

### Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1α (ΓΕΚ1α)

Σε ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα ναδειχθεί ότι η γενική λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger είναι της μορφής

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}, \text{ όπου τα } E_n \text{ και } \psi_n(x) \text{ αποτελούν τις διακριτές}$$

ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, αντίστοιχα. Ποιά η φυσική σημασία των συντελεστών αυτών

Η χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger, έχει την μορφή  $\hat{H}(x, \hat{p})\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$ ,

όπου  $\hat{H}(x, \hat{p})$  είναι ο τελεστής της Χαμιλτονιανής.

Η λύση της εξίσωσης αυτής με μερικές παραγώγους μπορεί να βρεθεί χρησιμοποιώντας την μέθοδο Χωριζόμενων μεταβλητών. Δηλαδή αναζητάμε λύσεις της μορφής  $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$ . Με τον χωρισμό αυτό των ανεξάρτητων μεταβλητών η χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger παίρνει την ισοδύναμη μορφή

$$\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i\hbar \frac{dT}{dt}}{T(t)}.$$

Καθώς το αριστερό μέρος της ισότητας είναι συνάρτηση μόνο της θέσης ενώ το δεξιό αποκλειστικά του χρόνου, για να είναι ίσα θα πρέπει να είναι ίσα με μια σταθερά. Άρα

$$\frac{\hat{H}\psi}{\psi} = i\hbar \frac{dT}{T} = E, \text{ που ισοδυναμεί με δύο διαφορικές εξισώσεις}$$

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = ET, \text{ με προφανή λύση } T(t) = T(0) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \text{ και την διαφορική εξίσωση}$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Η εξίσωση αυτή αποτελεί την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger, και είναι ουσιαστικά το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας. Η λύση του προβλήματος αυτού άλλοτε έχει συνεχές φάσμα (π.χ. ελεύθερο σωματίο,  $\hat{H}\psi_p(x) = E\psi_p(x)$ , δείκτης  $p$  ουσιαστικά της ορμής, ο οποίος παίρνει συνεχείς τιμές) ή άλλες φορές διακριτό ( $\hat{H}\psi_n(x) = E\psi_n(x)$ , ο δείκτης  $n$  είναι ακέραιος).

Έτσι βρίσκουμε ότι η λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger είναι της μορφής  $\psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ . Καθώς όμως η χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger είναι γραμμική (δεν

περιέχει μη γραμμικούς όρους, π.χ. όρους  $(\Psi(x,t))^2, \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}, \left( \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \right)^2$ ) και

οποιαδήποτε γραμμικός συνδυασμός των λύσεων αυτών θα αποτελεί λύση της εξίσωσης.

$$\text{Έχουμε δηλαδή η γενική λύση να είναι της μορφής } \Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}.$$

Ποια είναι η φυσική σημασία των συντελεστών αυτών.

Ας προσπαθήσουμε να βρούμε την μέση ενέργεια του συστήματος.

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \hat{H} \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \right]^* \hat{H} \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* \psi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \right] \left[ \sum_{m=1}^{\infty} c_m e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} (\hat{H} \psi_m(x)) \right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \psi_n^*(x) (\hat{H} \psi_m(x)) dx = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) (\hat{H} \psi_m(x)) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) (E_m \psi_m(x)) dx = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} E_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} E_m \delta_{nm} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* c_n E_n = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n
\end{aligned}$$

Όμως γνωρίζουμε ότι η μέση ενέργεια δίνεται από την σχέση  $\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} P_n E_n$ , άρα

βρίσκουμε  $|c_n|^2 = P_n$ , δηλαδή οι συντελεστές σχετίζονται με την πιθανότητα να έχω την  $n$ -ιδιοκατάσταση του συστήματος.

### **Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1β (ΓΕΚ1β)**

Για ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα να βρεθεί η έκφραση που δίνει την μέση τιμή οποιοδήποτε φυσικού μεγέθους που περιγράφεται από ένα τελεστή  $A$ , αν είναι γνωστά τα  $E_n$  και  $\psi_n(x)$  που αποτελούν τις διακριτές ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας, αντίστοιχα.

Από τον ορισμό της μέσης τιμής έχω  $\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \hat{A} \Psi(x,t) dx$ .

Γνωρίζουμε δε από την ακριβώς προηγούμενη άσκηση, ότι  $\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$ .

Έτσι έχουμε

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \hat{A} \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \right]^* \hat{A} \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* \psi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \right] \left[ \sum_{m=1}^{\infty} c_m e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} (\hat{A} \psi_m(x)) \right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \psi_n^*(x) (\hat{A} \psi_m(x)) dx = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) (\hat{A} \psi_m(x)) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{i \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} A_{nm}
\end{aligned}$$

όπου

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

**Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1γ (ΓΕΚ1γ)**

Για ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από δύο καταστάσεις με ενέργεια  $E_1$  και  $E_2$  και αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις  $\psi_1, \psi_2$ , να βρεθεί η έκφραση που δίνει την μέση τιμή της θέσης, της ορμής και της ενέργειας.

Την γενική έκφραση που βρήκαμε στην προηγούμενη άσκηση την χρησιμοποιούμε για όλες τις ζητούμενες φυσικές ιδιότητες.

Αρχικά για την θέση του σωματιδίου, δηλαδή  $\hat{A} = x$ .

Έτσι η μέση τιμή της θέσης δίνεται από την έκφραση

$$\langle x \rangle = c_1 c_1^* e^{i\omega_1 t} x_{11} + c_1 c_2^* e^{i\omega_{12} t} x_{12} + c_2 c_1^* e^{i\omega_{21} t} x_{21} + c_2 c_2^* e^{i\omega_{22} t} x_{22}, \quad \text{όπου } \omega_{ij} = (E_i - E_j) / \hbar \quad \text{και}$$

$$x_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* x \psi_j. \quad \text{Ένώ τα } c_1, c_2 \text{ είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί, δηλαδή}$$

$$c_1 = |c_1| e^{i\varphi_1}, c_2 = |c_2| e^{i\varphi_2}.$$

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

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

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

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

που είναι χρονο-εξαρτώμενη πραγματική συνάρτηση.

Στην παραπάνω σχέση για την μέση θέση, παρατηρούμε ότι αν οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας είναι πραγματικές, όπως για παράδειγμα στο απειρόβαθο και 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

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

Την γενική έκφραση που βρήκαμε στην προηγούμενη άσκηση την χρησιμοποιούμε για την ορμή του σωματιδίου ( $\hat{A} = \hat{p}$ ).

Έτσι η μέση τιμή της ορμής δίνεται από την σχέση

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

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

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

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  $\tilde{\varphi} = \pm\pi/2$ , γι'ατί

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

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

$\langle p \rangle(t) = \pm 2|c_1||c_2||p_{12}|\sin(\omega_{12}t + \varphi_{21})$ , όπου προφανώς το πρόσημο στην έκφραση της μέσης ορμής, εξαρτάται από το πρόσημο του ολοκληρώματος  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_2$ .

Τέλος η μέση ενέργεια δίνεται από την μέση τιμή του τελεστή της Χαμιλτονιανής,

$$\langle E \rangle = c_1 c_1^* e^{i\omega_{11}t} H_{11} + c_1 c_2^* e^{i\omega_{12}t} H_{12} + c_2 c_1^* e^{i\omega_{21}t} H_{21} + c_2 c_2^* e^{i\omega_{22}t} H_{22}, \text{ όπου } \omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar \text{ και}$$

$$H_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* \hat{H} \psi_j = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* E_j \psi_j = E_j \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* \psi_j = E_j \delta_{ij}. \text{ Δηλαδή η μέση ενέργεια}$$

$$\text{δίνεται από την έκφραση } \langle E \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2.$$

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

Συμπερασματικά μπορούμε να πούμε ότι έχουμε τις παρακάτω σχέσεις

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

$$\text{Μέση ορμή, } \langle p \rangle(t) = |c_1|^2 p_{11} + |c_2|^2 p_{22} + 2|c_1||c_2||p_{12}|\cos(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi}).$$

$$\text{Μέση ενέργεια, } \langle E \rangle(t) = P_1 E_1 + P_2 E_2 = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2.$$

$$\text{Νορμαλισμός, } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

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;

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

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,

$$\text{καθώς } p(x) dx = \psi^*(x) \psi(x) dx \text{ και}$$

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

Έτσι ουσιαστικά χρειαζόμαστε μία φάση, δηλαδή μπορούμε να θέσουμε  $\varphi_1 = 0$  και

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

Η κυματοσυνάρτηση γίνεται

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

Έχουμε τρεις αγνώστους  $|c_1|, |c_2|, \varphi_{12}$ , άρα χρειαζόμαστε τρεις σχέσεις με αυτούς τους αγνώστους.

