

Σύνοψη της στοιχειώδους Κβαντομηχανικής. Οι τέσσερις κανόνες της.

Ανδρέας Φ. Τερζής

October 21, 2025

Παρακάτω δίνονται σε σύντομη μορφή οι τέσσερις βασικές αρχές που εισάγει ο Chris J. Isham ως θεμέλιο της μη-σχετικιστικής κβαντομηχανικής, μαζί με βασικούς ορισμούς χρήσιμων μεγεθών.

1 Ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις διαφορικού τελεστή

Ορισμός

Ας θεωρήσουμε έναν διαφορικό τελεστή $\hat{A}$ που δρα σε (κυματο)συναρτήσεις $\psi(x)$ του χώρου (συμβολίζεται $L^2(\mathbb{R})$) των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων (κυματο)συναρτήσεων, δηλαδή αυτών που ισχύει $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$.

Η εξίσωση ιδιοτιμών ορίζεται ως

$$\hat{A}u_n(x) = a_n u_n(x),$$

όπου a_n είναι οι ιδιοτιμές και $\psi_n(x)$ οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις.

Παράδειγμα: Για τον τελεστή ορμής $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ έχουμε:

$$\hat{p} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx},$$

δηλαδή ιδιοτιμή $p = \hbar k$ και ιδιοσυνάρτηση e^{ikx} .

2 Ερμητιανοί τελεστές

Ορισμός

Ένας τελεστής $\hat{A}$ ονομάζεται **ερμητιανός** (ή αυτοσυζυγής) αν ισχύει:

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

για όλες τις κυματοσυναρτήσεις ϕ, ψ .

Οι ερμητιανοί τελεστές έχουν **πραγματικές ιδιοτιμές** και **ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις** — ιδιότητες που τους καθιστούν κατάλληλους για να παριστάνουν φυσικές ποσότητες.

Παράδειγμα: Οι τελεστές $\hat{x}$ και $\hat{p}$ είναι ερμητιανοί ενώ ο τελεστής $\frac{d}{dx}$ δεν είναι ερμητιανός.

3 Οι 4 κανόνες της στοιχειώδους Κβαντομηχανικής

Κανόνας I Η κβαντική κατάσταση ενός σημειακού σωματιδίου που κινείται σε μία διάσταση, αναπαριστάται από μία μιγαδική κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, που είναι νορμαλισμένη (κανονικοποιημένη) στην μονάδα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Η πλέον σημαντική ιδιότητα, και ένα από τα «μυστήρια» της θεωρίας, αποτελεί το γεγονός ότι δύο κυματοσυναρτήσεις, ψ_1 και ψ_2 , μπορούν να συνδυαστούν και να δώσουν μια καινούργια κυματοσυνάρτηση, την $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, δηλαδή την **υπέρθθεση** των δύο αρχικών, αρκεί οι (εν γένει μιγαδικοί) συντελεστές να είναι τέτοιοι ώστε η νέα κυματοσυνάρτηση να είναι νορμαλισμένη.

Κανόνας II Παρατηρήσιμες ποσότητες. Οι φυσικές (πραγματικές) μετρήσιμες ποσότητες αναπαριστώνται από ερμητιανούς (λέγονται και αυτοσυζυγείς) οι οποίοι έχουν δράση πάνω στην κυματοσυνάρτηση. Οι ιδιοτιμές του $\hat{A}$ αντιστοιχούν στα δυνατά αποτελέσματα μιας μέτρησης.

Παράδειγμα: Για τη θέση ενός σωματιδίου, ορίζουμε τον τελεστή της θέσης ($\hat{x}$) που λειτουργεί σύμφωνα με την σχέση, $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$.

Κανόνας III (3.1) Μέτρηση και ιδιοτιμές ερμητιανού τελεστή

Η μοναδικές τιμές μέτρησης για κάποιο φυσικό μέγεθος (παρατηρήσιμο) A που αναπαρίσταται από τον τελεστή $\hat{A}$, είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή.

