Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 10: Ερμιτιανοί τελεστές και εισαγωγή στους μεταθέτες

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να αναδείξει την ερμιτιανότητα ως βασική ιδιότητα των κβαντομηχανικών τελεστών και να παρουσιάσει την μεταθετικότητα δύο μεγεθών, που αποτελεί κριτήριο για το αν μπορούν αυτά να μετρηθούν ταυτόχρονα.

Περιεχόμενα ενότητας

- Ερμιτιανοί τελεστές
- Διατήρηση της πιθανότητας
- Συζυγία τελεστών
- Μεταθετικότητα

Ερμιτιανοί τελεστές-ορισμός

- Θα λέμε ότι ένας (γραμμικός) τελεστής A είναι ερμιτιανός αν ισχύει η σχέση

$$\int \psi^* (\mathrm{A\varphi})\mathrm{dV} = \int (A\psi)^* \varphi dV$$

αν μπορεί δηλαδή να μεταφερθεί από την μία συνάρτηση του παραπάνω ολοκληρώματος στην άλλη, χωρίς καμία αλλαγή.

- Στο σημείο αυτό εισάγουμε την έννοια του **εσωτερικού γινομένου** δύο κυματοσυναρτήσεων ψ και φ μέσω της σχέσης:

$$(\psi, \varphi) = \int \psi^* \varphi dV$$

- Άρα με την βοήθεια του συμβολισμού για το εσωτερικό γινόμενο, ο ορισμός για τον ερμιτιανό τελεστή είναι : $(\psi, \mathrm{A\varphi}) = (\mathrm{A\psi}, \mathrm{\varphi})$.

Ιδιότητες ερμιτιανού τελεστή

- Ένας ερμιτιανός τελεστής έχει πάντα

1. Πραγματική μέση τιμή (δηλ. $\langle \mathrm{A} \rangle = \langle \mathrm{A} \rangle^*$. Πράγματι
$$\langle \mathrm{A} \rangle = (\psi, \mathrm{A}\psi) = (\mathrm{A}\psi, \psi)^* = (\psi, \mathrm{A}\psi)^* = \langle \mathrm{A} \rangle^*.$$
2. Πραγματικές ιδιοτιμές (Αν η ψ ικανοποιεί την εξίσωση ιδιοτιμών $\mathrm{A}\psi = \alpha\psi$, τότε $\langle \mathrm{A} \rangle = (\psi, \mathrm{A}\psi) = (\psi, \alpha\psi) = \alpha(\psi, \psi) = \alpha \int |\psi|^2 dV = a$. Κι επειδή όπως είπαμε η μέση τιμή είναι πραγματικός, το ίδιο θα ισχύει και για τις ιδιοτιμές.
3. Ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις. (Δύο συναρτήσεις είναι ορθογώνιες όταν $\int \psi^* \varphi dV = (\psi, \varphi) = 0$. Έστω $\mathrm{A}\psi_1 = = \alpha_1 \psi_1, \mathrm{A}\psi_2 = \alpha_2\psi_2$. Από τον ορισμό της ερμιτιανότητας θα ισχύει $(\psi_1, \mathrm{A}\psi_2) = (\mathrm{A}\psi_1, \psi_2) \Rightarrow (\psi_1, \alpha_2\psi_2) = (\alpha_1\psi_1, \psi_2) \Rightarrow \alpha_2(\psi_1, \psi_2) = \alpha_1(\psi_1, \psi_2) \Rightarrow (\alpha_1 - \alpha_2)(\psi_1, \psi_2) = 0 \Rightarrow (\psi_1, \psi_2) = 0$ (αφού διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές).

Μερικά παραδείγματα

- Είναι ο τελεστής θέσης ερμιτιανός;

Θα έχουμε $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(\hat{x}\psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* x\psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x\varphi)^*\psi dx$

Άρα είναι ερμιτιανός.

- Είναι ο τελεστής της ορμής ερμιτιανός;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{p}\varphi)dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx$$

Λύνουμε κατά παράγοντες:

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = i\hbar\psi^*[\psi^*(\infty)\varphi(\infty) - \psi^*(-\infty)\varphi(-\infty)] + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \varphi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

Ο πρώτος όρος είναι μηδέν διότι οι κυματοσυναρτήσεις είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Άρα $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi\, (\hat{p}\psi)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p}\varphi)^*\psi dx$, δηλαδή ο τελεστής της ορμής είναι ερμιτιανός.

- Για τον τελεστή $\frac{d}{dx}$ δεν ισχύει ο ορισμός, άρα δεν είναι ερμιτιανός.

Διατήρηση της πιθανότητας

- Θα αποδείξουμε ότι το ολοκλήρωμα της ολικής πιθανότητας $\mathrm{I} = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)\, dV$ είναι ανεξάρτητο του χρόνου, οπότε αν μια ορισμένη χρονική στιγμή έχει την τιμή μονάδα, θα παραμένει συνεχώς μονάδα.
- Παραγωγίζουμε την παραπάνω σχέση και έχουμε:

$$\frac{d\mathrm{I}}{d\mathrm{t}} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dV + \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dV$$

Συνέχεια απόδειξης

Από την εξίσωση Schrödinger ισχύει ότι:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}(H\psi), \qquad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}(H\psi)^*$$

Άρα

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\int (H\psi)^*\psi dV + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^*(\mathrm{H\psi})\mathrm{dV} =$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^*(\mathrm{H\psi})\mathrm{dV} - \int (\mathrm{H\psi})^*\psi dV\right)$$

Η τελευταία έκφραση είναι μηδέν εξ’ αιτίας της ερμιτιανότητας του τελεστή της χαμιλτονιανής. (Ο τελεστής της χαμιλτονιανής είναι ερμιτιανός διότι εξαρτάται από τους τελεστές θέσης και ορμής που είναι ερμιτιανοί).

Συζυγής τελεστής

- Ορίζουμε ως συζυγή τελεστή του $\hat{A}$ και συμβολίζουμε με $\hat{A}^{+}$ αυτόν για τον οποίο ισχύει ότι
$$\left(\hat{A}^{+}\Psi, \Phi\right) = \left(\Psi, \hat{A}\Phi\right) \Rightarrow$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{A}^{+}\Psi\right)^{*} \Phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{*}\left(\hat{A}\Phi\right) dx$$
- Από την παραπάνω ισότητα παρατηρούμε ότι ερμιτιανός είναι ο τελεστής για τον οποίο ισχύει ότι
$$\hat{A}^{+} = \hat{A}$$

Ιδιότητες συζυγούς τελεστή(Ι)

- $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{+}=\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}$

Απόδειξη: $\left(\Psi,\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\Phi\right)=\left(\Psi,\hat{A}\Phi+\hat{B}\Phi\right)=$

$$=\left(\Psi,\hat{A}\Phi\right)+\left(\Psi,\hat{B}\Phi\right)=$$

$$=\left(\hat{A}^{+}\Psi,\Phi\right)+\left(\hat{B}^{+}\Psi,\Phi\right)=$$

$$=\left(\hat{A}^{+}\Psi+\hat{B}^{+}\Psi,\Phi\right)=\left(\left(\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}\right)\Psi,\Phi\right)$$

Εξ' αιτίας της ερμιτιανότητας έχουμε επιπλέον ότι

$$\left(\Psi,\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\Phi\right)=\left(\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{+}\Psi,\Phi\right)$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι θα πρέπει $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{+}=\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}$.

Ιδιότητες συζυγούς τελεστή(ΙΙ)

- $\left(\widehat{\mathrm{A}} \cdot \widehat{\mathrm{B}}\right)^{+} = \widehat{\mathrm{B}}^{+} \cdot \widehat{\mathrm{A}}^{+}$

