Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 12: Θεωρήματα Ehrenfest-Parity-
-Μέση τιμή τελεστή

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να ολοκληρώσει τις ιδιότητες του μεταθέτη, να παρουσιάσει τα θεωρήματα Ehrenfest και έναν νέο τελεστή, τον τελεστή της ισοτιμίας. Επίσης, θα δοθεί ένας γενικός τύπος με τον οποίο μπορούμε να υπολογίζουμε την μέση τιμή οποιουδήποτε φυσικού μεγέθους.

Περιεχόμενα ενότητας

- Ολοκλήρωση ιδιοτήτων μεταθέτη
- Θεωρήματα Ehrenfest
- Τελεστής Parity (ή ισοτιμίας)
- Μέση τιμή τελεστή

Συνέχεια ιδιοτήτων μεταθέτη

3. $[x, A(p)] = i\hbar \frac{\partial A(p)}{\partial p}$, όπου $\mathrm{A(p)} = c_0 + c_1 p + c_2 p^2 + c_3 p^3 ..$

Απόδειξη: $[x, A(p)] = [x, c_0] + [x, c_1 p] + [x, c_2 p^2] + \cdots =$

$$0 + i\hbar c_1 \frac{\partial p}{\partial p} + i\hbar c_2 \frac{\partial p^2}{\partial p} + i\hbar c_3 \frac{\partial p^3}{\partial p} =$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial p}(c_0 + c_1 p + c_2 p^2 + ..) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} A(p)$$

Την παραπάνω απόδειξη μπορούμε να την διαπιστώσουμε και επαγωγικά:

- $[x, p] = i\hbar \frac{\partial p}{\partial p} = i\hbar$
- $[x, p^2] = [x, pp] = [x, p]p + p[x, p] = i\hbar p + p i\hbar = 2i\hbar p = i\hbar \frac{\partial p^2}{\partial p}$
- $[x, p^3] = [x, p^2 p] = [x, p^2]p + p^2[x, p] = 2i\hbar p^2 + p^2 i\hbar = 3i\hbar p^2 =$

  $= i\hbar \frac{\partial p^3}{\partial p}$. ..Επιβεβαιώνεται λοιπόν επαγωγικά η παραπάνω σχέση.

Παράγωγος μέσης τιμής

Μια τελευταία ιδιότητα που αφορά τους μεταθέτες με παρόμοιο τρόπο εξαγωγής είναι:

4. $[p, B(x,p)] = -i\hbar \frac{\partial B(x,p)}{\partial p}$

- Στην συνέχεια ζητάμε να προσδιορίσουμε την χρονική παράγωγο της μέσης τιμής του μεγέθους A (διευκρινίζοντας ότι ο αντίστοιχος τελεστής δεν εξαρτάται από τον χρόνο). Θα έχουμε λοιπόν

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\widehat{\mathrm{A}}\psi)dx\right] =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^*(\hat{A}\psi)dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\widehat{\mathrm{A}}\frac{\partial\psi}{\partial t}dx \quad (1)$$

Από εξίσωση Schrödinger έχουμε: $\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}(\widehat{\mathrm{H}}\psi), \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^* = -\frac{1}{i\hbar}\left(\widehat{H}\psi\right)^*$

Τελικός τύπος

- Αντικαθιστώντας στην σχεση (1) έχουμε:

$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\int (H\psi)^{*}\mathrm{A}\psi dx + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^{*}\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{H}}\psi dx$ (2)

Όμως από ιδιότητα ερμιτιανότητας γνωρίζουμε ότι:

$$\int (\mathrm{B}\psi)^{*}\psi dx = \int \psi^{*}\mathrm{B}\psi \mathrm{dx}$$

Άρα η σχέση (2) γίνεται:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int \psi^{*}\left(-\widehat{\mathrm{H}}\widehat{\mathrm{A}}\psi\right) + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^{*}\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{H}}\psi dx =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int \psi^{*}\left[\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{H}} - \widehat{\mathrm{H}}\widehat{\mathrm{A}}\right]\psi dx = \frac{1}{i\hbar}\int \psi^{*}\left[\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{H}}\right]\psi dx = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}, \widehat{H}\right]\right\rangle$$

Άρα καταλήγουμε ότι $\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}, \widehat{H}\right]\right\rangle$.

1ο θεώρημα Ehrenfest

- Η εφαρμογή του παραπάνω τύπου για τον τελεστή θέσης οδηγεί στην διατύπωση του 1ου θεωρήματος Ehrenfest. Δηλαδή θα έχουμε:
- $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [x,H]\rangle$ (1)
- Υπολογίζουμε πρώτα τον μεταθέτη:

$$[x,H] = \left[x,\frac{p^2}{2m}+V(x)\right] = \left[x,\frac{p^2}{2m}\right] + [x,V(x)] =$$

$$= \frac{1}{2m}[x,p^2] = \frac{1}{2m}2i\hbar p = \frac{i\hbar p}{m}$$

Επομένως από την (1) έχουμε: $\frac{1}{i\hbar}\langle [x,H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \frac{i\hbar p}{m}\right\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}$

- Η τελική μορφή του 1ου θεωρήματος Ehrenfest είναι: $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}$.
- Παρατηρούμε ότι θυμίζει την κλασική σχέση $p = mv$, (όπου v είναι η ταχύτητα).