(3.2) Καταστάσεις και πιθανότητες

Αν θεωρήσουμε, για λόγους απλότητας, ότι δεν υπάρχει εκφυλισμός (δηλαδή δύο ή περισσότερες ιδιοσυναρτήσεις με την ίδια ιδιοτιμή) και ότι ο $\hat{A}$ έχει διακριτό φάσμα ιδιοτιμών, $a_1, a_2, a_3, \dots$, με αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $u_1, u_2, u_3, \dots$. Τότε, αν η κβαντική κατάσταση είναι $\psi(x)$, η πιθανότητα όταν μετρηθεί ο A να καταγραφεί η τιμή a_n είναι:

$$\boxed{Prob(A = a_n; \psi(x)) = |c_n|^2},$$

όπου ο μιγαδικός αριθμός ψ_n είναι ο συντελεστής στο ανάπτυγμα

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n u_n(x)}.$$

της κυματοσυνάρτησης $\psi(x)$ ως γραμμικός συνδιασμός των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $\hat{A}$.

Κανόνας IV Χρονική εξέλιξη.

Η χρονοεξαρτώμενη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t)$ εξελίσσεται χρονικά σύμφωνα με την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t)}.$$

Ο τελεστής της Χαμιλτονιανής (Hamiltonian) $\hat{H}$, υπολογίζεται από την έκφραση της ενέργειας στην κλασική μηχανική ($H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$), δηλαδή αντικαταθιστώντας την συνάρτηση της δυναμικής ενέργειας που είναι συνάρτηση της θέσης x και της κινητικής ενέργειας που είναι συνάρτηση της ορμής p με τους αντίστοιχους τελεστές θέσης $\hat{x}$ και ορμής $\hat{p}$, ως

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}).$$

4 Συνέπειες βασικών κανόνων

Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις των ερμητιανών τελεστών που χρησιμοποιούνται στην κβαντομηχανική, έχουν τρεις πολύ σημαντικές ιδιότητες.

(α) Οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές, κάτι που χρειαζόμαστε μια και αντιστοιχούν στα δυνατά αποτελέσματα μιας μέτρησης.

(β) Οι ιδιοσυναρτήσεις αποτελούν ένα πλήρες σύνολο, δηλαδή οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός τους (βλέπε την έκφραση στον κανόνα III)

(γ) Οι ιδιοσυναρτήσεις υπακούουν στην ορθοκανονική συνθήκη, δηλαδή:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

όπου δ_{mn} είναι το δέλτα του Kronecker, που εξ' ορισμού έχει μηδενική τιμή για διαφορετικούς δείκτες και τιμή μονάδα για ίδιους δείκτες.

Άμεση συνέπεια του τελευταίου κανόνα είναι ο υπολογισμός των συντελεστών στο ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης στο κανόνα III (η 2η σχέση στο (3.2)), που δίνεται από την έκφραση

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} u_n^*(x) \psi(x) dx.$$

Συνέπεια των κανόνων είναι και ο τύπος εύρεσης της μέσης τιμής, οποιουδήποτε ερμητιανού τελεστή, από την σχέση

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (\hat{A}\psi)(x) dx,$$

Οι τέσσερις κανόνες είναι ατελείς, μια και δεν δίνουν καμία πληροφορία πως να κατασκευάσουμε τους τελεστές που χρειαζόμαστε στην κβαντομηχανική έτσι ώστε να αναπαριστούν παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη του κβαντικού συστήματος που μελετάμε. Αυτό τελικά γίνεται, βάζοντας σε εφαρμογή τον «κανόνα της αντικατάστασης», με το οποίο χρησιμοποιούμε τις κλασικές εκφράσεις και κάνοντας αντικατάσταση των μεγεθών με τους αντίστοιχους τελεστές. Δηλαδή για το κλασικό μέγεθος $A(x, p)$ χρησιμοποιούμε τον τελεστή $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$. Μάλιστα, έχουμε ήδη εφαρμόσει τον κανόνα αυτό στον κανόνα IV την εκτίμηση το τελεστή της Χαμιλτονιανής.

Ωστόσο, η θεωρητική μας κατασκευή, για να ολοκληρωθεί χρειάζεται να ορίσουμε τους τελεστές θέσης και ορμής. Στην στοιχειώδη κβαντομηχανική, ακολουθώντας την σκέψη του Schrödinger που χρησιμοποίησε διαισθητικά επιχειρήματα, «αξιοματικά» ορίζουμε τους τελεστές θέσης και ορμής από τις σχέσεις,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x),$$

με άμεση συνέπεια την ισχύ της διάσημης σχέσης αντιμετάθεσης τους, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

5 ΑΣΚΗΣΗ

Από τους 4 κανόνες της Κβαντομηχανικής και τις μαθηματικές ιδιότητες του προβλήματος ιδιοτιμών ενός ερμητιανού τελεστή, αποδείξτε:

(α) την πιθανοκρατική ερμηνεία του Max Born (1926),

(β) τον τύπο για την μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (\hat{A}\psi(x)) dx,$$

(γ) για τους συντελεστές του αναπτύγματος της κυματοσυνάρτησης, τον τύπο

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \psi(x) dx,$$

(δ) τέλος γράψτε την τυχαία κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας του ελεύθερου σωματιδίου (η ανάλυση Fourier θα βοηθήσει). Η εκφώνηση του ερωτήματος αυτού θα μπορούσε να ήταν με τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής και τα αποτελέσματα θα ήταν ακριβώς ίδια. Γιατί;

Λύση

(α) Πιθανοκρατική ερμηνεία του Born

Προφανώς χρησιμοποιούμε την θεωρία του κανόνα III (τις σχέσεις στο (3.2)), όπου ο τυχαίος τελεστής $\hat{A}$, είναι εδώ ο τελεστής θέσης. Για να προχωρήσουμε χρειαζόμαστε τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή θέσης, δηλαδή να λύσουμε το πρόβλημα $\hat{A}u_n(x) = a_n u_n(x)$. Βέβαια καθώς από φυσική διαίσθηση αναμένουμε ο τελεστής θέσης να έχει συνεχές φάσμα ιδιοτιμών (όλες οι θέσεις $x_0 \in (-\infty, +\infty)$, επιτρέπονται), το πρόβλημα ιδιοτιμών διατυπώνεται ως

$$\hat{x}u(x; x_0) = x_0 u(x; x_0).$$

Οπότε, αφού $\hat{x}u(x; x_0) = xu(x; x_0)$, έχουμε να λύσουμε την εξίσωση $(x - x_0)u(x; x_0) = 0$, της οποίας η λύση είναι η διάσημη συνάρτηση δέλτα του Dirac ($\delta(x - x_0)$), της οποίας μια πολύ σημαντική ιδιότητα (για κάποιους ιδιότητα ορισμός της), είναι η σχέση

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a).$$

Για να προχωρήσουμε, πρέπει να δημιουργήσουμε μια συνεχή έκδοση της σχέσης $\psi(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n u_n(x)$, το οποίο καταφέρνουμε αντικαθιστώντας το άθροισμα με ολοκλήρωμα ($\sum_n \rightarrow \int dx_0$, δηλαδή πάμε από την διακριτή παράμετρο n στην συνεχή x_0) και έχουμε τελικά,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0) u(x, x_0) dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0.$$

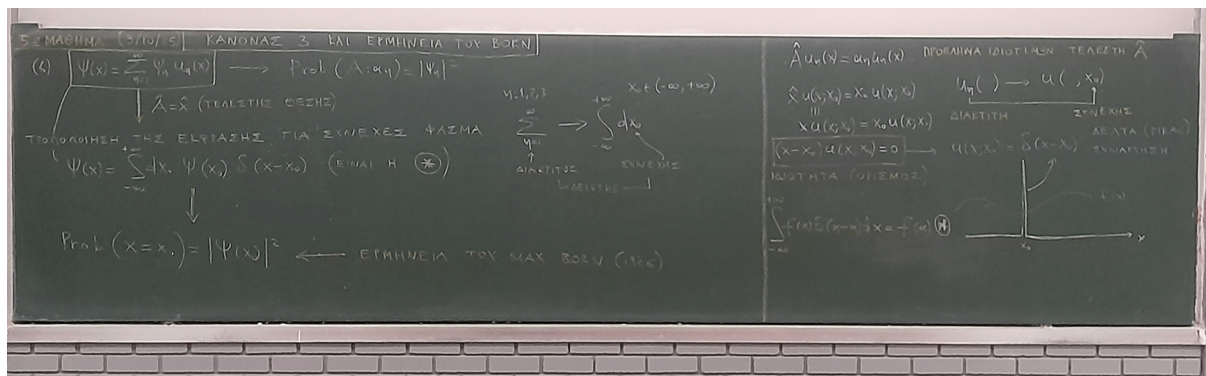
Παρατηρούμε ότι η τελευταία ισότητα, δεν είναι άλλη από την βασική ιδιότητα της συνάρτησης του Dirac, που αναφέραμε αμέσως παραπάνω.

Απόδειξη της πιθανοκρατικής ερμηνείας

Θυμίζουμε από τον κανόνα III, ότι αν η κβαντική κατάσταση είναι $\psi(x)$, η πιθανότητα όταν μετρηθεί ο A να καταγραφεί η τιμή a_n είναι $Prob(A = a_n; \psi(x)) = |c_n|^2$, όπου ο μιγαδικός αριθμός c_n είναι ο συντελεστής στο ανάπτυγμα. Εδώ αντικαθιστούμε τον A με τον τελεστή θέσης και βάση της τελευταίας σχέσης που βγάλαμε στην προηγούμενη παράγραφο, το $|\psi(x_0)|^2$, είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίο στην περιοχή $[x_0, x_0 + dx_0]$. Κλείνοντας, να αναφέρουμε ότι ιστορικά έγινε η αντίστροφη διαδικασία, δηλαδή ο Born πρότεινε την ερμηνεία αυτή και ακολούθησαν οι συνεπειές του, που καταγράφονται στους 4 κανόνες.

Η απόδειξη στον πίνακα διδασκαλίας

Στο σχήμα 1, είναι η εικόνα του πίνακα διδασκαλίας στο οποίο παρουσιάστηκε η ζητούμενη απόδειξη.



Σχήμα 1: Πίνακας διδασκαλίας: Κανόνας 3 και Ερμηνεία του Born.

(β) Τύπος για τη μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$

Ξεκινάμε από την ζητούμενη έκφραση και με απλές πράξεις καταλήγουμε στην σχέση (3.2) του κανόνα III, δηλαδή:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (\hat{A}\psi)(x) dx &= \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{+\infty} c_n u_n(x) \right)^*(x) \left(\hat{A} \sum_{m=1}^{+\infty} c_m u_m(x) \right) dx = \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m=1}^{+\infty} c_n^* c_m \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \hat{A} u_m(x) dx = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m=1}^{+\infty} c_n^* c_m a_m \delta_{nm} = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n^* c_n a_n = \langle \hat{A} \rangle. \end{aligned}$$

Διατρέχοντας τις ισότητες με την ανάποδη σειρά, έχουμε την ζητούμενη απόδειξη.

(γ) Συντελεστές του αναπτύγματος — τύπος

Ξεκινώντας από την βασική σχέση του κανόνα III, $\psi(x) = \sum_n c_n u_n(x)$ και χρησιμοποιώντας την ορθοκανονικότητα των ιδιοσυναρτήσεων βρίσκουμε την ζητούμενη σχέση. Για την ακρίβεια πολλαπλασιάζοντας εσωτερικά με $u_m^*(x)$ και ολοκληρώνοντας, έχουμε

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x) \psi(x) dx = \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x) u_n(x) dx = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m.$$

(δ) Ανάπτυγμα σε ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας ελεύθερου σωματιδίου

Για το ελεύθερο σωματίδιο ($V(x) = 0$), οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ενέργειας υπολογίζονται από την λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών της ενέργειας, δηλαδή $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x;k)}{\partial x^2} = E\psi(x;k)$.