Πάντα, μία σχέση αποτελεί η *συνθήκη κανονικοποίησης*, δηλαδή ότι  $P_1 + P_2 = 1 \Rightarrow |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$  (δυστυχώς μια σχέση με δύο λύσεις, πάντα όμως διαλέγουμε τις θετικές λύσεις).

Για να βρούμε τους τρεις αυτούς αγνώστους χρειαζόμαστε, δύο μέσες τιμές (π.χ. θέση και ορμή, θέση και ενέργεια και ορμή και ενέργεια).

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  $A_{11} = A_{11}^*$ , καταλαβαίνουμε ότι τα διαγώνια στοιχεία είναι πραγματικά.

Η σχέση  $A_{nm} = A_{mn}^*$ , αποδεικνύεται εύκολα καθώς τα  $A_{nm} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)(\hat{A}\psi_m(x))dx$  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  $A_{mn} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)(\hat{A}\psi_n(x))dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_n(x))^* \psi_m(x)dx\right)^* = A_{nm}^*.$

### Σημείωση

Αποδείξτε ότι η αβεβαιότητα στην ενέργεια δίνεται από τον τύπο,

$$\Delta E = \left[ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right]^{1/2} = \left[ P_1 P_2 (E_1 - E_2)^2 \right]^{1/2} = |c_1||c_2||E_1 - E_2|.$$

Δηλαδή σε ένα σύστημα δύο επιπέδων αν γνωρίζουμε την μέση ενέργεια μπορούμε να εκτιμήσουμε την αβεβαιότητα της ενέργειας και αντίστροφα.

**Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1δ (ΓΕΚ1δ)**

Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στις δύο πρώτες ενεργειακές του καταστάσεις σε δυναμικό απειροβάθου πηγαδιού εύρους  $a$ . (α) Προσδιορίστε πλήρως αυτή την κατάσταση αν δίνεται ότι έχει μέση θέση  $a/2$  και η μέση ορμή του είναι  $8\hbar/3a$ . (β) Να υπολογιστεί η μέση ενέργεια του συστήματος.

Υπόδειξη:

*Χρήσιμες τριγωνομετρικές σχέσεις*

$$2 \sin A \sin B = \cos(A - B) - \cos(A + B)$$

$$2 \sin A \cos B = \sin(A + B) + \sin(A - B)$$

$$2 \cos A \cos B = \cos(A + B) + \cos(A - B)$$

*Χρήσιμες τριγωνομετρικές σχέσεις, ειδικές περιπτώσεις των προηγούμενων*

$$2(\sin A)^2 = 1 - \cos(2A)$$

$$2 \sin A \cos A = \sin(2A)$$

$$2(\cos A)^2 = 1 + \cos(2A)$$

Αφού έχουμε πραγματικές ιδιοσυναρτήσεις, έχουμε από την προηγούμενη άσκηση

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

$$\langle p \rangle(t) = 2\hbar|c_1||c_2||p_{12}| \cos(\omega_{12}t + \varphi_{21} + \tilde{\varphi}).$$

Οι πληροφορίες που μας δίνει η άσκηση αναφέρονται σε μια χρονική στιγμή. Για ευκολία και προφανώς (γιατί;) χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε  $t=0$ . Έτσι οι παραπάνω εκφράσεις παίρνουν τις τιμές

$$\langle x \rangle(t=0) = |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + 2|c_1||c_2|x_{12} \cos(\varphi_{21}),$$

$$\langle p \rangle(t=0) = 2\hbar|c_1||c_2||\tilde{p}_{12}| \cos(\varphi_{21} + \tilde{\varphi}).$$

Χρειάζεται να υπολογίσουμε τα

$$x_{11} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1|^2 x, \quad x_{22} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_2|^2 x, \quad x_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1 x \psi_2, \quad \tilde{p}_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\psi_2.$$

Αφού  $\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \Theta(x) \Theta(a-x)$ ,  $\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \Theta(x) \Theta(a-x)$ , έχουμε

$$\begin{aligned} x_{11} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1|^2 x = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left( \frac{\pi x}{a} \right) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \left( \frac{2\pi x}{a} \right) \right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x dx - \frac{1}{a} \int_0^a x \cos \left( \frac{2\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \frac{a^2}{2} = \frac{a}{2} \end{aligned}$$

