Φυσική IV (Κβαντομηχανική Ι)

Πρόχειρες σημειώσεις του μαθήματος

Γ. Ε. Κουτσούμπας, Κ. Ν. Φαράκος

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Περιεχόμενα

1

Θεμελίωση της Κβαντομηχανικής

1.1 Εξίσωση του Schrödinger

1.1.1 Εξίσωση του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο

Σύμφωνα με την εισήγηση του de Broglie όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, σε κάθε ελεύθερο σωματίδιο μάζας m με ορμή p και ενέργεια E αντιστοιχεί ένα κύμα με μήκος κύματος λ και συχνότητα f. Η σχέση μεταξύ των φυσικών ποσοτήτων E, p που αποδίδουμε στο σωματίδιο και των λ, f που αντιστοιχούν στην κυματική συμπεριφορά είναι:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad \text{και} \qquad E = hf = \hbar\omega \tag{1.1}$$

όπου $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$, $\omega = 2\pi f$ και $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$.
Η σταθερά h του Planck ισούται με $6,63 \cdot 10^{-34}\,\text{J}{\cdot}\text{s}$ και $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}\,\text{J}{\cdot}\text{s}$. Η νέα σταθερά $\hbar$ που μόλις ορίσαμε ονομάζεται και «ανηγμένη σταθερά του Planck». Σε αυτό το κεφάλαιο, όπως και στα επόμενα κεφάλαια αυτού του βιβλίου, όταν αναφερόμαστε στην σταθερά του Planck, θα εννοούμε την ανηγμένη σταθερά $\hbar$ του Planck.

Υποθέτουμε χωρίς βλάβη της γενικότητας ότι το σωματίδιο κινείται στην θετική κατεύθυνση του άξονα των x. Η συνάρτηση $\psi(x,t)$ που περιγράφει το αντίστοιχο «υλικό κύμα» κατά de Broglie είναι:

$$\psi(x,t) = A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} = A\mathrm{e}^{i(px-Et)/\hbar} \tag{1.2}$$

Η συνάρτηση $\psi(x,t)$ του κύματος είναι μία μιγαδική συνάρτηση των μεταβλητών x, t και ονομάζεται συνήθως **κυματοσυνάρτηση** του σωματιδίου.

Κλασσικά η σχέση μεταξύ ενέργειας E και ορμής p για ένα ελεύθερο σωματίδιο μάζας m δίνεται από την σχέση:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \tag{1.3}$$

Όπου $p = mv$ η ορμή στην κλασσική μηχανική ενός σωματιδίου μάζας m και ταχύτητας v. Στην κβαντική περιγραφή των ελεύθερων σωματιδίων ως υλικών κυμάτων υποθέτουμε ότι η σχέση (1.3) μεταξύ ενέργειας και ορμής συνεχίζει να ισχύει.

Στην Κλασσική Μηχανική ένα φυσικό σύστημα (π.χ. το ελεύθερο σωματίδιο) περιγράφεται από τους νόμους του Νεύτωνα. Η εφαρμογή του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα μας οδηγεί σε μία διαφορική εξίσωση κίνησης για το φυσικό σύστημα και η λύση της δίνει τις δυνατές τροχιές στον χώρο ως συνάρτηση του χρόνου για την κίνηση του φυσικού συστήματος. Εδώ τώρα αντιμετωπίζουμε το αντίστροφο πρόβλημα: έχουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ (εξίσωση (1.2)) του ελεύθερου σωματιδίου και αναζητούμε την διαφορική «κυματική» εξίσωση που ικανοποιεί. Η κυματική εξίσωση που αναζητούμε θα πρέπει καταρχάς να είναι συμβιβαστή με την εξίσωση (1.3) της ενέργειας του σωματιδίου.

Η μερική παράγωγος της κυματοσυνάρτησης $\psi(x,t)$ ως προς τον χρόνο t δίνει την ενέργεια E του σωματιδίου ενώ η μερική παράγωγος ως προς x δίνει αντίστοιχα την ορμή p του σωματιδίου:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\psi \;\Rightarrow\; i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \tag{1.4}$$

και

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\psi \;\Rightarrow\; -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p\psi \tag{1.5}$$

Παραγωγίζοντας ξανά ως προς x και χρησιμοποιώντας την εξίσωση (1.3) παίρνουμε:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \left(i\frac{p}{\hbar}\right)^2\psi \;\Rightarrow\; \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{1.6}$$

$$\Rightarrow\; -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi \tag{1.7}$$

Άρα συνδυάζοντας την εξίσωση (1.4) με την (1.7) βρίσκουμε ότι η κυματοσυνάρτηση ψ του ελεύθερου σωματιδίου ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{1.8}$$

Η εξίσωση (1.8) είναι η **εξίσωση του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο μάζας** m στην μη σχετικιστική Κβαντομηχανική.

Η εξίσωση (1.8) που κατασκευάσαμε για το υλικό κύμα (1.2) είναι γραμμική και ομογενής άρα μπορεί να έχει ως λύσεις και κυματοσυναρτήσεις που είναι υπέρθεση τέτοιων απλών λύσεων. Έτσι έχουμε την δυνατότητα να περιγράψουμε φαινόμενα συμβολής ή περίθλασης και σωματίδια. Ακόμη το γεγονός ότι έχει σταθερούς συντελεστές αντιστοιχεί στην ομοιογένεια του χώρου όταν δεν έχουμε ένα εξωτερικό πεδίο δυνάμεων. Δηλαδή για ένα ελεύθερο σωματίδιο όλα τα σημεία του χώρου είναι ισοδύναμα.

Όταν θέλουμε να περιγράψουμε σωματίδια χρειαζόμαστε καταστάσεις εντοπισμένες στο χώρο. Αν πρόκειται να περιγραφούν τα σωματίδια με κύματα, δεν είναι κατάλληλα τα επίπεδα κύματα, γιατί έχουν άπειρη χωρική έκταση. Εκείνο που θα αναπαραστήσει ένα σωματίδιο θα είναι μια υπέρθεση κυμάτων με μια κατανομή ορμών, τέτοια ώστε το αποτέλεσμα να είναι μια κυματοσυνάρτηση με πεπερασμένη έκταση στο χώρο και η ομαδική ταχύτητα να ταυτίζεται με την ταχύτητα του σωματιδίου. Θα δείξουμε αμέσως ότι μια τέτοια υπέρθεση ικανοποιεί την εξίσωση που μόλις επινοήσαμε, με την προϋπόθεση ότι η σχέση διασποράς είναι η $E = \frac{p^2}{2m}$. Πράγματι, αν

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p)\exp\left[\frac{ipx}{\hbar} - \frac{iE(p)t}{\hbar}\right]\mathrm{d}p\,, \quad E(p) = \frac{p^2}{2m} \tag{1.9}$$

μπορούμε να ελέγξουμε ότι έχουμε:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p)E(p)\exp\left[\frac{ipx}{\hbar} - \frac{iE(p)t}{\hbar}\right]\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p)\frac{p^2}{2m}\exp\left[\frac{ipx}{\hbar} - \frac{iE(p)t}{\hbar}\right]\mathrm{d}p$$

και ότι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p)\frac{p^2}{2m}\exp\left[\frac{ipx}{\hbar} - \frac{iE(p)t}{\hbar}\right]\mathrm{d}p\,,$$

άρα ικανοποιείται η εξίσωση του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο:

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

Οι κυματοσυναρτήσεις που περιγράφονται από την εξίσωση (1.9) ονομάζονται συνήθως **κυματοπακέτα** στην κβαντομηχανική και θα τα μελετήσουμε αναλυτικά στο πέμπτο Κεφάλαιο.

Από την εξίσωση (1.5) προκύπτει μια αντιστοιχία ανάμεσα στο φυσικό μέγεθος p_x της ορμής στην κατεύθυνση x και στην διαφόριση–παραγώγιση της κυματοσυνάρτησης ως προς x, ομοίως από την εξίσωση (1.4) προκύπτει μία αντιστοιχία ανάμεσα στο φυσικό μέγεθος της ολικής ενέργειας και στην παραγώγιση ως προς t:

$$\begin{cases} p_x \;\rightarrow\; -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \\ E \;\rightarrow\; i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \end{cases}$$

Συμβολικά μπορούμε να γράψουμε αυτή την αντιστοιχία ορμής και διαφόρισης ως προς κάποια χωρική συντεταγμένη όπως η x ως εξής:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{1.10}$$

Χρησιμοποιώντας το νέο σύμβολο $\hat{p}_x$ η εξίσωση (1.5) για το ελεύθερο σωματίδιο γράφεται ως εξής:

$$\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p\psi$$

Το $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ λέμε ότι είναι ο **τελεστής της ορμής** στην κατεύθυνση x.

Για οποιαδήποτε συνάρτηση ψ μιγαδική ή πραγματική ονομάζουμε **δράση του τελεστή** της ορμής στην ψ την παραγώγιση της συνάρτησης ως προς x και πολλαπλασιασμό της νέας συνάρτησης που προκύπτει από την παραγώγιση με την ποσότητα $-i\hbar$. Συμβολικά γράφουμε:

$$\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

και το εκφράζουμε ως «δράση του τελεστή $\hat{p}_x$ στην συνάρτηση ψ».

Πρόβλημα 1

Βρείτε τις σταθερές A, B και την σχέση μεταξύ των ω, k στην συνάρτηση

$$\Psi(x,t) = A\cos(kx-\omega t) + B\sin(kx-\omega t)$$

έτσι ώστε η $\Psi(x,t)$ να περιγράφει ένα ελεύθερο σωματίδιο μάζας m.

Λύση:

1.1.2 Εξίσωση του Schrödinger για ένα σωματίδιο σε εξωτερικό δυναμικό

Στην Κβαντική φυσική κάνουμε την θεμελιώδη παραδοχή ότι κάθε σωματίδιο περιγράφεται από μία μιγαδική συνάρτηση $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$ που εξαρτάται γενικά από τις συντεταγμένες $(x,\ y,\ z)$ του σωματιδίου στον χώρο και από τον χρόνο t. Την συνάρτηση αυτή όπως ήδη έχουμε πει στην προηγούμενη παράγραφο συνηθίζεται να την λέμε κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου. Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$

περιέχει όλη την πληροφορία για το κβαντικό σύστημα.

Η διαφορική εξίσωση που μας δίνει ως λύση την $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$ για ένα σωματίδιο που βρίσκεται υπό την επίδραση δυνάμεων είναι η εξίσωση του Schrödinger. Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίδιο μάζας m κινείται κατά μήκος του άξονα των x και αλληλεπιδρά με ένα πεδίο δυνάμεων $F(x)$ που δίνεται από την συνάρτηση δυναμικής ενέργειας $V(x)$, $F = -\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$. Ο Schrödinger το 1927 για να περιγράψει την κίνηση αυτού του σωματιδίου έγραψε την εξίσωση

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \tag{1.11}$$

Η εξίσωση του Schrödinger (1.11) δεν είναι συνέπεια κάποιου άλλου φυσικού νόμου. Αυτή η εξίσωση είναι ο βασικός φυσικός νόμος για την κβαντική φυσική και είναι αξίωμα όπως είναι ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα για την κλασσική μηχανική. Μόνο το πείραμα είναι ο τελικός κριτής για την ορθότητα ή μη αυτής την παραδοχής.

Θα γράψουμε την εξίσωση του Schrödinger με έναν διαφορετικό συμπαγή τρόπο χρησιμοποιώντας τον τελεστή της ορμής $\hat{p}_x$. Ο τελεστής $\hat{p}_x^2$ ορίζεται από την δράση του σε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση Ψ. Έχουμε λοιπόν:

$$\hat{p}_x^2\Psi = \hat{p}_x\left(\hat{p}_x\Psi\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) = (-i\hbar)^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

Άρα η εξίσωση (1.11) του Schrödinger μπορεί να γραφτεί στην μορφή:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2\Psi + V(x)\Psi$$

$$\Rightarrow\ i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)\right)\Psi \tag{1.12}$$

Στην κλασσική μηχανική ορίζουμε την Χαμιλτονιανή H ενός συστήματος σωματιδίων μέσω της σχέσης:

$$H(p,x,t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

Όταν οι δυνάμεις που ασκούνται στα σωματίδια του συστήματος είναι διατηρητικές και δεν είναι χρονικά μεταβαλλόμενες τότε η συνάρτηση V δεν εξαρτάται από τον χρόνο και είναι η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας $V(x)$ του συστήματος. Σε αυτή την περίπτωση η Χαμιλτονιανή ισούται με την ολική ενέργεια E του συστήματος και ισχύει:

$$H(p,x) = E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{1.13}$$

Συνδυάζοντας την εξίσωση (1.12) με την (1.13) ορίζουμε τον **τελεστή της Χαμιλτονιανής** η απλά Χαμιλτονιανή του συστήματος:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x) \tag{1.14}$$

Χρησιμοποιώντας τον τελεστή της Χαμιλτονιανής η εξίσωση του Schrödinger γίνεται:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \ \hat{H}\psi \tag{1.15}$$

Προσοχή: όταν αναφερόμαστε στην ενέργεια του σωματιδίου ή κάποιου κβαντικού συστήματος γενικότερα χρησιμοποιούμε το E ενώ όταν αναφερόμαστε στην εξίσωση του Schrödinger χρησιμοποιούμε την Χαμιλτονιανή $\hat{H}$ του συστήματος.

Εξίσωση του Schrödinger στις τρεις διαστάσεις

Στις τρεις διαστάσεις η εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + V(\boldsymbol{r})\Psi \tag{1.16}$$

Χρησιμοποιώντας τον τελεστή της Λαπλασιανής:

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

η (1.16) γράφεται ως εξής:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\boldsymbol{r})\Psi \tag{1.17}$$

Ορίζουμε τον τελεστή της ορμής $\hat{\boldsymbol{p}}$ στις τρεις διαστάσεις με την σχέση:

$$\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x,\ \hat{p}_y,\ \hat{p}_z) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{1.18}$$

$$\Rightarrow\ \hat{\boldsymbol{p}} = -\,i\hbar\nabla \tag{1.19}$$

και η εξίσωση του Schrödinger στις τρεις διαστάσεις παίρνει την μορφή:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})\right)\Psi = \hat{H}\Psi \tag{1.20}$$

Όπου η Χαμιλτονιανή $\hat{H}$ του συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{1.21}$$

και $\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$.

Όταν στο σωματίδιο δεν ασκούνται δυνάμεις η δυναμική ενέργεια είναι σταθερή και μπορούμε να την θέσουμε ίση με μηδέν. Σε αυτή την περίπτωση παίρνουμε την εξίσωση του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο στις τρεις διαστάσεις:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi \tag{1.22}$$

$$\Rightarrow\ i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi \tag{1.23}$$

$$\text{όπου}\quad \hat{H}_0 = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} \tag{1.24}$$

Η μορφή της εξίσωσης του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο σε μία ή δυο διαστάσεις είναι προφανής.

Παράδειγμα

Σωματίδιο μάζας m το οποίο φέρει φορτίο q κινείται υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου στο $(x,\ y)$ επίπεδο, $q < 0$. Η ένταση E του ηλεκτρικού πεδίου είναι κατά μήκος του άξονα των x και δίνεται από την σχέση $E = E_0 x$, $E_0 > 0$. Να γράψετε την εξίσωση του Schrödinger για το σωματίδιο.

Λύση:

1.2 Στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης

Από την μορφή της εξίσωσης (1.11) του Schrödinger βλέπουμε ότι η λύση της $\Psi(x,t)$ είναι μία μιγαδική συνάρτηση. Η συνάρτηση $V(x)$ της δυναμικής ενέργειας είναι μία πραγματική συνάρτηση. Εάν και η $\Psi(x,t)$ ήταν μία πραγματική συνάρτηση τότε το αριστερό μέλος της εξίσωσης (1.11) θα ήταν ένας φανταστικός αριθμός ενώ το δεξί μέλος θα ήταν πραγματικό και είναι αδύνατον να έχουμε ισότητα των δύο όρων. Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ δεν είναι μία μετρήσιμη φυσική ποσότητα. Με άλλα λόγια η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ που είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασικό κύμα.

Όπως είδαμε στο πρώτο κεφάλαιο, όταν κάνουμε μία μέτρηση δεν μπορούμε να βρούμε ακριβώς τη θέση που βρίσκεται το σωματίδιο. Αυτό που έχουμε τελικά είναι η πιθανότητα να μετρηθεί το σωματίδιο σε αυτή την θέση, και αυτή η πιθανότητα είναι ανάλογη με την κυματοσυνάρτηση. Όσο μεγαλύτερη η κυματοσυνάρτηση σε ένα σημείο, τόσο μεγαλύτερη η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε αυτό το σημείο κατά την μέτρηση.

Ο M. Born διατύπωσε πρώτος την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης με άρθρο του το 1926 στο περιοδικό Z. Physik και με ένα δεύτερο άρθρο στο περιοδικό Nature το 1927. Σύμφωνα με τον Born:

> Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης $\Psi(x,t)$ δίνει την **πυκνότητα πιθανότητας** $P(x,t)$, δηλαδή την πιθανότητα ανά μονάδα μήκους ή όγκου να βρούμε το σωματίδιο σε μία περιοχή του χώρου γύρω από την θέση x την χρονική στιγμή t

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \tag{1.25}$$

Η στοιχειώδης πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε μία περιοχή μήκους $\mathrm{d}x$ γύρω από το x την χρονική στιγμή t είναι ίση με:

$$\mathrm{d}\Pi(x,t) = P(x,t)\mathrm{d}x = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{1.26}$$

ενώ η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στο διάστημα $(x_1,\ x_2)$ ισούται με το ολοκλήρωμα της εξίσωσης (1.26):

$$\Pi(x_1 < x < x_2,\ t) = \int_{x_1}^{x_2} P(x,t)\mathrm{d}x = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

Υποθέτουμε ότι το σωματίδιο κινείται στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$. Η ολική πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο κάπου μέσα σε αυτή την περιοχή δίνεται από το ολοκλήρωμα της πυκνότητας πιθανότητας:

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

και απαιτείται η ολική πιθανότητα να είναι ίση με την μονάδα. Χωρίς αυτόν τον περιορισμό η στατιστική ερμηνεία δεν έχει κανένα νόημα. Τελικά πρέπει το σωματίδιο να είναι κάπου μέσα στο επιτρεπτό διάστημα κίνησης με πιθανότητα μονάδα.

Εάν λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger, βρούμε την κυματοσυνάρτηση Ψ του σωματιδίου, υπολογίσουμε την ολική πιθανότητα με αυτήν την κυματοσυνάρτηση και το ολοκλήρωμα είναι μεν

πεπερασμένο αλλά όχι ίσο με την μονάδα τι κάνουμε;
Η απάντηση είναι απλή, κανονικοποιούμε την κυματοσυνάρτηση που βρήκαμε και ορίζουμε μια νέα κυματοσυνάρτηση που δίνει τώρα ολική πιθανότητα ίση με την μονάδα.
Ορίζουμε με τις επόμενες τρεις σχέσεις τι εννοούμε μαθηματικά με την λέξη κανονικοποίηση. Έστω ότι ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = C \tag{1.27}$$

όπου C πεπερασμένος (θετικός) αριθμός. Ορίζουμε την νέα κυματοσυνάρτηση από την αντικατάσταση:

$$\Psi(x,t) \ \rightarrow \ \frac{\Psi(x,t)}{\sqrt{C}} \tag{1.28}$$

Για την νέα κυματοσυνάρτηση ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = 1, \quad \text{«}\textbf{συνθήκη κανονικοποίησης}\text{»} \tag{1.29}$$

Η κυματοσυνάρτηση που ικανοποιεί την σχέση (1.29) λέμε ότι είναι **κανονικοποιημένη**. Η διαδικασία που ακολουθήσαμε είναι μαθηματικά σωστή διότι η εξίσωση (1.11) του Schrödinger είναι γραμμική και εάν η Ψ είναι λύση της εξίσωσης (1.11) τότε κάθε πολλαπλάσιο της $\lambda\Psi$ είναι επίσης λύση της (1.11).

Από το ολοκλήρωμα κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης, εξίσωση (1.29), βλέπουμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας $P(x) = \Psi^*\Psi$ έχει διαστάσεις αντίστροφου μήκους $[P] = L^{-1}$ άρα η κυματοσυνάρτηση Ψ έχει διαστάσεις: $[\Psi] = L^{-1/2}$.

Η εξίσωση (1.11) του Schrödinger μπορεί να έχει επίσης λύσεις όπου το ολοκλήρωμα του μέτρου της κυματοσυνάρτησης είναι άπειρο, σε αυτή την περίπτωση είναι αδύνατον να κανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση. Οι **μη–κανονικοποιημένες** λύσεις, όπως π.χ. η κυματοσυνάρτηση (1.2) για το επίπεδο κύμα με συγκεκριμένη ορμή, είναι προβληματικές και δεν μπορούν να περιγράψουν κάποιο φυσικό κβαντικό σύστημα. Οι λύσεις αυτές ανεξάρτητα από την φυσική τους ερμηνεία έχουν έναν σπουδαίο μαθηματικό ρόλο στα πλαίσια της κβαντομηχανικής, μπορούν να χρησιμοποιηθούν π.χ. για να κατασκευάσουμε ένα κυματοπακέτο δηλαδή μία κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση με πεπερασμένο χωρικό εύρος.

Θεμελιώδης παραδοχή στην κβαντική μηχανική είναι ότι μόνο οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις είναι φυσικά αποδεκτές και μπορούν να περιγράψουν ένα φυσικό κβαντικό σύστημα. Ο χώρος $\mathbb{S}$ των συναρτήσεων με αυτή την ιδιότητα είναι ο χώρος των **τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων**.

Πρόταση 1. Εάν υποθέσουμε ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi_1(x,t)$ και $\Psi_2(x,t)$ ικανοποιούν την εξίσωση (1.11) του Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + V(x)\Psi_1$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} + V(x)\Psi_2$$

τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση (1.11) του Schrödinger. Οι συντελεστές c_1 και c_2 είναι σταθεροί πραγματικοί ή μιγαδικοί αριθμοί.

Απόδειξη.

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= i\hbar c_1\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + i\hbar c_2\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}c_1\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + c_1 V(x)\Psi_1 - \frac{\hbar^2}{2m}c_2\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + c_2 V(x)\Psi_2 \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) + V(x)\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi
\end{aligned}
$$

□

Πρόταση 2. Εάν οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi_1(x,t)$ και $\Psi_2(x,t)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες τότε και η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Άρα η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ ανήκει επίσης στον χώρο $\mathbb{S}$.

Απόδειξη.

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^\star \Psi \mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right)^\star \left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right)\mathrm{d}x \\
&= |c_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x + |c_2|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \\
&+ c_1^\star c_2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x + c_2^\star c_1 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_1 \mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

Από την «ανισότητα του Schwartz» έχουμε:

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \right|^2
$$

Το αριστερό μέλος της ανισότητας είναι πεπερασμένο άρα και το ολοκλήρωμα

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x
$$

στο δεξί μέλος είναι πεπερασμένο. Όπως επίσης και το ολοκλήρωμα

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_1 \mathrm{d}x = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \right)^\star
$$

Συνεπάγεται ότι το αρχικό ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^\star \Psi \mathrm{d}x$ είναι πεπερασμένο άρα η Ψ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

□

Συμπεραίνουμε ότι ο χώρος $\mathbb{S}$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων λύσεων της εξίσωσης του Schrödinger είναι ένας **γραμμικός χώρος**.

Απόδειξη της **ανισότητας του Schwartz**:

Ισχύει προφανώς η ανισότητα:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \Psi_1(x) - \Psi_2(x) \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 \Psi_2^\star \mathrm{d}x'}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_2 \mathrm{d}x''} \right|^2 \mathrm{d}x \geq 0 \tag{1.30}$$

Για συντομία θα χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό $(\Phi,\, \Psi)$ για το ολοκλήρωμα των δύο συναρτήσεων $\Phi^\star(x)$ και $\Psi(x)$:

$$(\Phi,\, \Psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^\star(x) \Psi(x) \mathrm{d}x \tag{1.31}$$

Ισχύει επίσης το εξής:

$$(\Phi,\, \Psi)^\star = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(x) \Psi^\star(x) \mathrm{d}x = (\Psi,\, \Phi) \quad \Rightarrow \quad (\Phi,\, \Phi)^\star = (\Phi,\, \Phi) \tag{1.32}$$

Η προηγούμενη ανισότητα χρησιμοποιώντας αυτόν τον συμβολισμό γράφεται ως εξής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \Psi_1(x) - \Psi_2(x) \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \right|^2 \mathrm{d}x \geq 0 \tag{1.33}$$

Αναπτύσουμε την έκφραση μέσα στο ολοκλήρωμα και παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \left| \Psi_1 - \Psi_2 \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \right|^2 \mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi_1 - \Psi_2 \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \right)^\star \left(\Psi_1 - \Psi_2 \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \right) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi_1^\star - \Psi_2^\star \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)^\star}{(\Psi_2,\, \Psi_2)^\star} \right) \left(\Psi_1 - \Psi_2 \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \right) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \\
&\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^\star \Psi_1 \mathrm{d}x \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)^\star}{(\Psi_2,\, \Psi_2)^\star} + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)^\star}{(\Psi_2,\, \Psi_2)^\star} \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} \geq 0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x \geq (\Psi_1,\, \Psi_2) \, \frac{(\Psi_2,\, \Psi_1)}{(\Psi_2,\, \Psi_2)} = (\Psi_1,\, \Psi_2) \, \frac{(\Psi_1,\, \Psi_2)^\star}{(\Psi_2,\, \Psi_2)}$$

$$\Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_1 \mathrm{d}x \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^\star \Psi_2 \mathrm{d}x \right|^2 \tag{1.34}$$

Η ισότητα ισχύει μόνο όταν έχουμε $\Psi_1(x,t) = c\Psi_2(x,t)$, όπου c πραγματικός ή μιγαδικός σταθερός αριθμός.

Συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης στο άπειρο

Αναγκαία συνθήκη για να είναι μια συνάρτηση τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, δηλαδή να συγκλίνει το ολοκλήρωμα στην σχέση (1.27), είναι ο μηδενισμός της κυματοσυνάρτησης για $x \to \pm\infty$:

$$\Rightarrow \quad \Psi(-\infty,\ t) = 0 \qquad \text{και} \qquad \Psi(\infty,\ t) = 0 \tag{1.35}$$

Ποια είναι η ικανή συνθήκη για σύγκλιση του ολοκληρώματος (1.27);
Απάντηση:

$$|\Psi(x \to \pm\infty)| \lessapprox \frac{1}{x^k}, \quad \text{με} \quad k > \frac{1}{2} \tag{1.36}$$

Απόδειξη:
Εάν $\Psi(x \to \pm\infty) \;\approx\; \dfrac{1}{x^k}$ τότε $|\Psi(x \to \pm\infty)|^2 \;\approx\; \dfrac{1}{x^{2k}}$ και από την ολοκλήρωση παίρνουμε:

$$\int \Psi^* \Psi \mathrm{d}x = \int |\Psi|^2 \mathrm{d}x \;\xrightarrow[x\to\pm\infty]{}\; \int \frac{1}{x^{2k}}\,\mathrm{d}x \sim \frac{1}{x^{2k-1}}$$

το ολοκλήρωμα συγκλίνει για $x \to \infty$ όταν έχουμε $2k-1>0$ άρα $2k>1$, $k>1/2$. Για $2k=1$ δηλαδή $k=1/2$ το ολοκλήρωμα δίνει λογάριθμο και αποκλίνει όταν το x τείνει στο άπειρο. Η συνθήκη (1.36) δείχνει ότι και η παράγωγος της κυματοσυνάρτησης μηδενίζεται στο όριο $x \to \pm\infty$:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x}(-\infty,\ t) = 0 \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial \Psi}{\partial x}(\infty,\ t) = 0 \tag{1.37}$$

Επανερχόμαστε τώρα στις συνθήκες κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης Ψ, σχέσεις (1.27) και (1.29). Όταν η $\Psi(x,\ t)$ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger και η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,\ t)/\sqrt{C}$ θα ικανοποιεί την ίδια εξίσωση μόνο εάν το C είναι σταθερό ανεξάρτητο του χρόνου. Όταν το C είναι σταθερό τότε: εάν κανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,\ t)$ κάποια χρονική στιγμή t_0, η κανονικοποίηση ισχύει για κάθε t. Άρα αρκεί να έχουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,\ t_0)$ κάποια χρονική στιγμή t_0 και ορίζουμε την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση από τις σχέσεις:

$$C(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t_0)\Psi(x,t_0)\mathrm{d}x \tag{1.38}$$

$$\Psi(x,\ t) \;\to\; \frac{1}{\sqrt{C(t_0)}}\Psi(x,\ t) \tag{1.39}$$

Πρόταση 3. Θα δείξουμε ότι:

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

όταν η Ψ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger και η δυναμική ενέργεια V είναι μία πραγματική συνάρτηση της θέσης x, $V(x) = V^*(x)$.

Απόδειξη. Παραγωγίζουμε την εξίσωση (1.27):

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi \mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}\mathrm{d}x \tag{1.40}$$

Ισχύει:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \;\Leftrightarrow\; -i\hbar\frac{\partial \Psi^\star}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^\star}{\partial x^2} + V(x)\Psi^\star$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} \dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = \dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \dfrac{i}{\hbar}V(x)\Psi\,, \\[2ex] \dfrac{\partial \Psi^\star}{\partial t} = -\dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2 \Psi^\star}{\partial x^2} + \dfrac{i}{\hbar}V(x)\Psi^\star \end{cases}$$

Αντικαθιστούμε στην εξίσωση (1.40) και παίρνουμε:

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\Psi^\star}{\partial x^2}\Psi\mathrm{d}x + \cancelto{0}{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\Psi^\star\Psi\mathrm{d}x} \\
&+ \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\mathrm{d}x - \cancelto{0}{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\Psi^\star\Psi\mathrm{d}x} \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x + \cancelto{0}{\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{d}x} \\
&+ \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^\star\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x - \cancelto{0}{\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{d}x} \\
\Rightarrow\quad \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\Psi\Bigg|_{-\infty}^{\infty}\right) + \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^\star\frac{\partial\Psi}{\partial x}\Bigg|_{-\infty}^{\infty}\right) = 0
\end{aligned}
$$

Στην τελευταία σχέση χρησιμοποιήσαμε τις οριακές συνθήκες:

$$
\Psi(x\to\pm\infty)=0 \quad \text{και} \quad \Psi^\star(x\to\pm\infty)=0
$$

$$
\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x\to\pm\infty)=0 \quad \text{και} \quad \frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}(x\to\pm\infty)=0
$$

σχέσεις (1.35) και (1.37). Οι δύο όροι που περιέχουν στο ολοκλήρωμα την συνάρτηση $V(x)$ της δυναμικής ενέργειας απλοποιήθηκαν μεταξύ τους όπως επίσης και τα δύο ολοκληρώματα με το γινόμενο $\frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$. □

Η στατιστική ερμηνεία ισχύει στην κβαντομηχανική για κάθε μετρήσιμη φυσική ποσότητα και όχι μόνο για την θέση ενός σωματιδίου.
Θα μπορούσαμε να φανταστούμε έναν μεγάλο αριθμό από ταυτόσημα, ανεξάρτητα πειράματα σε διαφορετικές περιοχές του χώρου έτσι ώστε σε κάθε πείραμα η συμπεριφορά του σωματιδίου (κβαντικού συστήματος) να περιγράφεται τοπικά από την ίδια κυματοσυνάρτηση Ψ. Σύμφωνα με την στατιστική ερμηνεία που δόθηκε από τον Born η αριθμητική τιμή της μέτρησης κάποια χρονική στιγμή t οποιασδήποτε φυσικής ποσότητας, όπως θέσης, ορμής, ή ενέργειας, δεν θα είναι γενικά η ίδια για όλα τα πειράματα. Το αποτέλεσμα της μέτρησης μιας συγκεκριμένης φυσικής ποσότητας στα διάφορα ταυτοτικά πειράματα θα αποτελείται από μία κατανομή των αριθμητικών αποτελεσμάτων που μπορεί να περιγραφεί από μία συνάρτηση πιθανότητας.
Έχουμε ήδη ορίσει την συνάρτηση πιθανότητας για την θέση. Η συνάρτηση πιθανότητας για την ορμή και την ενέργεια (όπως και για κάθε άλλη φυσική ποσότητα) μπορεί να υπολογιστεί επίσης όπως θα δούμε στις επόμενες παραγράφους με την χρήση της κυματοσυνάρτησης Ψ του σωματιδίου.

Παράδειγμα

(α) Από τις ακόλουθες κυματοσυναρτήσεις να ξεχωρίσετε τις φυσικά αποδεκτές:

$$
(1)\ \psi_1(x) = N\mathrm{e}^{\lambda x},\ \lambda>0 \qquad (2)\ \psi_2(x) = Nx\mathrm{e}^{-\lambda x},\ \lambda>0
$$

$$
(3)\ \psi_3(x) = N\mathrm{e}^{-\lambda|x|},\ \lambda>0,\ N>0.
$$

όπου $-\infty < x < \infty$.
(β) Να κανονικοποιήσετε τις φυσικά αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις όταν το x ανήκει στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$.

Λύση:

(α) Η πρώτη κυματοσυνάρτηση $\psi_1(x) = N\mathrm{e}^{\lambda x}$ με $\lambda > 0$ δεν είναι φυσικά αποδεκτή διότι απειρίζεται όταν το $x \to \infty$. Ομοίως η δεύτερη κυματοσυνάρτηση $\psi_2(x) = Nx\mathrm{e}^{-\lambda x}$ απειρίζεται όταν $x \to -\infty$ για $\lambda > 0$ και δεν είναι φυσικά αποδεκτή. Το ολοκλήρωμα του τετραγώνου της $\psi_1(x)$ και το ολοκλήρωμα του τετραγώνου της $\psi_2(x)$ από $-\infty$ έως ∞ απειρίζονται. Η τρίτη συνάρτηση $\psi_3(x) = N\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$ για $x \to \pm\infty$ τείνει στο μηδέν όταν $\lambda > 0$ και το ολοκλήρωμα του τετραγώνου της είναι πεπερασμένο.

(β) Κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης $\psi_3(x)$:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_3^\star(x)\psi_3(x)\mathrm{d}x &= |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x = |N|^2 \int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x + |N|^2 \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x \\
&= |N|^2 \int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{2\lambda x}\mathrm{d}x + |N|^2 \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x = -|N|^2 \int_{\infty}^{0} \mathrm{e}^{-2\lambda y}\mathrm{d}y + |N|^2 \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x \\
&= 2|N|^2 \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x = \frac{2|N|^2}{2\lambda}
\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_3^\star(x)\psi_3(x)\mathrm{d}x = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{2|N|^2}{2\lambda} = 1 \quad \Rightarrow \quad |N|^2 = \lambda \quad \Rightarrow \quad |N| = \sqrt{\lambda}$$

Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση ψ_3 στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$ είναι:

$$\psi_3(x) = \sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$$

1.3 Βασικές στατιστικές έννοιες

1.3.1 Διακριτή κατανομή

Έστω κάποιο στατιστικό μέγεθος A το οποίο παίρνει διακριτές τιμές $a_1, a_2, \ldots, a_\nu$. Σε μια σειρά N μετρήσεων έχουμε N_1 φορές το a_1, N_2 φορές το $a_2, \ldots, N_\nu$ φορές το a_ν.
Η μέση τιμή του A δίνεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle = \frac{N_1 a_1 + N_2 a_2 + \ldots + N_\nu a_\nu}{N} &= a_1 \frac{N_1}{N} + \ldots + a_\nu \frac{N_\nu}{N} \\
= a_1 f_1 + \ldots + a_\nu f_\nu &= \sum_{k=1}^{\nu} a_k f_k
\end{aligned}$$

όπου f_k η συχνότητα εμφάνισης της k τιμής.

Αν το $N \to \infty$ τότε $f_k \to P_k$, που είναι η πιθανότητα εμφάνισης της τιμής a_k,

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

και

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

Για τυχούσα συνάρτηση $G(A)$ ενός στατιστικού μεγέθους A, όπου $g_k = G(a_k)$ είναι οι δυνατές τιμές κατά την μέτρηση του G, η μέση τιμή ορίζεται από την σχέση:

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

1.3.2 Συνεχής κατανομή, πυκνότητα πιθανότητας

Εάν οι τιμές που παίρνει ένα στατιστικό μέγεθος A είναι συνεχείς έστω στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$, τότε ορίζουμε ότι η πιθανότητα να βρεθεί η τιμή του A σε ένα διάστημα απειροστό γύρω από κάποια τιμή a, δηλαδή στο διάστημα

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

Η συνάρτηση

$$P(a) \quad \text{ονομάζεται πυκνότητα πιθανότητας.}$$

Ισχύει:

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

Η μέση τιμή του στατιστικού μεγέθους A δίνεται από την σχέση:

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

Η πιθανότητα να βρούμε κατά την μέτρηση το αποτέλεσμα στο διάστημα $(a_1,\ a_2)$ είναι:

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

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

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

1.3.3 Διασπορά $(\Delta A)^2$ και τυπική απόκλιση ΔA του στατιστικού μεγέθους A

Η τυπική απόκλιση για ένα στατιστικό μέγεθος A αποτελεί ένα μέτρο της απόστασης των δυνατών τιμών του στατιστικού μέγεθους A από την μέση τιμή του $\langle A \rangle$.
Ορισμός:

$$(\Delta A)^2 = \langle \big(A - \langle A \rangle\big)^2 \rangle, \quad \text{Διασπορά} \tag{1.41}$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}, \quad \text{Τυπική απόκλιση} \tag{1.42}$$

Θα δείξουμε ότι ισχύει η εξής ισότητα:

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \tag{1.43}$$

Για συνεχή κατανομή με πυκνότητα πιθανότητας $P(a)$:

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

Για διακριτή κατανομή, $P_k = P(a_k)$, έχουμε:

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

Προσοχή η διασπορά ενός στατιστικού μεγέθους είναι πάντα ένας θετικός αριθμός ή μηδέν. Ισχύει πάντα:

$$\langle A^2\rangle \geq \langle A\rangle^2$$

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.

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

όπου a μία από τις δυνατές τιμές του στατιστικού μεγέθους A.

Απόδειξη για διακριτή κατανομή, όπου $(\Delta A)^2 = 0$ και $\langle A\rangle = a_{k_0}$:

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

αλλά $P_k \geq 0$ και $(a_k - \langle A\rangle)^2 \geq 0$. Άρα ή μόνη δυνατή λύση είναι:

$$P_{k_0} = 1,\ P_k = 0 \ \text{ για κάθε } k \neq k_0 \text{ διότι } \sum_{k=1}^{\nu} P_k = 1$$

και συγχρόνως $\langle A\rangle = a_{k_0}$.

Στην φυσική χρησιμοποιούμε συνήθως τον όρο **αβεβαιότητα** όταν αναφερόμαστε στην τυπική απόκλιση ενός φυσικού μεγέθους.

Παράδειγμα 1

Ένα στατιστικό μέγεθος A έχει μόνο τρεις δυνατές τιμές $a_1 = 1$, $a_2 = 2$ και $a_3 = 4$ με αντίστοιχες πιθανότητες $P_1 = \frac{1}{2}$, $P_2 = \frac{1}{4}$ και $P_3 = \frac{1}{4}$.
Να υπολογίσετε την μέση τιμή και την αβεβαιότητα του A.

Λύση:

Η μέση τιμή $\langle A\rangle$ του στατιστικού μεγέθους A είναι:

$$\langle A\rangle = \sum_{k=1}^{3} a_k P_k = \frac{1}{2} + \frac{2}{4} + \frac{4}{4} = 2$$

Η αβεβαιότητα ΔA του στατιστικού μεγέθους A ορίζεται ως εξής:

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

Υπολογίζουμε την μέση τιμή $\langle A^2\rangle$ του A:

$$\langle A^2\rangle = \sum_{k=1}^{3} a_k^2 P_k = \frac{1}{2} + \frac{4}{4} + \frac{16}{4} = \frac{11}{2}$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση που δίνει την διασπορά $(\Delta A)^2$ του A παίρνουμε:

$$(\Delta A)^2 = \frac{11}{2} - 4 = \frac{3}{2}$$

Άρα η αβεβαιότητα ΔA του A ισούται με:

$$\Delta A = \sqrt{(\Delta A)^2} = \sqrt{\frac{3}{2}}$$

Παράδειγμα 2

Ένα στατιστικό μέγεθος έχει συνεχή κατανομή των δυνατών τιμών του στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$, με πυκνότητα πιθανότητας:

$$P(x) = \lambda\,\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}$$

όπου λ θετικός πραγματικός αριθμός.
Να βρείτε την μέση τιμή και την διασπορά του x.

Λύση:

1.4 Ορισμός φυσικών μεγεθών, μέση τιμή φυσικών μεγεθών

1.4.1 Μέση τιμή της θέσης ενός σωματιδίου, αβεβαιότητα θέσης

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,\ t)$ μας δίνει μέσω της έκφρασης $P = |\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ την πυκνότητα πιθανότητας $P(x,\ t)$ για βρούμε το σωματίδιο στην θέση x την χρονική στιγμή t. Άρα η μέση τιμή της θέσης ενός κβαντικού σωματιδίου υπολογίζεται άμεσα από την σχέση:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,\ t)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi^*(x,\ t)\Psi(x,\ t)\,\mathrm{d}x \tag{1.44}$$

Εάν η πυκνότητα πιθανότητας $P = |\Psi|^2$ είναι συμμετρική γύρω από κάποιο σημείο x_0 τότε μπορούμε να δείξουμε ότι $\langle x\rangle = x_0$. Επειδή η κυματοσυνάρτηση Ψ εξαρτάται και από τον χρόνο t συνεπάγεται ότι γενικά και η μέση τιμή $\langle x\rangle$ της θέσης θα εξαρτάται από τον χρόνο.

Τι ακριβώς σημαίνει μέση τιμή $\langle x\rangle$ της θέσης για ένα σωματίδιο που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ; Καταρχάς δεν σημαίνει ότι μετράμε την θέση του σωματιδίου ξανά και ξανά σε μία μόνο πειραματική συσκευή, διότι η πρώτη μέτρηση θα δώσει κάποια τιμή για την θέση του σωματιδίου (γενικά απροσδιόριστη εκ των προτέρων) και οι επόμενες μετρήσεις θα δίνουν συνέχεια την ίδια τιμή με την προϋπόθεση ότι δεν διαταράσσουμε το σύστημα μετά την πρώτη μέτρηση. Η ποσότητα $\langle x\rangle$ είναι η μέση τιμή των μετρήσεων της θέσης του σωματιδίου σε ένα μεγάλο αριθμό ανεξάρτητων ταυτοτικών πειραμάτων όπου σε κάθε μία από αυτές τις πειραματικές συσκευές το σωματίδιο περιγράφεται από την ίδια κυματοσυνάρτηση.

Όταν γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου μπορούμε να υπολογίσουμε με ακρίβεια την τυπική απόκλιση ή αβεβαιότητα Δx της θέσης για το σωματίδιο:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \;\Rightarrow\; \Delta x = \sqrt{(\Delta x)^2}$$

όπου:

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\Psi^*(x,\ t)\Psi(x,\ t)\,\mathrm{d}x$$

Η αβεβαιότητα θέσης Δx είναι ένα ποσοτικό μέτρο του εύρους της περιοχής όπου υπάρχει σημαντική πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο. Εάν η πυκνότητα πιθανότητας $P(x)$ είναι εντοπισμένη γύρω από κάποιο σημείο, περιμένουμε ότι το Δx θα είναι σχετικά μικρό. Γενικά και η αβεβαιότητα θέσης Δx θα εξαρτάται από τον χρόνο.

Για οποιαδήποτε φυσική ποσότητα $F = F(x)$ που είναι συνάρτηση μόνο της θέσης x του σωματιδίου η μέση τιμή της $\langle F \rangle$ δίνεται από την σχέση:

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F(x)\Psi^*(x,\ t)\Psi(x,\ t)\,\mathrm{d}x \tag{1.45}$$

Για παράδειγμα η μέση τιμή $\langle V \rangle$ της δυναμικής ενέργειας $V(x)$ του σωματιδίου στην κατάσταση $\Psi(x,\ t)$ είναι:

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

Όταν αναφερόμαστε στην «κατάσταση» ενός κβαντικού συστήματος εννοούμε την κυματοσυνάρτησή του Ψ.

Παράδειγμα

Ηλεκτρόνιο περιγράφεται την χρονική στιγμή t_0 από μία κυματοσυνάρτηση που μηδενίζεται για αρνητικά x, ενώ για θετικά x δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(x,\,t_0) = N\mathrm{e}^{-x/a}, \quad a > 0.$$

(α) Βρείτε την τιμή του N που κανονικοποιεί την Ψ.
(β) Βρείτε στη συνέχεια την αναμενόμενη τιμή $\langle x \rangle$ της θέσης και την τυπική απόκλιση Δx.
(γ) Ποια είναι η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρεθεί σε απόσταση μιας τυπικής απόκλισης από την αναμενόμενη τιμή του, δηλαδή από το $\langle x \rangle - \Delta x$ μέχρι το $\langle x \rangle + \Delta x$;
Δίνεται:

$$\int_0^{\infty} x^n \mathrm{e}^{-\lambda x}\mathrm{d}x = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}$$

Λύση:

Πρόβλημα

Η κατάσταση ενός σωματιδίου κάποια χρονική στιγμή t_0 δίνεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\Psi(x,\ t_0) = N\,\mathrm{e}^{-\lambda(x-\alpha)^2/2}$$

όπου α και λ πραγματικοί αριθμοί, $\lambda > 0$.
(α) Να κανονικοποιήσετε την κυματοσυνάρτηση.
(β) Να υπολογίσετε τις ποσότητες $\langle x \rangle$ και $\langle x^2 \rangle$.
(γ) Να βρείτε την αβεβαιότητα Δx της θέσης.

Λύση:

Πρόβλημα

Η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου στην θεμελιώδη στάθμη του ατόμου του Υδρογόνου είναι:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = N\mathrm{e}^{-r/a_0}$$

όπου a_0 η ακτίνα του Bohr.
(α) Να βρείτε την μέση απόσταση $\langle r \rangle$ του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.
(β) Να βρείτε την απόσταση όπου η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο γίνεται μέγιστη.

Λύση:

1.4.2 Δύο προτάσεις για την σύνδεση μεταξύ πειράματος και θεωρίας

Για να συνδέσουμε με το πείραμα την εξίσωση του Schrödinger και την λύση της, δηλαδή την κυματοσυνάρτηση Ψ που περιγράφει την κατάσταση του κβαντικού συστήματος, χρειάζεται να δώσουμε τον κατάλληλο ορισμό των φυσικών ποσοτήτων που μπορούμε να μετρήσουμε. Αυτό γίνεται με τις ακόλουθες δύο προτάσεις:

1. Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος $A(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{p})$ που είναι στην κλασσική φυσική συνάρτηση της θέσης $\boldsymbol{r}$ και της ορμής $\boldsymbol{p}$ αντιστοιχεί ένας «ερμιτιανός» γραμμικός τελεστής $\hat{A}(\boldsymbol{r},\ \hat{\boldsymbol{p}})$. Ο τελεστής $\hat{A}(\boldsymbol{r},\ \hat{\boldsymbol{p}})$ δημιουργείται από την συνάρτηση $A(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{p})$ θέτοντας όπου $\boldsymbol{p}$ τον τελεστή της ορμής $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$.

2. Οι τιμές ενός μετρήσιμου φυσικού μεγέθους $A(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{p})$ ταυτίζονται με τις ιδιοτιμές του αντίστοιχου ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}(\boldsymbol{r},\ \hat{\boldsymbol{p}})$ και υπολογίζονται από την λύση της διαφορικής εξίσωσης:

$$\hat{A}\,\Phi_n(\boldsymbol{r}) = \lambda_n \Phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{1.46}$$

   Τα λ_n είναι πραγματικοί αριθμοί και ονομάζονται **ιδιοτιμές του τελεστή** $\hat{A}$. Οι συναρτήσεις $\Phi_n(\boldsymbol{r})$ που ικανοποιούν αυτή την διαφορική εξίσωση ονομάζονται **ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή** $\hat{A}$ και αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές λ_n. Η εξίσωση (1.46) ονομάζεται **εξίσωση ιδιοτιμών**.

Στο Κεφάλαιο 4 θα δώσουμε τον ορισμό του ερμιτιανού τελεστή και θα μελετήσουμε εκτενώς τις ιδιότητές του. Μία από τις σημαντικές ιδιότητές του είναι ότι έχει μόνο πραγματικές ιδιοτιμές.

1.4.3 Τι είναι ο γραμμικός τελεστής;

Κάθε απεικόνιση $\mathbb{S} \to \mathbb{S}$ ενός χώρου συναρτήσεων στον εαυτό του μέσω μιας σειράς μαθηματικών πράξεων ορίζει έναν τελεστή. Ο **τελεστής** δηλαδή είναι μία μαθηματική έκφραση $A(x,\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, ...)$ που περιέχει μία σειρά από μαθηματικές πράξεις οι οποίες όταν εκτελούνται πάνω σε μία συνάρτηση $\psi(x)$ του χώρου $\mathbb{S}$ δίνουν μία άλλη συνάρτηση του $\mathbb{S}$:

$$A(x,\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, ...)\,\psi(x) = \psi'(x), \quad \text{όπου} \quad \psi(x) \in \mathbb{S} \quad \text{και} \quad \psi'(x) \in \mathbb{S} \tag{1.47}$$

Συμβολίζουμε τον τελεστή $A(x,\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, ...)$ συνοπτικά με $\hat{A}$, άρα:

$$\hat{A}\psi(x) \equiv A(x,\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, ...)\,\psi(x) \tag{1.48}$$

και λέμε ότι ο τελεστής $\hat{A}$ δρα στην συνάρτηση ψ.

Επί παραδείγματι:

$$\begin{aligned}
\hat{A} = x^2 \quad &\Rightarrow \quad \hat{A}\psi(x) = x^2\psi(x) \\
\hat{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \quad &\Rightarrow \quad \hat{A}\psi(x) = \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \\
\hat{A} = \frac{1}{x} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \quad &\Rightarrow \quad \hat{A}\psi(x) = \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\psi(x)}{x}
\end{aligned}$$

Στην Κβαντομηχανική ο χώρος των κυματοσυναρτήσεων είναι ένας γραμμικός χώρος και οι τελεστές που ορίζουμε σε αυτόν τον χώρο είναι γραμμικοί τελεστές. Ένας τελεστής $\hat{A}$ είναι **γραμμικός τελεστής** όταν ισχύει

$$\hat{A}\left(c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)\right) = c_1\hat{A}\psi_1(x) + c_2\hat{A}\psi_2(x) \tag{1.49}$$

όπου $c_1,\ c_2$ πραγματικοί ή μιγαδικοί αριθμοί και $\psi_1(x),\ \psi_2(x)$ συναρτήσεις του γραμμικού χώρου $\mathbb{S}$. Όλοι οι τελεστές στο εμφανίζονται στο προηγούμενο παράδειγμα είναι γραμμικοί τελεστές.

Άλγεβρα τελεστών.

Οι πράξεις μεταξύ τελεστών ορίζονται από την δράση τους στις συναρτήσεις του γραμμικού χώρου $\mathbb{S}$.

Πρόσθεση τελεστών.
Το άθροισμα $\hat{C}$ δύο τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ορίζεται ως εξής:

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \ \Rightarrow\ \hat{C}\psi = \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \tag{1.50}$$

για κάθε συνάρτηση ψ που ανήκει στον γραμμικό χώρο $\mathbb{S}$.

Πολλαπλασιασμός δύο τελεστών.
Το γινόμενο $\hat{A}\cdot\hat{B}$ δύο τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ορίζεται ως εξής:

$$\hat{D} = \hat{A}\cdot\hat{B} \ \Rightarrow\ \hat{D}\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right) \tag{1.51}$$

δηλαδή δρα πρώτα ο τελεστής $\hat{B}$ στην συνάρτηση ψ και μετά δρα ο τελεστής $\hat{A}$ στην συνάρτηση $\psi' = \hat{B}\psi$. Το γινόμενο $\hat{B}\cdot\hat{A}$ των δύο τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ είναι αντίστοιχα:

$$\hat{F} = \hat{B}\cdot\hat{A} \ \Rightarrow\ \hat{F}\psi = \hat{B}\left(\hat{A}\psi\right) \tag{1.52}$$

Εν γένει η δράση του τελεστή $\hat{A}\cdot\hat{B}$ πάνω σε μία συνάρτηση δεν ταυτίζεται με την δράση του τελεστή $\hat{B}\cdot\hat{A}$ πάνω στην ίδια συνάρτηση. Εάν για δύο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ισχύει:

$$\hat{A}\cdot\hat{B}\,\psi \equiv \hat{B}\cdot\hat{A}\,\psi, \quad \text{για κάθε συνάρτηση } \psi \ \in\ \mathbb{S} \tag{1.53}$$

λέμε ότι οι δύο τελεστές μετατίθενται.

Για παράδειγμα, έστω ότι έχουμε $\hat{A} = x$ και $\hat{B} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$

$$\Rightarrow \quad \hat{A}\cdot\hat{B}\,\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right) = x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$$

$$\text{και} \qquad \hat{B}\cdot\hat{A}\,\psi = \hat{B}\left(\hat{A}\psi\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x\psi\right) = \psi + x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$$

Άρα

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

και λέμε ότι οι δύο αυτοί τελεστές δεν μετατίθενται.

Το τετράγωνο $\hat{C}^2$ ενός τελεστή $\hat{C}$ ορίζεται ως εξής:

$$\hat{C}^2\,\psi = \hat{C}\left(\hat{C}\,\psi\right) \tag{1.54}$$

και γενικότερα η νιοστή δύναμη του τελεστή $\hat{C}$ δίνεται από την σχέση:

$$\hat{C}^n\,\psi = \hat{C}\left(\hat{C}^{n-1}\,\psi\right) \tag{1.55}$$

για κάθε συνάρτηση $\psi \ \in\ \mathbb{S}$.

Παράδειγμα

Βρείτε το σύνολο των συνεχών και παραγωγίσιμων ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $\hat{D} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ στο διάστημα $x \in (-\infty,\, \infty)$ και τις αντίστοιχες ιδιοτιμές.

Λύση:

1.4.4 Γραμμικοί τελεστές φυσικών μεγεθών, μέση τιμή των φυσικών μεγεθών

Εάν το κβαντικό σύστημα είναι μονοδιάστατο, η κίνησή του χαρακτηρίζεται από μία χωρική συντεταγμένη και ας υποθέσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, ότι κινείται κατά μήκος του άξονα των x. Οι τελεστές θέσης $\hat{x}$, ορμής $\hat{p}_x$ και ενέργειας $\hat{H}$ αντίστοιχα είναι:

$$\text{«τελεστής θέσης»} \quad \hat{x} = x \quad \Rightarrow \quad \hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x) \tag{1.56}$$

$$\text{«τελεστής ορμής»} \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \Rightarrow \quad \hat{p}_x\Psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} \tag{1.57}$$

$$\text{«τελεστής ενέργειας»} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \tag{1.58}$$

όπου m η μάζα του κβαντικού συστήματος και $V(x)$ η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας.

Εάν το κβαντικό σύστημα μάζας m κινείται στις δύο ή τις τρεις διαστάσεις έχουμε αντίστοιχα:

$$\text{«τελεστής θέσης»} \quad \hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r} \quad \Rightarrow \quad \hat{\boldsymbol{r}}\Psi(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r}\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.59}$$

$$\text{«τελεστής ορμής»} \quad \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla \quad \Rightarrow \quad \hat{\boldsymbol{p}}\Psi(\boldsymbol{r}) = -i\hbar\nabla\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.60}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x,\, \hat{p}_y,\, \hat{p}_z) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{1.61}$$

$$\text{«τελεστής ενέργειας»} \quad \hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\boldsymbol{r})\Psi \tag{1.62}$$

Ένα μετρήσιμο φυσικό μέγεθος χαρακτηριστικό της κατάστασης ενός κβαντικού συστήματος στις δύο ή τις τρεις διαστάσεις είναι η στροφορμή του κβαντικού συστήματος. Η στροφορμή είναι το διάνυσμα $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ στην κλασσική φυσική. Ο τελεστής $\hat{\boldsymbol{L}}$ της στροφορμής ορίζεται στην κβαντική φυσική από την σχέση:

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\,\boldsymbol{r} \times \nabla \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right) \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}\right) \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right) \end{cases} \tag{1.63}$$

Οι τελεστές των φυσικών μεγεθών θέσης, ορμής, ενέργειας και στροφορμής που ορίσαμε είναι γραμμικοί τελεστές. Θα το αποδείξουμε για τον τελεστή $\hat{H}$ της ενέργειας και με τον ίδιο τρόπο γίνεται η απόδειξη για τα άλλα φυσικά μεγέθη.
Έστω ότι έχουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ που είναι γραμμικός συνδυασμός των

κυματοσυναρτήσεων Ψ_1 και Ψ_2. Η δράση του $\hat{H}$ στην Ψ είναι:

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\boldsymbol{r})\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) + V(\boldsymbol{r})\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) \\ &= -c_1\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_1 - c_2\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_2 + c_1V(\boldsymbol{r})\Psi_1 + c_2V(\boldsymbol{r})\Psi_2 \\ &= c_1\hat{H}\Psi_1 + c_2\hat{H}\Psi_2\end{aligned}$$

Άρα ο τελεστής $\hat{H}$ της ενέργειας είναι ένας γραμμικός τελεστής.

Όταν κάποιο κβαντικό σύστημα είναι σε μία κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi = \Psi(\boldsymbol{r}, t)$ η μέση τιμή $\langle A\rangle$ για τυχόν φυσικό μέγεθος A δίνεται από την σχέση:

$$\langle A\rangle = \int \Psi^\star \hat{A}\,\Psi \mathrm{d}^3x\,, \tag{1.64}$$

όπου $\hat{A}$ ο κατάλληλος γραμμικός τελεστής για το φυσικό μέγεθος A. Δηλαδή ο τελεστής $\hat{A}$ μέσα στο ολοκλήρωμα δρα στην κυματοσυνάρτηση Ψ και μας δίνει μία άλλη συνάρτηση $\Phi = \hat{A}\Psi$ μετά πολλαπλασιάζουμε με την $\Psi^\star$ και ολοκληρώνουμε. Το στοιχείο όγκου στις τρεις διαστάσεις είναι d^3x. Στην μία διάσταση έχουμε αντίστοιχα $\mathrm{d}x$. Τα όρια ολοκλήρωσης εκτείνονται στο πεδίο ορισμού της κυματοσυνάρτησης $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ του συστήματος.

Η μέση τιμή $\langle A\rangle$ του φυσικού μεγέθους A είναι, όπως έχουμε πει στην παράγραφο **2.4.1**, η μέση τιμή των μετρήσεων του A σε ένα μεγάλο αριθμό ανεξάρτητων ταυτοτικών πειραμάτων όπου σε κάθε μία από αυτές τις πειραματικές συσκευές το κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την ίδια κυματοσυνάρτηση $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$.

Εάν η κυματοσυνάρτηση $\Psi = \Psi(\boldsymbol{r}, t)$ που περιγράφει το κβαντικό σύστημα είναι συνάρτηση του χρόνου, τότε εν γένει η μέση τιμή $\langle A\rangle$ του φυσικού μεγέθους A είναι συνάρτηση του χρόνου. Εάν η μέση τιμή $\langle A\rangle$ δεν εξαρτάται από τον χρόνο έχουμε μία **στάσιμη κατάσταση**.

Η τυπική απόκλιση ή αβεβαιότητα ΔA του φυσικού μεγέθους A, όταν το κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ, δίνεται από τις σχέσεις:

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta A = \sqrt{(\Delta A)^2} \tag{1.65}$$

όπου:

$$\langle A^2\rangle = \int \Psi^\star \hat{A}^2\,\Psi \mathrm{d}^3x \equiv \int \Psi^\star \hat{A}\left(\hat{A}\Psi\right)\mathrm{d}^3x \tag{1.66}$$

και είναι ένα ποσοτικό μέτρο του εύρους των μετρήσεων για το μέγεθος A στην κατάσταση Ψ.

Πρόβλημα

Έστω $\langle x\rangle$ και $\langle p\rangle$ οι μέσες τιμές της θέσης και της ορμής αντίστοιχα για ένα σύστημα στην κατάσταση $\psi(x)$, $x \in (-\infty, \infty)$. Δείξτε ότι οι μέσες τιμές της θέσης και της ορμής για την κατάσταση:

$$\phi(x) = exp[-i\langle p\rangle x/\hbar]\,\psi(x + \langle x\rangle)$$

μηδενίζονται.

Λύση:

Πρόβλημα

(α) Δείξτε ότι εάν δύο κυματοσυναρτήσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ διαφέρουν μόνο κατά μία σταθερή φάση, δηλαδή $\psi_2(x) = \mathrm{e}^{ia}\psi_1(x)$ με a σταθερό, τότε περιγράφουν την ίδια φυσική κατάσταση.

(β) Τι συμβαίνει όταν $a = a(x)$;

Λύση:

(α) Εάν η κατάσταση $\psi_1(x)$ είναι κανονικοποιημένη τότε και η $\psi_2(x)$ είναι κανονικοποιημένη διότι το μέτρο της σταθεράς $c = \mathrm{e}^{ia}$ που πολλαπλασιάζει την $\psi_1(x)$ ισούται με την μονάδα:

$$\int \psi_2^\star(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x = \mathrm{e}^{-ia}\mathrm{e}^{ia}\int \psi_1^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x = 1$$

Επίσης η πυκνότητα πιθανότητας δεν αλλάζει όπως και η μέση τιμή κάθε φυσικής ποσότητας:

$$P_2(x) = \psi_2^\star(x)\psi_2(x) = \mathrm{e}^{-ia}\mathrm{e}^{ia}\psi_1^\star(x)\psi_1(x) = \psi_1^\star(x)\psi_1(x) = P_1(x)$$

$$\langle x\rangle_2 = \int x\psi_2^\star(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x = \mathrm{e}^{-ia}\mathrm{e}^{ia}\int x\psi_1^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x = \int x\psi_1^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x = \langle x\rangle_1$$

$$\langle p_x\rangle_2 = -i\hbar\int \psi_2^\star(x)\frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}\mathrm{d}x = -i\hbar\mathrm{e}^{-ia}\mathrm{e}^{ia}\int \psi_1^\star(x)\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}\mathrm{d}x = \langle p_x\rangle_1$$

(β) Εάν η φάση εξαρτάται από το x, δηλαδή $a = a(x)$ τότε αλλάζει η μέση τιμή της ορμής όπως και κάθε τελεστή που περιέχει παράγωγο ως προς x:

$$\begin{aligned}
\langle p_x\rangle_2 &= -i\hbar\int \psi_2^\star(x)\frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}\mathrm{d}x \\
&= -i\hbar\int \mathrm{e}^{-ia(x)}\psi_1^\star(x)\left(\mathrm{e}^{ia(x)}\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x} + i\mathrm{e}^{ia(x)}\frac{\partial a(x)}{\partial x}\psi_1(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= -i\hbar\int \psi_1^\star(x)\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}\mathrm{d}x + \hbar\int \psi_1^\star(x)\frac{\partial a(x)}{\partial x}\psi_1(x)\mathrm{d}x \\
&= \langle p_x\rangle >_1 + \hbar\int \frac{\partial a(x)}{\partial x}\psi_1^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Πρόβλημα 2: Μέση τιμή της ορμής, σύγκριση με τον ρυθμό μεταβολής της $\langle x\rangle$.

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ ενός σωματιδίου μάζας m είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger.

(α) Να υπολογίσετε τον ρυθμό μεταβολής $\dfrac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}$ της μέσης τιμής $\langle x\rangle$ της θέσης του σωματιδίου.

(β) Να συγκρίνετε το αποτέλεσμα του ερωτήματος (α) με την μέση τιμή $\langle p_x\rangle$ της ορμής του σωματιδίου.

Λύση:

(α)

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^\star\Psi)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} x\left(\frac{\partial\Psi^\star}{\partial t}\Psi + \Psi^\star\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x$$

Η Ψ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \;\Rightarrow\; \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi$$

$$\text{και}\qquad -i\hbar\frac{\partial\Psi^\star}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^\star}{\partial x^2} + V(x)\Psi^\star \;\Rightarrow\; \frac{\partial\Psi^\star}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^\star}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi^\star$$

όπου η δυναμική ενέργεια $V(x)$ είναι πραγματική συνάρτηση, $V^\star(x) = V(x)$. Υπολογίζουμε την παράσταση μέσα στο ολοκλήρωμα:

$$\frac{\partial \Psi^\star}{\partial t}\Psi + \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi^\star}{\partial x^2}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(x\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\right)\mathrm{d}x + \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial x}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \\
&= 0 + \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi\mathrm{d}x - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Για να φτάσουμε στο τελικό αποτέλεσμα

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

χρησιμοποιήσαμε τις εξής σχέσεις:

$$(i) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(x\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\right)\mathrm{d}x = x\left(\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi - \Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

διότι εάν $\Psi \sim \dfrac{1}{x^{(1/2)+\varepsilon}} \;\Rightarrow\; \dfrac{\partial \Psi}{\partial x} \sim \dfrac{1}{x^{(3/2)+\varepsilon}} \;\Rightarrow\; x\Psi^\star\dfrac{\partial \Psi}{\partial x} \sim \dfrac{1}{x^{1+2\varepsilon}} \to 0$ όταν $x \to \pm\infty$

και (ii)

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial(\Psi^\star\Psi)}{\partial x}\mathrm{d}x - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x = \left(\Psi^\star\Psi\Bigg|_{-\infty}^{\infty}\right) - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

$$= 0 - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x, \quad \text{διότι } \Psi^\star\Psi \sim \frac{1}{x^{1+2\varepsilon}} \to 0 \text{ όταν } x \to \pm\infty.$$

(β) Η μέση τιμή $\langle p_x\rangle$ της ορμής του σωματιδίου είναι:

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\hat{p}_x\Psi\mathrm{d}x = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

Συγκρίνοντας με το ερώτημα (α) έχουμε:

$$< p_x >= m\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}$$

Εάν υποθέσουμε ότι η μέση τιμή $\langle v\rangle$ της ταχύτητας του σωματιδίου ισούται με την χρονική παράγωγο της μέσης τιμής της θέσης:

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

παίρνουμε την σχέση της κλασσικής φυσικής:

$$\langle p_x\rangle = m\langle v\rangle$$

μεταξύ της ¨ορμής¨ και της ¨ταχύτητας¨ του σωματιδίου, αλλά χρησιμοποιώντας τις μέσες τιμές τους. Θα μπορούσαμε να ισχυριστούμε ότι η τελευταία σχέση δικαιολογεί την επιλογή του διαφορικού τελεστή $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ ως τελεστή της ορμής του σωματιδίου στην κατεύθυνση x.

Πρόβλημα 3

Δείξτε ότι η μέση τιμή της ορμής $\langle p_x \rangle$ είναι μηδέν όταν: (α) η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ είναι μία πραγματική συνάρτηση, (β) η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ είναι άρτια ή περιττή συνάρτηση του x. Υποθέτουμε ότι η κυματοσυνάρτηση που χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε την μέση τιμή κάποιου φυσικού μεγέθους είναι πάντα κανονικοποιημένη.

Λύση:

(α) Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ του κβαντικού συστήματος είναι μία πραγματική συνάρτηση του x, $\psi^\star(x) = \psi(x)$:

$$\Rightarrow \langle p_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\star \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x$$

$$= -i\frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^2}{\partial x} \mathrm{d}x = -i\frac{\hbar}{2} \Big[\psi^2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} \Big] = 0$$

(β) Έστω ότι έχουμε $\psi(-x) = k\psi(x)$ όπου $k = \pm 1$. Η μέση τιμή της ορμής δίνεται από την σχέση:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\star \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x$$

Εάν η συνάρτηση $\psi(x)$ είναι άρτια τότε η παράσταση $\psi^\star \dfrac{\partial \psi}{\partial x}$ είναι περιττή συνάρτηση του x, ομοίως και εάν η συνάρτηση $\psi(x)$ είναι περιττή συνάρτηση του x. Άρα λόγω συμμετρίας του διαστήματος ολοκλήρωσης το ολοκλήρωμα μηδενίζεται.
Κάνουμε αναλυτική απόδειξη του προηγούμενου συμπεράσματος:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^\star \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{0} \psi^\star \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} \psi^\star \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x$$

$$= \int_{\infty}^{0} \psi^\star(-y) \frac{\partial \psi(-y)}{\partial(-y)} (-\mathrm{d}y) + \int_{0}^{\infty} \psi^\star(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \mathrm{d}x$$

$$= \int_{\infty}^{0} \psi^\star(y) k^2 \frac{\partial \psi(y)}{\partial y} \mathrm{d}y + \int_{0}^{\infty} \psi^\star(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \mathrm{d}x$$

$$= -\int_{0}^{\infty} \psi^\star(y) \frac{\partial \psi(y)}{\partial y} \mathrm{d}y + \int_{0}^{\infty} \psi^\star(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \mathrm{d}x = 0$$

Στο ολοκλήρωμα θέσαμε $x = -y$ άρα $\mathrm{d}x = -\mathrm{d}y$ και $k^2 = 1$.

1.4.5 Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Η αρχή της αβεβαιότητας για την θέση και την ορμή ενός σωματιδίου διατυπώθηκε για πρώτη φορά από τον Heisenberg το 1927. Σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg για την θέση και την ορμή είναι αδύνατον να προσδιορίσουμε συγχρόνως και με ακρίβεια την τιμή των δύο συζυγών φυσικών μεγεθών θέσης και ορμής για ένα σωματίδιο ή γενικότερα για ένα σύστημα με διαστάσεις στην ατομική κλίμακα. Ειδικότερα η αρχή της αβεβαιότητας μας λέει ότι γινόμενο της αβεβαιότητας Δx στην θέση επί την αβεβαιότητα Δp_x στον προσδιορισμό της ορμής ενός κβαντικού συστήματος είναι, κατά τάξη μεγέθους, μεγαλύτερο από την σταθερά $\hbar$ του Planck:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar \tag{1.67}$$

Δηλαδή δεν μπορούμε να εντοπίσουμε το σωματίδιο σε μια μικρή περιοχή του χώρου και συγχρόνως να γνωρίζουμε την ορμή του με μεγάλη ακρίβεια. Όσο μικρότερη είναι η περιοχή που έχουμε εντοπίσει το σωματίδιο τόσο μεγαλύτερη είναι η απροσδιοριστία στην ορμή του.

Μπορούμε να αναπτύξουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ κάποια χρονική στιγμή t σε επίπεδα κύματα με διαφορετικά μήκη κύματος λ χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό Fourier. Εάν η κυματοσυνάρτηση έχει ένα εύρος Δx τότε το εύρος Δk των κυματικών αριθμών που χρησιμοποιούμε στον μετασχηματισμό Fourier της $\Psi(x,t)$ ικανοποιεί προσεγγιστικά την σχέση:

$$\Delta k \gtrsim \frac{1}{\Delta x} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1$$

Από την σχέση του de Broglie μεταξύ ορμής p και μήκους κύματος λ έχουμε:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad \Rightarrow \quad \Delta p = \hbar \Delta k$$

Συνδυάζοντας τις δύο σχέσεις παίρνουμε:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$$

Στην Κβαντομηχανική ορίζουμε μαθηματικά ως αβεβαιότητα για μία φυσική ποσότητα την αντίστοιχη τυπική απόκλιση της φυσικής ποσότητας χρησιμοποιώντας την κυματοσυνάρτηση του κβαντικού συστήματος. Άρα ορίζουμε:

$$\Delta x = \sqrt{(\Delta x)^2}, \quad \text{όπου } (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \tag{1.68}$$

$$\text{και} \qquad \Delta p_x = \sqrt{(\Delta p_x)^2}, \quad \text{όπου } (\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 \tag{1.69}$$

Στηριζόμενοι στον προηγούμενο ορισμό θα αποδείξουμε αναλυτικά πιο κάτω ότι η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg παίρνει την ακριβέστερη μορφή:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.70}$$

Με βάση την στατιστική αντιμετώπιση της κυματοσυνάρτησης, η φυσική ερμηνεία της αρχής της αβεβαιότητας στην κβαντική φυσική είναι η εξής: Εάν ένα σωματίδιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ και κάποια χρονική στιγμή μετρήσουμε την θέση του σωματιδίου σε έναν μεγάλο αριθμό πανομοιότυπων συστημάτων θα βρούμε ένα εύρος τιμών για την θέση του σωματιδίου. Εάν στα ίδια συστήματα κάνουμε ανεξάρτητα μέτρηση της ορμής του σωματιδίου θα πάρουμε ένα εύρος τιμών για την ορμή του σωματιδίου. Όσο μικρότερο είναι το εύρος τιμών για την θέση του σωματιδίου τόσο μεγαλύτερο είναι το εύρος τιμών που θα βρούμε για την ορμή του, και αντίθετα εάν ή ορμή του σωματιδίου είναι περιορισμένη σε ένα μικρό διάστημα γύρω από κάποια κεντρική τιμή το εύρος τιμών για την θέση απλώνεται σε ένα πολύ μεγαλύτερο διάστημα.

Πρόβλημα 4

Δείξτε ότι ισχύει:

$$\langle p_x^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \mathrm{d}x$$

για ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα. Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ του συστήματος είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο διάστημα $(-\infty,\, \infty)$.

Λύση:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}_x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^\star \hat{p}_x \left(\hat{p}_x \Psi\right) \mathrm{d}x = (-i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^\star \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) \mathrm{d}x \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Big[\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) - \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big] \mathrm{d}x \\ &= -\hbar^2 \Big[\Psi^\star \frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty}\Big] + \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} \mathrm{d}x = 0 + \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} \mathrm{d}x\end{aligned}$$

Ο όρος $\Psi^\star \dfrac{\partial \Psi}{\partial x}$ μηδενίζεται στο όριο $x \to \pm\infty$ διότι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,\, t)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο διάστημα $(-\infty,\, \infty)$ άρα $\Psi(x \to \pm\infty,\, t) \to 0$ και $\Psi^\star(x \to \pm\infty,\, t) \to 0$ όπως επίσης και οι παραγωγοί τους $\dfrac{\partial \Psi}{\partial x}$ και $\dfrac{\partial \Psi^\star}{\partial x}$. Άρα:

$$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{p}_x \Psi\right)^\star \left(\hat{p}_x \Psi\right) \mathrm{d}x \tag{1.71}$$

Παρατηρούμε ότι έχουμε $\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left|\dfrac{\partial \Psi}{\partial x}\right|^2 \mathrm{d}x > 0$.

Πρόβλημα 5

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου κάποια χρονική στιγμή $t = t_0$ είναι:

$$\Psi(x, t_0) = N \mathrm{e}^{-\lambda x^2/2}$$

(α) Να κανονικοποιήσετε την $\Psi(x, t_0)$. Δίνεται το ολοκλήρωμα:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \mathrm{d}x = \frac{(2n)!}{n!(4\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

(β) Να υπολογίσετε την αβεβαιότητα Δx στη θέση και την αβεβαιότητα Δp_x στην ορμή του σωματιδίου την χρονική στιγμή t_0.
(γ) Δείξτε ότι ισχύει:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

Λύση:

(α) Κανονικοποιούμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t_0) = \psi(x)$ και υπολογίζουμε την σταθερά κανονικοποίησης N:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star(x)\psi(x) \mathrm{d}x = N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \mathrm{d}x = N^\star N \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1 \;\Rightarrow\; N^\star N = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$$

Υποθέτουμε ότι η σταθερά κανονικοποίησης N είναι πραγματικός και θετικός αριθμός:

$$N^2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \quad \Rightarrow \quad N = \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}$$

Εάν υποθέσουμε ότι έχουμε $N = \sqrt[4]{\dfrac{\lambda}{\pi}} \mathrm{e}^{i\varphi}$, η σταθερή φάση φ δεν επηρεάζει την πυκνότητα πιθανότητας ή τις μέσες τιμές των φυσικών ποσοτήτων.

(β) Η αβεβαιότητα Δx στη θέση είναι:

$$\Delta x = \sqrt{(\Delta x)^2}, \quad \text{όπου} \quad (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Η μέση τιμή $\langle x \rangle$ της θέσης είναι μηδέν διότι η $\psi(x)$ είναι μία άρτια συνάρτηση. Υπολογίζουμε αναλυτικά την μέση τιμή $\langle x \rangle$ της θέσης του σωματιδίου:

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi^2(x)\mathrm{d}x = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x \\
&= N^2 \int_{-\infty}^{0} x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x + N^2 \int_{0}^{\infty} x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x \\
&= N^2 \int_{\infty}^{0} y\mathrm{e}^{-\lambda y^2}\mathrm{d}y + N^2 \int_{0}^{\infty} x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x \\
&= -N^2 \int_{0}^{\infty} y\mathrm{e}^{-\lambda y^2}\mathrm{d}y + N^2 \int_{0}^{\infty} x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x = 0
\end{aligned}$$

Στο ολοκλήρωμα ορίσαμε την νέα μεταβλητή $y = -x$ άρα $\mathrm{d}y = -\mathrm{d}x$ και $y \to \infty$ όταν $x \to -\infty$. Υπολογίζουμε την μέση τιμή $< x^2 >$ του τετραγώνου της θέσης του σωματιδίου:

$$\langle x^2 \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{1}{2\lambda}$$

Αντικαθιστούμε στην σχέση που δίνει την αβεβαιότητα Δx στην θέση και παίρνουμε:

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$$

Η αβεβαιότητα Δp_x στην ορμή p_x του σωματιδίου δίνεται από την σχέση:

$$\Delta p_x = \sqrt{(\Delta p_x)^2}, \quad \text{όπου} \quad (\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$$

Η μέση τιμή $\langle p_x \rangle$ της ορμής του σωματιδίου είναι μηδέν όπως έχουμε δείξει διότι η κυματοσυνάρτηση του είναι πραγματική. Άρα χρειάζεται να υπολογίσουμε μόνο την μέση τιμή $\langle p_x^2 \rangle$ του τετραγώνου της ορμής του σωματιδίου:

$$\begin{aligned}
\langle p_x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\,\hat{p}_x^2\psi(x)\mathrm{d}x = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = \hbar^2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda x)^2\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x \\
&= \hbar^2\lambda^2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x = \hbar^2\lambda^2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \hbar^2\frac{\lambda}{2}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle = \hbar^2\frac{\lambda}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p_x = \hbar\sqrt{\frac{\lambda}{2}}$$

(γ) Το γινόμενο της αβεβαιότητας στην θέση του σωματιδίου Δx επί την αβεβαιότητα Δp_x στη ορμή του είναι ίσο με $\hbar/2$:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\hbar\sqrt{\frac{\lambda}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

Αποδεικνύεται ότι η Γκαουσιανή κυματοσυνάρτηση δίνει ισότητα και όχι ανισότητα για την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.

Πρόβλημα 6

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ ενός σωματιδίου την χρονική στιγμή $t=0$ είναι:

$$\psi(x)=\Psi(x,0)=N\mathrm{e}^{-|x|/\lambda}$$

(α) Να κανονικοποιήσετε την $\psi(x)$. Τι διαστάσεις έχει η παράμετρος λ;
(β) Να υπολογίσετε την αβεβαιότητα Δx στη θέση και την αβεβαιότητα Δp_x στην ορμή του σωματιδίου.
(γ) Δείξτε ότι ισχύει η αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg:

$$\Delta x\cdot\Delta p_x>\frac{\hbar}{2}$$

(δ) Τι συμβαίνει στις οριακές περιπτώσεις όπου η παράμετρος $\lambda\to 0$ ή $\lambda\to\infty$;

Λύση:

(α)

Πρόβλημα 7: Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.

Αποδείξτε την σχέση $\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\dfrac{\hbar}{2}$ του Heisenberg. Όπου Δx η τυπική απόκλιση της θέσης και Δp_x η τυπική απόκλιση της ορμής αντίστοιχα για ένα κβαντικό σύστημα στην κατάσταση $\Psi(x,t)$. Για απλότητα υποθέτουμε ότι ισχύει $\langle x\rangle=0$ και $\langle p_x\rangle=0$. Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ του κβαντικού συστήματος είναι κανονικοποιημένη στο διάστημα $(-\infty,\,\infty)$.

Λύση:

Η τυπική απόκλιση–αβεβαιότητα Δx της θέσης του κβαντικού συστήματος δίνεται από την σχέση:

$$\Delta x=\sqrt{(\Delta x)^2},\ \text{όπου}\ (\Delta x)^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\langle x^2\rangle\ \text{διότι}\ \langle x\rangle=0$$

ενώ η τυπική απόκλιση–αβεβαιότητα Δp_x της ορμής του κβαντικού συστήματος είναι:

$$\Delta p_x=\sqrt{(\Delta p_x)^2},\ \text{όπου}\ (\Delta p_x)^2=\langle p_x^2\rangle-\langle p_x\rangle^2=\langle p_x^2\rangle\ \text{διότι}\ \langle p_x\rangle=0$$

Το γινόμενο της διασποράς της θέσης $(\Delta x)^2$ επί την διασπορά της ορμής $(\Delta p_x)^2$ χρησιμοποιώντας την ανισότητα του Schwartz (εξίσωση (1.34)) δίνει την σχέση:

$$(\Delta x)^2\cdot(\Delta p_x)^2=\langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}(x\Psi)^\star(x\Psi)\mathrm{d}x\cdot\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{p}_x\Psi)^\star(\hat{p}_x\Psi)\mathrm{d}x$$

$$\geq\left|\int_{-\infty}^{\infty}(x\Psi)^\star(\hat{p}_x\Psi)\mathrm{d}x\right|^2=\left|\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star x\hat{p}_x\Psi\mathrm{d}x\right|^2$$

Στο δεξιό μέλος της ανισότητας έχουμε την μέση τιμή του τελεστή $\hat{C}=x\hat{p}_x$. Ορίζουμε τους τελεστές:

$$\hat{C}_1=\frac{1}{2}\left(x\hat{p}_x+\hat{p}_x x\right)\qquad\text{και}\qquad\hat{C}_2=\frac{1}{2i}\left(x\hat{p}_x-\hat{p}_x x\right)$$

Ισχύει:

$$\hat{C}=\hat{C}_1+i\hat{C}_2\quad\Rightarrow\quad\langle\hat{C}\rangle=\langle\hat{C}_1\rangle+i\langle\hat{C}_2\rangle$$

Θα δείξουμε ότι οι μέσες τιμές $\langle\hat{C}_1\rangle$ και $\langle\hat{C}_2\rangle$ των τελεστών $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$ είναι πραγματικοί αριθμοί:

$$\langle\hat{C}_1\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\hat{C}_1\Psi\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star x\hat{p}_x\Psi\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^\star\hat{p}_x(x\Psi)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}(x\Psi)^\star(\hat{p}_x\Psi)\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{p}_x\Psi)^\star(x\Psi)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{2}\left(A+A^\star\right)\ \in\ \mathbb{R}.$$

Έχουμε ορίσει:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} (x\Psi)^{\star}(\hat{p}_x\Psi)\mathrm{d}x \;\Rightarrow\; A^{\star} = \int_{-\infty}^{\infty} (x\Psi)(\hat{p}_x\Psi)^{\star}\mathrm{d}x$$

Στον υπολογισμό της μέσης τιμής $\langle \hat{C}_1 \rangle$ έχουμε χρησιμοποιήσει την ταυτότητα:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{\star}\hat{p}_x(x\Psi)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p}_x\Psi)^{\star}(x\Psi)\mathrm{d}x$$

Η απόδειξη είναι η εξής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{\star}\hat{p}_x(x\Psi)\mathrm{d}x = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{\star}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}\mathrm{d}x = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\{\frac{\partial}{\partial x}(\Psi^{\star}x\Psi) - \frac{\partial\Psi^{\star}}{\partial x}x\Psi\}\mathrm{d}x$$

$$= -i\hbar\Big[\Psi^{\star}x\Psi\Big|_{-\infty}^{\infty}\Big] + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^{\star}}{\partial x}x\Psi\mathrm{d}x = 0 + \int_{-\infty}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)^{\star}(x\Psi)\mathrm{d}x$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{p}_x\Psi)^{\star}(x\Psi)\mathrm{d}x$$

Ομοίως αποδεικνύεται το εξής:

$$\langle \hat{C}_2 \rangle = \frac{1}{2i}(A - A^{\star}) \;\in\; \mathbb{R}.$$

Τελικά:

$$|\langle \hat{C} \rangle|^2 = \langle \hat{C}_1 \rangle^2 + \langle \hat{C}_2 \rangle^2 \;\geq\; \langle \hat{C}_2 \rangle^2$$

Ισχύει:

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\,\Psi = -i\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x} = i\hbar\Psi$$

Άρα:

$$\langle \hat{C}_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^{\star}\hat{C}_2\Psi\mathrm{d}x = \frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^{\star}\,(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\,\Psi\mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^{\star}\Psi\mathrm{d}x = \frac{\hbar}{2}$$

$$\Rightarrow\; (\Delta x)^2\cdot(\Delta p_x)^2 \;\geq\; |\langle \hat{C} \rangle|^2 \;\geq\; \langle \hat{C}_2 \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\Rightarrow\; \Delta x\cdot\Delta p_x \;\geq\; \frac{\hbar}{2}$$

1.5 Λύση της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης του Schrödinger

1.5.1 Χωρισμός μεταβλητών

Η χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{1.72}$$

όπου $\Psi = \Psi(x,t)$ η κυματοσυνάρτηση και $\hat{H}$ η Χαμιλτονιανή του κβαντικού συστήματος. Η χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger είναι μία διαφορική εξίσωση πρώτου βαθμού ως προς τον χρόνο και για να λυθεί χρειαζόμαστε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,0) = \psi(x)$ του συστήματος κάποια αρχική χρονική στιγμή, έστω για $t = 0$.

Εάν η Χαμιλτονιανή δεν εξαρτάται από τον χρόνο, η εξίσωση του Schrödinger μπορεί να λυθεί με την μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Στην πραγματικότητα η μέθοδος του χωρισμού των μεταβλητών αποτελεί την μόνη μέθοδο ακριβούς επίλυσης της εξίσωσης του Schrödinger εκτός από ελάχιστες περιπτώσεις που η εξίσωση λύνεται κατευθείαν.

Στην μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών αναζητούμε λύσεις της μορφής:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\Phi(t) \tag{1.73}$$

και αντικαθιστούμε στην εξίσωση (1.72) του Schrödinger:

$$\Rightarrow \ \psi(x) i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = (\hat{H}\psi(x))\Phi(t), \text{ όπου } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Διαιρούμε με την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t) = \psi(x)\Phi(t)$ και παίρνουμε την σχέση:

$$\frac{i\hbar}{\Phi}\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\right). \tag{1.74}$$

Το αριστερό μέλος αυτής της εξίσωσης είναι συνάρτηση μόνο του t ενώ το δεξιό μέλος είναι συνάρτηση μόνο του x. Η ισότητα ισχύει για κάθε x, t ανεξάρτητα από τις τιμές που παίρνουν. Άρα οι δύο συναρτήσεις Φ και ψ που αναζητάμε ως λύσεις της (1.74) έχουν την ιδιότητα:

$$\frac{i\hbar}{\Phi}\frac{\partial \Phi}{\partial t} = W \quad \text{σταθερά με διαστάσεις ενέργειας} \tag{1.75}$$

και

$$\frac{1}{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\right) = W \tag{1.76}$$

Λύνουμε την πρώτη εξίσωση και παίρνουμε:

$$\Phi(t) = \mathrm{e}^{-iWt/\hbar} \tag{1.77}$$

Από την δεύτερη εξίσωση έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = W\psi \tag{1.78}$$

Η κυματοσυνάρτηση του κβαντικού συστήματος είναι:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-iWt/\hbar} \tag{1.79}$$

Ποιά είναι η φυσική σημασία της σταθεράς W;
Αντικαθιστώντας την $\Psi(x,t)$ στην εξίσωση του Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο όπου $V(x) = 0$ βρίσκουμε ότι η σταθερά W είναι η ενέργεια του συστήματος. Επομένως χρησιμοποιούμε το σύμβολο E στην θέση του W. Η Χαμιλτονιανή όπως έχουμε ήδη πει είναι ο τελεστής της ενέργειας και σύμφωνα με όσα αναφέρουμε στην παράγραφο **1.4.2** η εξίσωση (1.78) είναι μία εξίσωση ιδιοτιμών όπου οι ιδιοτιμές $W \equiv E$ είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας για αυτό το κβαντικό σύστημα και $\psi(x)$ είναι οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις.

Εάν από την λύση της εξίσωσης (1.78) πάρουμε ως μία δυνατή τιμή της σταθεράς W έναν μιγαδικό αριθμό, $W = E + i\Gamma$ έχουμε:

$$\Phi(t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\mathrm{e}^{\Gamma t/\hbar}$$

Βλέπουμε ότι $\Phi(t) \to \infty$ όταν $t \to \infty$ εάν $\Gamma > 0$ ενώ $\Phi(t) \to \infty$ όταν $t \to -\infty$ για $\Gamma < 0$. Άρα, εάν η χρονοανεξάρτητη εξίσωση (1.78) του Schrödinger έχει κάποια μιγαδική ιδιοτιμή W με ιδιοσυνάρτηση $\psi(x)$, τότε η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t) = \Phi(t)\psi(x)$ είναι μη αποδεκτή διότι θα αποκλίνει για μεγάλες τιμές του $|t| \to \infty$ και δεν θα είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

Δείξαμε, κάνοντας χρήση της μεθόδου χωρισμού των μεταβλητών, ότι το χωρικό μέρος της κυματοσυνάρτησης του κβαντικού συστήματος είναι λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.80}$$

και στη συνέχεια θα επικεντρωθούμε στη μελέτη των λύσεων αυτής της εξίσωσης. Η σταθερά E είναι η ιδιοτιμή της ενέργειας και $\psi(x)$ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση. Εάν είναι αναγκαίο να επισημάνουμε αυτή την αντιστοιχία συμβολίζουμε ως $\psi_E(x)$ την ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή E.

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi(x)$ ονομάζεται **στάσιμη** κυματοσυνάρτηση διότι η πυκνότητα πιθανότητας $P(x,t)$ και οι μέσες τιμές θέσης, ορμής και ενέργειας δεν έχουν χρονική εξάρτηση:

$$P(x,t) = \Psi^\star(x,t)\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{iEt/\hbar}\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi^\star(x)\psi(x) = \psi^\star(x)\psi(x)$$

$$\langle x\rangle = \int x\Psi^\star(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \int x\mathrm{e}^{iEt/\hbar}\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x = \int x\psi^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x$$

$$\langle p_x\rangle = -i\hbar\int \Psi^\star(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x = -i\hbar\int \mathrm{e}^{iEt/\hbar}\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi^\star(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\mathrm{d}x = -i\hbar\int \psi^\star(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\mathrm{d}x$$

$$\langle\hat{H}\rangle = \int \Psi^\star(x,t)\left(\hat{H}\Psi(x,t)\right)\mathrm{d}x = \int \mathrm{e}^{iEt/\hbar}\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi^\star(x)\left(\hat{H}\psi(x)\right)\mathrm{d}x = \int \psi^\star(x)E\psi(x)\mathrm{d}x = E$$

Άρα

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle p_x\rangle = 0$$

Η μέση τιμή της ορμής σε μία στάσιμη κατάσταση είναι μηδέν.

Οριακές συνθήκες και συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης.

Κατά την λύση της διαφορικής εξίσωσης (1.80) προσδιορίζουμε την ιδιοτιμή E της ενέργειας και την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ ταυτόχρονα. Οι φυσικά αποδεκτές λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης (1.80) του Schrödinger είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Οι συναρτήσεις αυτές είναι πεπερασμένες συναρτήσεις του x δηλαδή δεν απειρίζονται για καμμία τιμή της μεταβλητής x στο πεδίο ορισμού του κβαντικού συστήματος και τείνουν στο μηδέν για $x \to \pm\infty$.

Εάν η συνάρτηση $V(x)$ της δυναμικής ενέργειας είναι πεπερασμένη συνάρτηση του x τότε αναγκαστικά και η δεύτερη παράγωγος $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ της λύσης $\psi(x)$ θα είναι πεπερασμένη παντού διότι το άθροισμα των δύο όρων στο αριστερό μέλος της εξίσωσης (1.80) ισούται με μία πεπερασμένη ποσότητα, την $E\psi(x)$. Άρα η πρώτη παράγωγος $\dfrac{\partial\psi}{\partial x}$ της $\psi(x)$ είναι συνεχής συνάρτηση του x και ως εκ τούτου και η $\psi(x)$ είναι συνεχής συνάρτηση στο πεδίο ορισμού του κβαντικού συστήματος.

Το σύνολο των ιδιοτιμών E του τελεστή $\hat{H}$ της Χαμιλτονιανής ονομάζεται **φάσμα του τελεστή** $\hat{H}$. Για το φάσμα των ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής ισχύει η εξής πρόταση:

> Οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες λύσεις της εξίσωσης $\hat{H}\psi = E\psi$ του Schrödinger έχουν **διακριτό φάσμα** και το οποίο μπορούμε να αριθμήσουμε E_1, E_2, $E_3, \dots$.

Σε κάθε ιδιοτιμή αντιστοιχεί ¨γενικά¨ μία ιδιοσυνάρτηση:

$$E_1 \to \psi_1,\ E_2 \to \psi_2,\ E_3 \to \psi_3, ...$$

Εάν για κάποια ιδιοτιμή E_k της ενέργειας λύνοντας την εξίσωση (1.80) του Schrödinger βρούμε περισσότερες από μία γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις τότε λέμε ότι έχουμε **εκφυλισμό** και η ιδιοτιμή E_k ονομάζεται **εκφυλισμένη**. Στην γενική περίπτωση μπορεί να έχουμε άπειρο πλήθος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων της Χαμιλτονιανής.

Πρόταση 4. Επειδή η Χαμιλτονιανή είναι ένας γραμμικός τελεστής ο γραμμικός συνδυασμός δύο λύσεων $\Psi_1(x,t)$, $\Psi_2(x,t)$ της χρονοεξηρτημένης εξίσωσης (1.72) του Schrödinger είναι επίσης λύση της εξίσωσης (1.72).

Απόδειξη. Έστω

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t) = c_1 \mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x) + c_2\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x),$$

όπου c_1, c_2 σταθεροί αριθμοί.

$$\Rightarrow\ i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\left(\frac{-iE_1}{\hbar}\right)c_1\Psi_1(x,t) + i\hbar\left(\frac{-iE_2}{\hbar}\right)c_2\Psi_2(x,t) = E_1c_1\Psi_1(x,t) + E_2c_2\Psi_2(x,t)$$

$$\text{και}\quad \hat{H}\Psi = c_1\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}\hat{H}\psi_1(x) + c_2\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\hat{H}\psi_2(x) = c_1\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}E_1\psi_1(x) + c_2\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}E_2\psi_2(x)$$

$$= E_1c_1\Psi_1(x,t) + E_2c_2\Psi_2(x,t)$$

$$\text{οπότε:}\quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

Η προηγούμενη απόδειξη γενικεύεται για οποιονδήποτε γραμμικό συνδυασμό των $\Psi_k(x,t)$. □

Γενική λύση της εξίσωσης (1.72) του Schrödinger:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\Psi_n(x,t) = \sum_n c_n\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) \tag{1.81}$$

Εάν γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t=0) = \psi(x)$ του κβαντικού συστήματος κάποια χρονική στιγμή, έστω για $t = 0$, από την προηγούμενη σχέση παίρνουμε:

$$\Psi(x,0) = \psi(x) = \sum_n c_n\psi_n(x) \tag{1.82}$$

Οι σταθεροί συντελεστές προσδιορίζονται από τα ολοκληρώματα:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x \tag{1.83}$$

Πρόταση 5. Οι ιδιοσυναρτήσεις του διακριτού φάσματος του τελεστή $\hat{H}$ της Χαμιλτονιανής που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι μεταξύ τους ορθογώνιες. Συγκεκριμένα εάν για δύο ιδιοτιμές E_n και E_k της Χαμιλτονιανής έχουμε $E_n \neq E_k$ τότε για τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις ψ_n και ψ_k ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = 0 \tag{1.84}$$

Απόδειξη. Οι δύο κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ και $\psi_k^\star(x)$ ικανοποιούν την εξίσωση (1.80) του Schrödinger με ιδιοτιμές E_n και E_k αντίστοιχα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_n}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi_n=E_n\psi_n$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_k^\star}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi_k^\star=E_k\psi_k^\star$$

Πολλαπλασιάζουμε την πρώτη εξίσωση με $\psi_k^\star(x)$ και την δεύτερη εξίσωση με $\psi_n(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_k^\star\frac{\mathrm{d}^2\psi_n}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi_k^\star\psi_n=E_n\psi_k^\star\psi_n$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n\frac{\mathrm{d}^2\psi_k^\star}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi_n\psi_k^\star=E_k\psi_n\psi_k^\star$$

Αφαιρούμε τις δύο εξισώσεις κατά μέλη και ολοκληρώνουμε στο πεδίο ορισμού των κυματοσυναρτήσεων:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi_k^\star\frac{\mathrm{d}^2\psi_n}{\mathrm{d}x^2}-\psi_n\frac{\mathrm{d}^2\psi_k^\star}{\mathrm{d}x^2}\right)\mathrm{d}x=(E_n-E_k)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star\psi_n\mathrm{d}x$$

Θα δείξουμε ότι το αριστερό μέλος της τελευταίας εξίσωσης είναι μηδέν.

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi_k^\star\frac{\mathrm{d}^2\psi_n}{\mathrm{d}x^2}-\psi_n\frac{\mathrm{d}^2\psi_k^\star}{\mathrm{d}x^2}\right)\mathrm{d}x\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_k^\star\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x})-\frac{\mathrm{d}\psi_k^\star}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_n\frac{\mathrm{d}\psi_k^\star}{\mathrm{d}x})+\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\psi_k^\star}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left((\psi_k^\star\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x})\Big|_{-\infty}^{\infty}-(\psi_n\frac{\mathrm{d}\psi_k^\star}{\mathrm{d}x})\Big|_{-\infty}^{\infty}\right)=0\end{aligned}$$

Άρα το αριστερό μέλος της εξίσωσης είναι μηδέν και επειδή έχουμε $E_n\neq E_k$ θα πρέπει να ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=0$$

□

Υπολογισμός των συντελεστών c_n στο ανάπτυγμα της $\Psi(x,t)$

Υπολογίζουμε τους σταθερούς συντελεστές c_n στο ανάπτυγμα της $\Psi(x,t)$ ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ της Χαμιλτονιανής (εξίσωση (1.81)). Υποθέτουμε ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ είναι κανονικοποιημένες και ότι δεν έχουμε εκφυλισμό. Πολλαπλασιάζουμε τα δύο μέλη της εξίσωσης (1.82) με $\psi_k^\star(x)$ και ολοκληρώνουμε ως προς x:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\sum_n c_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x$$

Από την προηγούμενη πρόταση (Πρόταση 5) βρήκαμε ότι ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & \text{όταν } k\neq n\\ 1, & \text{όταν } k=n\end{cases}$$

Άρα από το άθροισμα ως προς n στο δεξιό μέλος της ισότητας επιζεί μόνο ο όρος με $n = k$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x = c_k$$

Χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $(\Phi,\, \Psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^\star(x)\Psi(x)\mathrm{d}x$, για το ολοκλήρωμα των δύο συναρτήσεων $\Phi^\star(x)$ και $\Psi(x)$, οι συντελεστές c_k μπορούν να εκφραστούν ως εξής:

$$c_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x = (\psi_k,\, \psi) \tag{1.85}$$

Παράδειγμα

Εάν στην δυναμική ενέργεια $V(x)$ στην εξίσωση του Schrödinger προσθέσουμε μία σταθερά V_0 με διαστάσεις ενέργειας τότε η κυματοσυνάρτηση αλλάζει κατά μία φάση της μορφής: $exp[-iV_0t/\hbar]$.

Λύση:

Παράδειγμα

Σωματίδιο μάζας m κινείται κατά τον άξονα των x εντός ενός πεδίου δυνάμεων που δίνεται από την δυναμική ενέργεια $U(x)$. Εάν η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι:

$$\psi(x) = N\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$$

και είναι λύση της μονοδιάστατης χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger με μηδενική ενέργεια να βρείτε την συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας $U(x)$.

Λύση:

Πρόβλημα

(α) Δείξτε ότι οι διακριτές ιδιοτιμές της ενέργειας σε ένα μονοδιάστατο πρόβλημα δεν είναι εκφυλισμένες.
(β) Με βάση το προηγούμενο ερώτημα δείξτε ότι μπορούμε να διαλέξουμε τις αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις να είναι πραγματικές.

Λύση:

(α) Έστω ότι έχουμε δύο γραμμικά ανεξάρτητες τετραγωνικά ολοκληρώσιμες λύσεις ψ_1 και ψ_2 με την ίδια ενέργεια E:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi_1 = E\psi_1 \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi_2 = E\psi_2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} = \dfrac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\psi_1 \\ \dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2} = \dfrac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\psi_2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{\psi_1}\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} = \frac{1}{\psi_2}\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}\psi_2 - \frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1 = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\psi_2 - \frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\psi_1\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\psi_2 - \frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\psi_1 = c \text{ σταθερό}$$

Αλλά ισχύει $\psi_1(x=\pm\infty)=0$ και $\psi_2(x=\pm\infty)=0$ διότι οι ψ_1, ψ_2 είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Άρα η σταθερή τιμή c είναι μηδέν:

$$\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\psi_2-\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\psi_1=0 \quad\Rightarrow\quad \frac{1}{\psi_1}\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}=\frac{1}{\psi_2}\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}$$

$$\Rightarrow\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\ln\psi_1)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\ln\psi_2) \quad\Rightarrow\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\ln(\frac{\psi_1}{\psi_2})\right]=0$$

$$\Rightarrow\quad \ln\left(\frac{\psi_1}{\psi_2}\right)=a \text{ σταθερό} \quad\Rightarrow\quad \psi_1=\mathrm{e}^a\psi_2=b\psi_2$$

Άρα οι δύο κυματοσυναρτήσεις ψ_1, ψ_2 είναι γραμμικά εξαρτημένες, $\psi_1=b\psi_2$.

(β) Έστω ότι η ψ είναι ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E. Η κυματοσυνάρτηση ψ και η μιγαδική συζυγής της $\psi^\star$ ικανοποιούν την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger με την ίδια ιδιοτιμή της ενέργειας E. Άρα έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi=E\psi$$

$$\text{και}\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi^\star}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi^\star=E\psi^\star$$

Σύμφωνα με το ερώτημα (α) οι δύο συναρτήσεις ψ και $\psi^\star$ είναι γραμμικά εξαρτημένες

$$\psi^\star=b\psi$$

δηλαδή η $\psi^\star$ είναι ένα πολλαπλάσιο της ψ. Παίρνουμε το μιγαδικό συζυγές της προηγούμενης σχέσης και έχουμε:

$$\psi=b^\star\psi^\star=b^\star b\psi \quad\Rightarrow\quad b^\star b=1 \quad\Rightarrow\quad b=\mathrm{e}^{i\varphi}$$

Η κυματοσυνάρτηση ψ και η μιγαδική συζυγής της $\psi^\star$ διαφέρουν μόνο κατά μία σταθερή φάση φ ανεξάρτητη του x. Μπορούμε να πάρουμε την σταθερή αυτή φάση ίση με το μηδέν διότι δεν επηρεάζει καμία φυσική ποσότητα άρα μπορούμε να διαλέξουμε από την αρχή τις ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής να είναι πραγματικές συναρτήσεις.

Πρόβλημα

Σωματίδιο μάζας m κινείται σε μια διάσταση υπό την επίδραση του δυναμικού $U(x)=\frac{1}{2}kx^2$ και βρίσκεται στην θεμελιώδη κατάσταση.
Αν

$$\Psi(x,t)=N\mathrm{e}^{-bx^2}\,\mathrm{e}^{-iat}$$

είναι κανονικοποιημένη λύση της χρόνο-εξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger για την θεμελιώδη στάθμη να υπολογίσετε τις σταθερές b, a.

Λύση:

Πρόβλημα

Σωματίδιο μάζας m κινείται υπό την επίδραση της δύναμης $F=-kx$, $k>0$, και η κατάστασή του σε μια ορισμένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x)=Nx\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$$

(α) Έχει το σωματίδιο απόλυτα καθορισμένη ενέργεια; Υπάρχει κατάλληλη τιμή του λ για την οποία η απάντηση είναι καταφατική;

(β) Για οιοδήποτε λ υπολογίστε την μέση τιμή της ενέργειας του σωματιδίου και σχεδιάστε πρόχειρα την εξάρτησή της από το λ. Τι παρατηρείτε, ποία η σχέση με το ερώτημα (α);
Δίνεται το ολοκλήρωμα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}\mathrm{e}^{-bx^2}\mathrm{d}x = \frac{(2n)!}{n!(4b)^n}\sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

Λύση:

1.5.2 Φυσική ερμηνεία

Πρόταση 6. Οι λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger αντιπροσωπεύουν φυσικές καταστάσεις με απόλυτα καθορισμένη ενέργεια ίση με την αντίστοιχη ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής.

Απόδειξη. Έστω ότι η κυματοσυνάρτηση του κβαντικού συστήματος είναι η $\Psi_E(x,t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi_E(x)$ όπου:

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \qquad \text{και} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_E^\star(x)\psi_E(x)\mathrm{d}x = 1$$

Επειδή η ο τελεστής $\hat{H}$ της ενέργειας δεν εξαρτάται από τον χρόνο t ισχύει επίσης το εξής:

$$\hat{H}\Psi_E(x,t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\hat{H}\psi_E(x) = E\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\psi_E(x) = E\Psi_E(x,t)$$

Υπολογίζουμε την μέση τιμή $< E >$ της ενέργειας του κβαντικού συστήματος:

$$\langle E\rangle = \langle\hat{H}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_E^\star(x,t)\hat{H}\Psi_E(x,t)\mathrm{d}x = E\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_E^\star(x,t)\Psi_E(x,t)\mathrm{d}x = E$$

Υπολογίζουμε την διασπορά $(\Delta E)^2$ της ενέργειας:

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2$$

$$\langle\hat{H}^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_E^\star(x,t)\hat{H}^2\Psi_E(x,t)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_E^\star(x,t)\hat{H}(\hat{H}\Psi_E(x,t))\mathrm{d}x$$

$$= E\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_E^\star(x,t)\hat{H}\Psi_E(x,t)\mathrm{d}x = E^2$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση που δίνει την διασπορά $(\Delta E)^2$ της ενέργειας βρίσκουμε:

$$(\Delta E)^2 = E^2 - E^2 = 0$$

Άρα όλες οι μετρήσεις της ενέργειας σε ένα σύστημα με κυματοσυνάρτηση την $\Psi_E(x,t)$ θα δώσουν μία μόνο τιμή της ενέργειας την E. □

Πρόταση 7. Για μία δεδομένη κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ η πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής E_n σε μία μέτρηση της ενέργειας ισούται με:

$$P_n = |c_n|^2 \tag{1.86}$$

όπου για την $\Psi(x,t)$ ισχύει:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x). \tag{1.87}$$

Θα δείξουμε τα εξής:

$$\text{(α)} \qquad \sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{1.88}$$

$$\text{(β)} \qquad \langle E\rangle = \sum_n E_n|c_n|^2 \tag{1.89}$$

$$\text{(γ)} \qquad (\varDelta E)^2 = \sum_n \left(E_n - \langle E\rangle\right)^2 |c_n|^2 \tag{1.90}$$

Απόδειξη. (α) Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ του συστήματος είναι κανονικοποιημένη. Άρα ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = 1$$

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ γράφεται ως εξής:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x)$$

όπου

$$c_n(t) = c_n\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}$$

Η μιγαδική συζυγής $\Psi^\star(x,t)$ είναι:

$$\Psi^\star(x,t) = \sum_k c_k^\star(t)\psi_k^\star(x)$$

Ο δείκτης k στην άθροιση παίρνει τις ίδιες τιμές με τον δείκτη n. Αντικαθιστούμε τις δύο προηγούμενες εκφράσεις στην σχέση κανονικοποίησης και παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_k c_k^\star(t)\psi_k^\star(x)\right)\left(\sum_n c_n(t)\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,n} c_k^\star(t)c_n(t)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{k,n} c_k^\star(t)c_n(t)\delta_{kn} \\
&= \sum_n c_n^\star(t)c_n(t) = \sum_n c_n^\star c_n \mathrm{e}^{iE_nt/\hbar}\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar} = \sum_n c_n^\star c_n \\
&\Rightarrow \qquad \sum_n c_n^\star c_n = \sum_n |c_n|^2 = 1
\end{aligned}$$

Στην απόδειξη χρησιμοποιήσαμε το συμμετρικό δ_{kn} σύμβολο του Kronecker. Το δ_{kn} είναι μονάδα όταν $k=n$, διαφορετικά είναι ίσο με το μηδέν. Ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{kn} = \begin{cases} 0, & k\neq n \\ 1, & k=n\end{cases}$$

(β)

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^\star(x,t)\hat{H}\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\sum_k c_k^\star(t)\psi_k^\star(x)\right)\hat{H}\left(\sum_n c_n(t)\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,n} c_k^\star(t)c_n(t)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\hat{H}\psi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{k,n} c_k^\star(t)c_n(t)E_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,n} c_k^\star(t)c_n(t)E_n\delta_{kn} = \sum_n E_n c_n^\star c_n = \sum_n E_n|c_n|^2
\end{aligned}$$

(γ) Η διασπορά $(\Delta E)^2$ της ενέργειας δίνεται από την σχέση

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

όπου

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

Θα υπολογίσουμε την μέση τιμή $\langle E^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle E^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t) \hat{H}^2 \Psi(x,t) \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t) \hat{H} \left(\hat{H} \Psi(x,t) \right) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t) \hat{H} \left(\sum_n c_n(t) E_n \psi_n(x) \right) \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t) \left(\sum_n c_n(t) E_n^2 \psi_n(x) \right) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_k c_k^\star(t) \psi_k^\star(x) \right) \left(\sum_n c_n(t) E_n^2 \psi_n(x) \right) \mathrm{d}x = \sum_{k,n} c_k^\star(t) c_n(t) E_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^\star(x) \psi_n(x) \mathrm{d}x \\
&= \sum_n E_n^2 c_n^\star(t) c_n(t) = \sum_n E_n^2 |c_n|^2
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta E)^2 = \sum_n E_n^2 |c_n|^2 - \langle E \rangle \sum_n E_n |c_n|^2$$

Γράφουμε την ποσότητα $\langle E \rangle^2$ ως εξής:

$$\langle E \rangle^2 = \langle E \rangle \sum_n E_n |c_n|^2 = \langle E \rangle^2 \sum_n |c_n|^2$$

Στην τελευταία σχέση που δίνει την διασπορά της ενέργειας προσθέτουμε και αφαιρούμε την $< E >^2$:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad (\Delta E)^2 &= \sum_n E_n^2 |c_n|^2 - \langle E \rangle \sum_n E_n |c_n|^2 - \langle E \rangle^2 + \langle E \rangle^2 \\
&= \sum_n E_n^2 |c_n|^2 - 2\langle E \rangle \sum_n E_n |c_n|^2 + \langle E \rangle^2 \sum_n |c_n|^2 \\
&= \sum_n \left(E_n^2 - 2E_n \langle E \rangle + \langle E \rangle^2 \right) |c_n|^2 = \sum_n \left(E_n - \langle E \rangle \right)^2 |c_n|^2
\end{aligned}$$

□

Πρόβλημα

Η κατάσταση ενός σωματιδίου την χρονική στιγμή $t = 0$ περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x) = N \left(\psi_1(x) + 2\psi_2(x) \right)$$

όπου ψ_1, ψ_2 κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας στο διάστημα $(-\infty, \infty)$ με ιδιοτιμές $E_1 = 2\,\mathrm{eV}$ και $E_2 = 4\,\mathrm{eV}$ αντίστοιχα.
(α) Να βρείτε τα πιθανά αποτελέσματα μέτρησης της ενέργειας και την πιθανότητα να εμφανιστεί κάθε μία από τις πιθανές τιμές τις ενέργειας.
(β) Να υπολογίσετε την μέση τιμή $\langle E \rangle$ της ενέργειας και την αβεβαιότητα ΔE της ενέργειας.
(γ) Πως επηρεάζονται τα αποτελέσματα εάν η κυματοσυνάρτηση είναι:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}} \psi_1(x) + \frac{2\mathrm{e}^{i\varphi}}{\sqrt{5}} \psi_2(x)$$

(δ) Να επαναλάβετε τα ερωτήματα (α) και (β) για την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x) = N' \left(\psi_1(x) + \psi_2(x) \right)$$

Λύση:

(α) Υπολογίζουμε την σταθερά N ώστε η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ να είναι κανονικοποιημένη:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x &= N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\psi_1^\star(x) + 2\psi_2^\star(x)\right)\left(\psi_1(x) + 2\psi_2(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x + 4N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^\star(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x \\
&+ 2N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^\star(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x + 2N^\star N \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^\star(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x \\
&= N^\star N + 4N^\star N + 0 + 0 = 5N^\star N
\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 1 \ \Rightarrow\ 5N^\star N = 1 \ \Rightarrow\ N^\star N = \frac{1}{5} \ \Rightarrow\ N = \frac{1}{\sqrt{5}}$$

Πήραμε την σταθερά κανονικοποίησης N πραγματική και θετική, $N = 1/\sqrt{5}$. Εάν ορίζαμε την σταθερά κανονικοποίησης ως έναν μιγαδικό αριθμό $N = \dfrac{\mathrm{e}^{i\varphi}}{\sqrt{5}}$, η σταθερή φάση φ δεν έχει καμία επίδραση στις μετρήσιμες φυσικές ποσότητες. Οι κυματοσυναρτήσεις ψ_1 και ψ_2 είναι ορθογώνιες μεταξύ τους:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^\star(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x = 0$$

διότι αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές της ενέργειας.

Μετά την κανονικοποίηση η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{5}}\psi_2(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

όπου $c_1 = \dfrac{1}{\sqrt{5}}$ και $c_2 = \dfrac{2}{\sqrt{5}}$. Η μέτρηση της ενέργειας θα δώσει τις τιμές $E_1 = 2\,\mathrm{eV}$ και $E_2 = 4\,\mathrm{eV}$ με πιθανότητες αντίστοιχα $P_1 = |c_1|^2 = \dfrac{1}{5}$ και $P_2 = |c_2|^2 = \dfrac{4}{5}$.

(β) Η μέση τιμή $\langle E\rangle$ της ενέργειας είναι:

$$\langle E\rangle = P_1E_1 + P_2E_2 = |c_1|^2E_1 + |c_2|^2E_2 = \frac{1}{5}E_1 + \frac{4}{5}E_2 \quad\Rightarrow\quad \langle E\rangle = \frac{18}{5}\ \mathrm{eV}$$

Υπολογίζουμε την ποσότητα:

$$\langle E^2\rangle = P_1E_1^2 + P_2E_2^2 = |c_1|^2E_1^2 + |c_2|^2E_2^2 = \frac{1}{5}E_1^2 + \frac{4}{5}E_2^2 \quad\Rightarrow\quad \langle E^2\rangle = \frac{68}{5}\ (\mathrm{eV})^2$$

Η διασπορά $(\Delta E)^2$ της ενέργειας για την ψ είναι:

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \frac{16}{25}\ (\mathrm{eV})^2$$

Η αβεβαιότητα ΔE στην ενέργεια ισούται με:

$$\Delta E = \sqrt{(\Delta E)^2} = \frac{4}{5}\ \mathrm{eV}$$

(γ) Εάν η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου έχει την μορφή:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_1(x) + \frac{2e^{i\varphi}}{\sqrt{5}}\psi_2(x) = c_1\psi_1(x) + c_2'\psi_2(x)$$

όπου $c_1 = \dfrac{1}{\sqrt{5}}$ και $c_2' = \dfrac{2e^{i\varphi}}{\sqrt{5}}$ παίρνουμε:

$$|c_1|^2 = \frac{1}{5} \quad \text{και} \quad |c_2'|^{=}|c_2|^2 = \frac{4}{5}$$

άρα η μέση τιμή της ενέργειας και η αβεβαιότητα έχουν την ίδια έκφραση όπως στο (β) ερώτημα.

(δ) Από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης όπως στο (α) ερώτημα βρίσκουμε $N' = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$. Μετά την κανονικοποίηση η κυματοσυνάρτηση ψ έχει την μορφή:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

όπου $c_1 = c_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$. Η μέτρηση της ενέργειας θα δώσει τις τιμές $E_1 = 2\,\mathrm{eV}$ και $E_2 = 4\,\mathrm{eV}$ με πιθανότητες αντίστοιχα $P_1 = |c_1|^2 = \dfrac{1}{2}$ και $P_2 = |c_2|^2 = \dfrac{1}{2}$.

Η μέση τιμή της ενέργειας είναι:

$$\langle E\rangle = P_1E_1 + P_2E_2 = |c_1|^2E_1 + |c_2|^2E_2 = \frac{1}{2}(E_1+E_2) \quad \Rightarrow \quad \langle E\rangle = 3\,\mathrm{eV}$$

και

$$\langle E^2\rangle = P_1E_1^2 + P_2E_2^2 = |c_1|^2E_1^2 + |c_2|^2E_2^2 = \frac{1}{2}E_1^2 + \frac{1}{2}E_2^2$$

Υπολογίζουμε την διασπορά $(\varDelta E)^2$ στην ενέργεια:

$$(\varDelta E)^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \frac{E_1^2}{2} + \frac{E_2^2}{2} - \frac{1}{4}(E_1+E_2)^2 = \frac{1}{4}(E_1-E_2)^2$$

$$\Rightarrow \quad \varDelta E = \sqrt{(\varDelta E)^2} = \frac{1}{2}|E_1 - E_2| \quad \Rightarrow \quad \varDelta E = 1\,\mathrm{eV}$$

1.5.3 Χρονική εξέλιξη της μέσης τιμής των φυσικών μεγεθών, αναπαράσταση των τελεστών με πίνακες

Έστω ότι το κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\varPsi(x,t)$ όπου:

$$\varPsi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x)$$

και $\psi_n(x)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{H}$ της ενέργειας με ιδιοτιμή αντίστοιχα E_n.

Όπως δείξαμε στην προηγούμενη παράγραφο, η μέση τιμή $\langle E\rangle$ της ενέργειας ισούται με:

$$\langle E\rangle = \sum_n E_n|c_n|^2$$

και είναι ανεξάρτητη του χρόνου t. Ομοίως δείξαμε ότι και η αβεβαιότητα $\varDelta E$ της ενέργειας δεν εξαρτάται από τον χρόνο. Αντίθετα, οι μέσες τιμές των υπολοίπων φυσικών μεγεθών έχουν γενικά εξάρτηση από τον χρόνο όπως θα δείξουμε σε αυτή την παράγραφο.

Υπολογίζουμε την μέση τιμή $\langle x \rangle$ της θέσης του κβαντικού συστήματος με κυματοσυνάρτηση την $\Psi(x,t)$:

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int x\Psi^\star(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x\left(\sum_k c_k^\star(t)\psi_k^\star(x)\right)\left(\sum_n c_n(t)\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,\,n} c_k^\star(t)c_n(t)\int_{-\infty}^{+\infty} x\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{k,\,n} c_k^\star c_n \mathrm{e}^{iE_k t/\hbar}\mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} x\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,\,n} c_k^\star c_n \mathrm{e}^{i(E_k-E_n)t/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} x\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Ορίζουμε:

$$x_{kn} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x \tag{1.91}$$

Η μέση τιμή της θέσης γράφεται τώρα ώς εξής:

$$\langle x \rangle = \sum_{k,\,n} c_k^\star c_n \mathrm{e}^{i(E_k-E_n)t/\hbar} x_{kn} \tag{1.92}$$

Παρατηρούμε ότι η μέση τιμή της θέσης του κβαντικού συστήματος δεν είναι σταθερή αλλά εξαρτάται από τον χρόνο t. Η κίνηση αυτή είναι σύνθεση ταλαντώσεων με περίοδο που καθορίζεται από την κυκλική συχνότητα $\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$. Το πλάτος της ταλάντωσης εξαρτάται από του συντελεστές c_k, c_n και το ολοκλήρωμα x_{kn}.

Εάν έχουμε ένα άλλο φυσικό μέγεθος A που αντιπροσωπεύεται κβαντικά από τον τελεστή $\hat{A}$ και θέλουμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή του $< A >$ παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t)\hat{A}\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\sum_k c_k^\star(t)\psi_k^\star(x)\right)\hat{A}\left(\sum_n c_n(t)\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,\,n} c_k^\star(t)c_n(t)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\hat{A}\psi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{k,\,n} c_k^\star c_n \mathrm{e}^{i(E_k-E_n)t/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\hat{A}\psi_n(x)\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k,\,n} c_k^\star c_n \mathrm{e}^{i(E_k-E_n)t/\hbar} A_{kn}
\end{aligned}$$

Έχουμε ορίσει την ποσότητα A_{kn}:

$$A_{kn} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\hat{A}\psi_n(x)\mathrm{d}x \equiv (\psi_k,\, \hat{A}\psi_n) = \text{ στοιχείο } (k,\, n) \text{ του πίνακα } A. \tag{1.93}$$

Η μεταβολή ή μη της μέσης τιμής $\langle A \rangle$ του φυσικού μεγέθους A με τον χρόνο εξαρτάται από τα μη μηδενικά στοιχεία A_{kn} του πίνακα A και την αντίστοιχη κυκλική συχνότητα $\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$.

Ο αντίστοιχος πίνακας H_{kn} της Χαμιλτονιανής $\hat{H}$ είναι διαγώνιος:

$$H_{kn} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\hat{H}\psi_n(x)\mathrm{d}x = E_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = E_n\delta_{kn} \tag{1.94}$$

Πρόβλημα

Η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος δίνεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\Psi = N\Big(\psi_1 + (1-i)\psi_2 + 2\psi_3\Big)$$

όπου ψ_1, ψ_2, ψ_3 κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του φυσικού μεγέθους A με ιδιοτιμές $a_1 = -4$, $a_1 = -1$, $a_1 = 2$ αντίστοιχα. Οι συναρτήσεις ψ_1, ψ_2 και ψ_3 είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.
(α) Να βρείτε τον συντελεστή κανονικοποίησης N.
(β) Να υπολογίσετε την μέση τιμή $\langle A\rangle$ και την αβεβαιότητα ΔA του φυσικού μεγέθους A.

Λύση:

Πρόβλημα

(α) Εάν η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου είναι:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x),$$

να υπολογίσετε την μέση τιμής $\langle x\rangle_t$ της θέσης του σωματιδίου την χρονική στιγμή t.
(β) Ομοίως εάν έχουμε:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x) + \frac{2i}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x)$$

Λύση:

(α) Η μέση τιμή της θέσης $\langle x\rangle_t$ του σωματιδίου δίνεται από την σχέση:

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t)x\Psi(x,t)\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{iE_1t/\hbar}\psi_1^\star(x) + \frac{2}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{iE_2t/\hbar}\psi_2^\star(x)\right) x \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{5}(\psi_1,\, x\psi_1) + \frac{4}{5}(\psi_2,\, x\psi_2) + \frac{2}{5}\mathrm{e}^{i(E_1-E_2)t/\hbar}(\psi_1,\, x\psi_2) + \frac{2}{5}\mathrm{e}^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}(\psi_2,\, x\psi_1) \\
&= \frac{1}{5}x_{11} + \frac{4}{5}x_{22} + \frac{2}{5}\mathrm{e}^{i\omega_{12}t}x_{12} + \frac{2}{5}\mathrm{e}^{-i\omega_{12}t}x_{21}
\end{aligned}$$

Έχουμε ορίσει:

$$\begin{aligned}
\omega_{12} &= \frac{E_1 - E_2}{\hbar} \\
x_{11} &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^\star(x)x\psi_1(x)\mathrm{d}x, \quad x_{22} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^\star(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x \\
x_{21} &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^\star(x)x\psi_1(x)\mathrm{d}x = \left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^\star(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x\right)^\star = x_{12}^\star
\end{aligned}$$

Τα στοιχεία x_{11} και x_{22} του πίνακα είναι πραγματικοί αριθμοί και θέτουμε $a = \frac{1}{5}x_{11} + \frac{4}{5}x_{22}$. Το x_{12} είναι γενικά μιγαδικός αριθμός και τον γράφουμε ως εξής $x_{12} = \rho\mathrm{e}^{i\varphi}$ άρα $x_{21} = \rho\mathrm{e}^{-i\varphi}$. Αντικαθιστούμε στην τελευταία έκφραση για την μέση τιμή $\langle x\rangle_t$ της θέσης του σωματιδίου και παίρνουμε:

$$\langle x\rangle_t = a + \frac{2}{5}\rho\left(\mathrm{e}^{i\omega_{12}t+i\varphi} + \mathrm{e}^{-i\omega_{12}t-i\varphi}\right) = a + \frac{4}{5}\rho\cos(\omega_{12}t+\varphi)$$

Εάν οι κυματοσυναρτήσεις ψ_1, ψ_2 είναι πραγματικές συναρτήσεις του x τότε $\varphi = 0$.

(β) Η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1(x) + \frac{2i}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_2 t/\hbar}\psi_2(x)$$

Υπολογίζουμε την μέση τιμή $\langle x\rangle_t$ της θέσης του σωματιδίου. Κατά τον υπολογισμό θα παραλείψουμε εκείνα τα σημεία που είναι ίδια με τα αντίστοιχα στο ερώτημα (α).

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{iE_1 t/\hbar}\psi_1^\star(x) - \frac{2i}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{iE_2 t/\hbar}\psi_2^\star(x)\right) x \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1(x) + \frac{2i}{\sqrt{5}}\mathrm{e}^{-iE_2 t/\hbar}\psi_2(x)\right)\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{5}x_{11} + \frac{4}{5}x_{22} + i\frac{2}{5}\mathrm{e}^{i\omega_{12}t}x_{12} - i\frac{2}{5}\mathrm{e}^{-i\omega_{12}t}x_{21} \\ &= a + i\frac{2}{5}\rho\left(\mathrm{e}^{i\omega_{12}t+i\varphi} - \mathrm{e}^{-i\omega_{12}t-i\varphi}\right) = a - \frac{4}{5}\rho\sin(\omega_{12}t+\varphi) = a + \frac{4}{5}\rho\cos(\omega_{12}t+\varphi+\pi/2)\end{aligned}$$

1.5.4 Μέτρηση στην κβαντομηχανική

Όταν η κυματοσυνάρτηση ενός κβαντικού συστήματος έχει την μορφή:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x)$$

λέμε ότι το σύστημα αυτό είναι σε μία **επαλληλία** ή **υπέρθεση κβαντικών καταστάσεων** $\psi_n(x)$ του τελεστή $\hat{H}$ της ενέργειας.

Εάν μετρήσουμε την ενέργεια του κβαντικού συστήματος και η μέτρηση μας δώσει την τιμή E_k ποιά θα είναι η κατάσταση του κβαντικού συστήματος μετά την μέτρηση;
Απάντηση:
Η κατάσταση του κβαντικού συστήματος μετά την μέτρηση είναι η ιδιοσυνάρτηση $\psi_k(x)$ του τελεστή $\hat{H}$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή E_k της ενέργειας, όπου k είναι μία από τις τιμές της μεταβλητής n στον ορισμό της κυματοσυνάρτησης πριν την μέτρηση. Όπως έχουμε πει στην παράγραφο **4.2**, οι δυνατές τιμές που μπορεί να πάρει κατά την μέτρηση η ενέργεια του κβαντικού συστήματος είναι μία από τις ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{H}$ της ενέργειας. Εάν μετρήσουμε αμέσως μετά για δεύτερη φορά την ενέργεια του κβαντικού συστήματος θα βρούμε την ίδια τιμή E_k με πιθανότητα ένα.

Η κβαντική μέτρηση δηλαδή καθορίζει την κατάσταση του κβαντικού συστήματος αμέσως μετά την μέτρηση. Το φαινόμενο αυτό όπου το κβαντικό σύστημα πριν την μέτρηση ήταν σε μία επαλληλία καταστάσεων ενώ μετά την μέτρηση η κατάστασή του περιγράφεται από μία μόνο κατάσταση–ιδιοσυνάρτηση του τελεστή που αντιπροσωπεύει το φυσικό μέγεθος που μετρήσαμε ονομάζεται στην βιβλιογραφία **αναγωγή** ή **κατάρρευση (collapse) της κυματοσυνάρτησης**. Εάν επαναλάβουμε πολλές φορές την μέτρηση της ενέργειας σε ένα μεγάλο πλήθος ανεξάρτητων πανομοιότυπων κβαντικών συστημάτων θα πάρουμε μία κατανομή των δυνατών τιμών της ενέργειας E_n. Ο αριθμός εμφανίσεων της τιμής E_n σε αυτή την κατανομή θα είναι ανάλογος του τετραγώνου του μέτρου του συντελεστή c_n στην ανάπτυξη της κυματοσυνάρτησης $\Psi(x,t)$ σε ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ενέργειας.

Τι θα συμβεί εάν την χρονική στιγμή $t = t_0$ μετρήσουμε μια άλλη φυσική ποσότητα A;
Η μέτρηση θα μας δώσει μία από τις ιδιοτιμές a_k του τελεστή $\hat{A}$ που αντιπροσωπεύει το φυσικό

μέγεθος A και το σύστημα θα βρίσκεται αμέσως μετά την μέτρηση στην αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση του ϕ_k:

$$\hat{A}\phi_k = a_k \phi_k$$

Ποιές είναι οι δυνατές τιμές της μέτρησης του A; Ποιά είναι η πιθανότητα εμφάνισης αυτών των τιμών;
Απάντηση:
Αναπτύσουμε την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t_0)$ του κβαντικού συστήματος πριν την μέτρηση σε μία σειρά ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις ϕ_n του τελεστή $\hat{A}$:

$$\Psi(x, t_0) = \sum_n d_n \phi_n(x)$$

Οι δυνατές τιμές της μέτρησης είναι μία από τις ιδιοτιμές a_n του $\hat{A}$ με πιθανότητα $|d_n|^2$. Οι συντελεστές d_n στην προηγούμενη εξίσωση δίνονται από την σχέση:

$$d_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^\star(x)\Psi(x, t_0)\mathrm{d}x$$

Άρα εμφανίζονται μόνο εκείνες οι ιδιοτιμές a_k του τελεστή $\hat{A}$, για τις οποίες ο αντίστοιχος συντελεστής d_k είναι μη μηδενικός.

Πρόβλημα

Ένας τελεστής $\hat{A}$ έχει δύο κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις ψ_1 και ψ_2, με ιδιοτιμές a_1 και a_2 αντίστοιχα. Ο τελεστής $\hat{B}$ έχει επίσης δύο κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις ϕ_1 και ϕ_2, με ιδιοτιμές b_1 και b_2. Οι ιδιοκαταστάσεις των δύο τελεστών υπακούουν στις σχέσεις:

$$\psi_1 = \Big(\phi_1 + 2\phi_2\Big)/\sqrt{5}, \quad \psi_2 = \Big(2\phi_1 - \phi_2\Big)/\sqrt{5}$$

Οι καταστάσεις ψ_1, ψ_2 είναι ορθογώνιες μεταξύ τους και οι ϕ_1, ϕ_2 είναι αντίστοιχα ορθογώνιες μεταξύ τους.
(α) Μετράμε την ποσότητα A και βρίσκουμε την τιμή a_1. Ποια είναι η κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά την μέτρηση;
(β) Εάν μετρηθεί η ποσότητα B ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα, ποια είναι η πιθανότητα για κάθε αποτέλεσμα;
(γ) Αμέσως μετά την μέτρηση του B μετράμε ξανά την ποσότητα A. Ποια είναι η πιθανότητα να πάρουμε την τιμή a_1;

Λύση:

1.6 Προβλήματα προς λύση

Πρόβλημα 1

Θεωρήστε δύο ορθοκανονικά διανύσματα ψ_1, ψ_2 και υποθέστε ότι αποτελούν βάση σε ένα χώρο δύο διαστάσεων. Θεωρήστε επίσης ένα τελεστή $\hat{T}$ που ορίζεται στο χώρο αυτό και ικανοποιεί τις σχέσεις

$$\hat{T}\psi_1 = 3\psi_1 - \psi_2, \quad \hat{T}\psi_2 = \psi_1 + 3\psi_2$$

Να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές και τις κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{T}$.
Ορθοκανονικά ονομάζουμε δύο διανύσματα όταν είναι κανονικοποιημένα και ορθογώνια μεταξύ τους.

Πρόβλημα 2

Σωματίδιο μάζας m κινείται κατά τον άξονα x με ιδιοσυνάρτηση βασικής κατάστασης

$$\psi(x) = \frac{N}{\cosh{(bx)}}$$

όπου N, b θετικές σταθερές.
Αν η συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας $V(x)$ μηδενίζεται για $x \to \pm\infty$:
(α) Βρείτε την τιμή της ενέργειας της βασικής στάθμης και
(β) βρείτε την μορφή της δυναμικής ενέργειας.
Δίνεται ότι:

$$\Big(\cosh{(bx)}\Big)' = b\sinh{(bx)}, \quad \Big(\sinh{(bx)}\Big)' = b\cosh{(bx)}, \quad \cosh^2{(bx)} + \sinh^2{(bx)} = 1$$

Πρόβλημα 3

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου σε μία ορισμένη χρονική στιγμή $t = 0$ είναι:

$$\Psi(x,\, t = 0) = N\Big(\psi_1(x) + 3i\psi_2(x)\Big)$$

Όπου $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας με ιδιοτιμές E_1 και E_2 αντίστοιχα, $E_2 = 3E_1 = 3\,\mathrm{eV}$.
(α) Να υπολογίσετε την μέση τιμή και την αβεβαιότητα της ενέργειας.
(β) Εάν υποθέσουμε ότι $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$) είναι αντίστοιχα άρτια και περιττή συνάρτηση, να υπολογίσετε τη μέση τιμή της θέσης του σωματιδίου σαν συνάρτηση του χρόνου.

Πρόβλημα 4

Δείξτε ότι οι συναρτήσεις:

$$\phi_1(x) = \mathrm{e}^{ikx} \quad \text{και} \quad \phi_2(x) = \mathrm{e}^{-ikx}$$

είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{D} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ και βρείτε σε ποια ιδιοτιμή αντιστοιχούν. Κατασκευάστε δύο νέες ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{D}$ (ως γραμμικούς συνδυασμούς των $\phi_1(x)$ και $\phi_2(x)$) οι οποίες να είναι κανονικοποιημένες στο διάστημα $(-\pi/2,\, \pi/2)$.

Πρόβλημα 5

Σωματίδιο μάζας m κινείται κατά τον άξονα των x εντός ενός πεδίου δυνάμεων που δίνεται από την δυναμική ενέργεια $U(x)$. Εάν η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι:

$$\psi(x) = Nx\mathrm{e}^{-bx^2}$$

και είναι λύση της μονοδιάστατης χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger με μηδενική ενέργεια να βρείτε την συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας $U(x)$. Να υπολογίσετε τις μέσες τιμές των x, x^2, p, p^2. Το γινόμενο της τυπικής απόκλισης της θέσης και της ορμής είναι συνεπές με την αρχή της αβεβαιότητας;

Πρόβλημα 6

Σωματίδιο μάζας m κινείται υπό την επίδραση της δύναμης $F = -kx$, $k > 0$, και η κατάστασή του σε μια ορισμένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x) = N\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$$

(α) Έχει το σωματίδιο απόλυτα καθορισμένη ενέργεια; Υπάρχει κατάλληλη τιμή του λ για την οποία η απάντηση είναι καταφατική;
(β) Για οιοδήποτε λ υπολογίστε την μέση τιμή της ενέργειας του σωματιδίου και σχεδιάστε πρόχειρα την εξάρτησή της από το λ. Τι παρατηρείτε, ποία η σχέση με το ερώτημα (α);

Πρόβλημα 7

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου μάζας m κάποια χρονική $t = 0$ είναι:

$$\Phi(x,\, 0) = \mathrm{e}^{(-ip_0 x/\hbar)}\mathrm{e}^{(-\lambda|x|)}$$

(α) Να κανονικοποιήσετε την $\Phi(x,\, 0)$ στο διάστημα $(-\infty,\, \infty)$.
(β) Να υπολογίσετε την μέση τιμή της ορμής του σωματιδίου.
(γ) Να υπολογίσετε το γινόμενο $(\Delta x) \cdot (\Delta p)$.