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι τετριμμένη και δίνει

$$\psi(x;k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar},$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει ανάπτυξη Fourier, για να έχουμε συντελεστές οι οποίοι ικανοποιούν την ορθοκανονικότητα κατά Dirac, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x;k)^* \psi(x';k) dk = \delta(x - x')$.

Σε αυτό το σημείο παρατηρούμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις που βρήκαμε είναι ίδιες με τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής (βλέπε παραπάνω, το παράδειγμα στους ορισμούς των ιδιοσυναρτήσεων διαφορικού τελεστή), αν θέσουμε $k = p/\hbar$.

Όμως υπάρχει και μία ουσιαστική διαφορά, όταν κάνουμε το ανάπτυγμά μας με τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, έχουμε ουσιαστικά και την λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger, (κανόνας IV) μια και η εξίσωση αυτή έχει λύση της μορφής

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n u_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}},$$

με $u_n(x)$ τις ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος ιδιοτιμών της ενέργειας, δηλαδή $\hat{H}u_n(x) = a_n u_n(x)$. Στο πρόβλημά του ελεύθερου σωματιδίου, οι λύσεις ταυτίζονται καθώς η ορμή και η ενέργεια είναι ίδιες, μια και έχουμε μόνο κινητική ενέργεια και ο τελεστής $\hat{p}$ και $\hat{p}^2 (= \hat{p}\hat{p})$ έχουν προφανώς ίδιες ιδιοσυναρτήσεις.

Κάνοντας χρήση του κανόνα III και του τύπου του προηγούμενου ερωτήματος (ερώτημα (γ)), βρίσκουμε τελικά

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) \psi(x, k) dk,$$

με

$$\tilde{\psi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x; k)^* \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx.$$

Οι σχέσεις αυτές ανοίγουν ένα ολόκληρο σύμπαν στην κβαντομηχανική, μια και είναι οι σχέσεις ορισμού αυτών που αποκαλούμε **κυματοπακέτα**.

Σχόλια και παρατηρήσεις.

- Οι ιδιοσυναρτήσεις, θα βρείτε πολλές φορές να ονομάζονται και **ιδιοδιανύσματα**, γιατί συμβαίνει αυτό; Ουσιαστικά έχει να κάνει με τον κανόνα I, στον οποίο αναφέρονται οι καταστάσεις υπέρθεσης, δηλαδή η θεμελιώδης ιδιότητα των κυματοσυναρτήσεων, βάσει της οποίας, αν έχω δύο κυματοσυναρτήσεις και ο, με προϋποθέσεις (βλέπε λεπτομέρειες κανόνα I), γραμμικός συνδιασμός τους είναι κυματοσυνάρτηση. Αλλά η ιδιότητα αυτή είναι και η βασική προϋπόθεση και ουσιαστικά ο ορισμός ενός διανυσματικού χώρου. Η γενίκευση αυτών των καταστάσεων υπέρθεσης με άπειρα ιδιοδιανύσματα καταγράφεται στον τύπο τις (3.2) του κανόνα III.
- Με αφετηρία τον κανόνα IV, λύνοντας την εξίσωση Schrödinger με την μεθοδολογία των χωριζόμενων μεταβλητών οι καταστάσεις υπέρθεσης, τουλάχιστον για τον τελεστή της Χαμιλτονιανής, προκύπτουν αβίαστα (βλέπε την σχέση μέσα στο πλαίσιο στο ερώτημα (δ) της άσκησης μας).

6 Συνοπτικά συμπεράσματα

Οι τέσσερις κανόνες, μαζί με τους ορισμούς των ιδιοτιμών, ιδιοσυναρτήσεων και των ερμητιανών τελεστών, σχηματίζουν το αξιωματικό και μαθηματικό υπόβαθρο της κβαντομηχανικής. Όλες οι φυσικές προβλέψεις της στοιχειώδους κβαντομηχανικής μπορούν να αναχθούν σε αυτές τις αρχές.

Βιβλιογραφία

References

- [1] C. J. Isham, *Lectures on Quantum Theory: Mathematical and Structural Foundations*, Imperial College Press / World Scientific, 1995.