καθώς

$$\int_0^a x \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2\pi} \int_0^a x d\left(\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right) = \frac{a}{2\pi} \left( x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right) \Big|_0^a - \frac{a}{2\pi} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

$$= -\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \Big|_0^a = 0$$

ανάλογα βρίσκουμε ότι  $x_{22} = \frac{a}{2}$ , και

$$x_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} x dx \psi_1 x \psi_2 = \frac{2}{a} \int_{-\infty}^{\infty} x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} x \left( \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) dx = \frac{16a}{9\pi^2}$$

καθώς

$$\int_0^a x \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{n\pi} \int_0^a x d\left(\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) = \frac{a}{n\pi} \left( x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right) \Big|_0^a - \frac{a}{n\pi} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Big|_0^a = \begin{cases} 2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2, & n=1,3,5,\dots \\ 0, & n=2,4,6,\dots \end{cases}$$

Έτσι από το δεδομένο ότι

$$\langle x \rangle(t=0) = a/2 = |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + 2|c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21}) = |c_1|^2 a/2 + |c_2|^2 a/2 + 2|c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21})$$

$$= a/2(|c_1|^2 + |c_2|^2) + 2|c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21}) = a/2 + 2|c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21}) \Rightarrow |c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21}) = 0$$

$$\Rightarrow \cos(\varphi_{21}) = 0 \Rightarrow \varphi_{21} = \pm\pi/2.$$

Ακόμα έχουμε

$$p_{12} = \int_0^a \psi_1 \hat{p} \psi_2 dx = \int_0^a \psi_1 \left( -i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) dx = -i\hbar \int_0^a \psi_1 d\psi_2 = -\frac{2i\hbar}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) d \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) =$$

$$= -\frac{4\pi\hbar i}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = -\frac{2\pi\hbar i}{a^2} \left( \int_0^a \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx + \int_0^a \sin\left(-\frac{\pi x}{a}\right) dx \right) =$$

$$= -\frac{2\pi\hbar i}{a^2} \left( \frac{2a}{3\pi} - \frac{2a}{\pi} \right) = \frac{8\hbar i}{3a} = \frac{8\hbar}{3a} e^{\pi/2}.$$

καθώς

$$\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = -\frac{a}{n\pi} \int_0^a d\left(\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) = -\frac{a}{n\pi} \left( \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right) \Big|_0^a = \begin{cases} +\frac{2a}{n\pi}, & n=1,3,5,\dots \\ 0, & n=2,4,6,\dots \end{cases}$$

Δηλαδή, βρίσκουμε ότι,  $p_{12} = \frac{8\hbar}{3a} e^{\pi/2} \Rightarrow |p_{12}| = p_{12}, \tilde{\varphi} = \pi/2$  και αφού έχουμε ότι

$$\langle p \rangle(t=0) = 2\hbar|c_1||c_2||p_{12}|\cos(\varphi_{12} + \tilde{\varphi}) = 2\hbar|c_1||c_2|\left(\frac{8}{3a}\right)\cos(\varphi_{21} + \pi/2), \text{ και μέση ορμή}$$

$$\text{ισή με } 8\hbar/3a, \text{ έχουμε } 2\hbar|c_1||c_2|\left(-\frac{8}{3a}\right)\sin(\varphi_{21} = \pm\pi/2) = \frac{8\hbar}{3a} \Rightarrow \varphi_{21} = -\pi/2 \text{ και}$$

$$|c_1||c_2| = 1/2.$$

$$\text{Άρα } \sqrt{P_1(1-P_1)} = \frac{1}{2} \rightarrow P_1 = \frac{1}{2} \text{ και } P_2 = \frac{1}{2}$$

$$c_1 = |c_1| = |c_1| = 1/\sqrt{2},$$

$$\text{Δηλαδή } c_2 = |c_2| e^{i\varphi_{21}} = |c_2| e^{-i\pi/2} = -i/\sqrt{2}.$$

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

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \frac{-i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \left[ 1 - 2i \cos \frac{\pi x}{a} \right].$$

$$(\beta) \langle E \rangle = P_1 E_1 + P_2 E_2 = \frac{1}{2} E_0 1^2 + \frac{1}{2} E_0 2^2 = \frac{5}{2} E_0 = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{4ma^2}$$

### Επιπλέον Ασκήσεις,

#### Άσκηση ισοδύναμη της ΓΕΚ1δ

- Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στις δύο πρώτες ενεργειακές του καταστάσεις σε δυναμικό απειρόβαθου πηγαδιού που εκτείνεται στην περιοχή  $[-a/2, +a/2]$ . (α) Προσδιορίστε πλήρως αυτή την κατάσταση αν δίνεται ότι έχει μηδενική μέση θέση και η μέση ορμή του είναι  $8\hbar/3a$ . (β) Να υπολογιστεί η μέση ενέργεια του συστήματος.

#### Υπόδειξη

Το πρόβλημα είναι απολύτως ισοδύναμο με την άσκηση ΓΕΚ1δ καθώς η μέση θέση είναι πάλι στην μέση του πηγαδιού και η μέση ορμή είναι ίδια. Απλώς τώρα έχουμε συμμετρικό πηγάδι δυναμικού και πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τις ιδιοσυναρτήσεις για το πηγάδι αυτό.

Για τον φοιτητή, πολύ καλή εξάσκηση είναι να κάνει όλες τις αριθμητικές πράξεις (ολοκληρώματα) από την αρχή με τις κυματοσυναρτήσεις του συμμετρικού πηγαδιού και να επιβεβαιώσει τα αναμενόμενα αποτελέσματα.

- Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στις δύο πρώτες ενεργειακές του καταστάσεις σε δυναμικό απειρόβαθου πηγαδιού πάχους που  $a$ . Διερευνείστε κατά πόσο είναι δυνατό να βρούμε την μέση θέση και τη μέση ορμή, αν γνωρίζουμε τη μέση ενέργεια του συστήματος και την αβεβαιότητα ενέργειας.
- Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στις δύο πρώτες ενεργειακές του καταστάσεις σε δυναμικό απειρόβαθου πηγαδιού πάχους που  $a$ . Διερευνείστε κατά πόσο είναι δυνατό να προσδιορίσουμε πλήρως την καταστασή του, αν γνωρίζουμε (α) τη μέση θέση του σε δύο χρονικές στιγμές και (β) την μέση θέση και την μέση ορμή σε δυο διαφορετικές χρονικές στιγμές.



**Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1ε (ΓΕΚ1ε)**

Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στις δύο πρώτες ενεργειακές του καταστάσεις σε δυναμικό απειρόβαθου πηγαδιού εύρους  $a$ . (α) Προσδιορίστε πλήρως αυτή την κατάσταση αν δίνεται ότι έχει μέση θέση στο μέσο του πηγαδιού και η μέση ενεργειά του είναι  $5\hbar^2/16ma^2$ . (β) Να υπολογιστεί η μέση ορμή του συστήματος.

Ακολουθούμε την ίδια μεθοδολογία με την προηγούμενη άσκηση ΓΕΚ1δ.

Για την μέση θέση έχουμε βρει  $\langle x \rangle(t=0) = |c_1|^2 x_{11} + |c_2|^2 x_{22} + 2|c_1||c_2||x_{12}|\cos(\varphi_{21})$ ,

$$\text{όπου } x_{11} = x_{22} = \frac{a}{2} \text{ και } x_{12} = \frac{16a}{9\pi^2}.$$

Έτσι καθώς

$$\langle x \rangle(t=0) = a/2 \Rightarrow \cos(\varphi_{21}) = 0 \Rightarrow \varphi_{21} = \pm\pi/2.$$

Ακόμα έχουμε

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = |c_1|^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 1^2 + |c_2|^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 2^2 = (|c_1|^2 + 4|c_2|^2) \frac{\hbar^2}{8ma^2} = \frac{5\hbar^2}{16ma^2} \Rightarrow \\ &\Rightarrow |c_1|^2 + 4|c_2|^2 = 5/2, \end{aligned}$$

και καθώς  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ , βρίσκουμε ότι  $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$ .

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

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \pm \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \left[ 1 \pm 2i \cos \frac{\pi x}{a} \right].$$

(β) Για την μέση ορμή χρησιμοποιούμε την σχέση

$$\langle p \rangle(t=0) = 2\hbar |c_1||c_2||p_{12}|\cos(\varphi_{12} + \tilde{\varphi}),$$

$$\text{Όπου (βλέπε άσκηση ΓΕΚ1δ), } p_{12} = \frac{8\hbar}{3a} i = \frac{8\hbar}{3a} e^{i\pi/2} \Rightarrow \tilde{\varphi} = \pi/2.$$

Δηλαδή

$$\langle p \rangle(t=0) = 2\hbar |c_1||c_2||p_{12}|\cos(\varphi_{12} + \tilde{\varphi}) = 2\hbar \left( \frac{1}{2} \right) \left( \frac{8}{3a} \right) \cos(\pm\pi/2 + \pi/2) = \pm \frac{8\hbar}{3a}.$$

Παρατηρούμε ότι η μέση ενέργεια μπορεί να έχει δύο δυνατές τιμές σε συμφωνία με τις δυο δυνατές τιμές των συντελεστών  $c_1 = 1/\sqrt{2}, c_1 = \pm i/\sqrt{2}$ .

**Πρόβλημα Γενικές Έννοιες Κβαντομηχανικής 1στ (ΓΕΚ1στ)**

Για ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από τρεις καταστάσεις με ενέργεια  $E_1$ ,  $E_2$  και  $E_3$  και αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις  $\psi_1, \psi_2, \psi_3$ , να βρεθεί η έκφραση που δίνει την μέση τιμή οποιοδήποτε φυσικού μεγέθους. Πως εκτιμούμε την κυματοσυνάρτηση;

Χρησιμοποιούμε την γενική έκφραση που βρήκαμε στο πρόβλημα ΓΕΚ1β, για την εύρεση της μέσης τιμής οποιοδήποτε τελεστή, δηλαδή

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

Στο παρόν πρόβλημα στο διπλό άθροισμα οι δείκτες παίρνουν τιμές  $n=1,2,3$  και  $m=1,2,3$ .

Έτσι η μέση τιμή οποιουδήποτε τελεστή  $A$ , δίνεται από την έκφραση

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= c_1^* c_1 e^{i\omega_{11}t} A_{11} + c_1^* c_2 e^{i\omega_{12}t} A_{12} + c_1^* c_3 e^{i\omega_{13}t} A_{13} + \\ &\quad + c_2^* c_1 e^{i\omega_{21}t} A_{21} + c_2^* c_2 e^{i\omega_{22}t} A_{22} + c_2^* c_3 e^{i\omega_{23}t} A_{23} + \\ &\quad + c_3^* c_1 e^{i\omega_{31}t} A_{31} + c_3^* c_2 e^{i\omega_{32}t} A_{32} + c_3^* c_3 e^{i\omega_{33}t} A_{33} = \\ &= |c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + |c_3|^2 A_{33} + \\ &\quad + [c_1^* c_2 e^{i\omega_{12}t} A_{12} + c_2^* c_1 e^{i\omega_{21}t} A_{21}] + [c_1^* c_3 e^{i\omega_{13}t} A_{13} + c_3^* c_1 e^{i\omega_{31}t} A_{31}] + [c_2^* c_3 e^{i\omega_{23}t} A_{23} + c_3^* c_2 e^{i\omega_{32}t} A_{32}] = \\ &= |c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + |c_3|^2 A_{33} + \\ &\quad + [c_1 |c_2| e^{i\varphi_2} e^{i\omega_{12}t} |A_{12}| e^{i\varphi_A^{12}} + c_1 |c_2| e^{-i\varphi_2} e^{-i\omega_{12}t} |A_{12}| e^{-i\varphi_A^{12}}] + \\ &\quad + [c_1 |c_3| e^{i\varphi_3} e^{i\omega_{13}t} |A_{13}| e^{i\varphi_A^{13}} + c_1 |c_3| e^{-i\varphi_3} e^{-i\omega_{13}t} |A_{13}| e^{-i\varphi_A^{13}}] + \\ &\quad + [c_2 |c_3| e^{-i\varphi_2} e^{i\varphi_3} e^{i\omega_{23}t} |A_{23}| e^{i\varphi_A^{23}} + c_2 |c_3| e^{i\varphi_2} e^{-i\varphi_3} e^{-i\omega_{23}t} |A_{23}| e^{-i\varphi_A^{23}}] = \\ &= |c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + |c_3|^2 A_{33} + \\ &\quad + 2|c_1||c_2||A_{12}|\cos(\omega_{12}t + \varphi_2 + \varphi_A^{12}) + 2|c_1||c_3||A_{13}|\cos(\omega_{13}t + \varphi_3 + \varphi_A^{13}) + 2|c_2||c_3||A_{23}|\cos(\omega_{23}t + \varphi_3 - \varphi_2 + \varphi_A^{23}) \end{aligned}$$

Όπου ορίσαμε  $\omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar$ , (έτσι  $\omega_{11} = \omega_{22} = \omega_{33} = 0$ ). Ενώ χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα  $A_{ij} = (A_{ji})^*$ .

Ενώ τα  $c_1, c_2, c_3$  γράφονται ισοδύναμα  $c_1 = |c_1| e^{i\varphi_1} = |c_1|$ ,  $c_2 = |c_2| e^{i\varphi_2}$ ,  $c_3 = |c_3| e^{i\varphi_3}$  (θυμάστε γιατί θέτουμε  $\varphi_1 = 0$ ; βλέπε πρόβλημα ΓΕΚ1γ).

Γενικά έχουμε τις εξής παρατηρήσεις.

(α) Τα  $A_{ii}$  είναι πραγματικοί αριθμοί καθώς  $A_{ij} = (A_{ji})^* \Rightarrow A_{ii} = (A_{ii})^*$ . Δηλαδή η ποσότητα  $|c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + |c_3|^2 A_{33}$  είναι προφανώς ένας πραγματικός αριθμός.

(β) Οι φάσεις  $\varphi_A^{12}, \varphi_A^{13}, \varphi_A^{23}$  εκτιμούνται από τα στοιχεία  $A_{12} = |A_{12}| e^{i\varphi_A^{12}}$ ,  $A_{13} = |A_{13}| e^{i\varphi_A^{13}}$  και  $A_{23} = |A_{23}| e^{i\varphi_A^{23}}$ . Αν τα στοιχεία αυτά είναι πραγματικοί αριθμοί οι αντίστοιχες φάσεις προφανώς μηδενίζονται. Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα όταν έχω πραγματικές ιδοσυναρτήσεις της ενέργειας (π.χ. απειρόβαθο πηγάδι, τετραγωνικό πηγάδι και αρμονικό ταλαντωτή) για τους ‘πραγματικούς’ τελεστές, όπως την θέση και όλες τις δυνάμεις αυτής, για το τετράγωνο της ορμής και όλες της άρτιες δυνάμεις της ορμής. Έτσι έχουμε την απλοποιημένη μορφή

$$\langle A \rangle(t) = |c_1|^2 A_{11} + |c_2|^2 A_{22} + |c_3|^2 A_{33} + \\ + 2|c_1||c_2| A_{12} \cos(\omega_{12}t + \varphi_2) + 2|c_1||c_3| A_{13} \cos(\omega_{13}t + \varphi_3) + 2|c_2||c_3| A_{23} \cos(\omega_{23}t + \varphi_3 - \varphi_2)$$

Ενώ αν έχουμε την ορμή του σωματιδίου ( $\hat{A} = \hat{p}$ ),  $\varphi_A^j = \pm\pi/2$ , γιατί

$$p_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* (\hat{p} \psi_j) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i \left( \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i d\psi_j, \text{ όπου προφανώς το πρόσημο}$$

στη φάση του στοιχείου  $p_{ij}$ , εξαρτάται από το πρόσημο του ολοκληρώματος  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i d\psi_j$  (καθώς  $\pm i = e^{\pm i\pi/2}$ ).

Γενικά στο σύστημα με τρεις καταστάσεις έχουμε πέντε αγνώστους  $|c_1|, |c_2|, |c_3|, \varphi_2, \varphi_3$ , άρα χρειαζόμαστε πέντε σχέσεις με αυτούς τους αγνώστους. Φυσικά ισχύει πάντα ο νορμαλισμός, δηλαδή  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . Άρα χρειαζόμαστε τέσσερις σχέσεις. Μπορούμε να έχουμε σχέσεις με την μέση θέση, με την αβεβαιότητα της θέσης με την μέση ορμή και με την αβεβαιότητα της ορμής. Μπορούμε να έχουμε κάποια από τα παραπάνω και σχέσεις από την μέση ενέργεια και την αβεβαιότητα της ενέργειας. Όμως πρέπει να παρατηρήσουμε ότι οι σχέσεις που έχουν την ενέργεια και την αβεβαιότητα της ενέργειας δεν έχουν καθόλου πληροφορίες για την φάση του συστήματος (το σύστημα είναι κλειστό και η ενέργεια διατηρείται, δηλαδή δεν έχει καμία χρονοεξάρτηση).