ΜΕΣΗ ΤΙΜΗ ΤΕΛΕΣΤΗ

Αν ένα σύστημα περιγράφεται απ' την κατάσταση ψ (ή $|\psi>$), τότε η **μέση τιμή του τελεστή $\widehat{A}$** για την κατάσταση αυτή ορίζεται ως:

$$<\hat{A}>=\frac{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{A}\psi dx}{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi dx}=\frac{(\psi,\hat{A}\psi)}{(\psi,\psi)}=\frac{<\psi|\hat{A}|\psi>}{<\psi|\psi>}$$

Αν η ψ είναι κανονικοποιημένη, δηλαδή $(\psi,\psi)=<\psi|\psi>=1$ τότε

$$<\widehat{\boldsymbol{A}}>=(\boldsymbol{\psi},\widehat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\psi})=<\psi|\widehat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{\psi}>$$

Ιδιότητα: $<c_1\hat{A}_1+c_2\hat{A}_2>=c_1<\hat{A}_1>+c_2<\hat{A}_2>,\quad c_1c_2\epsilon\mathbb{C}$

Εφαρμογή

Να δειχτεί ότι η μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ ως προς μια ιδιοσυνάρτηση ψ_n του $\hat{A}$ είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή α_n.

Λύση

Είναι:

$$\left.\begin{array}{c}<\hat{A}>=\dfrac{(\psi_n,\hat{A}\psi_n)}{(\psi_n,\psi_n)}\\ \hat{A}\psi_n=a_n\psi_n\end{array}\right\}\rightarrow<\hat{A}>=\frac{(\psi_n,a_n\psi_n)}{(\psi_n,\psi_n)}=\frac{a_n(\psi_n,\psi_n)}{(\psi_n,\psi_n)}\Rightarrow<\hat{A}>=a_n$$

Χρονική εξέλιξη μέσης τιμής

Ο χρονικός ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής ενός φυσικού μεγέθους Α για ένα σωματίδιο είναι:

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<[\hat{A},\hat{H}]>+<\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}>$$

όπου $\hat{A}$ ο τελεστής που αντιστοιχεί στο μέγεθος Α και $\hat{H}$ ο τελεστής Hamilton του σωματιδίου.
Αν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ανεξάρτητος του χρόνου τότε $<\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}>=0$ και η προηγούμενη σχέση γίνεται:

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<[\hat{A},\hat{H}]>$$

Στην Κβαντομηχανική λέμε ότι ένα φυσικό μέγεθος Α, διατηρείται αν η μέση τιμή του παραμένει σταθερή, δηλαδή αν

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt}=0$$

Συνεπώς ένα φυσικό μέγεθος Α, το οποίο δεν εξαρτάται άμεσα απ' το χρόνο, διατηρείται αν και μόνο αν ο τελεστής $\hat{A}$ αντιμετατίθεται με τον τελεστή Hamilton $\hat{H}$ του σωματιδίου. Δηλαδή:

$$A\ \delta\iota\alpha\tau\eta\rho\varepsilon\acute{\iota}\tau\alpha\iota \rightarrow \frac{d<\hat{A}>}{dt}=0 \Rightarrow \frac{1}{i\hbar}<[\hat{A},\hat{H}]>=0 \Rightarrow <[\hat{A},\hat{H}]>=0$$

Θεωρήματα Ehrenfest

1) $\frac{d<\hat{x}>}{dt}=\frac{<\hat{p}_x>}{m}$

Απόδειξη

Είναι:

$$\frac{d<\hat{x}>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<[\hat{x},\hat{H}]>+<\frac{\partial\hat{x}}{\partial t}> \qquad \mathbf{(1)}$$

Επειδή ο τελεστής θέσης $\hat{x}$ δεν εξαρτάται απ' το χρόνο είναι $\frac{\partial\hat{x}}{\partial t}=0$ **(2)**

και

$$[\hat{x},\hat{H}]=\left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\hat{V}(x)\right]=\left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right]+\cancel{[\hat{x},\hat{V}(x)]}=$$

$$=\frac{1}{2m}[\hat{x},\hat{p}_x^2]=\frac{1}{2m}[\hat{x},\hat{p}_x](\hat{p}_x^2)'=\frac{1}{\cancel{2}m}i\hbar\cancel{2}\hat{p}_x=\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x \qquad (\mathbf{3})$$

Άρα η **(1)** λόγω της **(2)** και **(3)** δίνει:

$$\frac{d<\hat{x}>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x>\Rightarrow \boldsymbol{\frac{d<\hat{x}>}{dt}=\frac{<\hat{p}_x>}{m}}$$

Το 1ο θεώρημα Ehrenfest θυμίζει τον κλασικό ορισμό της ταχύτητας.

$\mathbf{2)}\ \frac{d<\hat{p}_x>}{dt}=-<\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}>$

Απόδειξη:

Είναι:

$$\frac{d<\hat{p}_x>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<[\hat{p}_x,\hat{H}]>+<\frac{\hat{p}_x}{\partial t}> \qquad (\mathbf{4})$$

Αλλά ο τελεστής ορμής $\hat{p}_x$ δεν εξαρτάται απ' το χρόνο οπότε $\frac{\partial\hat{p}_x}{\partial t}=0$ **(5)**

και

$$[\hat{p}_x,\hat{H}]=\left[\hat{p}_x,\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\hat{V}(x)\right]=\cancel{\left[\hat{p}_x,\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right]}+[\hat{p}_x,\hat{V}(x)]=[\hat{p}_x,\hat{V}(x)] \qquad (\mathbf{6})$$

Το αποτέλεσμα της δράσης του μεταθέτη $[\hat{p}_x, \hat{V}(x)]$ σε μια συνάρτηση ψ είναι:

$$[\hat{p}_x, \hat{V}(x)]\psi = \hat{p}_x\hat{V}\psi - \hat{V}\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi) - \hat{V}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) =$$

$$\left.\begin{aligned} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi) + i\hbar\hat{V}\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi) - \hat{V}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) \\ &\textit{Επειδή:}\ \frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi) = \hat{V}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x}(\hat{V}\psi) - \hat{V}\frac{\partial\psi}{\partial x} = \psi\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \end{aligned}\right\}\rightarrow$$

$$\rightarrow [\hat{p}_x, \hat{V}_x]\psi = -i\hbar\psi\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \quad \textit{οπότε:} \quad [\hat{p}_x, \hat{V}_x] = -i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \quad (\mathbf{7})$$

Έτσι η **(6)** λόγω της **(7)** δίνει:

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \quad (\mathbf{8})$$

Άρα η **(4)** λόγω των **(5)** και **(8)** δίνει:

$$\frac{d<\hat{p}_x>}{dt} = \frac{1}{i\hbar}< -i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}> \Rightarrow \boldsymbol{\frac{d<\hat{p}_x>}{dt} = -<\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}>}$$

Το 2ο θεώρημα Ehrenfest θυμίζει τον κλασικό ορισμό του 2ου νόμου του Newton.

Ερμιτινιανοί τελεστές

Στην Κβαντομηχανική σε κάθε παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος A, αντιστοιχούμε ένα τελεστή $\hat{A}$. Η μέση τιμή του μεγέθους αυτού είναι ίση με τη μέση τιμή του $\hat{A}$ ως προς την κυματοσυνάρτηση ψ που περιγράφει την κατάσταση του συστήματος. Η μέση τιμή, εφόσον η ψ είναι κανονικοποιημένη, είναι το εσωτερικό γινόμενο:

$$< \hat{A} >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A}\psi dx = (\psi, \hat{A}\psi)$$

Επειδή το αποτέλεσμα μιας μέτρησης πρέπει να είναι ένας πραγματικός αριθμός έπεται ότι και η μέση τιμή πολλών μετρήσεων πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός. Δηλαδή πρέπει να ισχύει:

$$< \hat{A} >=< \hat{A} >^* \Rightarrow (\psi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}\psi)^* \Rightarrow (\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi)$$

Επομένως οι τελεστές που αντιστοιχούν στα παρατηρήσιμα μεγέθη πρέπει να έχουν την ιδιότητα:

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi) \quad \text{ή} \quad (\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}\psi_1, \psi_2)$$

και λέγονται **ερμιτιανοί τελεστές.**

Αν ένας τελεστής $\hat{A}$ δεν είναι ερμιτιανός, μπορούμε να ορίσουμε έναν άλλο τελεστή που ονομάζεται **ερμιτιανός συζυγής** ή **συναφής** του $\hat{A}$ και συμβολίζεται $\hat{A}^\dagger$ τέτοιον ώστε:

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}^\dagger\psi_1, \psi_2)$$

Αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ τότε ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, δηλαδή αν ο $\hat{A}$ είναι αυτοσυζυγής θα είναι και ερμιτιανός.

Ιδιότητες συζυγών:

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \qquad (\hat{A}_1 \pm \hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_1^\dagger \pm \hat{A}_2^\dagger$$

$$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger \qquad (\hat{A}_1\hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_2^\dagger\hat{A}_1^\dagger$$

Ιδιότητες ερμιτιανών τελεστών

1) Οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$ είναι πραγματικοί αριθμοί. Αντίστροφα αν όλες οι ιδιοτιμές ενός τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί, αυτός είναι ερμιτιανός.

2) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$ που ανήκουν σε διαφορετικές ιδιοτιμές α_1, α_2... είναι ορθογώνιες συναρτήσεις.

3) Αν οι τελεστές $\hat{A}$, $\hat{B}$ είναι ερμιτιανοί τότε:

α) το άθροισμα $\hat{A} + \hat{B}$ είναι ερμιτιανός τελεστής.
β) Αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, το γινόμενο τους είναι ερμιτιανός τελεστής.
γ) Αν $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ είναι $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ όπου $\hat{C}$ ερμιτιανός τελεστής.

Μοναδιακοί τελεστές

Ένας τελεστής $\hat{U}$ λέγεται μοναδιακός (unitary) όταν ο ερμιτιανός συζυγής του συμπίπτει με τον αντίστροφό του: $\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}$
δηλαδή αν ισχύει: $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{I}$

Οι μοναδιακοί τελεστές έχουν την ιδιότητα να αφήνουν αναλλοίωτο το εσωτερικό γινόμενο αφού:

$$(\hat{U}\psi_1, \hat{U}\psi_2) = (\psi_1, \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\psi_2) = (\psi_1, \hat{I}\psi_2) = (\psi_1, \psi_2)$$

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας

ΑΣΚΗΣΗ 1

Θεωρήστε την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) \equiv (a/\pi)^{1/4} \exp(-ax^2/2)$$

και υπολογίστε τις ροπές $\langle x^n \rangle$ και $\langle p^n \rangle$ για $n = 1,2$ όπου $p \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$

Αν $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ και αντιστοίχως για το $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ να υπολογίσετε το $\Delta x\, \Delta p$ και να σχολιάσετε το αποτέλεσμα

ΑΣΚΗΣΗ 2

Θεωρήστε την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) \equiv (a/\pi)^{1/4} \exp\left(-a(x-x_0)^2/2 + i\, p_0 x/\hbar\right)$$

($a > 0$) και υπολογίστε τις ροπές $\langle x^n \rangle$ και $\langle p^n \rangle$ για $n = 1,2$ όπου $p \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$

Αν $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ και αντιστοίχως για το $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ να υπολογίσετε το $\Delta x\, \Delta p$ και να σχολιάσετε το αποτέλεσμα

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας