

## Μάθημα 14<sup>ο</sup>, 4 Νοεμβρίου 2008 (9:00-11:00).

### **ΕΥΡΕΣΗ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ, ΑΠΟ ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ**

Έστω ένα κβαντικό σύστημα το οποίο περιγράφεται από μια ενεργειακή κατάσταση (ιδιοτιμές ενέργειας του προβλήματος ιδιοτιμών  $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ ),  $E_1$ .

Να βρεθούν οι εκφράσεις για τη μέση τιμή της θέσης και της ορμής.

Η κυματοσυνάρτηση δίνεται προφανώς από την έκφραση

$$\psi(x, t) = c_1\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}$$

Για την εύρεση της μέσης τιμής της θέσης χρησιμοποιούμε την σχέση που βρήκαμε στο 12<sup>ο</sup> μάθημα

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}} A_{nm}, \text{ όπου } A_{nm} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) (\hat{A}\psi_m(x)) dx.$$

Εδώ ο τελεστής  $A$  είναι ο τελεστής της θέσης, ενώ στο διπλό άθροισμα οι δείκτες παίρνουν τιμές  $n=1$  και  $m=1$ .

Δηλαδή η μέση τιμή της θέσης δίνεται από την έκφραση

$$\langle x \rangle(t) = c_1 c_1^* e^{i\omega_1 t} x_{11} = |c_1|^2 x_{11} = x_{11} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* x \psi_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1|^2 x.$$

Η μέση ορμή εκτιμάται από την έκφραση

$$\begin{aligned} \langle p \rangle(t) &= \int (c_1 e^{i\omega_1 t} \psi_1)^* \hat{p} (c_1 e^{i\omega_1 t} \psi_1) dx = \\ &= \int (c_1^* e^{-i\omega_1 t} \psi_1^*) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) (c_1 e^{i\omega_1 t} \psi_1) dx = -i\hbar \int (c_1^* e^{-i\omega_1 t} \psi_1^*) \left( c_1 e^{i\omega_1 t} \frac{d\psi_1}{dx} \right) dx \\ &= -i\hbar c_1 c_1^* \int \psi_1^* \frac{d\psi_1}{dx} dx = -i\hbar |c_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* d\psi_1 \end{aligned}$$

Προφανώς η μέση ενέργεια είναι  $\langle E \rangle = |c_1|^2 E = E$ , καθώς  $P_1 = 1 = |c_1|^2$ .

ΕΧΟΥΜΕ **ΣΤΑΣΙΜΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ**, ΔΗΛΑΔΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ ΠΟΥ ΕΙΝΑΙ ΣΤΑΘΕΡΗ ΜΕ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ (ΧΡΟΝΟ-ΑΝΕΞΑΡΤΗΤΗ).

## Άσκηση 11

Έστω ένα κβαντικό σύστημα το οποίο περιγράφεται από δυο ενεργειακές καταστάσεις (ιδιοτιμές ενέργειας του προβλήματος ιδιοτιμών  $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ ),  $E_1$  και  $E_2$  (σύστημα δύο επιπέδων).

Να βρεθούν οι εκφράσεις για τη μέση τιμή της θέσης και της ορμής.

### Λύση

Η κυματοσυνάρτηση δίνεται προφανώς από την έκφραση

$$\psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + c_2\psi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

Για την εύρεση της μέσης τιμής της θέσης χρησιμοποιούμε την σχέση που βρήκαμε στο 12<sup>ο</sup> μάθημα

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}} A_{nm}, \text{ όπου } A_{nm} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) (\hat{A}\psi_m(x)) dx.$$

Εδώ ο τελεστής  $A$  είναι ο τελεστής της θέσης, ενώ στο διπλό άθροισμα οι δείκτες παίρνουν τιμές  $n=1,2$  και  $m=1,2$ .

Δηλαδή η μέση τιμή της θέσης δίνεται από την έκφραση

$$\langle x \rangle(t) = c_1^* c_1 e^{i\omega_{11}t} x_{11} + c_1^* c_2 e^{i\omega_{12}t} x_{12} + c_2^* c_1 e^{i\omega_{21}t} x_{21} + c_2^* c_2 e^{i\omega_{22}t} x_{22}, \text{ όπου } \omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar \text{ και } x_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* x \psi_j. \text{ Ένώ τα } c_1, c_2 \text{ είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί, δηλαδή } c_1 = |c_1| e^{i\varphi_1}, c_2 = |c_2| e^{i\varphi_2}.$$

Έτσι έχουμε τελικά, καθώς  $\omega_{11} = \omega_{22} = 0$  και

$$x_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* x \psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_1 x \psi_2^*)^* = \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^* x \psi_1 \right)^* = x_{21}^* \Rightarrow x_{12} = |x_{12}| e^{i\varphi}, x_{21} = |x_{12}| e^{-i\varphi},$$

ενώ  $x_{11} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* x \psi_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1|^2 x$ ,  $x_{22} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^* x \psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_2|^2 x$  (αμφότεροι πραγματικοί), ότι

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= |c_1| e^{-i\varphi_1} |c_1| e^{i\varphi_1} x_{11} + |c_1| e^{-i\varphi_1} |c_2| e^{i\varphi_2} e^{i\omega_{12}t} x_{12} + |c_2| e^{-i\varphi_2} |c_1| e^{i\varphi_1} e^{i\omega_{21}t} x_{21} + |c_2| e^{-i\varphi_2} |c_2| e^{i\varphi_2} x_{22} \\ &= |c_1|^2 x_{11} + |c_1| |c_2| e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} e^{i\omega_{12}t} x_{12} + |c_2| |c_1| e^{-i(\varphi_2 - \varphi_1)} e^{i\omega_{21}t} x_{12}^* + |c_2|^2 x_{22} \\ &= |c_1|^2 x_{11} + |c_1| |c_2| e^{i\varphi_2} e^{i\omega_{12}t} |x_{12}| e^{i\varphi} + |c_2| |c_1| e^{-i\varphi_2} e^{-i\omega_{12}t} |x_{12}| e^{-i\varphi} + |c_2|^2 x_{22} \\ &= |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + |c_1| |c_2| |x_{12}| (e^{i(\omega_{12}t + \varphi_2 + \varphi)} + e^{-i(\omega_{12}t + \varphi_2 + \varphi)}) \\ &= |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + 2|c_1| |c_2| |x_{12}| \cos(\omega_{12}t + \varphi_2 + \varphi). \end{aligned}$$

που είναι χρόνο-εξαρτώμενη πραγματική συνάρτηση.

Στην παραπάνω σχέση για την μέση θέση, παρατηρούμε ότι αν οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας είναι πραγματικές, όπως για παράδειγμα στο απειρόβαθο, στο πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού και στον αρμονικό ταλαντωτή, η φάση  $\varphi$  μηδενίζεται και προφανώς  $x_{12} = x_{21} = |x_{12}|$ .

Αυτό γιατί  $x_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* x \psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1 x \psi_2$ , που είναι πραγματικός αριθμός.

Δηλαδή η μέση τιμή της θέσης γίνεται

$$\langle x \rangle(t) = |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + 2|c_1||c_2| x_{12} \cos(\omega_{12}t + \varphi_{21}).$$

Συνεχίζουμε με την μέση τιμή της ορμής, η οποία εκτιμάται από ανάλογη έκφραση

$$\langle p \rangle(t) = c_1^* c_1 e^{i\omega_{11}t} p_{11} + c_1^* c_2 e^{i\omega_{12}t} p_{12} + c_2^* c_1 e^{i\omega_{21}t} p_{21} + c_2^* c_2 e^{i\omega_{22}t} p_{22},$$

όπου  $p_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* (\hat{p} \psi_j) dx$  και  $p_{12} = p_{21}^* \Rightarrow p_{12} = |p_{12}| e^{i\tilde{\varphi}}, p_{21} = |p_{12}| e^{-i\tilde{\varphi}}$ , δηλαδή

$$\begin{aligned} \langle p \rangle(t) &= |c_1| e^{-i\varphi_1} |c_1| e^{i\varphi_1} p_{11} + |c_1| e^{-i\varphi_1} |c_2| e^{i\varphi_2} e^{i\omega_{12}t} p_{12} + |c_2| e^{-i\varphi_2} |c_1| e^{i\varphi_1} e^{i\omega_{21}t} p_{21} + |c_2| e^{-i\varphi_2} |c_2| e^{i\varphi_2} p_{22} \\ &= |c_1|^2 p_{11} + |c_1||c_2| e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} e^{i\omega_{12}t} p_{12} + |c_2||c_1| e^{-i(\varphi_2 - \varphi_1)} e^{i\omega_{21}t} p_{12}^* + |c_2|^2 p_{22} \\ &= |c_1|^2 p_{11} + |c_1||c_2| e^{i\varphi_{12}} e^{i\omega_{12}t} |p_{12}| e^{i\tilde{\varphi}} + |c_2||c_1| e^{-i\varphi_{12}} e^{-i\omega_{12}t} |p_{12}| e^{-i\tilde{\varphi}} + |c_2|^2 p_{22} \\ &= |c_1|^2 p_{11} + |c_2|^2 p_{22} + |c_1||c_2||p_{12}| (e^{i(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi})} + e^{-i(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi})}) \\ &= |c_1|^2 p_{11} + |c_2|^2 p_{22} + 2|c_1||c_2||p_{12}| \cos(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi}). \end{aligned}$$

που είναι χρόνο-εξαρτώμενη πραγματική συνάρτηση.

Στην περίπτωση που οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές, έχουμε ότι

$$p_{11} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* d\psi_1 = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_1 = -0.5i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_1^2 = -0.5i\hbar \psi_1^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

$$p_{22} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* d\psi_2 = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 d\psi_2 = -0.5i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_2^2 = -0.5i\hbar \psi_2^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

και  $\tilde{\varphi} = \pm \pi/2$ , γιατί

$$p_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* (\hat{p} \psi_2) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \left( \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_2 = -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_2 e^{i\pi/2}.$$

Δηλαδή  $\langle p \rangle(t) = 2|c_1||c_2||p_{12}| \cos(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi})$ , που ισοδύναμα μπορεί να γραφεί

$$\langle p \rangle(t) = \pm 2|c_1||c_2||p_{12}| \sin(\omega_{12}t + \varphi_{21}),$$

μέσης ορμής, εξαρτάται από το πρόσημο του ολοκληρώματος  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_2$ .

Παρατηρούμε ότι η μέση τιμή της θέσης και της ορμής εξαρτώνται από τα μέτρα των συντελεστών  $c_1, c_2 (|c_1|, |c_2|)$  και από την διαφορά φάσης τους  $\varphi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2$ .

Προφανώς, μία ακόμα σχέση αποτελεί η συνθήκη κανονικοποίησης, δηλαδή

$$P_1 + P_2 = 1 \Rightarrow |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

Ακόμα μία σχέση θα μπορούσαμε να έχουμε από την μέση ενέργεια, δηλαδή έχουμε

$$\langle E \rangle = P_1 E_1 + P_2 E_2 = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2$$

Γενικά έχουμε τέσσερις αγνώστους  $|c_1|, |c_2|, \varphi_1, \varphi_2$ , άρα χρειαζόμαστε τέσσερις σχέσεις με αυτούς τους αγνώστους.

Είναι όμως έτσι τα πράγματα;

Αν η κυματοσυνάρτηση διαφέρει κατά μια φάση, είναι διαφορετική;

Έστω από την  $\psi(x)$  δημιουργώ την  $\tilde{\psi}(x) = e^{i\phi} \psi(x)$ , όπου  $\phi$  ένας αριθμός.

Παρατηρούμε ότι η πιθανότητα που είναι η ποσότητα με την φυσική σημασία δεν

αλλάζει, καθώς  $p(x) dx = \psi^*(x) \psi(x) dx$  και

$$\begin{aligned}\tilde{p}(x)dx &= \tilde{\psi}^*(x)\tilde{\psi}(x)dx = \left(e^{i\phi}\psi(x)\right)^* e^{i\phi}\psi(x)dx = \\ &= e^{-i\phi}\psi^*(x)e^{i\phi}\psi(x)dx = e^{-i\phi}e^{i\phi}\psi^*(x)\psi(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx = p(x)dx\end{aligned}$$

ΑΡΑ ΜΠΟΡΩ ΠΑΝΤΑ ΝΑ ΘΕΩΡΩ ΤΗΝ ΜΙΑ ΦΑΣΗ ΜΗΔΕΝ, ΔΗΛΑΔΗ  $\varphi_1 = 0$

ΚΑΙ ΟΥΣΙΑΣΤΙΚΑ  $\varphi_{21} = \varphi_2 - \varphi_1 = \varphi_2$ .

**ΔΗΛΑΔΗ Η ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΓΙΑ ΣΥΣΤΗΜΑ ΔΥΟ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ ΕΙΝΑΙ**

$$\psi(x, t) = |c_1| \psi_1(x) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + |c_2| e^{i\varphi_{21}} \psi_2(x) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}.$$

**ΓΙΑ ΝΑ ΒΡΩ ΤΟΥΣ ΤΡΕΙΣ ΑΥΤΟΥΣ ΑΓΝΩΣΤΟΥΣ ΧΡΕΙΑΖΟΜΑΙ, ΔΥΟ ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ (π.χ. θέση και ορμή, θέση και ενέργεια και ορμή και ενέργεια).**

### ΓΕΝΙΚΗ ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ

Για οποιοδήποτε τελεστή  $A$ , η μέση του τιμή θα δίνεται από την έκφραση

$$\langle A \rangle(t) = |c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + 2|c_1||c_2||A_{12}|\cos(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \varphi),$$

όπου η φάση  $\varphi$  ορίζεται από την σχέση  $A_{12} = |A_{12}|e^{i\varphi}$ , ενώ πάντα ισχύει ότι τα μη διαγώνια στοιχεία έχουν την ιδιότητα  $A_{12} = A_{21}^* \Rightarrow A_{12} = |A_{12}|e^{i\varphi}, A_{21} = |A_{12}|e^{-i\varphi}$ . Καθώς η τελευταία σχέση ισχύει και για τα διαγώνια στοιχεία, δηλαδή  $A_{11} = A_{11}^*$ ,

είναι ίσα με  $A_{nm} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_n(x))^* \psi_m(x)dx$ , λόγω ερμιτιανότητας. Ενώ το ίδιο αποτέλεσμα έχουμε από το συζυγές του  $A_{mn}$ , καθώς ισχύει ότι

$$A_{mn} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)(\hat{A}\psi_n(x))dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_n(x))^* \psi_m(x)dx\right)^* = A_{nm}^*$$