Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις ΙΙΙ: Κβαντικές Αρχές και Κβαντική Μέτρηση

1. Λύση εξίσωσης Schrödinger

Το επόμενο βήμα είναι να λύσουμε την εξίσωση Schrödinger για κάποιο δυναμικό, $V(x)$, και να υπολογίσουμε την $\psi(x,t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{3.1}$$

Επειδή οι παράγωγοι ως προς x και t δεν έχουν διασταυρούμενους όρους, αναζητούμε λύσεις σε μορφή γινομένου:

$$\psi(x,t)=\varphi(x)T(t)$$

Αντικαθιστώντας στην (3.1) παίρνουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)T(t)+V(x)\varphi(x)T(t)=i\hbar\varphi(x)\frac{\partial T}{\partial t} \tag{3.2}$$

Διαιρώντας με $\psi(x,t)$ την (3.2), έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+V(x)=i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{\partial T}{\partial t} \tag{3.3}$$

Η εξίσωση (3.3) εκφράζει την ισότητα δυο συναρτήσεων ανεξάρτητων μεταβλητών (των x και t). Πρόκειται δηλαδή για μια εξίσωση της μορφής $f(x)=g(t)$, η οποία πρέπει να ισχύει για κάθε τιμή των x και t. Αυτό μπορεί να συμβαίνει μόνο αν οι δυο συναρτήσεις είναι ανεξάρτητες των x και t, δηλαδή είναι ίσες με μια σταθερά, έστω E:

$$f(x)=g(t)=E$$

Λίγο αργότερα θα δούμε ότι η E είναι η ενέργεια του σωματιδίου, εξ ου και η ονομασία της μεταβλητής ως «E». Αντικαθιστώντας στην (3.3) έχουμε:

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t}=E\Rightarrow\log\left(T(t)/T(0)\right)=e^{-iEt/h}\Rightarrow T(t)=T(0)e^{-iEt/h}$$

Ενώ η χωρική εξίσωση γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_E}{dx^2}+V(x)\varphi_E=E\varphi_E \tag{3.4}$$

Η (3.4) ονομάζεται «Χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger». Η λύση της εξαρτάται, προφανώς, από τη μορφή του δυναμικού $V(x)$ και από την τιμή της παραμέτρου E.

2. Το πιο απλό δυναμικό: Απειρόβαθο πηγάδι

Το πιο απλό δυναμικό είναι το σταθερό μέσα σε ένα πεπερασμένο εύρος και άπειρο παντού αλλού:

$$V(x)=0,\ 0\le x\le L,\ V(x)=\infty \ \text{ για } \ x\le 0,\ x\ge L$$

Μέσα στο πηγάδι, η (3.4) γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_E}{dx^2}=E\varphi_E \tag{3.5}$$

ή

$$\frac{d^2\varphi_E}{dx^2}+k^2\varphi_E=0 \quad \text{όπου} \quad \frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$$

$$\varphi_E(x)=A\sin kx+B\cos kx=Ce^{ikx}+De^{-ikx} \tag{3.6}$$

Οι παράμετροι A,B και k βρίσκονται από τις συνοριακές συνθήκες.

Εφόσον το δυναμικό στο εξωτερικό του πηγαδιού είναι άπειρο, δεν μπορεί να υπάρχει πιθανότητα το σωμάτιο να βρεθεί εκεί (δες και Άσκηση 1). Επομένως $\varphi_E(x)=0$ για $x\le 0$ και $x\ge L$:

$$\varphi(0)=0\Rightarrow B=0$$

$$\varphi(L)=0\Rightarrow A\sin kL=0\Rightarrow kL=n\pi,\quad k=\frac{n\pi}{L}$$

και επομένως,

$$\varphi_n(x)=A\sin\frac{n\pi x}{L} \tag{3.7}$$

όπου A η «σταθερά κανονικοποίησης» και n ακέραιος αριθμός. Στην (3.7) γράψαμε την $\varphi(x)$ με δείκτη n, $\varphi_n(x)$, για να δείξουμε ότι οι διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις χαρακτηρίζονται από ένα ακέραιο αριθμό n.

Προφανώς, στην επίλυση της (3.5) θα μπορούσαμε να είχαμε χρησιμοποιήσει την άλλη μορφή των λύσεων, δηλ.

$$\varphi(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx}$$

Εφαρμόζοντας και πάλι τις συνοριακές συνθήκες, έχουμε:

$$\varphi(0)=0\Rightarrow C+D=0\Rightarrow D=-C$$

$$\varphi(L)=0\Rightarrow C\left\{e^{ikL}-e^{-ikL}\right\}=0\Rightarrow e^{2ikL}=1\Rightarrow 2kL=n2\pi\Rightarrow k=\frac{n\pi}{L}$$

Το μόνο που απομένει είναι η κανονικοποίηση της $\psi(x)$, δηλ. η απαίτηση να ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi(x,t)\right|^2dx=1$$

Αντικαθιστώντας την $\psi(x,t)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 \left|e^{-iEt/\hbar}\right|^2 dx = 1$$

και επομένως, εφ' όσον $\varphi(x) = 0$ για $x < 0$ και $x > L$, πρέπει:

$$\int_0^L |A|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1 \tag{3.8}$$

Το ολοκλήρωμα στην (3.8) υπολογίζεται εύκολα και έχουμε

$$\Rightarrow |A|^2 \left\{\frac{1-\cos 2n\pi x / L}{2}\right\}_0^L = |A|^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

και επομένως,

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \tag{3.9}$$

Το αποτέλεσμα των συνοριακών συνθηκών είναι ότι η ποσότητα E παίρνει μόνο διακριτές τιμές:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Αυτό είναι και το πρώτο μας παράδειγμα εξαγωγής "κβαντισμένης" ποσότητας από την εξίσωση Schrödinger.

3. Χρήση της κυματοσυνάρτησης για τον υπολογισμό μέσων τιμών

Από τη στιγμή που γνωρίζουμε την $\psi(x,t)$ μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της x:

$$\left\langle \hat{\mathrm{X}} \right\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x,t) \hat{\mathrm{X}} \psi^*(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \rho(x) \tag{3.10}$$

Για ένα σωμάτιο που βρίσκεται σε απειρόβαθο πηγάδι και έχει κυματοσυνάρτηση την $\varphi_n(x)$:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \frac{1}{2}\left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{L}\right) dx - \frac{1}{L} = \frac{1}{L}\left\{\int_0^L x dx - \int_0^L x \cos \frac{2n\pi x}{L} dx\right\}$$

Το ολοκλήρωμα στο δεύτερο όρο δίνει μηδέν:

$$I = \int_0^L x \cos \frac{2n\pi x}{L} dx = \int_0^L x d\left\{\sin \frac{2n\pi x}{L}\right\}\left\{\frac{L}{2n\pi}\right\} = \frac{L}{2n\pi}\left\{L \sin(2n\pi) - 0\right\} = 0$$

Άρα:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{L} \frac{L^2}{2} = \frac{L}{2}$$

Με ακριβώς τον ίδιο τρόπο μπορούμε να υπολογίσουμε το $\langle x^2 \rangle$, και επομένως και τη διασπορά στη θέση του σωματιδίου:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{1}{L}\int_0^L x^2 \left(1-\cos\frac{2n\pi x}{L}\right) dx$$

Με λίγη άλγεβρα βγάζουμε

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2 n^2}$$

και επομένως,

$$\left(\Delta x\right)^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2 = \frac{L^2}{2}\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2 n^2}\right)$$

Με τον τρόπο αυτόν μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή οποιασδήποτε συνάρτησης του x, εφόσον αυτή δίδεται ως πολυώνυμο

$$f\left(x\right) = c_0 + c_1 x + \ldots c_n x^n$$
$$\left\langle f\left(x\right) \right\rangle = c_0 + c_1 \left\langle x \right\rangle + \ldots + c_n \left\langle x^n \right\rangle$$

Ο γενικός όρος στην τελευταία έκφραση είναι:

$$\left\langle x^n \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n \left|\varphi\left(x\right)\right|^2 dx \tag{3.11}$$

4. Ορμή του σωματιδίου

Το μόνο που απομένει είναι να υπολογίσουμε την ορμή του σωματιδίου. Δεδομένης της άγνοιάς μας της ακριβούς θέσης, αναμένουμε ότι μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση ορμή (και όχι τη στιγμιαία-τουλάχιστον με όσα γνωρίζουμε ως τώρα). Όπως συζητήσαμε και στην πρώτη ενότητα και σε αναλογία με τον κλασσικό ορισμό της ορμής, απαιτούμε

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}} \right\rangle_t = m \frac{d\left\langle \hat{\mathrm{X}} \right\rangle_t}{dt} \tag{3.12}$$

Στην προηγούμενη ενότητα προσδιορίσαμε τον τελεστή της ορμής (δες Εξ. (2.35)) :

$$\hat{\mathrm{P}} f\left(x\right) = -i\hbar \frac{d}{dx} f\left(x\right) \tag{3.13}$$

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}} \right\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \tag{3.14}$$

Παράδειγμα: υπολογισμός της μέσης ορμής στο απειρόβαθο πηγάδι.

Έστω σωματίδιο μάζας m, που βρίσκεται σε απειρόβαθο πηγάδι $\left[0, L\right]$ και του οποίου η κυματοσυνάρτηση είναι η $\psi\left(x\right) = \varphi_n\left(x\right)$. Η μέση τιμή της p, $\left\langle p \right\rangle$, και η μέση τιμή της p^2, $\left\langle p^2 \right\rangle$, υπολογίζονται με εφαρμογή της

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}} \right\rangle = \left(\sqrt{\frac{2}{L}}\right)^2 \int_0^L dx \sin\frac{n\pi x}{L} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \sin\frac{n\pi x}{L}$$

$$=\frac{2}{L}(-i\hbar)\left(\frac{n\pi}{L}\right)\int_0^L dx\sin\frac{n\pi x}{L}\cos\frac{n\pi x}{L}=-\frac{i\hbar n\pi}{L^2}\int_0^L dx\sin\frac{2n\pi x}{L}=0$$

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}}^2\right\rangle=\frac{2}{L}\int_{-\infty}^{\infty}dx\sin\frac{n\pi x}{L}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sin\frac{n\pi x}{L}=\frac{2}{L}\left(+\hbar^2\right)\left(\frac{n^2\pi^2}{L^2}\right)\int_0^L dx\sin^2\frac{n\pi x}{L}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}$$

Σημείωση: θα μπορούσαμε να αποφύγουμε τη διπλή παραγώγιση, χρησιμοποιώντας την εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n=E\varphi_n=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2mL^2}\varphi_n$$

που δίνει αμέσως:

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}}^2\right\rangle=\frac{2}{L}\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{L^2}\int_0^L dx\sin^2\frac{n\pi x}{L}=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{L^2}$$

5. <u>Θεώρημα μέσης τιμής, τελεστές και ερμιτιανότητα</u>

Οι (3.10) και (3.11) μπορούν να γραφούν ως εξής:

$$\langle x\rangle=\int\psi^*(x,t)\,\hat{\mathrm{x}}\,\psi(x,t)$$
$$\langle p\rangle=\int\psi^*(x,t)\,\hat{\mathrm{p}}\,\psi(x,t)$$

Γενικότερα, σε κάθε φυσική ποσότητα, A, αντιστοιχεί ένας τελεστής, $\hat{\mathrm{A}}$, τέτοιος ώστε η μέση τιμή πολλών μετρήσεων της ποσότητας A, όταν το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση με κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$, να δίδεται ως:

$$\langle A\rangle=\int\psi^*(x,t)\,\hat{\mathrm{A}}\,\psi(x,t)dx \tag{3.15}$$

Η (3.15) δεν αποδεικνύεται: αποτελεί τη δεύτερη αρχή της κβαντομηχανικής, και ονομάζεται «Θεώρημα Μέσης Τιμής» (ΘΜΤ).

Το ΘΜΤ για οποιαδήποτε φυσική ποσότητα, Q, επιβάλει μια σημαντική συνθήκη στη μορφή του τελεστή, $\hat{\mathrm{Q}}$, που αντιστοιχεί στο Q. Εφόσον η μέση τιμή είναι (προφανώς) πραγματικός αριθμός, θα πρέπει να ισχύει

$$\langle Q\rangle=\langle Q\rangle^*$$

Αντικαθιστώντας το ΘΜΤ, παίρνουμε

$$\int\psi^*\hat{\mathrm{Q}}\psi\,dx=\left(\int\psi^*\hat{\mathrm{Q}}\psi\,dx\right)^* \tag{3.16}$$

Το δεύτερο μέλος στην (3.16) γράφεται ως

$$\int\psi^*\hat{\mathrm{Q}}\psi\,dx=\int\left(\psi^*\right)^*\left(\hat{\mathrm{Q}}\psi\right)^*dx=\int\left(\hat{\mathrm{Q}}\psi\right)^*\psi\,dx$$

και επομένως, ο τελεστής $\hat{\mathrm{Q}}$ πρέπει να είναι τέτοιος ώστε να ισχύει

$$\int \psi^* \hat{Q} \psi dx = \int \left(\hat{Q} \psi \right)^* \psi dx \tag{3.17}$$

Οι τελεστές που πληρούν την (3.17) λέγονται "ερμιτιανοί". Μάλιστα, ο ορισμός ενός τελεστή ως ερμιτιανού απαιτεί να ισχύει η γενικότερη σχέση

$$\int \psi_1^* \hat{Q} \psi_2 dx = \int \left(\hat{Q} \psi_1 \right)^* \psi_2 dx \tag{3.18}$$

για τυχαίες ψ_1 και ψ_2. Προφανώς η (3.17) είναι ειδική περίπτωση της (3.18), όταν $\psi_1 = \psi_2$.

Η (3.18) μπορεί να γενικευτεί ως εξής: για κάθε τελεστή, $\hat{Q}$, ορίζουμε τον "ερμιτιανό συζυγή" του, τον οποίο συμβολίζουμε με $\hat{Q}^\dagger$, ως τον τελεστή που πληροί

$$\int \psi_1^* \hat{Q} \psi dx = \int \left(\hat{Q}^\dagger \psi_1 \right)^* \psi_2 dx$$

Με τον ορισμό αυτό, οι ερμιτιανοί τελεστές είναι εκείνοι που ισούνται με τον ερμιτιανό συζυγή τους: $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$.

5.1 <u>Τελεστές</u>

Γενικά, ένας τελεστής είναι ένας μετασχηματισμός μιας (μιγαδικής) συνάρτησης $f(x)$ σε μια άλλη συνάρτηση $g(x)$. Η εξίσωση

$$\hat{Q} f(x) = g(x) \tag{3.19}$$

αποτελεί και τον ορισμό του $\hat{Q}$. Ο κάθε τελεστής, χαρακτηρίζεται από τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του, που ορίζονται από την εξίσωση

$$\hat{Q} \varphi(x) = q \varphi(x) \tag{3.20}$$

Σε περίπτωση που υπάρχουν πέραν της μιας ιδιοσυνάρτησης, η (3.20) γράφεται ως

$$\hat{Q} \varphi_n(x) = q_n \varphi_n(x) \tag{3.21}$$

όπου n ένας δείκτης που παίρνει όλες τις τιμές $1,\dots,N$ όπου N ο αριθμός των ιδιοσυναρτήσεων. Σημειώνεται ότι μπορεί κάλλιστα $N \to \infty$, δηλαδή να υπάρχουν άπειρες (έστω και αριθμήσιμες) ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές.

Στην περίπτωση που υπάρχουν πολλές ιδιοτιμές που όμως δεν είναι αριθμήσιμες, γράφουμε

$$\hat{Q} \varphi_q(x) = q \varphi_q(x)$$

Ένα παράδειγμα ιδιοσυναρτήσεων και ιδιοτιμών, είναι η εξίσωση Schrödinger για το απειρόβαθο πηγάδι. Εδώ λύσαμε την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E \varphi(x) \tag{3.22}$$

με συνοριακές συνθήκες $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$. Η (3.22) μπορεί να γραφτεί ως εξίσωση ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

δηλαδή

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \tag{3.23}$$

Όπως έχουμε δείξει, η (3.23) έχει άπειρες λύσεις $\varphi_n(x)$ με διαφορετικά E_n:

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \quad \text{και} \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}$$

Ως δεύτερο παράδειγμα, θεωρούμε τον τελεστή της παραγώγου, έστω $\hat{\mathrm{D}}$, που ορίζεται ως εξής:

$$\hat{\mathrm{D}}f(x) = \frac{df}{dx} \tag{3.24}$$

Η (3.24) αντιστοιχεί στην (3.19). Για να βρούμε τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{\mathrm{D}}$, πρέπει να λύσουμε το αντίστοιχο της εξίσωσης (3.20), δηλαδή

$$\hat{\mathrm{D}}f(x) = \lambda f(x) \tag{3.25}$$

όπου λ μια σταθερά. Από τις (3.24) και (3.25), παίρνουμε:

$$\frac{df}{dx} = \lambda f(x) \Rightarrow f(x) = Ae^{\lambda x} \tag{3.26}$$

Άρα, οι ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{\mathrm{D}}$ είναι όλες οι συναρτήσεις της μορφής (3.26), ενώ οι ιδιοτιμές είναι λ (και υπάρχουν άπειρες τέτοιες ιδιοσυναρτήσεις). Τέλος, σημειώνεται ότι ο $\hat{\mathrm{D}}$ δεν είναι ερμιτιανός.

<u>Παράδειγμα 5.1.1 Έλεγχος ερμιτιανότητας</u>

Είναι ο $\hat{\mathrm{D}}$ ερμιτιανός; δηλ. ισχύει ότι $\int \psi^*\hat{\mathrm{D}}\psi dx \overset{?}{=} \int \left(\hat{\mathrm{D}}\psi\right)^*\psi dx$

$$\int \psi^*\hat{\mathrm{D}}\psi dx = \int \psi^*\frac{d\psi}{dx}dx = \psi^*\psi - \int \psi\frac{d\psi^*}{dx}dx = -\int\left(\frac{d\psi^*}{dx}\right)\psi dx = \int\left(-\hat{\mathrm{D}}\psi\right)^*\psi dx$$

και επομένως $\hat{\mathrm{D}}^\dagger = -\hat{\mathrm{D}}$. Ο $\hat{\mathrm{D}}$ είναι παράδειγμα αντιερμιτιανού τελεστή. Με το παράδειγμα του $\hat{\mathrm{D}}$ βλέπουμε γιατί ο $\hat{\mathrm{p}}$ είναι ερμιτιανός:

$$\begin{aligned}\int \psi^*\hat{\mathrm{p}}\psi dx &= \int \psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dx = -i\hbar\psi^*\psi\Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi dx \\ &= \int\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\right]^*\psi dx = \int\left(\hat{\mathrm{p}}\psi\right)^*\psi dx\end{aligned}$$

5.2 <u>Ιδιότητες Ερμιτιανών Τελεστών</u>

Οι τελεστές που πληρούν την (3.17) ονομάζονται «Ερμιτιανοί» και έχουν δυο πολύ σημαντικές ιδιότητες:

α) Οι ιδιοτιμές τους είναι πραγματικοί αριθμοί

β) Οι ιδιοσυναρτήσεις τους είναι «κάθετες» μεταξύ τους, με την έννοια ότι για $m \neq n$, ισχύει: $\int f_n^*(x) f_m(x) dx = 0$

Η (α) αποδεικνύεται ως εξής: Από τον ορισμό της ερμιτιανότητας ισχύει ότι

$$\int \psi^* \hat{A} \psi dx = \int \left(\hat{A} \psi \right)^* \psi dx \text{ για } \forall \psi(x)$$

Παίρνοντας ως $\psi(x)$ μια ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$, έστω την $f_n(x)$, δηλ. ισχύει $\hat{A} f_n(x) = a_n f_n(x)$ όπου a_n η αντίστοιχη ιδιοτιμή

$$a_n \int f_n^* f_n dx = a_n^* \int f_n^* f_n dx \Rightarrow \left(a_n - a_n^* \right) \int |f_n|^2 dx = 0 \Rightarrow a_n = a_n^*$$

Η (β) αποδεικνύεται ως εξής: Έστω δύο διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις $f(x)$ και $g(x)$, ενός ερμιτιανού τελεστή $\hat{Q}$, με ιδιοτιμές q_f και q_g αντίστοιχα:

$$\hat{Q} f(x) = q_f f(x) \text{ και } \hat{Q} g(x) = q_g g(x) \tag{3.27}$$

Εφόσον ο $\hat{Q}$ είναι ερμιτιανός, θα ισχύει:

$$\int f^*(x) \hat{Q} g(x) dx = \int \left(\hat{Q} f(x) \right)^* g(x) dx \tag{3.28}$$

Χρησιμοποιώντας τις (3.27), παίρνουμε

$$q_g \int f^*(x) g(x) dx = q_f^* \int f^*(x) g(x) dx \Rightarrow \left(q_g - q_f \right) \int f^*(x) g(x) dx = 0$$

Και εφ' όσον $q_g \neq q_f$, πρέπει να ισχύει $\int f^*(x) g(x) dx = 0$.

5.2.1 Οι ιδιοσυναρτήσεις ερμιτιανού τελεστή ως βάση ανυσματικού χώρου

Μπορούμε να γενικεύσουμε τη συζήτηση, αν φανταστούμε τις διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{Q}$ ως «ανύσματα» που ορίζονται στο χώρο των μιγαδικών συναρτήσεων. Σε αυτό το χώρο, ορίζουμε το «εσωτερικό γινόμενο» δυο «ανυσμάτων», ως εξής:

$$f \circ g = \int f^*(x) g(x) dx$$

Σημειώνουμε ότι στη βιβλιογραφία χρησιμοποιείται συχνά και ο συμβολισμός

$$(f, g) = f \circ g = \int f^*(x) g(x) dx$$

Σε αναλογία με τη γλώσσα των ανυσμάτων, το «μέτρο» μιας ιδιοσυνάρτησης δίνεται ως

$$\left| \vec{A} \right| = \sqrt{\vec{A} \cdot \vec{A}} \qquad \|f\| = \sqrt{f \circ f} = \left(\int f^*(x) f(x) dx \right)^{1/2}$$

Θεωρώντας, δε, ότι όλες οι συναρτήσεις τις οποίες συναντούμε είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, το ολοκλήρωμα που αντιστοιχεί στο $\|f\|$ υπάρχει και επομένως μπορούμε πάντα να πάρουμε $\|f\|$ μέσω κανονικοποίησης: αν $\|f\| = c \neq 1$, παίρνουμε $f' = f / \sqrt{c}$, και, προφανώς,

$$\|f'\| = 1$$

Επίσης σε αναλογία με τα ανύσματα, λέμε ότι δυο συναρτήσεις $f(x), g(x)$ είναι κάθετες όταν

$$(f, g) \equiv f \circ g \equiv \int f^*(x) g(x) dx = 0$$

Ένα εξαιρετικά σημαντικό αποτέλεσμα της ορθοκανονικότητας είναι ότι οποιαδήποτε συνάρτηση, έστω $\psi(x)$, μπορεί να αναπτυχθεί ως υπέρθεση των ιδιοσυναρτήσεων ενός Ερμιτιανού τελεστή. Έστω ο τελεστής $\hat{\mathrm{Q}}$, με ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις που δίδονται από την (3.21). Τότε, κάθε $\psi(x)$ μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + ... + c_m\varphi_m(x) + ... \qquad (3.29)$$

Η απόδειξη της πρότασης (θεωρήματος) είναι η εύρεση των σταθερών $c_1, ..., c_m, ...$. Αυτό γίνεται με πολλαπλασιασμό της (3.29) με $\varphi_n^*(x)$ και ολοκλήρωση:

$$\begin{aligned}\int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx &= c_1\int \varphi_n^*(x)\varphi_1(x)dx + ... \\ &+ c_m\int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx + ... + c_n\int \varphi_n^*(x)\varphi_n(x)dx + ...\end{aligned} \qquad (3.30)$$

Η ορθοκανονικότητα των $\varphi_n(x)$ σημαίνει πως όλοι οι όροι στη δεξιά πλευρά της (3.30) μηδενίζονται, με εξαίρεση τον όρο

$$c_n\int \varphi_n^*(x)\varphi_n(x)dx = c_n$$

Επομένως, οι σταθερές c_n δίδονται ως

$$c_n = \int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx \qquad (3.31)$$

Εφόσον υπάρχει το ολοκλήρωμα στην (3.31) (και υπάρχει εφόσον εξ’ ορισμού θεωρούμε ότι οι $\varphi_n(x)$ και η $\psi(x)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες) υπάρχουν οι σταθερές c_n.

Η ως άνω ανάλυση μπορεί να γραφτεί πολύ πιο σύντομα με χρήση του συμβόλου του αθροίσματος. Η (3.29) γράφεται ως

$$\psi(x) = \sum_j c_j\varphi_j(x)$$

Πολλαπλασιάζοντας με φ_n^* και ολοκληρώνοντας:

$$\int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx = \int \varphi_n^* \sum_j c_j\varphi_j(x)dx$$

Αλλάζοντας τη σειρά των δυο αθροισμάτων (δηλ. του ολοκληρώματος ως προς x και του αθροίσματος ως προς j) παίρνουμε

$$\int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx = \sum_j c_j\int \varphi_n^*(x)\varphi_j(x)dx = \sum_j c_j\delta_{nj} = c_n$$

<u>Παράδειγμα 5.2.1.1</u>

Έστω $f_1(x)$ και $f_2(x)$ δυο (κανονικοποιημένες) ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή, που αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή. Εάν ισχύει

$$\int f_1^*(x) f_2(x) dx = d$$

όπου d πραγματικός αριθμός, και $d \neq 0$, βρείτε γραμμικούς συνδυασμούς των $f_1(x)$ και $f_2(x)$ που να είναι κάθετοι (α) στην $f_1(x)$ και (β) στην $f_1 + f_2$.

α) Έστω $g_1(x) = c_1 f_1 + c_2 f_2$ ο συνδυασμός που είναι κάθετος στην $f_1(x)$: $f_1 \circ g_1 = 0$ δηλ.

$$\int f_1^*(c_1 f_1 + c_2 f_2) dx = 0 \Rightarrow c_1 + c_2 \cdot d = 0 \Rightarrow c_1 = -dc_2$$

Η κανονικοποίηση της g_1 μας δίνει:

$$\begin{aligned} g_1 \circ g_1 &= (c_1 f_1 + c_2 f_2) \circ (c_1 f_1 + c_2 f_2) = |c_1|^2 \|f_1\|^2 + c_1^* c_2 f_1 \circ f_2 + c_1 c_2^* f_2 \circ f_1 + |c_2|^2 \|f_2\|^2 \\ &= |c_1|^2 + |c_2|^2 + d\left(c_1^* c_2 + c_1 c_2^*\right) = d^2 |c_2|^2 + |c_2|^2 + d\left(-d|c_2|^2 - d|c_2|^2\right) \\ &= |c_2|^2 \left(1 - d^2\right) = 1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |c_2| = \frac{1}{\sqrt{1-d^2}} \qquad |c_1| = -\frac{d}{\sqrt{1-d^2}}$$

$$g_1(x) = -\frac{d}{\sqrt{1-d^2}} f_1(x) + \frac{1}{\sqrt{1-d^2}} f_2(x) \tag{3.32}$$

Στην (3.32) πήραμε τους $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$. Αν δεν είναι, τότε γράφονται ως

$$c_1 = -d|c_2|e^{-i\omega} \qquad c_2 = |c_2|e^{-i\omega}$$

Ο παράγοντας $e^{-i\omega}$ είναι κοινός:

$$g_1(x) = e^{-i\omega}\left(-\frac{d}{\sqrt{1-d^2}} f_1(x) + \frac{1}{\sqrt{1-d^2}} f_2(x)\right)$$

και εφόσον η ολική φάση δεν είναι παρατηρήσιμη, μπορούμε να πάρουμε $\omega = 0$.

β) Καθετότητα της $g_1(x)$ με $f_1 + f_2$ δίνει:

$$\begin{aligned} g_1 \circ (f_1 + f_2) &= (c_1 f_1 + c_2 f_2) \circ (f_1 + f_2) = c_1 \|f_1\|^2 + c_2 \|f_2\|^2 + c_1 f_1 \circ f_2 + c_2 f_2 \circ f_1 \\ &= c_1 + c_2 + (c_1 + c_2) d = (c_1 + c_2)(1 + d) = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow g_1(x) = \frac{f_1(x) - f_2(x)}{\sqrt{2-2d}} \tag{3.33}$$

Σημ.: αποδείξτε την (3.33) μέσω της κανονικοποίησης.

5.2.2 <u>Ερμιτιανή συζυγία</u>

Ο ερμιτιανός συζυγής ενός τελεστή $\hat{A}$ συμβολίζεται με $\hat{A}^\dagger$ και ορίζεται ως εκείνος ο τελεστής που πληροί την εξίσωση

$$\left(f,\hat{A}g\right)=\left(\hat{A}^\dagger f,g\right) \text{ δηλαδή } \int f^*\hat{A}g dx=\int\left(\hat{A}^\dagger f\right)^* g dx$$

Προφανώς, ένας τελεστής $\hat{B}$ είναι ερμιτιανός όταν

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

Στα ακόλουθα κοιτάμε μερικές ιδιότητες της ερμιτιανής συζυγίας.

1. Για μιγαδικό αριθμό c, ο ερμιτιανός συζυγής είναι απλώς ο μιγαδικός συζυγής: $c^\dagger = c^*$:

$$\int \psi^* c\psi dx=\int c\psi^*\psi dx=\int\left(c^*\right)^*\psi^*\psi dx=\int\left(c^*\psi\right)^*\psi dx=\int\left(c^*\psi\right)^*\psi dx$$

2. Για δυο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$, $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$:

$$\int\psi^*\hat{A}\hat{B}\psi dx=\int\left(\hat{A}^\dagger\psi\right)^*\hat{B}\psi dx=\int\left(\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\psi\right)^*\psi dx=\int\left[\left(AB\right)^\dagger\psi\right]^*\psi dx\Rightarrow\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$$

3. Αν $\hat{A},\hat{B}$ δυο ερμιτιανοί τελεστές, τότε:

$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ είναι επίσης ερμιτιανός

$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ δεν είναι ερμιτιανός (είναι αντιερμιτιανός)

$$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}^\dagger=\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger+\left(\hat{B}\hat{A}\right)^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger+\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger=\hat{B}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}=\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}$$
$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]^\dagger=\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger-\left(\hat{B}\hat{A}\right)^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger-\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger=\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B}=-\left[\hat{A},\hat{B}\right]$$

4. Το γινόμενο δυο ερμιτιανών τελεστών δεν είναι αναγκαστικά ερμιτιανός τελεστής. Από το (2) έχουμε

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger=\hat{B}\hat{A}\neq\hat{A}\hat{B} \text{ (εκτός και αν } \left[\hat{A},\hat{B}\right]=0\text{)}$$

5. $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger=\hat{A}$

Από τον ορισμό του ερμιτιανού συζυγή:

$$I=\int\psi^*\hat{A}\psi dx=\int\left(\hat{A}^\dagger\psi\right)^*\psi dx \tag{3.34}$$

$$\Rightarrow I^*=\int\left(\hat{A}\psi\right)^*\psi dx=\int\left(\hat{A}^\dagger\psi\right)\psi^* dx=\int\psi^*\left(\hat{A}^\dagger\psi\right)dx$$

Αντικαθιστώντας $\hat{A}\to\hat{A}^\dagger$:

$$\int\left(\hat{A}^\dagger\psi\right)^*\psi dx=\int\psi^*\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger\psi dx \tag{3.35}$$

Συγκρίνοντας τις (3.34) και (3.35) παίρνουμε

$$\int \psi^* \hat{A} \psi = \int \psi^* \left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger \psi dx \Rightarrow \left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}$$

6. Κβαντική μέτρηση

Έχουμε πλέον όλα τα στοιχεία για να αποδείξουμε την εξής πρόταση: όταν η κυματοσυνάρτηση ενός συστήματος $\psi(x)$ είναι ιδιοσυνάρτηση ενός τελεστή, έστω του $\hat{A}$, τότε μέτρηση του $\hat{A}$ δίνει με **βεβαιότητα** την ιδιοτιμή που αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση αυτή. Δηλαδή, αν οι ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{A}$ δίδονται ως εξής:

$$\hat{A} f_n = a_n f_n$$

και ένα κβαντικό σύστημα έχει "κατασκευαστεί" (ή "προετοιμαστεί") έτσι ώστε η κυματοσυνάρτηση του να είναι $\psi(x) = f_m(x)$, τότε η μέτρηση του A θα δώσει <u>σίγουρα</u> a_m. Απόδειξη:

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx = \int f_m^* \hat{A} f_m dx = \int f_m^* a_m f_m dx = a_m \int f_m^* f_m dx = a_m$$

Ακολούθως, θα υπολογίσουμε τη διασπορά, ΔA. Γι' αυτό χρειαζόμαστε το $\langle A^2 \rangle$:

$$\langle A^2 \rangle = \int \psi^* \hat{A}^2 \psi dx = \int \psi^* \hat{A}\hat{A} \psi dx = \int f_m^* \hat{A} a_m f_m dx = a_m \int f_m^* a_m f_m dx = a_m^2$$

Η διασπορά είναι λοιπόν

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

Επομένως, μετράμε πάντα a_m, δηλαδή είμαστε σίγουροι ότι μέτρηση του A θα δώσει a_m.

Μήπως ισχύει και το αντίστροφο; Έστω ότι θέλουμε η μέτρηση του $\hat{A}$ να δώσει σίγουρα a_j. Ποια πρέπει να είναι η κυματοσυνάρτηση; Η απάντηση είναι η ιδιοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή a_j, δηλ. η μέτρηση A δίνει $a_j \Rightarrow$

$$\psi \equiv f_j(x)$$

Απόδειξη: εφ' όσον δίνει πάντα μια τιμή, την a_j, θα πρέπει $\Delta A = 0$. Επομένως:

$$(\Delta A)^2 = 0 \Rightarrow \left\langle \left(A - \langle A \rangle\right)^2 \right\rangle = 0 \Rightarrow \int \psi^* \left[\hat{A} - \langle A \rangle\right]^2 \psi dx = 0$$

$$\int \psi^* \left[\hat{A} - \langle A \rangle\right]\left[\hat{A} - \langle A \rangle\right] \psi dx = \int \left[\left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi\right]^* \left[\left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi\right] dx = 0$$

$$\Rightarrow \int \left|\left[\hat{A} - \langle A \rangle\right]\psi\right|^2 dx = 0 \qquad (3.36)$$

Ωστόσο, επειδή $\left|\left[\hat{A} - \langle A \rangle\right]\psi\right|^2 \geq 0$, η (3.36) δίνει

$$\left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi = 0 \Rightarrow \hat{A}\psi = \langle A \rangle \psi$$

Άρα, για να είναι η διασπορά μηδέν, η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$ (με ιδιοτιμή $\langle A \rangle$). Είναι δε προφανές ότι αν θέλουμε η μέτρηση να δίνει a_j, θα έχουμε $\langle A \rangle = a_j$ και επομένως ισχύει $\hat{A}\psi = a_j\psi$ δηλ. $\psi = f_j(x)$.

<u>Περίληψη</u>

- Όταν $\psi(x) = f_j(x) \Rightarrow$ Μέτρηση του A δίνει σίγουρα a_j.
- Όταν θέλουμε να είμαστε σίγουροι ότι μέτρηση του A θα δώσει a_j, πρέπει $\psi(x) = f_j(x)$.

Εν ολίγοις: $\psi(x) = f_j(x) \Leftrightarrow$ Μέτρηση του A δίνει σίγουρα a_j.

Τα ως άνω μας οδηγούν στο ακόλουθο συμπέρασμα: Αμέσως μετά από μια μέτρηση του A που έδωσε ως αποτέλεσμα a_j, η κυματοσυνάρτηση <u>πρέπει</u> να είναι η f_j, έτσι ώστε αν επαναληφθεί <u>αμέσως μετά</u> η ίδια μέτρηση, να πάρουμε πάλι ως αποτέλεσμα την τιμή a_j. «Αμέσως μετά» σημαίνει σε χρόνο $\delta t \to 0$ από την πρώτη μέτρηση. Στο επόμενο κεφάλαιο θα δούμε τι συμβαίνει όταν περνάει ένα χρονικό διάστημα t. Επομένως, καταλήγουμε ότι αμέσως μετά από μια μέτρηση μιας φυσικής ποσότητας η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι η ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή που μετρήσαμε.

Και τι γίνεται όταν η $\psi(x)$ δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{A}$; Απάντηση: τότε βρίσκουμε μια από τις ιδιοτιμές $a,...,a_n$ με πιθανότητα εμφάνισης της κάθε μιας που δίδεται από το ανάπτυγμα της $\psi(x)$, ενώ η πιθανότητα εμφάνισης της τιμής a_m είναι $|c_m|^2$.

Απόδειξη:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \int \psi^* \hat{A}\psi dx = \int (\Sigma_m c_m f_m)^* \hat{A}(\Sigma_n c_n f_n) dx \\ &= \int \Sigma_m c_m^* f_m^* \Sigma_n c_n a_n f_n dx = \Sigma_m \Sigma_n c_m^* c_n a_n \int f_m^* f_n dx \\ &= \Sigma_m \Sigma_n c_m^* c_n a_n \delta_{mn} = \Sigma_m c_m^* c_m a_m = \Sigma_m |c_m|^2 a_m\end{aligned} \tag{3.37}$$

Μα αν οι πιθανές τιμές μιας ποσότητας είναι $a_1,...,a_n$, ο μέσος όρος του Α είναι

$$\langle A \rangle = a_1 p(a_1) + ... + a_n p(a_n) = \Sigma_n a_n p(a_n) \tag{3.38}$$

Συγκρίνοντας τις (3.37) και (3.38), βλέπουμε πως ταυτίζονται αν ερμηνεύσουμε την $|c_m|^2$ ως την αντίστοιχη πιθανότητα εμφάνισης της a_m:

$$p(a_m) = |c_m|^2 \tag{3.39}$$

Για να ισχύει η ερμηνεία που δίδεται στην (3.39), θα πρέπει να ισχύει $\Sigma_m p(a_m) = 1$. Αυτό όντως ισχύει αυτόματα αν η $\psi(x)$ είναι κανονικοποιημένη, δηλ. $\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$:

$$\int \psi^* \psi dx = \int \Sigma_m c_m^* f_m^* \Sigma_n c_n f_n dx = \Sigma_m \Sigma_n c_m^* c_n \int f_m^* f_n dx = \Sigma_m \Sigma_n c_m^* c_n \delta_{mn} = \Sigma_m |c_m|^2 = 1$$

Τα ως άνω μας οδηγούν στην 3η Κβαντομηχανική Αρχή: Μέτρηση φυσικής ποσότητας, έστω A, με τελεστή $\hat{A}$, δίνει μια από τις ιδιοτιμές του $\hat{A}: a_1, a_2, \ldots a_n$, ενώ η μέση τιμή δίδεται ως

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

7. <u>Παραδείγματα</u>

<u>Παράδειγμα 7.1</u>

Σωμάτιο σε απειρόβαθο πηγάδι $[0, L]$ έχει κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_3(x) + \frac{1+i}{\sqrt{3}} \varphi_6(x)$$

όπου $\varphi_n(x)$ οι ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$. Ποιες οι δυνατές τιμές της ενέργειας και ποια η πιθανότητα εμφάνισής τους;

Απάντηση: η $\psi(x)$ έχει ήδη δοθεί ως γραμμικός συνδυασμός των $\varphi_n(x)$. Επιπλέον είναι κανονικοποιημένη:

$$\int \left|\psi(x)\right|^2 dx = \frac{1}{3} \int \left|\varphi_3(x)\right|^2 dx + \frac{2}{3} \int \left|\varphi_6(x)\right|^2 dx + \frac{1+i}{3} \int \varphi_3^*(x) \varphi_6(x) dx$$
$$+ \frac{1-i}{3} \int \varphi_3(x) \varphi_6^*(x) dx = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} = 1$$

Το τρίτο και τέταρτο ολοκλήρωμα είναι μηδέν λόγω της ορθοκανονικότητας των $\varphi_n(x)$, ενώ το πρώτο και δεύτερο είναι 1 (για τον ίδιο λόγο). Επομένως οι πιθανότητες εμφάνισης είναι

$$p(E_3) = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1}{3}; \quad p(E_6) = \left|\frac{1+i}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1+1}{3} = \frac{2}{3}; \quad p(E_n \neq E_3 \neq E_6) = 0$$

<u>Παράδειγμα 7.2</u>

Σωμάτιο σε απειρόβαθο πηγάδι έχει κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = A \sin\frac{3\pi x}{L} \cos\frac{\pi x}{L}$$

Ποιες είναι οι πιθανές τιμές της ενέργειάς του και με ποια πιθανότητα εμφάνισης;

<u>Τρόπος (α):</u> αναπτύσσουμε την $\psi(x)$ ως άθροισμα των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή που αντιστοιχεί στην ποσότητα που θέλουμε να μετρήσουμε, δηλ. της Χαμιλτονιανής, αφού θέλουμε την ενέργειά του. Στο απειρόβαθο πηγάδι, αυτές είναι οι γνωστές $\varphi_n(x)$ της (3.9). Παρατηρώντας την $\psi(x)$ βλέπουμε ότι είναι ένα απλό άθροισμα δυο ημιτόνων:

$$2 \sin a \cos b = \sin(a+b) + \sin(a-b)$$

και επομένως,

$$\psi(x) = \frac{A}{2} \left\{ \sin\frac{4\pi x}{L} + \sin\frac{2\pi x}{L} \right\} = \frac{A}{2} \sqrt{\frac{L}{2}} \left\{ \varphi_4(x) + \varphi_2(x) \right\}$$

Επομένως, στο ανάπτυγμα

$$\psi(x)=\sum_n c_n\varphi_n(x)$$

μόνο δυο συντελεστές, οι c_2 και c_4 είναι μη μηδενικοί. Άρα οι μόνες δυνατές τιμές της ενέργειας είναι η E_2 και η E_4. Η πιθανότητα εμφάνισης τους θα ήταν $|c_2|^2$ και $|c_4|^2$ αντίστοιχα, ΑΝ το A είχε υπολογισθεί μέσω της κανονικοποίησης της $\psi(x)$. Επομένως οι πιθανότητες εμφάνισης των E_2 και E_4 είναι

$$p(E_2)=\frac{|c_2|^2}{|c_2|^2+|c_4|^2} \qquad p(E_4)=\frac{|c_4|^2}{|c_2|^2+|c_4|^2}$$

όπου $c_2=A\sqrt{L}/2\sqrt{2}$ και $c_4=A\sqrt{L}/2\sqrt{2}$. Επομένως,

$$p(E_2)=p(E_n)=1/2$$

<u>Τρόπος (β):</u> γράφοντας $\psi(x)=\sum_n c_n\varphi_n(x)$, έχουμε άμεσα ότι

$$c_n=\int\varphi_n^*(x)\psi(x)dx$$

Επομένως η πιθανότητα εμφάνισης της $E_n, p(E_n)$ είναι $|c_n|^2$ εφ' όσον βρούμε το A:

$$c_n=A\sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L\sin\frac{3\pi x}{L}\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{n\pi x}{L}dx$$

Εδώ βλέπουμε ότι το ολοκλήρωμα είναι πολύ πιο δύσκολο από τον υπολογισμό με τον τρόπο (α). Σημειώνουμε ότι αυτή η μέθοδος "δουλεύει" πάντα - δεν είναι όμως αναγκαστικά η πιο γρήγορη ή αποτελεσματική.

<u>Παράδειγμα 7.3</u>

Σε ένα απειρόβαθο πηγάδι, η κυματοσυνάρτηση δίδεται ως:

$\psi(x)=ax$ για $x\le\frac{L}{2}$ και

$\psi(x)=a(L-x)$ για $x>\frac{L}{2}$

α) Υπολογίστε τη μέση τιμή της θέσης του σωματιδίου και τη διασπορά στη θέση.

β) Έστω ότι μετράμε την ενέργεια του σωματιδίου. Ποιες τιμές θα βρούμε και με ποια πιθανότητα;

Ως πρώτο βήμα, κανονικοποιούμε την $\psi(x)$ έτσι ώστε όλες οι μέσες τιμές να υπολογίζονται από τον τύπο

$$\langle x\rangle=\int x|\psi(x)|^2dx$$

χωρίς δηλ. να χρειάζεται να διαιρούμε με το ολοκλήρωμα $\int|\psi(x)|^2dx$.

Οπότε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^{L/2} a^2 x^2 dx + \int_{L/2}^{L} a^2 (L-x)^2 dx = \frac{a^2 L^3}{12} = 1$$

και άρα:

$$\psi(x) = \left(\frac{12}{L^{3/2}}\right) x \qquad\qquad \psi(x) = \left(\frac{12}{L^{3/2}}\right)(L-x)$$

α) Η μέση τιμή υπολογίζεται ως εξής:

$$\langle x \rangle = \int_0^{L/2} x \left|a^2 x^2\right| dx + \int_{L/2}^{L} x a^2 \left|L-x\right|^2 dx = a^2 \left\{ \int_0^{L/2} x^3 dx + \int_{L/2}^{L} x (L-x)^2 dx \right\} = \frac{L}{2}$$

Για τη διασπορά χρειαζόμαστε το $\langle x^2 \rangle$:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{L/2} x^2 [ax]^2 dx + \int_{L/2}^{L} x^2 [a(L-x)]^2 dx$$

Ο υπολογισμός είναι απλός, μολονότι έχει μπόλικη άλγεβρα. Το αποτέλεσμα είναι τελικά $(\Delta x)^2 = 1/40$.

Ένας πιο εύκολος (αλγεβρικά) τρόπος υπολογισμού του Δx^2 είναι να χρησιμοποιήσουμε απευθείας τον ορισμό:

$$(\Delta x)^2 = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle \left(x - \frac{L}{2}\right)^2 \right\rangle = \int_0^{L/2} \left(x - \frac{L}{2}\right)^2 a^2 x^2 dx + \int_{L/2}^{L} \left(x - \frac{L}{2}\right)^2 a^2 (L-x)^2 dx = I_1 + I_2$$

Το I_2 είναι ίσο με το I_1, μέσω της αλλαγής μεταβλητής

$$y = x - \frac{L}{2}: \; I_2 = \int_0^{L/2} y^2 a^2 \left(\frac{L}{2} - y\right)^2 dy = I_1$$

και άρα

$$(\Delta x)^2 = 2a^2 \int_0^{L/2} x^2 \left(\frac{L}{2} - x\right)^2 dx = \frac{a^2}{16} \int_0^{L} x^2 (L-x)^2 dx = \frac{a^2 L^5}{30 \times 16}$$

και εφόσον $a^2 L^3 = 12$, παίρνουμε $(\Delta x)^2 = 1/40$.

β) Σε μέτρηση της ενέργειας, θα βρούμε, προφανώς, μια από τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής στο απειρόβαθο πηγάδι. Η πιθανότητα εμφάνισης της κάθε ιδιοτιμής βρίσκεται από τους συντελεστές c_n γράφοντας την $\psi(x)$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων, $\varphi_n(x)$, της $\hat{\mathrm{H}}$:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

Η πιθανότητα εμφάνισης της E_n, $p(E_n) = |c_n|^2$. Άρα χρειαζόμαστε απλώς τους c_n. Αυτοί δίδονται ως

$$c_n = \int_0^{L} \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$$

με απλή αντικατάσταση των $\varphi_n\left(x\right)$ από την (3.9):

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^{L/2} \sin\frac{n\pi x}{L} axdx + \sqrt{\frac{2}{L}}\int_{L/2}^{L} \sin\frac{n\pi x}{L} a\left(L-x\right)dx$$

Ο υπολογισμός των c_n απλοποιείται με την αλλαγή μεταβλητής $y = x - \frac{L}{2}$, δηλ. $x = y + \frac{L}{2}$.

Οι λεπτομέρειες αφήνονται στον αναγνώστη.

8. <u>Μαθηματικό συμπλήρωμα</u>

8.1 <u>Πιθανότητα, μέση τιμή</u>

Έστω μεταβλητή a που παίρνει τις τιμές $a_1,...,a_n$ με πιθανότητα εμφάνισης $p_1,...,p_n$ αντίστοιχα. Η μέση τιμή ορίζεται ως

$$\langle a\rangle = a_1 p_1 + ... + a_n p_n \tag{3.40}$$

Η (3.40) ισχύει για την περίπτωση που $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$. Αν δεν ισχύει αυτό, τότε η μέση τιμή υπολογίζεται ως

$$\langle a\rangle = \frac{\sum_i a_i p_i}{\sum_i a_i}$$

Αν τώρα η a παίρνει συνεχείς τιμές σε κάποιο διάστημα των πραγματικών αριθμών, η πιθανότητα εμφάνισης $p_1,...,p_n$ μετατρέπεται σε πυκνότητα πιθανότητας:

$$\Sigma_i p(a_i) = 1 \Rightarrow \int dap(a) = 1$$

Η (3.40) τώρα γράφεται:

$$\langle a\rangle = \int daap(a)$$

Αν η $p(a)$ δεν είναι κανονικοποιημένη: $\langle a\rangle = \dfrac{\int p(a)ada}{\int p(a)da}$

Η διασπορά ορίζεται ως $(\Delta a)^2 = \left\langle \left(a - \langle a\rangle\right)^2 \right\rangle = \langle a^2\rangle - \langle a\rangle^2$. Η μέση τιμή του a^2 δίδεται ως:

$$\langle a^2\rangle = \int a^2 p(a)da$$

Γενικότερα,

$$\langle a^n\rangle = \int a^n p(a)da$$

<u>Παράδειγμα 8.1</u>

Ρίχνοντας ένα ζάρι πολλές φορές, περιμένουμε

$$q = \langle q\rangle = \sum_n q_n p(q_n) = 1\cdot\frac{1}{6} + 2\cdot\frac{1}{6} + 3\cdot\frac{1}{6} + ... + 6\cdot\frac{1}{6} = 3.5$$

$$\langle q^2\rangle = 1^2\cdot\frac{1}{6} + 2^2\cdot\frac{1}{6} + 3^2\cdot\frac{1}{6} + ... = \frac{1}{6}\cdot(1+4+9+16+25+36) = \frac{91}{6}$$

$$(\delta q)^2 = \frac{91}{6} - \frac{49}{4} = \frac{2\cdot 91 - 3\cdot 49}{12} = \frac{182-147}{12} = \frac{35}{12}$$

και επομένως, η μέση τιμή είναι 3.5 με διασπορά $\delta q \sim 1.7$.

<u>Παράδειγμα 8.2</u>

Έστω η τυχαία μεταβλητή q, και η πυκνότητα πιθανότητας $\begin{cases} p(q) = aq \quad \text{για} \;\; 0 \le q \le L \\ p(q) = 2aL - aq \quad \text{για} \;\; L \le q \le 2L \end{cases}$

Υπολογισμός της μέσης τιμής:

$$\begin{aligned}\langle q \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} p(q)\, q dq = \int_0^L p_1(q)\, q dq + \int_L^{2L} p_2(q)\, q dq \\ &= \frac{1}{3} aq^3\Big|_0^L + \left[2aL\left(\frac{q^2}{2}\right) - \frac{aq^3}{3}\right]\Bigg]_L^{2L} \\ &= \frac{aL^3}{3} + 2aL\left(\frac{4L^2}{2} - \frac{L^2}{2}\right) - \frac{a}{3}\left(8L^3 - L^3\right) = \frac{aL^3}{3} + 3aL^3 - \frac{7aL^3}{3} = aL^3\end{aligned}$$

Επειδή η $p(q)$ δεν είναι κανονικοποιημένη, πρέπει να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα:

$$\int p(q)\, dq = \int_0^{2L} p(q)\, dq = \frac{1}{2} aq^2\Big|_0^L + \left(2aLq - \frac{1}{2} aq^2\right)_L^{2L} = aL^2$$

και επομένως, τελικά:

$$\langle q \rangle = \frac{\int qp(q) dq}{\int p(q)\, dq} = \frac{aL^3}{aL^2} = L$$

το οποίο και αναμενόταν και μόνο "κοιτάζοντας" την $p(q)$ λόγω της συμμετρίας της ως προς $q = L$. Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να ξεκινήσουμε κανονικοποιώντας την $p(q)$:

$$\int p(q)\, dq = 1 \Rightarrow aL^2 = 1 \Rightarrow a = \frac{1}{L^2}$$

δηλ.

$$p_1(q) = \frac{1}{L^2} q \qquad p_2(q) = \frac{1}{L^2}(2L - q)$$

και επομένως

$$\langle q \rangle = L^3 \cdot \frac{1}{L^2} = L$$

Υπολογισμός διασποράς:

$$\left\langle q^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 p(q)\, dq = \int_0^L q^2 \frac{1}{L^2} q dq + \int_L^{2L} \frac{1}{L^2} \cdot (2L - q) q^2 dq = \frac{7}{6} L^2$$

και επομένως

$$(\Delta q)^2 = \left\langle q^2 \right\rangle - \langle q \rangle^2 = \frac{7}{6} L^2 - L^2 = \frac{L^2}{6} \Rightarrow \Delta q = \frac{L}{\sqrt{6}}$$

<u>Παράδειγμα 8.3</u>

Έστω η τυχαία μεταβλητή q, και η πυκνότητα πιθανότητας $p(q) = a$ για $0 \le q \le L$ και $p(q) = 0$ για $q < 0$ ή $q > L$. Υπολογισμός μέσης τιμής:

Πρώτα κανονικοποιούμε:

$$\int_0^L p(q)dq = 1 \Rightarrow \int_0^L a dq = 1 \Rightarrow a = 1/L$$

και άρα

$$\langle q \rangle = \int_0^L q p(q) dq = \int_0^L q \frac{1}{L} dq = \left. \frac{q^2}{2L} \right|_0^L = \frac{1}{2}$$

Για τον υπολογισμό της διασποράς χρειαζόμαστε το $\langle q^2 \rangle : \Delta q^2 = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$.

Έχουμε:

$$\langle q^2 \rangle = \int_0^L q^2 p(q) dq = \frac{1}{L} \int_0^L q^2 dq = \left. \frac{1}{L} \frac{q^3}{3} \right|_0^L = \frac{L^2}{3}$$

και επομένως $\Delta q = \sqrt{\frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{4}} = \frac{L}{\sqrt{12}}$ (ένα πολύ γνωστό αποτέλεσμα από τη βασική στατιστική/πιθανότητες).

8.2 <u>Παραδείγματα τελεστών</u>

$\hat{\mathrm{D}} = \frac{\partial}{\partial x}$	$\hat{\mathrm{D}}\phi(x) = \frac{\partial \phi}{\partial x}$
$\hat{\Delta} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\hat{\mathrm{D}}^2$	$\hat{\Delta}\phi(x) = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$
$\hat{\mathrm{M}} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$	$\hat{\mathrm{M}}\varphi(x,y) = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}$
$\hat{\mathrm{I}} = 1$	$\hat{\mathrm{I}}\varphi(x,y) = \varphi(x,y)$
$\hat{\mathrm{Q}} = \int_0^1 dx'$	$\hat{\mathrm{Q}}\varphi(x) = \int_0^1 \varphi(x') dx' = c$ (αριθμός)
$\hat{\mathrm{F}} =$ πολλαπλ. με $F(x)$	$\hat{\mathrm{F}}\varphi(x) = F(x)\varphi(x)$
$\hat{\mathrm{B}}_3 =$ διαίρεση με 3	$\hat{\mathrm{B}}_3\varphi(x) = \varphi(x)/3$
$\hat{\Theta}$: μηδενισμός	$\hat{\Theta}\varphi(x) = 0$
$\hat{\mathrm{P}}$: συγκεκριμένο πολυώνυμο	$\hat{\mathrm{P}}\varphi(x) = \varphi^3 - 3\varphi^2 - 4$
$\hat{\mathrm{G}}$: πάντα ο αριθμός 8	$\hat{\mathrm{G}}\varphi(x) = 8$
$\hat{\mathrm{T}}_0$: η τιμή στο $\varnothing$	$\hat{\mathrm{T}}_0\varphi(x) = \varphi(0)$

Υπολογισμός τετραγώνων:

$$\hat{\mathrm{D}}^2 = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{\Delta}^2 = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = +\frac{\partial^4}{\partial x^4}$$

$$\hat{\mathrm{M}}^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\right) = \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2}$$

$$\hat{\mathrm{I}}^2 = \hat{\mathrm{I}}$$

$$\hat{\mathrm{Q}}^2 = \int_0^1 dx' \int_0^1 dx'' \qquad \hat{\mathrm{Q}}\varphi(x) = \int_0^1 \varphi(x')dx'$$

$$\Rightarrow \hat{\mathrm{Q}}^2\varphi(x) = \hat{\mathrm{Q}}c = \int_0^1 c dx' = c$$

$$\hat{\mathrm{F}}^2\varphi(x) = F^2(x)\varphi(x)$$

$$\hat{\mathrm{B}}^2\varphi(x) = \frac{1}{9}\varphi(x)$$

$$\hat{\Theta}^2 = 0$$

$$\hat{\mathrm{P}}^2 = \left(\varphi^3 - 3\varphi^2 - 4\right)^3 - 3\left(\varphi^3 - 3\varphi^2 - 4\right)$$

$$\hat{\mathrm{G}}^2\varphi(x) = \frac{1}{64}\varphi(x)$$

Ορισμός αντίστροφου τελεστή:

$$\left(\hat{\mathrm{A}}\right)^{-1}\hat{\mathrm{A}}\varphi = \hat{\mathrm{I}}\varphi = \varphi$$

$$\hat{\mathrm{D}}\varphi(x) = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \to \int dx' \frac{\partial \varphi}{\partial x'} = \varphi(x) - \varphi(0)$$

$$\left[\hat{\mathrm{D}}^{-1} = \varphi(0) + \int_0^x dx'\right] = \hat{\mathrm{T}}_0 + \hat{\mathrm{Q}}(x)$$

$$\left(\hat{\mathrm{I}}\right)^{-1} = \hat{\mathrm{I}} \qquad \hat{\mathrm{F}}\varphi(x) = F(x)\varphi(x) \Rightarrow \hat{\mathrm{F}}^{-1} = \frac{1}{F(x)}$$

$$\hat{\mathrm{B}}_3 \Rightarrow \hat{\mathrm{B}}_3^{-1} = \hat{\mathrm{F}}_3$$

$\left(\hat{\Theta}\right)^{-1}$: δεν υπάρχει

$\left(\hat{\mathrm{G}}\right)^{-1}$: δεν υπάρχει

Γραμμικοί τελεστές:

$$\hat{\mathrm{Q}}\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = a\hat{\mathrm{O}}\varphi_1 + b\hat{\mathrm{O}}\varphi_2$$

Αποδείξτε ότι όλοι οι ως άνω τελεστές, πλην του $\hat{\mathrm{P}}$, είναι γραμμικοί.