Μεταθέτης δύο τελεστών.

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

$$(\hat{A}\hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f), \quad (\hat{B}\hat{A})f = \hat{B}(\hat{A}f).$$

Ιδιότητες.

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

$[\hat{A}, \beta\hat{B}+\gamma\hat{C}] = \beta[\hat{A},\hat{B}] + \gamma[\hat{A},\hat{C}]$

$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$

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

$= \underline{\hat{A}\hat{B}}\hat{C} - \underline{\hat{B}\hat{A}}\hat{C} + \hat{B}\underline{\hat{A}\hat{C}} - \hat{B}\underline{\hat{C}\hat{A}} = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}].$

$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] = 0$ (Jacobi)

1. Να δειχθεί ότι: $[\hat{p}, \hat{x}^n] = -i\hbar n \hat{x}^{n-1}$, $[\hat{p}, \hat{f}(\hat{x})] = -i\hbar \frac{d\hat{f}}{dx}(\hat{x})$.

$[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n \hat{p}^{n-1}$, $[\hat{x}, \hat{g}(\hat{p})] = -i\hbar \frac{d\hat{g}}{dp}(\hat{p})$.

Συνάρτηση τελεστού $\hat{f}(\hat{A})$:

εάν $f(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \dots + c_n x^n + \dots$ αναλυτική συνάρτηση

$\downarrow$

$\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1\hat{A} + c_2\hat{A}^2 + \dots + c_n\hat{A}^n + \dots$

$$\frac{df(x)}{dx} = c_1 + 2c_2 x + \dots + n c_n x^{n-1} + \dots$$

$\downarrow$

$$\frac{d\hat{f}}{dA}(\hat{A}) = c_1 + 2c_2\hat{A} + \dots + n c_n \hat{A}^{n-1} + \dots$$

Απόδειξη με μαθηματική επαγωγή.

π.χ. $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

Έστω $[\hat{x}, \hat{p}^{k}] = i\hbar k \hat{p}^{k-1} \Rightarrow$

$$[\hat{x}, \hat{p}^{k+1}] = [\hat{x}, \hat{p}^{k}\hat{p}] = \hat{p}^{k} \underbrace{i\hbar}_{[\hat{x},\hat{p}]} + \underbrace{i\hbar k \hat{p}^{k}}_{[\hat{x},\hat{p}^{k}]} \hat{p} = i\hbar (k+1) \hat{p}^{k}$$

Εάν $\hat{g}(\hat{p}) = c_0 + c_1\hat{p} + c_2\hat{p}^2 + \dots + c_n\hat{p}^n + \dots$

$$[\hat{x}, \hat{g}(\hat{p})] = i\hbar c_1 + i\hbar 2c_2\hat{p} + \dots + i\hbar n c_n \hat{p}^{n-1} + \dots$$

$$= i\hbar [c_1 + 2c_2\hat{p} + \dots + n c_n \hat{p}^{n-1} + \dots]$$

$$= i\hbar \frac{d\hat{g}}{dp}(\hat{p})$$

1'. Να ευρεθεί ο μεταθέτης $[\hat{x}^2, \hat{p}^2]$.

$$[\hat{x}^2, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{x}^2, \hat{p}] + \underbrace{[\hat{x}^2, \hat{p}]}_{2i\hbar\hat{x}}\hat{p}$$

$$= 2i\hbar(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}).$$

2. Να δειχθεί ότι:

α. $[\hat{A}, \hat{B}^n] = \hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}] + \hat{B}^{n-2}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B} + \dots + [\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{n-1}$.

β. $e^{-\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{\lambda\hat{B}} = \hat{A} + \hat{K}(\lambda)$ όπου

$$\hat{K}(\lambda) = \lambda[\hat{A},\hat{B}] + \dots + \frac{\lambda^n}{n!}\underbrace{[\dots[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}],\dots\hat{B}]}_{n\text{-όροι}} + \dots$$

γ. $e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}} = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B}) + \lambda^2\hat{F}(\lambda)}$, όπου

$\hat{F}(\lambda)$ προσδιοριστέος, εάν $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = [[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] = 0$.

δ. $[\hat{A}, e^{-\alpha\hat{B}}] = -e^{-\alpha\hat{B}}\int_0^\alpha e^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]e^{-\lambda\hat{B}}\,d\lambda$.

Λύση.

α. Χρήση της μαθηματικής επαγωγής:

- Έστω: $[\hat{A}, \hat{B}^k] = \hat{B}^{k-1}[\hat{A},\hat{B}] + \hat{B}^{k-2}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B} + \dots + [\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{k-1}$

$$[\hat{A},\hat{B}^{k+1}] = [\hat{A},\hat{B}^k\hat{B}] = \hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{B}^k]\hat{B}$$

$$= \hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}] + \hat{B}^{k-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B} + \hat{B}^{k-2}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^2 + \dots + [\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^k.$$

* Εάν $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$

$$= n[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{n-1}.$$

β. Ο τελεστής

$$\hat{D}(\lambda) = e^{-\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{\lambda\hat{B}}$$

έχει ανάπτυγμα ως προς λ:

$$\hat{D}(\lambda) = \hat{D}(0) + \lambda\frac{d\hat{D}(0)}{d\lambda} + \frac{1}{2}\lambda^2\frac{d^2\hat{D}(0)}{d\lambda^2} + \dots + \frac{1}{n!}\lambda^n\frac{d^n\hat{D}(0)}{d\lambda^n} + \dots$$

$$\hat{D}(0) = \hat{A}$$

$$\frac{d\hat{D}(\lambda)}{d\lambda} = e^{-\lambda\hat{B}}(-\hat{B})\hat{A}e^{\lambda\hat{B}} + e^{-\lambda\hat{B}}\hat{A}\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}$$

$$= e^{-\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]e^{\lambda\hat{B}}, \qquad \frac{d\hat{D}(0)}{d\lambda} = [\hat{A},\hat{B}]$$

$$\frac{d^2\hat{D}(\lambda)}{d\lambda^2} = e^{-\lambda\hat{B}}(-\hat{B})[\hat{A},\hat{B}]e^{\lambda\hat{B}} + e^{-\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}$$

$$= e^{-\lambda\hat{B}}[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}]e^{\lambda\hat{B}}, \qquad \frac{d^2\hat{D}(0)}{d\lambda^2} = [[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}]$$

$\vdots$

$$\frac{d^n\hat{D}(\lambda)}{d\lambda^n} = e^{-\lambda\hat{B}}[\underbrace{\dots[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}],\dots,\hat{B}}_{n\text{-όροι}}], \qquad \frac{d^n\hat{D}(0)}{d\lambda^n} = [\underbrace{\dots[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}],\dots,\hat{B}}_{n\text{-όροι}}]$$

* Για $\lambda = 1$:

$$e^{-\hat{B}}\hat{A}e^{\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2}[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] + \frac{1}{n!}[\dots[\hat{A},\underbrace{\hat{B}],\hat{B}],\dots\hat{B}}_{n\text{-όροι}}]$$

$$+ \dots$$

γ. Για τον

$$\hat{G}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}}$$

έχουμε διαφορίζοντας ως προς λ:

$$\frac{d\hat{G}}{d\lambda} = e^{\lambda\hat{A}}\hat{A}e^{\lambda\hat{B}} + e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}$$

$$= e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}\, e^{-\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{\lambda\hat{B}} + e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}\hat{B}$$

$$\Rightarrow \frac{d\hat{G}}{d\lambda} = \hat{G}(\lambda)\left[\hat{D}(\lambda) + \hat{B}\right]$$

$\hat{D}(\lambda)$ ο τελεστής του ερωτήματος 2,

$$\Rightarrow \frac{d\hat{G}}{d\lambda} = \hat{G}(\lambda)\left\{\hat{A} + \hat{B} + \lambda[\hat{A},\hat{B}]\right\}$$

Λύνοντας την ανωτέρω εξίσωση με συνθήκη $\hat{G}(0) = \hat{I}$:

$$\hat{G}(\lambda) = e^{\int_0^{\lambda}\{\hat{A}+\hat{B}+t[\hat{A},\hat{B}]\}dt} \Rightarrow$$

$$\hat{G}(\lambda) = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]} = e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$$

Για $\lambda = 1$: $$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$

* Εάν $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}]$, $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] \neq 0$ ο επόμενος όρος είναι

$$\frac{1}{12}\left\{[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + [\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]\right\}$$

δ. Θέτουμε:

$$\hat{D}(\alpha) = [\hat{A}, e^{-\alpha\hat{B}}] \; , \quad \hat{E}(\alpha) = -e^{-\alpha\hat{B}} \int_0^{\alpha} e^{\lambda\hat{B}} [\hat{A},\hat{B}] e^{-\lambda\hat{B}} d\lambda$$

Επειδή $\hat{D}(0) = \hat{E}(0) = \hat{0}$

αρκεί να δειχθεί ότι ικανοποιούν την ίδια πρώτης τάξης εξίσωση ως προς α:

$$\frac{d}{d\alpha}\hat{D} = \frac{d}{d\alpha}\left(\hat{A}e^{-\alpha\hat{B}} - e^{-\alpha\hat{B}}\hat{A}\right)$$

$$= -\hat{A}\hat{B}e^{-\alpha\hat{B}} + e^{-\alpha\hat{B}}\hat{B}\hat{A} = -\hat{A}\hat{B}e^{-\alpha\hat{B}} + \underline{\hat{B}e^{-\alpha\hat{B}}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}e^{-\alpha\hat{B}}} + \hat{B}\hat{A}e^{-\alpha\hat{B}}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\alpha}\hat{D} = -\hat{B}\hat{D} - [\hat{A},\hat{B}]e^{-\alpha\hat{B}}$$

$$\frac{d}{d\alpha}\hat{E} = -\hat{B}\hat{E} - [\hat{A},\hat{B}]e^{-\lambda\hat{B}}$$

Άρα $$[\hat{A}, e^{-\alpha\hat{B}}] = -e^{-\alpha\hat{B}} \int_0^{\alpha} e^{\lambda\hat{B}} [\hat{A},\hat{B}] e^{-\lambda\hat{B}} d\lambda$$

Εάν $[\hat{A},\hat{B}] = c\hat{I}$: $[\hat{A}, e^{-\alpha\hat{B}}] = -c e^{-\alpha\hat{B}}$

Συζυγής τελεστής -

Ερμιτιανός (αυτοσυζυγής) τελεστής.

Δεδομένου τελεστού $\hat{A}$
ορίζεται ο συζυγής $\hat{A}^{+}$ ως ο τελεστής
για τον οποίο ισχύει:

$$(\hat{A}^{+} f)\cdot g = f\cdot(\hat{A} g)$$

$$\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \hat{A} g(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A} f(x))^{*}\, g(x)\, dx \right\}.$$

Ιδιότητες της συζυγίας.

$$(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B})^{+} = \alpha^{*} \hat{A}^{+} + \beta^{*} \hat{B}^{+}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

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

$$(\hat{A}^{-1})^{+} = (\hat{A}^{+})^{-1},$$ εάν ο $\hat{A}$ έχει αντίστροφο.

Για συνάρτηση τελεστού

$$\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1 \hat{A} + \dots + c_n \hat{A}^{n} + \dots$$

$$[\hat{f}(\hat{A})]^{+} = c_0^{*} + c_1^{*} \hat{A}^{+} + \dots + c_n^{*} (\hat{A}^{+})^{n} + \dots$$

Τελεστής $\hat{A}$ καλείται Ερμιτιανός εάν:

$$\hat{A}^{+} = \hat{A}.$$

Να δειχθεί ότι εάν $\hat{A}, \hat{B}$ είναι Ερμιτιανοί τελεστές, τότε ισχύει ότι:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \iff$$ Οι δύο τελεστές έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.

Υπενθυμίζεται ότι ένας Ερμιτιανός τελεστής έχει ένα σύνολο πραγματικών ιδιοτιμών και αντίστοιχων ιδιοσυναρτήσεων τα οποία προσφέρουν ορθοκανονική βάση στον χώρο των συναρτήσεων.

π.χ. για τον $\hat{A}$ έχουμε (α_i, ψ_i):

$$\hat{A}\psi_i = \alpha_i \psi_i$$

$\psi_i \cdot \psi_j = \delta_{ij}$ και οποιαδήποτε f γράφεται ως:

$$f = \sum_i c_i \psi_i, \qquad c_i = \psi_i \cdot f$$

(Υποτίθεται διακριτό φάσμα).

Σημείωση: Οι ιδιοτιμές α_i δεν είναι κατ' ανάγκη διαφορετικές μεταξύ τους.

Εάν σε μία ιδιοτιμή αντιστοιχεί μόνο ένα ιδιοάνυσμα η ιδιοτιμή καλείται μη εκφυλισμένη.

Εάν σε μία ιδιοτιμή αντιστοιχούν περισσότερες (ανεξάρτητες) ιδιοσυναρτήσεις η ιδιοτιμή καλείται εκφυλισμένη.

(ii). Έστω $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

$\hat{A}$ Ερμιτιανός $\Rightarrow$ $\exists\, (\alpha_i, \psi_i)$:

$\hat{A}\psi_i = \alpha\psi_i$, (ψ_i βάση του χώρου).

$\hat{A}\hat{B}\psi_i = \hat{B}\hat{A}\psi_i = \hat{B}\alpha_i\psi_i = \alpha_i \hat{B}\psi_i \Rightarrow$

$\hat{B}\psi_i$ ιδιοάνυσμα του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή α_i

Επομένως εάν η α_i δεν έχει εκφυλισμό το άνυσμα

$\hat{B}\psi_i$ είναι ανάλογο του ψ_i δηλαδή:

$$\hat{B}\psi_i = \beta_j \psi_i$$

οπότε το ψ_i είναι ιδιοάνυσμα του $\hat{B}$ ιδιοτιμής β_j.

Μπορούμε άρα να γράψουμε:

$$\psi_i = \varphi_{ij} \quad : \quad \hat{A}\varphi_{ij} = \alpha_i\varphi_{ij}, \quad \hat{B}\varphi_{ij} = \beta_j \varphi_{ij}.$$

Έστω τώρα ότι η α_i έχει εκφυλισμό, δηλαδή υπάρχουν ιδιοανύσματα, έστω ψ_{ik} :

$$\hat{A}\psi_{ik} = \alpha_i \psi_{ik}$$

Τα ψ_{ik} συγκροτούν έναν υπόχωρο του αρχικού χώρου (V_i) στον οποίο ο τελεστής $\hat{B}$ εξακολουθεί να είναι Ερμιτιανός. Άρα σε αυτόν τον υπόχωρο υπάρχει ορθοκανονική βάση φ_{ij} (γραμμικοί συνδυασμοί των ψ_{ik}) από ιδιοανύσματα του $\hat{B}$:

$$\hat{B}\varphi_{ij} = \beta_j \varphi_{ij}$$

και $$\hat{A}\varphi_{ij} = \alpha_i \varphi_{ij}.$$

Παράδειγμα.

Ο τελεστής της ομοτιμίας $\hat{P}$ έχει μόνο δύο ιδιοτιμές $+1, -1$.

Σε διαστήματα συμμετρικά ως προς την αρχή, όπου ορίζεται είναι Ερμιτιανός. Πράγματι (σε μια διάσταση):

$$\int_{-\Lambda}^{\Lambda} f^*(x)\hat{P}g(x)\,dx = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} f^*(x)g(-x)\,dx$$

$$= (x \to -x) \int_{-\Lambda}^{\Lambda} f^*(-x)g(x)\,dx$$

$$= \int_{-\Lambda}^{\Lambda} (\hat{P}f(x))^* g(x)\,dx.$$

Για το απειρόβαθο πηγάδι: $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$ η Χαμιλτονιανή μετατίθεται με τον $\hat{P}$ και οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας είναι

συμμετρικές (άρτιες): $\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi}{L}x$ (n περιττό)
ιδιοσυναρτήσεις της ομοτιμίας ιδιοτιμής 1

η αντισυμμετρικές (περιττές): $\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x$ (n άρτιο)
ιδιοσυναρτήσεις της ομοτιμίας ιδιοτιμής -1.

Έχουμε επομένως κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων και οι ιδιοτιμές της ομοτιμίας έχουν άπειρο εκφυλισμό.

(ii). Το αντίστροφο αποδεικνύεται πολύ εύκολα.

Μοναδιαίος τελεστής (unitary).

Ένας τελεστής $\hat{U}$ καλείται μοναδιαίος εάν:

$$\hat{U}\hat{U}^{\dagger} = 1 \left(= \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\right)$$

(ο αντίστροφός του ταυτίζεται με τον Ερμιτιανό συζυγή του).

Παρατηρήσεις.

- Ο τελεστής της ομοτιμίας είναι μοναδιαίος.
- Εάν $\hat{U} = e^{i\hat{G}} \Rightarrow \left.\begin{array}{l}\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{G}} \\ \hat{U}^{\dagger} = e^{-i\hat{G}^{\dagger}}\end{array}\right\} \Rightarrow \hat{G} = \hat{G}^{\dagger} \Rightarrow$

  υπάρχει βάση από ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{U}$ (αυτή του $\hat{G}$) και οι ιδιοτιμές είναι μιγαδικοί αριθμοί μέτρου 1.

  π.χ. $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n$

  εάν $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$.
- $\hat{A}, \hat{B}$ Ερμιτιανοί $\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{G}$ όπου $\hat{G}$ Ερμιτιανός

3. Έστω ο τελεστής $\hat{D}$:

$$\hat{D}f(x) = \left[a_2(x)\frac{d^2}{dx^2} + a_1(x)\frac{d}{dx} + a_0(x)\right]f(x)$$

με a_2, a_1, a_0 ομαλές συναρτήσεις, $-\infty < x < \infty$.

Να ευρεθούν οι συνθήκες ώστε ο $\hat{D}$ να είναι αυτοσυζυγής.

Λύση.

Αναζητούνται οι συνθήκες ώστε:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[a_2\frac{d^2g}{dx^2} + a_1\frac{dg}{dx} + a_0\right]^* f\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*\left[a_2\frac{d^2f}{dx^2} + a_1\frac{df}{dx} + a_0\right]dx$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\left[a_2^*\frac{d^2g^*}{dx^2} + a_1^*\frac{dg^*}{dx} + a_0^*\right] f\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*\left[a_2\frac{d^2f}{dx^2} + a_1\frac{df}{dx} + a_0\right]dx$$

Οι παράγωγοι από την f μπορούν να περάσουν στην g^* με παραγοντική ολοκλήρωση.

Με δύο παραγοντικές ολοκληρώσεις για την $\frac{d^2f}{dx^2}$ και μία για την $\frac{df}{dx}$ έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*\left[a_2\frac{d^2f}{dx^2} + a_1\frac{df}{dx} + a_0 f\right]dx =$$

$$g^* a_2\frac{df}{dx}\Big|_{-\infty}^{\infty} - f\frac{d}{dx}(g^* a_2)\Big|_{-\infty}^{\infty} + g^* a_1 f\Big|_{-\infty}^{\infty}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{d^2}{dx^2}(g^* a_2) f - \frac{d}{dx}(g^* a_1) f + g^* a_0 f\right]dx$$

Οι όροι στα όρια της ολοκλήρωσης για τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις μηδενίζονται αρκεί οι a_1, a_2 να μην αυξάνονται πολύ γρήγορα στο $\pm\infty$.

(Οι όροι αυτοί πρέπει να μηδενίζονται οπωσδήποτε. Σε προβλήματα που ορίζονται σε πεπερασμένο διάστημα, αυτό επιβάλλει συνθήκες στις συναρτήσεις $f, g, \dots$).

Καταλήγουμε στην:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\frac{d^2g^*}{dx^2}a_2 + 2\frac{dg^*}{dx}\frac{da_2}{dx}f + g^*\frac{d^2a_2}{dx^2}f - \frac{dg^*}{dx}a_1 - g^*\frac{da_1}{dx}f + g^*a_0 f\Big]dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\Big[\frac{d^2g^*}{dx^2}a_2 + \frac{dg^*}{dx}\Big(2\frac{da_2}{dx} - a_1\Big) + g^*\Big(\frac{d^2a_2}{dx^2} - \frac{da_1}{dx} + a_0\Big)\Big]f\,dx$$

Για να ισούται αυτό με το αριστερό μέλος για τυχαίες f, g πρέπει:

$$a_2 = a_2^*$$

$$2\frac{da_2}{dx} - a_1 = a_1^*$$

$$\frac{d^2a_2}{dx^2} - \frac{da_1}{dx} + a_0 = a_0^*$$

* a_1, a_2, a_0 πραγματικές $\Rightarrow \frac{da_2}{dx} = a_1, \quad a_0 = a_0^*$ και:

$$a_2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{da_2}{dx}\frac{d}{dx} + a_0 = \frac{d}{dx}\Big(a_2\frac{d}{dx}\Big) + a_0$$

1. Σωμάτιο περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{P} + g f(\hat{x})\right)^2 + V(\hat{x}), \quad g \in \mathbb{R}.$$

Να ευρεθούν οι ποσότητες $\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t$ και $\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t$.

Λύση.

Θέτοντας $\hat{\Pi} = \hat{P} + g f(\hat{x})$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\Pi}^2 + V(\hat{x})$$

όπου $\hat{\Pi}$ Ερμιτιανός τελεστής*.

α). $$\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{x}]\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{\hat{\Pi}^2}{2m},\hat{x}\right] + \cancelto{0}{[V(\hat{x}),\hat{x}]}\right\rangle_t$$

$$= \frac{i}{2m\hbar}\langle[\hat{\Pi}^2,\hat{x}]\rangle_t$$

$$[\hat{\Pi}^2,\hat{x}] = \hat{\Pi}\underbrace{[\hat{\Pi},\hat{x}]}_{=-i\hbar} + \underbrace{[\hat{\Pi},\hat{x}]}_{-i\hbar}\hat{\Pi} = -2i\hbar\,\hat{\Pi}$$

Επομένως: $$\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle_t + \frac{g}{m}\langle f(x)\rangle_t .$$

β). $$\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = +\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle_t = \frac{i}{2m\hbar}\langle[\hat{\Pi}^2,\hat{p}]\rangle_t + \underbrace{\frac{i}{\hbar}\langle[V(\hat{x}),\hat{p}]\rangle_t}_{= -\left\langle \frac{dV}{dx}\right\rangle_t}$$

Υπολογίζουμε τον μεταθέτη:

$$[\hat{\pi}^2, \hat{p}] = \hat{\pi}[\hat{\pi}, \hat{p}] + [\hat{\pi}, \hat{p}]\hat{\pi}$$

$$= \hat{\pi}\, i\hbar g f' + i\hbar g f' \hat{\pi}$$

$$= 2i\hbar g f' \hat{\pi} - \hbar^2 g f''$$

$$= 2i\hbar g f' \hat{P} + 2i\hbar g f f' + \hbar^2 g f''$$

$$= i\hbar g\left(-i\hbar g f'' + 2f'\hat{P} + 2g f f'\right)$$

Άρα:

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = -\langle V'\rangle_t - \frac{g}{2m}\langle -i\hbar f'' + 2f'\hat{p} + 2g f f'\rangle \;^{**}$$

* $$\hat{\pi}^2 = \left(\hat{P} + g f(\hat{x})\right)^2 = \hat{P}^2 + \hat{P} g f(\hat{x}) + g f(\hat{x})\hat{P} + g^2 f^2(\hat{x})$$

$$= \hat{P}^2 + 2g f(\hat{x})\hat{P} - i\hbar g \frac{df(\hat{x})}{dx} + g^2 f^2(\hat{x})$$

$$= -\hbar \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2ig\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x} - i\hbar g\frac{df(x)}{dx} + g^2 f^2(x)$$ (σε συναρτήσεις του x)

Ελέγξτε ότι είναι Ερμιτιανός με βάση την Άσκηση 3.

** Ομοίως για τον:

$$-2i\hbar f'\frac{\partial}{\partial x} + 2g f f' - i\hbar f''$$