2^{o} Θεώρημα Ehrenfest

- Το 2^{o} θεώρημα Ehrenfest αφορά την συσχέτιση ορμής και δύναμης.
- Θα έχουμε: $\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[p,H]\rangle \quad (1)$
- $[p,H] = \left[p, \frac{p^2}{2m} + V(x)\right] = \left[p, \frac{p^2}{2m}\right] + [p, V(x)] =$

$$= [p, V(x)] = -i\hbar\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

- Άρα από (1) συμπεραίνουμε:

$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial \mathrm{V(x)}}{\partial x}\right\rangle$ =μέση δύναμη

- Παρατηρούμε ότι πάλι καταλήξαμε σε μια κλασική έκφραση για τις μέσες τιμές.

➢ **Παρατήρηση**: Τα μεγέθη που διατηρούνται είναι αυτά που μετατίθενται με την χαμιλτονιανή. Για να διατηρείται το μέγεθος Α θα πρέπει $\frac{d\langle \mathrm{A}\rangle}{dt} = 0 \Rightarrow \langle[A,H]\rangle = 0$

ή $[\mathrm{A},\mathrm{H}] = 0$.

Αρτιότητα ή ισοτιμία (parity)

- Η δράση του τελεστή της αρτιότητας περιγράφεται από την εξίσωση $P\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r})$.
- Αυτός ο τελεστής αντιστρέφει τον χώρο(δηλαδή αλλάζει την μεταβλητή από **r** σε –**r**).
- Ο P είναι ερμιτιανός τελεστής με την επιπλέον ιδιότητα $\mathrm{P}^2 = P \cdot P = 1$.
- Η εξίσωση ιδιοτιμών είναι: $P\psi(\boldsymbol{r}) = \xi\psi(\boldsymbol{r})$.
- Οι ιδιοτιμές ενός τελεστή ικανοποιούν πάντα την αλγεβρική εξίσωση που ικανοποιεί και ο τελεστής (δηλαδή σ ‘ αυτήν την περίπτωση την $\mathrm{P}^2 = 1$) . Άρα
- $\xi^2 = 1 \Rightarrow \xi = \pm 1$.

Ιδιοσυναρτήσεις αρτιότητας

- Για τις ιδιοσυναρτήσεις θα έχουμε

$$P\psi(\boldsymbol{r}) = \xi\psi(\boldsymbol{r}) \Rightarrow \psi(-\boldsymbol{r}) = \xi\psi(\boldsymbol{r}) \Rightarrow$$
$$\psi(-\boldsymbol{r}) = \pm\psi(\boldsymbol{r})$$

Συμπέρασμα: Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_+(\boldsymbol{r})$ που αντιστοιχούν στην θετική ιδιοτιμή $\xi = 1$ είναι άρτιες συναρτήσεις, ενώ οι $\psi_-(\boldsymbol{r})$ που αντιστοιχούν στην αρνητική ιδιοτιμή $\xi = -1$ είναι περιττές.

- Οι άρτιες ή περιττές κυματοσυναρτήσεις θα λέμε ότι έχουν καθορισμένη ισοτιμία. Ειδικότερα οι άρτιες κυματοσυναρτήσεις έχουν **θετική ισοτιμία**, ενώ οι περιττές **αρνητική ισοτιμία**.

Διατήρηση αρτιότητας

- Θα διαπιστώσουμε τώρα κάτω υπό ποια συνθήκη διατηρείται η αρτιότητα.
- Όπως αναφέραμε, για να διατηρείται ένα μέγεθος, θα πρέπει να μετατίθεται με την χαμιλτονιανή. Στην συγκεκριμένη λοιπόν περίπτωση θα πρέπει: $[P, H]\psi(x) = 0 \Rightarrow \left[P, -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) =$

$$P\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)P\psi(x)$$

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

$$= [V(-x) - V(x)] = 0 \Rightarrow V(-x) = V(x).$$

- Διαπιστώνουμε ότι η συνθήκη για την διατήρηση της αρτιότητας είναι

$V(-x) = V(x)$, δηλαδή το δυναμικό να είναι συμμετρικό.

Μέση τιμή φυσικών ποσοτήτων

- Θα εξάγουμε έναν γενικό τύπο που αφορά την μέση τιμή μιας φυσικής ποσότητας Α.

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \right]^* \hat{A} \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_n{}^* \psi_n{}^*(x) e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \right] \left[\sum_{m=1}^{\infty} c_m e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} \left(\hat{A}\psi_m(x) \right) \right] dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n{}^* c_m e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} \psi_n{}^*(x) \left(\hat{A}\psi_m(x) \right) dx$$

Τελικός τύπος

- $\langle \mathrm{A} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n{}^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^*(x) \hat{A} \psi_m(x) dx =$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n{}^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} A_{nm}$$

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

- Η παραπάνω σχέση είναι ιδιαίτερα σημαντική γιατί όπως αναφέραμε από αυτή υπολογίζουμε την μέση τιμή οποιουδήποτε μεγέθους A, που περιγράφεται από τον αντίστοιχο τελεστή $\widehat{\mathrm{A}}$. Φυσικά αυτό γίνεται αν έχουμε λύσει το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας και γνωρίζουμε τους συντελεστές στο ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης.

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 ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι.Θεωρήματα Ehrenfest-Parity- Μέση τιμή τελεστή». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης