

ΤΕΛΕΣΤΕΣ

Τελεστής (\hat{A}) ονομάζεται κάθε μαθηματική ποσότητα που δρα πάνω σε μια συνάρτηση μετασχηματίζοντάς την κατά έναν καθορισμένο τρόπο. Δηλαδή:

$$\hat{A}\psi = \varphi$$

Κάθε τελεστής από μόνος του δεν έχει κανένα φυσικό νόημα, αλλά αποκτάει όταν δράσει πάνω σε μια συνάρτηση.

Παραδείγματα τελεστών:

- Τελεστής θέσης \hat{x} : $\hat{x}\psi = x\psi$
- Τελεστής παραγωγίσης $\frac{\hat{a}}{dx}$: $\frac{\hat{a}}{dx}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$
- Ταυτοτικός τελεστής \hat{I} : $\hat{I}\psi = \psi$
- Σταθερός τελεστής \hat{c} (c μιγαδική σταθερά): $\hat{c}\psi = c\psi$, ($c \in \mathbb{C}$)
- Τελεστής ορμής \hat{p} : $\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x}$
- Τελεστής ομοτιμίας (parity) $\hat{\Pi}$: $\hat{\Pi}\psi(x) = \psi(-x)$ (ο τελεστής αυτός αλλάζει το πρόσημο της μεταβλητής)
- Τελεστής μετάθεσης \hat{T}_a : $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x + a)$
- Μηδενικός τελεστής $\hat{0}$: $\hat{0}\psi = 0$

Στην κβαντομηχανική ασχολούμαστε μόνο με γραμμικούς τελεστές οι οποίοι ικανοποιούν την ιδιότητα:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$



Άλγεβρα γραμμικών τελεστών:

$$1) \text{ Άθροιση τελεστών: } \hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \Rightarrow \hat{C}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$$

Παράδειγμα αποτελεί ο τελεστής Laplace:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Rightarrow \nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

$$2) \text{ Γινόμενο τελεστών: } \hat{D} = \hat{A}\hat{B} \Rightarrow \hat{D}\psi = (\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi)$$

δηλαδή η δράση του γινομένου δύο τελεστών σε μία συνάρτηση είναι το αποτέλεσμα της εφαρμογής πρώτα του τελεστή \hat{B} στη συνάρτηση και στη συνέχεια του τελεστή \hat{A} .

Μία από τις βασικότερες διαφορές της άλγεβρας τελεστών από την άλγεβρα των μιγαδικών αριθμών είναι το ότι δεν ισχύει η αντιμεταθετική ιδιότητα στο γινόμενο οποιονδήποτε τελεστών \hat{A} και \hat{B} . Δηλαδή γενικά ισχύει:

$$\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi$$

Γι' αυτό το λόγο είναι χρήσιμο να εισάγουμε τον **αντιμεταθέτη** δύο τελεστών που είναι βασικής σημασίας στην κβαντομηχανική.

$$\text{Ορίζουμε τον αντιμεταθέτη δύο τελεστών: } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Όταν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ τότε οι τελεστές \hat{A} και \hat{B} αντιμετατίθενται ή αλλιώς οι τελεστές $\hat{A}\hat{B}$ και $\hat{B}\hat{A}$ είναι ίσοι δηλαδή: $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi$

Ιδιότητες αντιμεταθέτη:

$$1) [\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

$$2) [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$3) [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

$$4) [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$



$$5) [\hat{A}, \lambda \hat{B}] = \lambda [\hat{A}, \hat{B}] = [\lambda \hat{A}, \hat{B}]$$

$$6) [\hat{A}, f(\hat{A})] = 0, \quad [\hat{A}, \hat{A}^n] = 0, \quad [\hat{A}, \lambda] = 0$$

Δηλαδή κάθε τελεστής αντιμετατίθεται με οποιαδήποτε συνάρτηση του.

$$7) [\hat{A}, f(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}] f'(\hat{B})$$

Βασικοί μεταθέτες:

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

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \text{ με } \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{αν } i = j \\ 0, & \text{αν } i \neq j \end{cases}$$

Ιδιότητες και ιδιοσυναρτήσεις τελεστή

Ένας μιγαδικός αριθμός α λέγεται **ιδιοτιμή** του τελεστή \hat{A} αν ισχύει:

$$\hat{A}\psi = \alpha\psi$$

Η συνάρτηση (διάνυσμα) ψ λέγεται **ιδιοσυνάρτηση** (ιδιοδιάνυσμα) του τελεστή \hat{A} που ανήκει στην ιδιοτιμή α .

Δηλαδή οι ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή είναι εκείνες οι συναρτήσεις για τις οποίες η δράση του τελεστή έχει ως αποτέλεσμα να τις αφήνει αναλλοίωτες, εκτός απ' τον πολλαπλασιασμό με μία σταθερά.

Ένας τελεστής μπορεί να έχει μία ή περισσότερες ιδιοτιμές.

Το σύνολο των ιδιοτιμών (φάσμα ιδιοτιμών) ενός τελεστή μπορεί να είναι διακριτό ή συνεχές ή μικτό.

Αν στην ίδια ιδιοτιμή ανήκουν περισσότερες από μία ιδιοσυναρτήσεις (γραμμικά ανεξάρτητες μεταξύ τους) λέμε ότι η ιδιοτιμή του τελεστή είναι **εκφυλισμένη**. Δηλαδή αν $\hat{A}\psi_i = \alpha\psi_i$, $i = 1, 2, \dots, m$ η ιδιοτιμή α

παρασιάζει εκφυλισμό τάξης m .



Εσωτερικό γινόμενο - Ορθογωνιότητα – Κανονικοποίηση

Το εσωτερικό γινόμενο στο χώρο των μιγαδικών συναρτήσεων ορίζεται ως:

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$$

Ιδιότητες εσωτερικού γινομένου:

- 1) $(\psi, \psi) \geq 0$
- 2) $(\psi_1, \alpha\psi_2) = \alpha(\psi_1, \psi_2) \quad (\alpha \in \mathbb{C})$
- 3) $(\psi_1, \psi_2 + \psi_3) = (\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \psi_3)$
- 4) $(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*$
- 5) Αν $(\psi_1, \psi_2) = 0$ τότε οι δύο συναρτήσεις ψ_1, ψ_2 είναι **ορθογώνιες** μεταξύ τους.
- 6) Μία συνάρτηση ψ λέγεται **κανονικοποιημένη** αν ισχύει: $(\psi, \psi) = 1$
- 7) Γενικότερα οι ψ_i, ψ_j λέγονται **ορθοκανονικοποιημένες** αν:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Συμβολισμός Dirac

Ο Dirac συμβόλισε τις συναρτήσεις (διανύσματα) των μιγαδικών χώρων με το σύμβολο $|\psi\rangle$ που ονόμασε **ket**.

Σε κάθε κατάσταση ket $|\psi\rangle$ αντιστοιχεί ένα συζυγές διάνυσμα που ονόμασε **bra** και συμβολίζεται ως $\langle\psi|$.

Το εσωτερικό γινόμενο ονομάζεται **bracket** και είναι:

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_2 dx = (|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = \langle\psi_1||\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας



ΑΣΚΗΣΗ 1

Να δείξετε ότι η $u(x) = e^{-ax^2/2}$ είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - a^2 x^2 \right)$$

και να βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή.

ΑΣΚΗΣΗ 2

Να δείξετε ότι η $u(x) = e^{-x^2/4}$ είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4} x^2 \right)$$

και να βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή.

ΑΣΚΗΣΗ 3

Να δείξετε ότι η $u(x) = e^{-x^2/2}$ είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2 \right)$$

και να βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή.



ΑΣΚΗΣΗ 4

Έστω \hat{T}_a ο τελεστής μετατοπίσεως

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x + a)$$

Να δείξετε ότι ισχύει $\hat{T}_a = \exp(iap_x / \hbar)$ όπου $p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$.

ΑΣΚΗΣΗ 5

(α) Υποθέσετε ότι $f(x)$ και $g(x)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή \hat{Q} με την ίδια ιδιοτιμή q . Αποδείξτε ότι οιαδήποτε γραμμική υπέρθεση των $f(x)$ και $g(x)$, είναι επίσης ιδιοσυνάρτηση με την ίδια ιδιοτιμή.

(β) Επιληθεύστε ότι οι $\exp(x)$ και $\exp(-x)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του $\frac{d^2}{dx^2}$ και βρείτε σε ποια ιδιοτιμή αντιστοιχούν.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας

