίο αποκλίνει. Εάν $2\alpha + 2 > -1$ το ολοκλήρωμα δίνει θετική δύναμη του r και αποκλίνει και πάλι.

β) Αρχή της Επαλληλίας: Εάν $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ είναι ιδιοσυνάρτηση του ερμιτιανού τελεστή της ολικής Ενέργειας με ιδιοτιμή E_n, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός των $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ που ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες δίνει μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ που θα μπορούσε να περιγράψει το σύστημα σε μια κατάσταση

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}, t)$$

οι αριθμοί α_n ($0 \leq \alpha_n \leq 1$) εκφράζουν το βαθμό συμμετοχής κάθε Ψ_n στην Ψ. Η ποσότητα $|\alpha_n|^2 = \alpha_n^* \alpha_n$ σχετίζεται με την πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής E_n σε μια μέτρηση του μεγέθους E. Ακόμη,

$$\alpha_n = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x$$

και

$$\sum_n |\alpha_n|^2 = \sum_n \alpha_n^* \alpha_n = 1$$

για να δίνει το $|\Psi|^2$ την πυκνότητα πιθανότητας.
Ισχύει

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_n \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

και

$$\int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^3 x = \delta_{nm}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x &= \sum_m \alpha_m \int \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^3 x e^{-i(E_m - E_n)/\hbar} \\ &= \sum_m \alpha_m \delta_{nm} e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} = \alpha_n \end{aligned}$$

εφόσον η $\Psi(\mathbf{r}, t)$ είναι κυματοσυνάρτηση ενός φυσικού συστήματος, απαιτούμε

$$\int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \, \mathrm{d}^3 x = 1$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 1 = \int_V \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}^3 x &= \sum_n \sum_m \alpha_n^* \alpha_m \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(r) \Psi_m(r) e^{-i(E_m - E_n)t} \, \mathrm{d}^3 x \\ &= \sum_n \sum_m \alpha_n^* \alpha_m \delta_{nm} e^{-i(\Delta E_{nm})t} \\ &= \sum_n \alpha_n^* \alpha_n \end{aligned}$$

Η $\Psi(\mathbf{r}, t)$, που είναι γραμμική επαλληλία των Ψ_n, ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger. Πράγματι:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_n \alpha_n (i\hbar) \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \sum_n \alpha_n \hat{H} \Psi_n = \hat{H} \Psi$$

Οι αριθμοί α_n είναι σταθεροί στο χρόνο και μπορούν να υπολογιστούν εάν ξέρουμε τη συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ για μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή t_0, έστω $t_0 = 0$

$$\Rightarrow \alpha_n = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, 0) \, \mathrm{d}^3 x$$

Χρονική Εξέλιξη Κυματοσυνάρτησης

Εάν ξέρουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},0)$, μπορούμε να ορίσουμε έναν τελεστή $\hat{S}(t)$ έτσι ώστε

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{S}(t)\Psi(\mathbf{r},0)$$

Η Ψ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger:

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},0) = \hat{H}\hat{S}(t)\Psi(\mathbf{r},0)$$

$$\Rightarrow \left[i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t} - \hat{H}\hat{S}\right]\Psi(\mathbf{r},0) = 0 \quad \forall t \quad \text{και} \quad \forall\Psi$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{S}}{\partial t} = \hat{H}\hat{S}, \quad \text{εάν } \frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$\Rightarrow \hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar},$$

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \sum_n \alpha_n\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r},t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Psi(\mathbf{r},0) = \sum_n \alpha_n e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$= \sum_n \alpha_n\Psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_nt/\hbar}$$

διότι

$$\mathrm{e}^{-i\mathbf{H}t}\Psi_n(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\Psi_n(\mathbf{r})$$

εάν $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$.

γ) Ιδιοκαταστάσεις ή στάσιμες καταστάσεις ενός συστήματος

Έστω η $\Psi_n(\mathbf{r},t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος σε μια κατάσταση με ενέργεια E_n. Η **πυκνότητα πιθανότητας** είναι

$$\Psi_n^*(\mathbf{r},t)\Psi_n(\mathbf{r},t) = \Psi_n^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r})e^{iE_nt/\hbar}e^{-iE_nt/\hbar} = \Psi_n^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r})$$

και είναι **ανεξάρτητη του χρόνου**. Αυτές οι καταστάσεις λέγονται **στάσιμες καταστάσεις**, και αντιστοιχούν σε **σταθερή ενέργεια**.
Εάν όμως έχουμε την κυματοσυνάρτηση του συστήματος να είναι ένας γραμμικός συνδυασμός από $\Psi_n(\mathbf{r},t)$, τότε

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n\Psi_n(\mathbf{r},t)$$

και

$$\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_l^*a_n\Psi_l^*(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r}) + \sum_{\substack{n,l\\n\neq l}} a_n^*a_l\Psi_n^*\Psi_l e^{-i(E_l-E_n)t/\hbar}$$

δηλαδή η πυκνότητα πιθανότητας δεν είναι σταθερή με το χρόνο, και εκτελεί γενικά ταλάντωση με γωνιακή συχνότητα π.χ.

$$\omega_{nl} = \frac{E_n - E_l}{\hbar}$$

ανάμεσα στις Ψ_n, Ψ_l ιδιοκαταστάσεις του συστήματος.

δ) Μέση ή Αναμενόμενη Τιμή

Εφόσον $P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ είναι η πιθανότητα το σωματίδιο να είναι στη θέση x τότε η μέση τιμή της θέσης είναι:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^*(\hat{x}\Psi(x,t))\,\mathrm{d}x$$

όπου $\hat{x}\Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$.

Αυτός ο τύπος ισχύει για κάθε δύναμη του $\hat{x}^n$:

$$\langle x^k \rangle = \int \Psi^*(x,t) x^k \Psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

Γενικεύοντας λοιπόν έχουμε ότι η **μέση τιμή** για κάθε φυσικό μέγεθος A που δίνεται από τον τελεστή $\hat{A}$, όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση Ψ, ειναι

$$\langle A \rangle = \int_{\text{όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}^3x$$

και όμοια,

$$\langle A^k \rangle = \int \Psi^* \hat{A}^k \Psi\,\mathrm{d}^3x$$

Άρα ειδικά για την ενέργεια έχουμε, εάν:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r},t), \qquad \hat{H}\Psi_n(\mathbf{r}) = E_n\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi\,\mathrm{d}^3x$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n$$

Εάν $\Phi(\mathbf{r},t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση για έναν ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ, τότε

$$\hat{A}\Phi = \lambda\Phi$$

και η μέση τιμή του $\hat{A}$ είναι:

$$\langle A \rangle = \int \Phi^* \hat{A}\Phi\,\mathrm{d}^3x = \lambda \int \Phi^*\Phi\,\mathrm{d}^3x = \lambda$$

και η διασπορά είναι

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0$$

Άρα η μόνη τιμή που παίρνουμε κατά τη μέτρηση της ποσότητας A είναι η λ.

Εάν $\Phi_n(\mathbf{r},t)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$ και του $\hat{H}$ συγχρόνως, τότε γράφουμε τη λύση του συστήματος $\Psi(\mathbf{r},t)$ σαν επαλληλία των Φ_n και έχουμε:

$$\Psi = \sum_n a_n \Phi_n, \quad a_n \text{ σταθερές στο χρόνο}$$

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x = \sum_n a_n^* a_n \lambda_n$$

ανεξάρτητη του χρόνου. Δηλαδή, $|a_n|^2 = \alpha_n^* a_n = P_n =$ Πιθανότητα να βρούμε την τιμή λ_n για το φυσικό μέγεθος A σε μια μέτρηση.

Το μέγεθος A με μέση τιμή ανεξάρτητη του χρόνου λέμε ότι είναι **διατηρήσιμο μέγεθος**.

Εάν οι ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$ δεν είναι και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$, τότε εάν το σύστημα είναι στην κατάσταση $\Phi(\mathbf{r},t)$ με $\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r},t)$:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

Η μέση τιμή του μεγέθους A είναι:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int \Phi^* \hat{A}\Phi \,\mathrm{d}^3x = \sum_{n,m} a_n^* a_m \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x \\ &= \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar} \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r})\hat{A}\Psi_m(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x\end{aligned}$$

Ορίζουμε $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$. Το

$$A_{nm} = \int_{\text{όγκο}} \Psi_n^*(\mathbf{r})\hat{A}\Psi_m(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x$$

είναι το στοιχείο (n,m) του πίνακα A. Επειδή ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός συνεπάγεται ότι $A_{nm} = A_{mn}^*$.

$$\Rightarrow \langle A\rangle = \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i\omega_{mn}t} A_{nm}$$

είναι χρονικά εξαρτημένη.

$$A_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x, \qquad A_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{A}\Psi_n \,\mathrm{d}^3x$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow (A_{mn})^* &= \left(\int \Psi_m^* (\hat{A}\Psi_n)\,\mathrm{d}^3x\right)^* = \int (\hat{A}\Psi_n)^* \Psi_m \,\mathrm{d}^3x \\ &= \int \Psi_n^* \hat{A}\Psi_m \,\mathrm{d}^3x = A_{nm}\end{aligned}$$

Το ότι ο $\hat{A}$ είναι Ερμιτιανός Τελεστής συνεπάγεται ότι ο $A_{k\lambda}$ είναι Ερμιτιανός Πίνακας.

1.4.4 Εξίσωση του Schrödinger για περισσότερα από ένα σωμάτια

Εάν ένα σύστημα αποτελείται από N σωμάτια με συντεταγμένες $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$ και ορμές $\mathbf{p}_k = (p_{xk}, p_{yk}, p_{zk})$, τότε η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = \sum_{k=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + V(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$$

Αντικαθιστώντας τα φυσικά μεγέθη με τους αντίστοιχους τελεστές θέσης και ορμής έχουμε:

$$\mathbf{p}_k = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial y_k}, \frac{\partial}{\partial z_k}\right)$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{array}{rcl} \hat{H} &=& \displaystyle\sum_{k=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_k}\nabla_k^2 + V(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \\ \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) &=& i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) \end{array}\right\}$$

Η πιθανότητα το σώμα 1 να βρεθεί γύρω από τη θέση $\mathbf{r}_1$, …, το σώμα N να βρεθεί γύρω από τη θέση $\mathbf{r}_N$ είναι:

$$P(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)dV_1 \cdots dV_N = \Psi^*(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t)\mathrm{d}\mathbf{V}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{V} = \mathrm{d}V_1 \cdots \mathrm{d}V_N = \mathrm{d}^3x_1 \cdots \mathrm{d}^3x_N$$

με

$$\begin{gathered}\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) = \Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)\Phi(t) \\ \Rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi \qquad \text{και} \qquad \Phi(t) = e^{-iEt/\hbar}\end{gathered}$$

1.5 Μεταθετικές Ιδιότητες Τελεστών

Ως **Μεταθέτης** δύο τελεστών $\hat{A}, \hat{B}$ έχει οριστεί η σχέση

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Εάν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, λέμε ότι οι δύο **τελεστές μετατίθενται**.

Όταν οι τελεστές δύο μεγεθών A, B μετατίθενται τότε τα δύο αυτά μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα και με απόλυτη ακρίβεια. Τα μεγέθη A, B λέγονται **συμβιβαστά**, αλλιώς εάν $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ λέγονται **ασυμβίβαστα**.

(1) Όταν δύο μεγέθη είναι συμβιβαστά, δηλαδή μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως (και με απόλυτη ακρίβεια) τότε οι τελεστές τους μετατίθενται.

Απόδειξη. Όταν ένα μέγεθος A μετριέται, το σύστημα βρίσκεται μετά τη μέτρηση σε μια ιδιοσυνάρτηση Ψ_k του τελεστή $\hat{A}$:

$$\hat{A}\Psi_k = \alpha_k \Psi_k$$

του τελεστή $\hat{A}$, αλλά τότε η Ψ_k είναι και ιδιοσυνάρτηση του B: $\hat{B}\Psi_k = \beta_k \Psi_k$. Άρα κάθε ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$ είναι και ιδιοσυνάρτηση του $\hat{B}$ και ανάποδα. Άρα,

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_k = \alpha_k \beta_k \Psi_k - \beta_k \alpha_k \Psi_k = 0$$

Κάθε κυματοσυνάρτηση γράφεται σαν επαλληλία των Ψ_k: $\Psi = \sum_k c_k \Psi_k$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi &= \hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) - \hat{B}(\hat{A}\Psi) \\
&= \hat{A}(\sum_k c_k \beta_k \Psi_k) - \hat{B}(\sum_k c_k \alpha_k \Psi_k) \\
&= \sum_k c_k \beta_k \alpha_k \Psi_k - \sum_k c_k \alpha_k \beta_k \Psi_k = 0
\end{aligned}$$

□

(2) Αν οι δύο τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ μετατίθενται και ο ένας, έστω ο $\hat{A}$ έχει μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις, τότε αυτές θα είναι ιδιοσυναρτήσεις και του άλλου, του $\hat{B}$. Άρα τα δύο μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα.

Εάν $\hat{A}\Psi_k = \alpha_k \Psi_k$ μη εκφυλισμένη ιδιοσυνάρτηση, τότε

$$\left.\begin{array}{rcl}
\hat{B}(\hat{A}\Psi_k) &=& \hat{A}(\hat{B}\Psi_k) \\
\hat{B}(\hat{A}\Psi_k) &=& \alpha_k \hat{B}\Psi_k
\end{array}\right\} \Rightarrow \hat{A}(\hat{B}\Psi_k) = \alpha_k(\hat{B}\Psi_k)$$

άρα η συνάρτηση $\Phi = \hat{B}\Psi_k$ ιδιοσυνάρτηση του A με ιδιοτιμή α_k μη εκφυλισμένη. Συνεπάγεται ότι η Φ είναι ανάλογη της Ψ_k και άρα $\Phi = \beta_k \Psi_k$

$$\Rightarrow \hat{B}\Psi_k = \beta_k \Psi_k$$

(3) Αν δύο τελεστές $\hat{A}, \hat{B}$ μετατίθενται και ο ένας από αυτούς έχει εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις, τότε με κατάλληλο γραμμικό συνδυασμό αυτών μπορούμε να κατασκευάσουμε ιδιοσυναρτήσεις του άλλου. Δηλαδή μπορούμε να κατασκευάσουμε κοινές ιδιοσυναρτήσεις και των δύο τελεστών.

Ιδιότητες των μεταθετών

- $[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{B}, \hat{A}] = 0$
- $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$
- $[\hat{A}, \lambda\hat{B} + \mu\hat{C}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] + \mu[\hat{A}, \hat{C}]$

- $[\alpha\hat{A}+\beta\hat{B},\hat{C}] = \alpha[\hat{A},\hat{C}]+\beta[\hat{B},\hat{C}]$
- $$\begin{aligned}[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}\pm\hat{B}\hat{A}\hat{C}\\ &= [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]\end{aligned}$$
- $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}] =? = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\hat{D}+\hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B}+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D}+\hat{C}\hat{A}[\hat{B},\hat{D}]$

Μνημονικός Κανόνας. Παίρνουμε όλους τους δυνατούς μεταθέτες:

$$[\hat{A},\hat{C}],\quad [\hat{A},\hat{D}],\quad [\hat{B},\hat{C}],\quad [\hat{B},\hat{D}]$$

και πολλαπλασιάζουμε τον κάθε μεταθέτη με τους υπόλοιπους τελεστές: Όλους τους «εξ αριστερών» τελεστές και των δύο γινομένων προς τα αριστερά του απλού μεταθέτη και όλους τους «εκ δεξιών» προς τα δεξιά, όπως κατωτέρω:

$$\begin{aligned}[A_1A_2\cdots A_n,\ B_1B_2\cdots B_k] &= \sum_{ij}(A_1\cdots A_{i-1})(B_1\cdots B_{j-1})[A_i,B_j](B_{j+1}\cdots B_k)(A_{i+1}\cdots A_n)\\ &= \sum_{ij}(B_1\cdots B_{j-1})(A_1A_{i-1})[A_iB_j](A_{i+1}\cdots A_n)(B_{j+1}\cdots B_k)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}\hat{E}] = {}&[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\hat{D}\hat{E}+\hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B}\hat{E}+\hat{C}\hat{D}[\hat{A},\hat{E}]\hat{B}\\ &+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D}\hat{E}+\hat{C}\hat{A}[\hat{B},\hat{D}]\hat{E}+\hat{C}\hat{D}\hat{A}[\hat{B},\hat{E}]\end{aligned}$$

Μεταθέτες Φυσικών Μεγεθών

(1) $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar, \qquad [\hat{p},\hat{x}] = -i\hbar$

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}]\Psi(x) &= \hat{x}\hat{p}\Psi(x)-\hat{p}\hat{x}\Psi(x) = -i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}+i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x\Psi)\\ &= \cancel{-i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}}+\cancel{i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}}+i\hbar\Psi\\ &= i\hbar\Psi(x),\quad \forall\Psi(x).\end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}^2] &= \hat{p}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}\\ &= i\hbar\hat{p}+i\hbar\hat{p} = 2i\hbar\hat{p}\\ &= i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{p}^2}{\mathrm{d}\hat{p}}\end{aligned}$$

$$[\hat{x},\hat{p}^k] = -i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{p}^k}{\mathrm{d}\hat{p}} = i\hbar k\hat{p}^{k-1}$$

$$[\hat{x},\hat{A}(\hat{x},\hat{p})] = i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}},$$

απόδειξη με ανάπτυξη του $A(\hat{x},\hat{p})$ σε σειρά Taylor ως προς $\hat{p}$ γύρω από το μηδέν.

(3)

$$\begin{aligned}[\hat{p}, \hat{x}^2] &= \hat{x}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{x} = -2i\hbar\hat{x} \\ &= -i\hbar\frac{\partial \hat{x}^2}{\partial \hat{x}}\end{aligned}$$

$$[\hat{p}, \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})] = -i\hbar\frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{x}}$$

(4) Εξ ορισμού: $[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$

και

$$[x, p_y] = [x, p_z] = 0$$

Όμοια για τις άλλες μεταθέσεις.

(5) $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, τελεστής της Στροφορμής

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} \hat{L}_x &=& \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &=& \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &=& \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y), (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)] \\ &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + 0 + 0 + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z\end{aligned}$$

Όμοια,

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \qquad \text{και} \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

Ορίζουμε το σύμβολο (αντισυμμετρικό τανυστή) των Levi-Civita ϵ_{ijk}

$$\epsilon_{123} = 1$$

$$\epsilon_{\kappa\kappa\lambda} = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ i, j, k = 1, 2, 3 \end{array} \right\}$$

Οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής δε μετατίθενται μεταξύ τους. Άρα δεν έχουν κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων, άρα δε μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως. Η **ολική στροφορμή** είναι:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow [L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= 0 + L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \\ &= -i\hbar\cancel{L_yL_z} - i\hbar\cancel{L_zL_y} + i\hbar\cancel{L_zL_y} + i\hbar\cancel{L_yL_z} = 0 \\ \Rightarrow [L^2, L_k] &= 0, \quad \forall k\end{aligned}$$

Επομένως η στροφορμή και μια συνιστώσα της μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως.

Για κάθε μετρήσιμο διανυσματικό φυσικό μέγεθος $\mathbf{A}$ έχουμε:

$$[L_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k$$

και

$$[L_i, \mathbf{A}^2] = 0.$$

Η γενικευμένη Σχέση Αβεβαιότητας

(1) Ανισότητα του Schwartz

Για κάθε ζευγάρι τετραγωνικά ολοκληρώσιμων μιγαδικών συναρτήσεων ισχύει:

$$\left(\int \Psi^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x\right)\cdot\left(\int \Phi^*(x)\Phi(x)\,\mathrm{d}x\right) \geq \left|\int \Psi^*(x)\Phi(x)\,\mathrm{d}x\right|^2$$

$$\langle\Psi,\Psi\rangle\cdot\langle\Phi,\Phi\rangle \geq |\langle\Psi,\Phi\rangle|^2$$

Απόδειξη.

$$\Psi_1 = \Phi - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi,$$

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi_1,\Psi_1\rangle \geq 0\\
\Rightarrow\ &\langle\Psi_1,\Psi_1\rangle = \int\left(\Phi^\star - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle^\star}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi^\star\right)\left(\Phi - \frac{\langle\Psi,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}\Psi\right)\mathrm{d}x\\
&= \int \Phi^\star\Phi\mathrm{d}x - \langle\Psi,\Phi\rangle^\star\frac{\langle\Psi^\star,\Phi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle} \geq 0\\
\Rightarrow\ &\langle\Phi,\Phi\rangle\langle\Psi,\Psi\rangle \geq \langle\Psi,\Phi\rangle^\star\langle\Psi,\Phi\rangle
\end{aligned}$$

□

(2) Ένας τελεστής $\hat{C}$ μπορεί να γραφτεί με το πραγματικό του και το φανταστικό του μέρος:

$$\left\{\begin{array}{ccc}\hat{C} & = & \hat{C}_1 + i\hat{C}_2\\ \hat{C}^\dagger & = & \hat{C}_1 - i\hat{C}_2\end{array}\right\}$$

όπου $\hat{C}_1, \hat{C}_2$ ερμιτιανοί τελεστές.

Απόδειξη. Ορίζουμε πρώτα τους $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$:

$$\hat{C}_1 = \frac{\hat{C}+\hat{C}^\dagger}{2}, \qquad \hat{C}_2 = \frac{\hat{C}-\hat{C}^\dagger}{2i}$$

$$\Rightarrow C_1^\dagger = \frac{1}{2}(\hat{C}^\dagger + \hat{C}) = C_1$$

$$\hat{C}_2^\dagger = -\frac{1}{2i}(\hat{C}^\dagger - \hat{C}) = C_2$$

και

$$\hat{C}_1 + i\hat{C}_2 = \hat{C}, \qquad \hat{C}_1 - i\hat{C}_2 = \hat{C}^\dagger$$

□

(3) Για δύο ασυμβίβαστα φυσικά μεγέθη A και B και για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση ισχύει η γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας:

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}\left|\langle[A,B]\rangle\right|}$$

Απόδειξη.

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

$$(\Delta B)^2 = \langle B\rangle^2 - \langle B\rangle^2$$

Υποθέτουμε ότι $\langle A\rangle = 0$, $\langle B\rangle = 0$. Αλλιώς εισάγουμε τους τελεστές $\tilde{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$ και $\tilde{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$.

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle = \int \Psi^* A^2\Psi\,\mathrm{d}^3x = \int (A\Psi)^*(A\Psi)\,\mathrm{d}^3x$$

και

$$(\Delta B)^2 = \langle B^2 \rangle = \int \Psi^* B^2 \Psi \, \mathrm{d}^3x = \int (B\Psi)^*(B\Psi)\, \mathrm{d}^3x$$

διότι ο τελεστής A είναι ερμιτιανός, όπως επίσης και ο B.

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A\Psi, A\Psi \rangle, \quad (\Delta B)^2 = \langle B\Psi, B\Psi \rangle$$

Από την ανισότητα του Schwartz, παίρνουμε

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2$$
$$\Rightarrow (\Delta A)\cdot(\Delta B) \geq |\langle A\Psi, B\Psi \rangle|$$

αλλά

$$\langle A\Psi, B\Psi \rangle = \int (A\Psi)^*(B\Psi)\, \mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(AB\Psi)\, \mathrm{d}^3x = \langle AB \rangle$$
$$\Rightarrow (\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle AB \rangle|$$

Ο τελεστής AB δεν είναι ερμιτιανός άρα έχει πραγματικό και φανταστικό μέρος.

$$C = AB$$
$$\Rightarrow C^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$$
$$\Rightarrow \frac{AB + BA}{2} = C_1$$
$$\Rightarrow \frac{AB - BA}{2i} = \frac{[A, B]}{2i} = C_2$$
$$\Rightarrow C = C_1 + iC_2$$

Οι τελεστές C_1 και C_2 είναι ερμιτιανοί και η μέση τιμή ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικός αριθμός,

$$\langle AB \rangle = \langle C \rangle = \langle C_1 \rangle + i\langle C_2 \rangle$$
$$\Rightarrow |\langle AB \rangle| = \sqrt{\langle C_1 \rangle^2 + \langle C_2 \rangle^2} \geq |\langle C_2 \rangle| = \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right| = \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

Δείξαμε λοιπόν ότι:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \qquad \square$$

(4) (i)

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2}\, |\langle [x, p] \rangle|$$
$$\Rightarrow (\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2}\hbar$$

(ii)

$$(\Delta x)(\Delta E) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [x, \hat{H}] \rangle \right|$$
$$[x, \hat{H}] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_x} = -i\hbar \frac{p_x}{m}$$

όπου p_x, x είναι ανεξάρτητες μεταβλητές,

$$\Rightarrow (\Delta x)(\Delta E) \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p_x \rangle|$$

Εάν το σύστημα είναι σε μια δέσμια κατάσταση, τότε έχουμε:

$$\Delta E = 0 \Rightarrow (\Delta x)(\Delta E) = 0 \Rightarrow \langle p_x \rangle = 0.$$

Όμοια υπολογίζονται τα

$$(\Delta p_k)(\Delta E) \geq \ldots$$
$$(\Delta L_k)(\Delta E) \geq \ldots$$

(iii)

$$(\Delta L_x)(\Delta L_z) \geq \frac{1}{2}|\langle [L_x, L_z] \rangle|$$
$$[L_x, L_z] = -i\hbar L_y$$
$$\Rightarrow (\Delta L_x)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2}|\langle L_y \rangle|$$

(5) Για τους τελεστές $\hat{x}, \hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ το κυματοπακέτο με την ελάχιστη αβεβαιότητα ($(\Delta x) \cdot (\Delta p) = \hbar/2$) είναι λύση της εξίσωσης:

$$(x - \langle x \rangle)\Psi = i\alpha(\hat{p}_x - \langle p_x \rangle)\Psi$$
$$\Rightarrow \Psi(x) = Ae^{-\alpha(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar}e^{i\langle p \rangle x/\hbar}$$

Απόδειξη. Για δύο γενικούς τελεστές A, B, η ανισότητα του Schwartz γίνεται ισότητα όταν:

$$\tilde{A}\Psi = \lambda\tilde{B}\Psi$$

και η δεύτερη ανισότητα γίνεται ισότητα όταν $\langle C_1 \rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle \tilde{A}\tilde{B} \rangle = -\langle \tilde{B}\tilde{A} \rangle$$
$$\int \Psi^*\tilde{A}\tilde{B}\Psi \,\mathrm{d}x = -\int \Psi^*\tilde{B}\tilde{A}\Psi \,\mathrm{d}x$$
$$\int (\tilde{A}\Psi)^*\tilde{B}\Psi \,\mathrm{d}x = -\int (\tilde{B}\Psi)^*\tilde{A}\Psi \,\mathrm{d}x$$
$$\lambda^* \int (\tilde{B}\Psi)^*(\tilde{B}\Psi) \,\mathrm{d}x = -\lambda \int (\tilde{B}\Psi)^*(\tilde{B}\Psi) \,\mathrm{d}x$$
$$\Rightarrow \lambda^* = -\lambda \Rightarrow \lambda = i\alpha$$

Η εξίσωση που ικανοποιεί η κυματοσυνάρτηση με την ελάχιστη αβεβαιότητα είναι:

$$\tilde{A}\Psi = ia\tilde{B}\Psi,$$

όπου a πραγματικός αριθμός. □

1.6 Χρονική Μεταβολή της Μέσης Τιμής - Διατήρηση Φυσικών Μεγεθών

(α) Θα δείξουμε ότι εάν $\hat{A}$ είναι ένας τελεστής ενός φυσικού μεγέθους στην Κβαντομηχανική και $\hat{H}$ ο τελεστής της Χαμιλτονιανής, τότε:

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{A} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle$$

Απόδειξη.

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$
$$-i\hbar\frac{\partial \Psi^\star}{\partial t} = (\hat{H}\Psi)^*$$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\langle \hat{A} \rangle}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \Psi^*(\hat{A}\Psi)\,\mathrm{d}^3x = \int \frac{\partial \Psi^\star}{\partial t}\hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \int \Psi^*\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \int \Psi^*\hat{A}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,\mathrm{d}^3x \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int (\hat{H}\Psi)^*\hat{A}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*\hat{A}\hat{H}\Psi\,\mathrm{d}^3x + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*(-\hat{H}\hat{A} + \hat{A}\hat{H})\Psi\,\mathrm{d}^3x + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle
\end{aligned}$$

□

Οι τελεστές της Κβαντομηχανικής στην πλειοψηφία τους δεν εξαρτώνται ρητά από το χρόνο, που συνεπάγεται ότι $\dfrac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$.

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle \hat{A} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

Εάν λοιπόν ένα μέγεθος *μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή* τότε η μέση τιμή του παραμένει σταθερή, και το μέγεθος αυτό λέμε ότι είναι **διατηρήσιμο**.

Εάν $[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}^n, \hat{H}] = 0 \; \forall n$

που συνεπάγεται ότι για κάθε συνάρτηση του A θα έχουμε

$$[f(\hat{A}), \hat{H}] = 0$$

(β) Στην Κλασσική Μηχανική η ενέργεια διατηρείται εάν το δυναμικό δεν εξαρτάται με οποιονδήποτε τρόπο από το χρόνο.

Η ορμή διατηρείται εάν έχουμε ανεξαρτησία του δυναμικού από τις μετατοπίσεις στο χώρο.

Η στροφορμή διατηρείται εάν έχουμε συμμετρία (ανεξαρτησία του δυναμικού) ως προς τις περιστροφές στο χώρο.

(γ) Ενέργεια

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{H} \rangle = \langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \rangle, \qquad \text{διότι } [\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

$$\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \rangle = \langle \frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \rangle$$

Εάν το δυναμικό του συστήματος είναι $V(\mathbf{r})$, *ανεξάρτητο του χρόνου*, τότε

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{H} \rangle = 0$$

και η ενέργεια διατηρείται, δηλαδή η μέση τιμή της ενέργειας παραμένει σταθερή στο χρόνο.

(δ) Ορμή

Ο τελεστής της ορμής δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο, δηλαδή

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle$$

αλλά

$$[\hat{p}_k, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial H}{\partial x_k} = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x_k} = i\hbar F_k$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{p}_k \rangle = \frac{i\hbar}{i\hbar}\langle F_k \rangle = \langle F_k \rangle$$

Διατήρηση της ορμής συνεπάγεται δύναμη μηδέν. Άρα το δυναμικό ανεξάρτητο της x_k συντεταγμένης. Άρα έχουμε συμμετρία κατά τη μεταφορά σε αυτή τη χωρική διεύθυνση.

Εάν ένα σύστημα περιλαμβάνει πολλά σωματίδια τα οποία ασκούν δυνάμεις μεταξύ τους, τότε το δυναμικό εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των σωματιδίων και είναι ανεξάρτητο από τη θέση του κέντρου μάζας, δηλαδή των συντεταγμένων x_{KM}, οπότε η παραγώγιση ως προς αυτήν δίνει μηδέν και η αντίστοιχη ορμή, δηλαδή η ορμή του ΚΜ (ολική ορμή του συστήματος) διατηρείται.

(ε) Στροφορμή

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

Για τις συνιστώσες της στροφορμής έχουμε: $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_i, \hat{H}] &= \epsilon_{ijk} x_j [p_k, H] + \epsilon_{ijk}[x_j, H] p_k \\
&= \epsilon_{ijk} x_j (-i\hbar) \frac{\partial H}{\partial x_k} + \epsilon_{ijk}(i\hbar) \frac{\partial H}{\partial p_j} p_k \\
&= -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial V}{\partial x_k} + i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{p_j}{m} p_k \\
&= i\hbar \epsilon_{ijk} x_j F_k + \text{ μηδέν}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{H}] = i\hbar (\mathbf{r} \times \mathbf{F})_i$$

και τελικά

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathbf{L} \rangle = \langle \mathbf{r} \times \mathbf{F} \rangle = \langle \mathbf{N} \rangle$$

Εάν $(\mathbf{r} \times \mathbf{F})_k = 0$

$$\Rightarrow [\hat{L}_k, \hat{H}] = 0$$

που συνεπάγεται ότι διατηρείται η $k-$συνιστώσα της Στροφορμής.

(στ) Εξισώσεις Κίνησης Κλασικής Μηχανικής - Θεώρημα του Ehrenfest

Ορίζουμε την ταχύτητα:

$$\langle v \rangle = \langle \frac{p}{m} \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{i\hbar}{i\hbar} \langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \rangle = \langle \frac{p}{m} \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle v \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{-i\hbar}{i\hbar} \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F(x) \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle F \rangle, \qquad \text{«Νόμος του Newton»}$$

Εάν $F(x) = 0$ τότε $\dfrac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = 0$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \langle p \rangle = \text{ σταθερή } = \langle p \rangle_0 \\
&\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle \frac{p}{m} \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} = \frac{\langle p \rangle_0}{m} = \langle v \rangle_0 \\
&\Rightarrow \langle x \rangle = \langle v \rangle_0 t + \langle x \rangle_0
\end{aligned}$$

Εάν $F(x) = F$ σταθερή, τότε

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(x,t) F \Psi(x,t) \mathrm{d}x = F \int \Psi^* \Psi \mathrm{d}x = F \text{ ανεξάρτητο του χρόνου}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}\langle p \rangle}{\mathrm{d}t} = F \Rightarrow \langle p \rangle_t = Ft + \langle p \rangle_0 \\
&\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{F}{m} t + \langle v \rangle_0 \\
&\Rightarrow \langle x \rangle = \frac{1}{2} \frac{F}{m} t^2 + \langle v \rangle_0 t + \langle x \rangle_0 \\
&\frac{F}{m} = a = \text{ επιτάχυνση}
\end{aligned}$$

(ζ) Parity ή Ισοτιμία (ομοτιμία) ή Κατοπτρισμός:

Αντιστροφή του χώρου, $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$

Το μέγεθος αυτό (η ομοτιμία) είναι ένα κβαντομηχανικό μέγεθος που έχει σχέση με τη μεταβολή της κυματοσυνάρτησης ενός συστήματος κάτω από την αντιστροφή του χώρου.

Η κυματοσυνάρτηση λοιπόν $\Psi(\mathbf{r})$ θα γίνει $\Psi(-\mathbf{r})$. Η αλλαγή αυτή επιτυγχάνεται με τη δράση ενός ερμιτιανού τελεστή:

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \hat{P}\Big(\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\Big) = \hat{P}\Big(\Psi(-\mathbf{r})\Big) = \Psi(\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \hat{P}^2 = 1$$

Ζητάμε τις ιδιοτιμές του $\hat{P}$.

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \lambda\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$$
$$\Psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\Big(\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\Big) = \lambda\hat{P}\Psi(\mathbf{r}) = \lambda^2\Psi(\mathbf{r})$$
$$\Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$
$$\hat{P}\Psi_+(\mathbf{r}) = \Psi_+(\mathbf{r}), \qquad \hat{P}\Psi_-(\mathbf{r}) = -\Psi_-(\mathbf{r})$$

Οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_+ λέγονται **άρτιες** (+)

Οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_- λέγονται **περιττές** (−)

Ο όρος ομοτιμία ή ισοτιμία έρχεται από το γεγονός ότι το μέγεθος της κυματοσυνάρτησης δεν αλλάζει.

Απόδειξη ότι ο τελεστής της Parity είναι ερμιτιανός:

$$\int\limits_{\text{άπειρο όγκο}} \Psi^*(\mathbf{r})\hat{P}\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x = \int \Psi^*(-\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x$$
$$= \int (\hat{P}\Psi(\mathbf{r}))^*\Psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3x$$

διότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(-x)\,\mathrm{d}x = -\int_{\infty}^{-\infty} \Psi^*(-\omega)\Psi(\omega)\,d\omega$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(-\omega)\Psi(\omega)\,d\omega$$

Εάν $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ τότε κάτω από την αντιστροφή του χώρου ($\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$) η $\hat{H}$ παραμένει αναλλοίωτη,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \to \frac{\partial^2}{\partial(-x)^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

όταν $x \to -x$. Άρα,

$$\hat{P}(\hat{H}\Psi) = \hat{H}(-\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r}) = \hat{H}\Psi(-\mathbf{r})$$

και

$$\hat{H}(\hat{P}\Psi) = \hat{H}\Big(\Psi(-\mathbf{r})\Big)$$
$$\Rightarrow (\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P})\Psi = 0 \Rightarrow [\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

Άρα η Parity διατηρείται με το χρόνο. Άρα εάν η Ψ είναι άρτια μια χρονική στιγμή θα παραμένει άρτια συνάρτηση συνέχεια.

Το ίδιο για τις περιττές κυματοσυναρτήσεις.

1.7 Συνεχές Φάσμα Ιδιοτιμών - Συνάρτηση δ του Dirac

Στη φύση υπάρχουν μεγέθη με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών.

$$\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a$$

όπου ο a είναι πραγματικός αριθμός που παίρνει συνεχείς τιμές.
Οι ιδιοσυναρτήσεις του συνεχούς φάσματος δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και συνεπώς δεν είναι κανονικοποιήσιμες, κατά το συνήθη τρόπο.
Η σχέση ορθοκανονικότητας έχει τη μορφή:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_a^*(x)\Psi_{a'}(x)\,\mathrm{d}x = \delta(a, a')$$

όπου

$$\delta(a, a') = \begin{cases} 0, & a' \neq a \\ \text{άπειρο}, & a' = a \end{cases}$$

Η ιδιάζουσα αυτή συνάρτηση που χρησιμοποιούμε στην κανονικοποίηση είναι μια **γενικευμένη συνάρτηση**. Ο σωστός τρόπος για να την περιγράψουμε είναι μέσω μιας οριακής (διαδικασίας) αναπαράστασης από ομαλές συναρτήσεις που έχουν όριο τη γενικευμένη συνάρτηση. Η συνάρτηση που περιγράψαμε προηγουμένως, και η οποία χρησιμοποιείται πολύ συχνά στην Κβαντομηχανική λέγεται **δ-συνάρτηση του Dirac** και συμβολίζεται με $\delta(a - a')$.

Ιδιότητα ορισμού: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0)$

Εάν

$$f(x) \equiv 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

Αυτό ισχύει εάν ολοκληρώσουμε σε οποιοδήποτε διάστημα (α, β) που περιέχει το μηδέν. Ακόμη μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - \alpha)\,\mathrm{d}x = f(\alpha)$$

ή

$$\int_{\beta}^{\gamma} f(x)\delta(x - \alpha)\,\mathrm{d}x = f(\alpha), \quad \text{εάν}\, \beta < \alpha < \gamma.$$

Για έναν τελεστή $\hat{A}$ με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών a, και ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_a(x)$ τότε οποιαδήποτε συνάρτηση $\Psi(x)$ γράφεται ως εξής:

$$\Psi(x) = \int_{[\text{πεδίο τιμών της } a]} c(a)\Psi_a(x)\,\mathrm{d}x$$

Εισάγοντας τη συνάρτηση δ-Dirac για την ορθοκανονικότητα της Ψ_a παίρνουμε τη σχέση ορισμού των $c(a)$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{a'}^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a c(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{a'}^*(x)\Psi_a(x)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}a \\ &= \int_a c(a)\delta(a - a')\,da = c(a') \end{aligned}$$

$$c(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_a^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

1.7.1 Αναπαραστάσεις των συναρτήσεων δ-Dirac

$$\boxed{\delta(x) = \lim_{L\to\infty} \frac{\sin xL}{\pi x}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin xL}{\pi x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} \frac{\sin xL}{x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} \frac{\sin y}{y}\,\mathrm{d}y = \frac{2}{\pi}\frac{\pi}{2} = 1$$

$$\lim_{x\to 0} \frac{\sin xL}{\pi x} = \frac{L}{\pi}$$

άρα απειρίζεται για $L \to 0$ και έχει περίοδο $2\pi/L \to 0$ για $L \to \infty$. Ακόμη το πλάτος της συνάρτησης τείνει στο μηδέν για $x \to \infty$.

$$\boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}x &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{-L}^{L} e^{ikx}\,dk \\
&= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\frac{1}{x}\int_{xL}^{xL} e^{iy}\,\mathrm{d}y = \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2i\pi x}(e^{ixL} - e^{-ixL}) \\
&= \lim_{L\to\infty}\frac{\sin(xL)}{\pi x} = \delta(x) \quad \text{εξ' ορισμού}
\end{aligned}$$

1.7.2 Ιδιότητες της δ-συνάρτησης

(α) $\delta(\alpha x) = \dfrac{1}{|\alpha|}\delta(x)$

(β) $x\delta(x) = 0$

(γ) $\delta(-x) = \delta(x)$

(δ) $\delta(x^2 - \alpha^2) = \dfrac{1}{2|\alpha|}[\delta(x-\alpha) + \delta(x+\alpha)]$

(ε) $\delta\Big(f(x)\Big) = \sum_k \dfrac{\delta(x - x_k)}{\left|\left(\frac{df}{\mathrm{d}x}\right)_{x=x_k}\right|}, \quad$ με $f(x_k) = 0$

«και άλλες πολλές ιδιότητες».

Απόδειξη.

(β)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [x\delta(x)]f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)[xf(x)]\,\mathrm{d}x = 0f(0) = 0 \qquad \forall f$$

(α) Έστω $\alpha > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\alpha x)f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{a}\right)\mathrm{d}y = \frac{1}{\alpha}f(0) = \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)\mathrm{d}x$$

Για $\alpha < 0$: $\alpha = -|\alpha|,\ y = \alpha x$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\alpha x)f(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{\alpha}\int_{+\infty}^{-\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\,\mathrm{d}y = \frac{-1}{|\alpha|}\int_{+\infty}^{-\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\,\mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{|\alpha|}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)f\left(\frac{y}{\alpha}\right)\,\mathrm{d}y = \frac{f(0)}{|\alpha|} = \frac{1}{|\alpha|}\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

(γ) Αποδεικνύεται από την (α) με $\alpha = -1$.

(δ+ε) Αναλύουμε την $f(x)$ γύρω από μια ρίζα της.

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

$$f(x_k) = 0 \Rightarrow f(x) = f'(x_k)(x - x_k)$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \delta\Big(f(x)\Big)\phi(x)\,\mathrm{d}x &= \sum_k \int_{x_k-\epsilon}^{x_k+\epsilon} \delta\Big(f'(x_k)(x - x_k)\Big)\phi(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \sum_k \frac{1}{|f'(x_k)|} \int_{x_k-\epsilon}^{x_k+\epsilon} \delta(x - x_k)\phi(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \sum_k \frac{\phi(x_k)}{|f'(x_k)|} = \sum_k \frac{1}{|f'(x_k)|} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_k)\phi(x)\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

$$\delta\left(f(x)\right) = \sum_k \frac{\delta(x - x_k)}{|f'(x_k)|}$$

$$\Rightarrow f(x) = x^2 - \alpha^2 \Rightarrow f'(x) = 2x, \quad x_1 = -\alpha, \quad x_2 = \alpha$$

Ιδιοσυνάρτηση του τελεστή θέσης:
Γενικά

$$\hat{x}\Psi_a(x) = x\Psi_a(x)$$

και

$$\begin{aligned}
\hat{x}\Psi_a(x) = a\Psi_a(x) &\Rightarrow (x - a)\Psi_a(x) = 0 \\
&\Rightarrow \Psi_a(x) = \delta(x - a)
\end{aligned}$$

□

1.7.3 Αναπαράσταση κυματοσυναρτήσεων και τελεστών στο χώρο των ορμών

Ιδιοσυνάρτηση του τελεστή της ορμής:

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi_p(x)}{\mathrm{d}x} = p\Psi_p(x) \Rightarrow \frac{\mathrm{d}\Psi_p(x)}{\mathrm{d}x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi_p(x)$$

$$\Rightarrow \Psi_p(x) = Ne^{(ip/\hbar)x}$$

Ορισμός του συντελεστή κανονικοποίησης N.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x)\Psi_{p'}(x)\,\mathrm{d}x = \delta(p - p')$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow N^*N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)}\,\mathrm{d}x &= N^*N2\pi\delta\left(\frac{1}{\hbar}(p - p')\right) \\
&= |N|^2 2\pi\hbar\delta(p - p') = \delta(p - p')
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow |N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\Psi_p(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow c(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

Πιθανότητα να βρούμε την ορμή να έχει τιμή στο διάστημα Δp γύρω από το p είναι:

$$P(p) = |c(p)|^2$$

$$c(p) \longrightarrow \text{ μετασχηματισμός Fourier της } \Psi(x)$$

Ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} c^*(p)c(p)\mathrm{d}p$$

άρα η συνάρτηση της ορμής $c(p)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και $c(p) \to 0$ όταν $p \to \pm\infty$.

Εάν ζητάμε τη μέση τιμή της ορμής:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\hat{p}\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} p|c(p)|^2\,dp$$

όμοια

$$\langle p^k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^k |c(p)|^2\,dp$$

Λέμε ότι η $\Psi(x)$ είναι η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων και η $c(p)$ η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών. Ο τελεστής της ορμής στο χώρο των ορμών είναι ο $\hat{p} = p$ και ο τελεστής θέσης στο χώρο των ορμών $\hat{x} = i\hbar d/dp_x$.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c^*(p)\hat{x}c(p)\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)x\Psi(x)\mathrm{d}x$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)x\Psi(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}c^*(p)\mathrm{d}p\right) x \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-iqx/\hbar}c(q)\mathrm{d}q\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}c^*(p)\mathrm{d}p\right)(-i\hbar)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} c(q)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q\right)\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Έχουμε τώρα ότι

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} c(q)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(c(q)\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\right)\mathrm{d}q - \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\mathrm{d}q \\
&= 0 - \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{iqx/\hbar}\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}q}\mathrm{d}q
\end{aligned}$$

διότι $c(q \to \pm\infty) = 0$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \langle x \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar}(i\hbar)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\mathrm{d}q c^*(p)\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{i(q-p)x/\hbar}\mathrm{d}x \\
&= i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\mathrm{d}q c^\star(p)\frac{\mathrm{d}c(q)}{\mathrm{d}q}\delta(q-p) = i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p c^*(p)\frac{\mathrm{d}c(p)}{\mathrm{d}p} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\hat{x}c(p)\mathrm{d}p
\end{aligned}$$

όπου

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \qquad \square$$

1.8 Συμβολισμός Dirac

Σε κάθε κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ αντιστοιχούμε το σύμβολο $|\Psi\rangle$ και το λεμε *ket της* Ψ. Ενώ στη μιγαδική συζυγή Ψ^* όπως εμφανίζεται στο εσωτερικό γινόμενο αντιστοιχούμε το σύμβολο $\langle\Psi|$ και το λέμε *bra της* Ψ.
Το εσωτερικό γινόμενο γράφεται ως εξής:

$$\int \Phi^*\Psi dx = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

Ακόμη

$$\langle\Phi|\Psi\rangle^* = \left(\int \Phi^*\Psi dx\right)^* = \int \Psi^*\Phi dx = \langle\Psi|\Phi\rangle$$

Εάν

$$|\Psi_3\rangle = \alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle$$

τότε

$$\langle\Psi_4|\Psi_3\rangle = \alpha\langle\Psi_4|\Psi_1\rangle + \beta\langle\Psi_4|\Psi_2\rangle$$

ενώ

$$\langle\Psi_3|\Psi_4\rangle = \alpha^*\langle\Psi_1|\Psi_4\rangle + \beta^*\langle\Psi_2|\Psi_4\rangle$$

Μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$:

$$\langle\Phi|A\Psi\rangle = \langle\Phi|A|\Psi\rangle = \int \Phi^*\hat{A}\Psi dx$$

1.8.1 Ανάπτυξη Κυματοσυνάρτησης σε ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων

$$\Psi\left(\mathbf{r}\right) = \sum_n a_n\Psi_n(\mathbf{r}) \quad \text{με } a_n = \int \Psi_n^*\Psi \mathrm{d}^3x = \langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n \langle\Psi_n|\Psi\rangle|\Psi_n\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

Στο γραμμικό χώρο των $|\Psi_n\rangle$ έχουμε προβολή του $|\Psi\rangle$ στα ιδιοδιανύσματα $|\Psi_n\rangle$. Εάν έχουμε δύο κυματοσυναρτήσεις $|\Phi\rangle$ και $|\Psi\rangle$

$$|\Phi\rangle = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Phi\rangle, \qquad |\Psi\rangle = \sum_k |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Phi|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Psi_k|\Phi\rangle^*\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

και ομοίως

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Psi|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*\Psi\mathrm{d}^3x = \sum_k \beta_k^*\alpha_k, \quad \beta_k = \langle\Psi_k|\Phi\rangle, \quad \alpha_k = \langle\Psi_k, \Psi\rangle$$

1.8.2 Ανισότητα του Schwartz

Θα αποδείξουμε την ανίσοτητα

$$\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle \cdot \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle \geq |\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle|^2$$

Παίρνουμε την κατάσταση

$$|\Psi\rangle = |\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}|\Psi_1\rangle$$

Έχουμε $\langle\Psi|\Psi\rangle \geq 0$, ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου. Επομένως

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle &= \left[\langle\Psi_2| - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}\langle\Psi_1|\right]\left[|\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle}|\Psi_1\rangle\right] \\ &= \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle - \frac{\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle} \geq 0\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle \cdot \langle\Psi_1|\Psi_1\rangle \geq \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

1.8.3 Ορθογωνιοποίηση Schmidt

Με τη μέθοδο αυτήν κατασκευάζουμε ένα σύνολο ορθογωνίων διανυσμάτων $|\Psi_k\rangle$ με $k = 1, 2, \ldots, N$ από ένα σύνολο **μη** ορθογωνίων διανυσμάτων $|\Phi_i\rangle$ με $i = 1, 2, \ldots, M \geq N$.

Παίρνουμε τυχαία το πρώτο, $|\Psi_1\rangle = N_1|\Phi_1\rangle$ επειδή $\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = N_1^* N_1 \langle\Phi_1|\Phi_1\rangle = 1$

$$\Rightarrow N_1 = \frac{1}{\sqrt{\langle\Phi_1|\Phi_1\rangle}} = \langle\Phi_1|\Phi_1\rangle^{-1/2}$$

$$\Rightarrow |\Psi_1\rangle = \frac{|\Phi_1\rangle}{[\langle\Phi_1|\Phi_1\rangle]^{1/2}}$$

Κατόπιν παίρνουμε τυχαία το $|\Phi_2\rangle$ και ορίζουμε

$$|\Psi_2\rangle = N_2(|\Phi_2\rangle + \alpha_{12}|\Psi_1\rangle)$$

με

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0 \qquad \text{και} \qquad \langle\Psi_2|\Psi_2\rangle = 1$$

$$\Rightarrow \langle\Psi_1|\Phi_2\rangle + \alpha_{12}\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_{12} = -\langle\Psi_1|\Phi_2\rangle$$

$$\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle = N_2^2\left(\langle\Phi_2|\Phi_2\rangle - |\alpha_{12}|^2\right) = 1$$

$$\Rightarrow N_2 = \left(\langle\Phi_2|\Phi_2\rangle - |\alpha_{12}|^2\right)^{-1/2}$$

Ομοίως ορίζουμε:

$$|\Psi_3\rangle = N_3\Big(|\Phi_3\rangle + \alpha_{13}|\Psi_1\rangle + \alpha_{23}|\Psi_2\rangle\Big)$$

και συνεχίζουμε.

1.8.4 Τελεστές, Γραμμικοί Μετασχηματισμοί

Ο τελεστής μετασχηματίζει ένα διάνυσμα ενός γραμμικού χώρου σε ένα άλλο διάνυσμα.

Ιδιοσυναρτήσεις και Ιδιοτιμές

$$Q|\Psi_n\rangle = q_n|\Psi_n\rangle$$

Εκφυλισμός

Μια ιδιοτιμή q ενός τελεστή Q είναι n φορές εκφυλισμένη, όταν υπάρχουν n γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, που είναι ιδιοδιανύσματα του Q με την ίδια ιδιοτιμή q.

Συναφής ή Συζυγής ενός Τελεστή Q

$$\langle\Psi_1|Q\Psi_2\rangle = \langle Q^\dagger\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

Όταν ο Q δρα στο ket $Q|\Psi\rangle$, τότε ο συζυγής του δρα στο bra, $\langle\Psi|Q^\dagger$.

$$(Q^\dagger)^\dagger = Q, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger, \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$$

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad \text{για οποιοδήποτε άθροισμα.}$$

Αυτοσυναφής Τελεστής $Q^\dagger = Q$**, Ερμιτιανός Τελεστής**

Το γινόμενο δύο Ερμιτιανών Τελεστών είναι Ερμιτιανός εάν οι Τελεστές μετατίθενται.
Ένας Ερμιτιανός Τελεστής έχει πραγματικές Ιδιοτιμές και ορθογώνια Ιδιοδιανύσματα.

Αντίστροφος ενός Τελεστή, Q^{-1}

$$QQ^{-1} = Q^{-1}Q = 1$$

Μοναδιαίος (Unitary) Τελεστής, U

Ορισμός:

$$U^\dagger = U^{-1}$$

Οι τελεστές αυτοί διατηρούν το Εσωτερικό Γινόμενο

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle, \qquad |\Phi'\rangle = U|\Phi\rangle$$

$$\langle\Phi'|\Psi'\rangle = \langle U\Phi|U\Psi\rangle = \langle\Phi|U^\dagger U\Psi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

διότι

$$U^\dagger U = 1, \qquad UU^\dagger = 1$$

Κανονικός Τελεστής

Μετατίθεται με το συζυγή του

$$[Q, Q^\dagger] = 0$$

Εφόσον μετατίθενται έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.

Θεώρημα 1.8.1. *Για έναν κανονικό Τελεστή ισχύει:*
Εάν

$$Q|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle$$

τότε

$$Q^\dagger|\Psi\rangle = q^*|\Psi\rangle$$

Απόδειξη.

$$Q\Psi = q\Psi, \quad Q^\dagger\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \lambda^* = \int (Q^\dagger\Psi)^*\Psi \mathrm{d}x = \int \Psi^* Q\Psi \mathrm{d}x = q \qquad \square$$

Για έναν Μοναδιαίο Τελεστή (κάθε Μοναδιαίος Τελεστής είναι κανονικός) έχουμε

$$QQ^\dagger = 1 \Rightarrow QQ^\dagger|\Psi\rangle = q^*Q|\Psi\rangle = q^*q|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

$$qq^* = 1 \Rightarrow q = \mathrm{e}^{i\theta}$$

Τελεστής Προβολής

Έχουμε μια ορθοκανονική βάση και ορίζουμε τον τελεστή

$$P_k = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$$

$$P_k|\Psi\rangle = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

Ισχύει $P_k^2 = P_k$, διότι

$$\begin{aligned} P_k^2|\Psi_k\rangle &= P_k|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle \\ &= |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = P_k|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Για μια ορθοκανονική πλήρη βάση έχουμε

$$|\Psi\rangle = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle = \sum_k P_k|\Psi\rangle \quad \text{για κάθε } \Psi$$

άρα

$$\sum_k P_k = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k| = 1$$

1.8.5 Ιδιότητες των Μοναδιαίων Τελεστών

Ένας μοναδιαίος Τελεστής μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$U = \mathrm{e}^{iA}$$

με A έναν *Ερμιτιανό* Τελεστή.
$U^\dagger = \mathrm{e}^{-iA}$, απόδειξη με ανάπτυξη σε σειρά.
Απόδειξη με ανάπτυξη σε σειρά ότι $\mathrm{e}^{-iA}\mathrm{e}^{iA} = 1$.

Μετασχηματισμός Ομοιότητας

Εάν

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi|Q|\Psi\rangle$$

και μετασχηματίσουμε την κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi\rangle \to |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

όπου U ο μοναδιαίος τελεστής, η μέση τιμή του Q δεν αλλάζει εάν μετασχηματίσουμε επίσης τον τελεστή Q:

$$Q \to Q' = UQU^\dagger$$

Απόδειξη.

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi|Q|\Psi\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle Q'\rangle &= \langle\Psi'|Q'|\Psi'\rangle = \langle U\Psi|UQU^\dagger|U\Psi\rangle\\ &= \langle\Psi|\underbrace{U^\dagger U}_{1}Q\underbrace{U^\dagger U}_{1}|\Psi\rangle = \langle\Psi|Q|\Psi\rangle\end{aligned}$$ □

1.8.6 Αναπαράσταση Γραμμικών Τελεστών με Πίνακες

Έστω ότι έχουμε μια ορθοκανονική βάση, $|\Psi_n\rangle$, τότε αναπτύσουμε μια κυματοσυνάρτηση $|\Psi\rangle$ σε αυτή τη βάση.

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n|\Psi_n\rangle$$

όπου $a_n = \langle\Psi_n|\Psi\rangle$.
Το σύνολο των α_n με $n = 1, 2, \ldots, N, \ldots$ φτιάχνει ένα διάνυσμα $\hat{n}$, μια στήλη ενός πίνακα

$$|\Psi\rangle \to \begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_N\\ \vdots\end{pmatrix} = |\alpha\rangle$$

Εάν ένας γραμμικός τελεστής Q δράσει στην $|\Psi\rangle$

$$\Rightarrow |\Phi\rangle = Q|\Psi\rangle = \sum_k Q|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \beta_n = \langle\Psi_n|\Phi\rangle = \langle\Psi_n|Q|\Psi\rangle = \sum_k \langle\Psi_n|Q|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}\beta_1\\ \beta_2\\ \vdots\\ \beta_N\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & Q & \\ & & \end{pmatrix}_{ij} \begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_N\\ \vdots\end{pmatrix}$$

$$Q_{ij} = \langle\Psi_i|Q|\Psi_j\rangle = \int \Psi_i^* Q\Psi_j \mathrm{d}x$$

και

$$\beta_i = \sum_j Q_{ij}\alpha_j$$

(i) Ανάστροφος ενός πίνακα $(\tilde{Q})_{ij} = Q_{ji}$

(ii) Συζυγής ενός πίνακα $(Q^\dagger)_{ij} = Q^*_{ji}$

$$(Q^*)_{ij} = \langle \Psi_i | Q^\dagger | \Psi_j \rangle = \langle Q\Psi_i | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_j | Q\Psi_i \rangle^* = Q^*_{ji}$$

(iii) Ερμιτιανός Πίνακας $Q^\dagger = Q$

$$\Rightarrow (Q^\dagger)_{ij} = Q^*_{ji} = Q_{ij}$$

(iv) Μοναδιαίος Πίνακας $U^\dagger = U^{-1}$

$$(U^\dagger)_{ij} = (U^{-1})_{ij}$$

Μετασχηματισμός από μια ορθοκανονική βάση σε μια άλλη ορθοκανονική βάση γίνεται μόνο μέσω ενός μοναδιαίου μετασχηματισμού

$$|\Psi'_k\rangle = \sum_l u_{kl} |\Psi_l\rangle, \qquad \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \qquad \text{και} \qquad \langle \Psi'_i | \Psi'_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle \Psi'_m | \Psi'_k \rangle = \sum_{n,l} u^*_{mn} u_{kl} \langle \Psi_n | \Psi_l \rangle = \sum_l u^*_{ml} u_{kl} = \delta_{mk}$$

Έστω A ένας μοναδιαίος πίνακας, τότε:

$$AA^\dagger = I \Rightarrow \sum_l A_{kl} (A^\dagger)_{lm} = \sum_l A_{kl} A^*_{ml} = \delta_{mk}$$

$$A^\dagger A = I \Rightarrow \sum_l (A^\dagger)_{ml} (A)_{lk} = \delta_{mk} = \sum_l A^*_{lm} A_{lk}$$

άρα ο U είναι μοναδιαίος.

Οι πίνακες Q', Q που αναπαριστούν τον ίδιο τελεστή στις δύο διαφορετικές ορθοκανονικές βάσεις συνδέονται ως εξής:

$$Q' = U^\dagger Q U$$

1.8.7 Πρόβλημα των Ιδιοτιμών

$$Q|\Psi\rangle = \lambda |\Psi_\lambda\rangle$$
$$(Q - \lambda I)|\Psi_\lambda\rangle = 0$$

όπου I ο ταυτοτικός τελεστής.
Αναπαριστώντας τον τελεστή Q με τον αντίστοιχο πίνακα και την $|\Psi\rangle$ με τη στήλη a_n, για να έχουμε μη-μηδενική λύση για τα a_n πρέπει να ισχύει

$$\det(Q - \lambda I) = 0$$

Λύνοντας την πολυωνυμική εξίσωση ως προς λ, βρίσκουμε τις ιδιοτιμές λ και για κάθε ιδιοτιμή το ιδιοδιάνυσμα $|\Psi_\lambda\rangle$. Σε αυτή τη βάση ο πίνακας είναι διαγώνιος.

Οι ιδιοσυναρτήσεις (ιδιοδιανύσματα) των Ερμιτιανών και των μοναδιαίων τελεστών είναι ορθογώνιες μεταξύ τους και φτιάχνουν ένα πλήρες σύστημα συναρτήσεων (διανυσμάτων).

Ποιος πίνακας διαγωνοποιεί τον Q;

Έστω ότι έχουμε μια βάση $|\Phi_l\rangle$ και βρίσκουμε τα στοιχεία του πίνακα Q

$$Q_{kl} = \langle \Phi_k | Q | \Phi_l \rangle$$

Βρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $|\Psi_n\rangle$ του Q· αυτές φτιάχνουν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύστημα (για τους τελεστές $\rightarrow$ πίνακες της κβαντομηχανικής)

$$Q|\Psi_n\rangle = \lambda_n|\Psi_n\rangle$$

$$I = \sum_l |\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|$$

$$Q'_{nm} = \langle\Psi_n|Q|\Psi_m\rangle = \sum_{k,l}\langle\Psi_n|\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|Q|\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|\Psi_m\rangle = \sum_{k,l} U^*_{kn}Q_{kl}U_{lm}$$

Ο πίνακας $U \rightarrow U_{ij} = \langle\Phi_i|\Psi_j\rangle$ είναι μοναδιαίος

$$\Rightarrow Q' = U^\dagger Q U$$

για $j =$ σταθερό το i δίνει τις συνιστώσες του ιδιοδιανύσματος $|\Psi_j\rangle$ στη βάση $|\Phi_i\rangle$.

Εισαγάγοντας τον Προβολικό Τελεστή ισοδύναμα γράφουμε

$$|\Psi_m\rangle = \sum_l |\Phi_l\rangle\langle\Phi_l|\Psi_m\rangle = \sum_l \langle\Phi_l|\Psi_m\rangle|\Phi_l\rangle$$

δηλαδή ο U έχει στήλες τα ιδιοδιανύσματα.