Απόδειξη: $\left(\Psi, \widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\Phi\right) = \left(\Psi, \widehat{\mathrm{A}}\left(\widehat{\mathrm{B}}\Phi\right)\right) = \left(\widehat{\mathrm{A}}^{+}\Psi, \widehat{\mathrm{B}}\Phi\right) =$

$$\left(\widehat{\mathrm{B}}^{+}\widehat{\mathrm{A}}^{+}\Psi\,, \Phi\right)$$

Εξ' αιτίας της ερμιτιανότητας έχουμε επιπλέον ότι

$$\left(\Psi, \widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\Phi\right) = \left(\left(\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\right)^{+}\Psi, \Phi\right)$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι θα πρέπει

$$\left(\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\right)^{+} = \widehat{\mathrm{B}}^{+}\widehat{\mathrm{A}}^{+}$$

- Ακόμη $\left(c\hat{A}\right)^{+} = c^{*}\hat{A}^{+}$ όπου c μια μιγαδική σταθερά.

Ο τελεστής της στροφορμής

- Η στροφορμή ξέρουμε ότι ορίζεται ως

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

όπου $\vec{r} = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath} + z\hat{k}, p = (p_x, p_y, p_z)$

- Ο αντίστοιχος τελεστής θα είναι:

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} \Rightarrow$$

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = \hat{L}_x\vec{\imath} + \hat{L}_y\vec{\jmath} + \hat{L}_z\vec{k}$$

με $L_x = y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) - z\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left[z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right]$, (Έχουμε αφαιρέσει τα «καπέλα» για λόγους ευκολίας). Ομοίως και για τα $\hat{L}_y, \hat{L}_z$.

Εφαρμογή

- Να ελεγχθεί αν οι τελεστές (α) $\mathrm{L}_z = xp_y - yp_x$, (β)$w = xp_x + yp_z$ είναι ερμιτιανοί.

(α) $(\mathrm{L}_z)^+ = \left(xp_y - yp_x\right)^+ = \left(xp_y\right)^+ - (yp_x)^+ =.$

$= {p_y}^+\, x^+ - {p_x}^+ y^+$

Όμως οι τελεστές θέσης και ορμής είναι ερμιτιανοί. Άρα $x^+ = x$,
$y^+ = y, {p_x}^+ = p_x, {p_y}^+ = p_y$.

Επομένως $(\mathrm{L}_z)^+ = p_y x - p_x y$. Ακόμη $p_y x = xp_y$,

διότι $xp_y\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = -i\hbar\frac{\partial x\psi}{\partial y} = p_y x\psi$. Άρα $(\mathrm{L}_z)^+ = xp_y - yp_x = L_z$.

Συμπεραίνουμε ότι είναι ερμιτιανός.

(β) Με την ίδια λογική βλέπουμε ότι $xp_x\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) =$

$= -i\hbar\frac{\partial x\psi}{\partial x} + i\hbar\psi \neq p_y x\psi$. Άρα δεν είναι ερμιτιανός.

Μετρητική διαδικασία

- Έστω ο τελεστής Α με εξίσωση ιδιοτιμών

$\mathrm{A}\psi_n = a_n\psi_n$. Έστω $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3$. Έχουμε αναφέρει ότι κατά την διάρκεια μιας μετρητικής διαδικασίας (πχ. σ' ένα πείραμα) η κυματοσυνάρτηση «καταρέει» και το αποτέλεσμα είναι μία από τις ιδιοσυναρτήσεις ψ_1, ψ_2, ψ_3. Αν βρούμε την ιδιοτιμή α_1 κατά την διάρκεια της διαδικασίας, τότε η κατάσταση που περιγράφει το σύστημα θα είναι η ψ_1. Ομοίως και για τις υπόλοιπες.

Μία ιδιοκατάσταση

- Τι συμβαίνει στην περίπτωση που ο τελεστής A έχει μόνο μια ιδιοκατάσταση; Με πόση βεβαιότητα μπορούμε να γνωρίζουμε το μέγεθος που αντιπροσωπεύει;
- Όταν λοιπόν συμβαίνει αυτό, ισχύει ότι $\Delta\mathrm{A} = 0$, δηλαδή μπορούμε να γνωρίζουμε το μέγεθος που περιγράφει ο τελεστής με απόλυτη βεβαιότητα.
- Απόδειξη: $\langle \mathrm{A}^2 \rangle = \int \psi_n{}^* \hat{A}^2 \psi_n dx = \int \psi_n{}^* \hat{A} \cdot \hat{A} \psi_n =$

$$= a_n \int \psi_n{}^* \hat{A} \psi_n = a_n{}^2 \int \psi_n{}^* \psi_n = a_n{}^2$$

$\langle A \rangle = \int \psi_n{}^* \hat{A} \psi_n dx = a_n$. Άρα $\langle \mathrm{A} \rangle^2 = \alpha_n{}^2$. Συμπεραίνουμε ότι

$$\Delta\mathrm{A} = \langle \mathrm{A}^2 \rangle - \langle \mathrm{A} \rangle^2 = 0$$

δηλαδή δεν υπάρχει αβεβαιότητα ως προς την γνώση του Α.

Η έννοια του μεταθέτη

- Είπαμε ότι μπορούμε να αντιστοιχίσουμε μια συγκεκριμένη τιμή(την ιδιοτιμή) στον τελεστή $\widehat{\mathrm{A}}$, αν το σύστημα βρίσκεται σε μια ιδιοσυνάρτηση του $\widehat{\mathrm{A}}$.
- Με την ίδια λογική, αν θέλουμε να αντιστοιχίσουμε τιμές **ταυτόχρονα** σε δύο τελεστές $\widehat{\mathrm{A}}$ και $\widehat{\mathrm{B}}$, μπορούμε μόνο στην περίπτωση που το σύστημα βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση που είναι ταυτόχρονα του $\widehat{\mathrm{A}}$ και του $\widehat{\mathrm{B}}$. Οι ιδιοτιμές τους όμως θα είναι διαφορετικές, δηλαδή: $\widehat{\mathrm{A}}\psi_n = a_n\psi_n, \hat{B}_n\psi_n = \beta_n\psi_n$.
- Εξασκούμε το $\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}$ στην ψ_n.
- $\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\,\psi_n = \hat{A}\left(\widehat{\mathrm{B}}\,\psi_n\right) = \hat{A}(\beta_n\psi_n) = \beta_n\left(\hat{A}\psi_n\right) = \beta_n a_n\psi_n$ (1)
- $\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{B}\left(\hat{A}\psi_n\right) = \hat{B}(a_n\psi_n) = a_n\left(\hat{B}\psi_n\right) = a_n\beta_n\psi_n$ (2)
- Από (1) και (2) $\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}}\psi_n = \hat{B}\hat{A}\psi_n \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$.

Η διαφορά $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ ονομάζεται **μεταθέτης ή εναλλάκτης.** Συμβολίζεται ως

$$\left[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Κριτήριο ταυτόχρονης μέτρησης

- Η μεταθετικότητα δύο τελεστών αποτελεί το κριτήριο για το αν τα μεγέθη που αντιπροσωπεύουν μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα, να είναι δηλαδή **συμβιβαστά**.
- Δύο μεγέθη Α και Β μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα αν $\left[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}\right] = 0$. Αν $\left[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}\right] \neq 0$, τότε δεν υπάρχει η δυνατότητα ταυτόχρονης μέτρησής τους.
- Εμείς ήδη γνωρίζουμε από την αρχή της αβεβαιότητας ότι η θέση και η ορμή δεν μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα. Παρακάτω επιβεβαιώνεται αυτό με την χρήση του μεταθέτη, ο οποίος θα πρέπει να είναι μη μηδενικός.

Μεταθέτης θέσης-ορμής

- $[\hat{x},\hat{p}]\psi = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi$
- Έχουμε $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{x} = x$.
- Αντικαθιστουμε και παίρνουμε:

$$-i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} =$$

$$= -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\psi + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = i\hbar\psi$$

Άρα $[\hat{x},\hat{p}]\psi = i\hbar\psi$ και επομένως $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \neq 0$

Τα μεγέθη λοιπόν θέση και ορμή δεν μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών, Ανδρέας Τερζής. Ανδρέας Τερζής «Κβαντική Φυσική Ι. Ερμιτιανοί τελεστές και εισαγωγή στους μεταθέτες». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης