Εισαγωγή: Κλασσική ⇒ Κβαντική ①

Κλασσική Μηχανική

- Σύστημα
- Στατικές ιδιότητες (π.χ. μάζα) δέν μεταβάλλονται μέ τόν χρόνο.
- αλλαγή κατάστασης → "δυναμικές παραμέτρους"
  $x(t)$, $p(t)$, $E(t)$ ...
- Αρχική κατάσταση γνωστή → x_0, p_0, E_0
- Έχουμε εξωτερικές επιδράσεις (δυνάμεις)
- Δυνάμεις μεταβάλλουν τήν κατάσταση, λόγω μεταβολής δυναμικών παραμέτρων μέ τόν χρόνο.
- Εξίσωση κίνησης μάς λέει πώς
- Λύση τής εξ. κίνησης → κατάσταση $t>0$.

Παράδειγμα (1-d)

m - στατική ιδιότητα

$x(t)$, $p(t)$, $E(t)$ → $T+V=\frac{1}{2}mv^2+V(x)$

$v(t)=\frac{dx}{dt}$ → $mv(t)$

αρχικά $x(0)$, $v(0)$ ή $p(0)$

$F=ma=m\frac{d^2x}{dt^2}$ εξίσωση κίνησης → μεταβολή x(

F - γνωστή → $a(t)$ → $v(t)$, $x(t)$ μέ $x(0)$, v

πολλά σωμάτια → ίδια φιλοσοφί

Κβαντομηχανική - απαραίτητη γιά τήν ερμη
τεία φαινομένων σέ ατομικά συστήματα
αλλά καί στερεά μέ ατομική δομή (στατιστι

Η θέση δέν ορίζεται μέ τόν χρόνο ~~$x(t)$~~ →
όπως η ορμή, ενέργεια, στροφορμή κ.τ.λ.

Μόνο μέ τήν πιθανότητα $P(x)$ νά είναι
στή θέση x

Εισάγουμε τήν έννοια τής κυματοσυνάρτη

$$\psi(x,t) \Longrightarrow P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$$ στατιστική περιγραφ.

σύστημα

Η κβαντομηχανική δέν υπακούει τίς βασικ
αρχές (κλασσικής μηχ.) αλλά μόνο κατά
"μέσο όρο"

α) δέν έχουμε εντοπισμένα σωμάτια → $|\psi(x$

β) Κάθε μεταβολή έχει ένα αίτιο.

γ) Γνώση κατάστασης σέ $t=0$ ⟹ κατάσταση t

δ) Συνεχή εξέλιξη.

ε) Αρχή τής διατήρησης τής ενέργειας.

Εδώ έχουμε στατιστική περιγραφή ενός
<u>μόνο</u> σώματος. Ρίψη ζαριών αλλά
εδώ έχουμε καί φαινόμενα <u>συμβολής</u>
από ενδιάμεσες ρίψεις

Πειράματα συμβολής + διάθλασης ηλεκτ

Εξίσωση Schrodinger

Κύμα $\longleftrightarrow$ σωματίδιο

$\vec{k}, \omega$ $\qquad\qquad$ $\vec{p}, E$ $\quad (E=\frac{p^2}{2m}$

$k = 2\pi/\lambda$ $\qquad$ $E=\hbar\omega$ (Einstein)

$p = \frac{h}{\lambda} \equiv \hbar k$ (de Broglie)

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longleftrightarrow E = \frac{p^2}{2m}$$

Ειδική περίπτωση

$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ – μιγαδική συνάρτηση

$\leftarrow$ δεν παριστά φυσική ποσότητα

$|\psi(\vec{r},t)|^2$ – πραγματική

$\leftarrow$ πυκνότητα πιθανότητας

Ποιά εξίσωση ικανοποιεί η $\psi(\vec{r},t)$

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \left(\hat{H} - \frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\psi(\vec{r},t) \Rightarrow ($$

Χρειαζόμαστε τούς τελεστές $\hat{H}$,

Ελεύθερο σωματίδιο

$$\psi(\vec{r},t) \sim e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$$\left.\begin{array}{l} E=\hbar\omega \\ p=\hbar k \end{array}\right\} E=\frac{p^2}{2m} \Rightarrow \hbar\omega=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\left(\hat{H}-\frac{p^2}{2m}\right)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}=0$$

$$\vec{p}=-i\hbar\vec{\nabla} \Longrightarrow \hat{H}\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{H}\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$ 1ης τάξης ως πρός t $\psi(\vec{r},0)\Rightarrow\psi(\vec{r},t)$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$$ μέ δυναμικό

$\hat{H}$ - ανεξάρτητη t

$$\psi(\vec{r},t)=X(\vec{r})T(t)$$ - Στάσιμη κατάσταση

$$\frac{1}{X(\vec{r})}\hat{H}X(\vec{r})=\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d T(t)}{dt}\equiv E$$ - σταθερά

ή $$i\hbar\frac{d}{dt}T(t)=ET(t) \Rightarrow T(t)\sim e^{-iEt/\hbar}$$

$$\hat{H}X(\vec{r})=\underset{\substack{\downarrow \\ \text{ιδιοτιμή ενέργειας}}}{E}\,X(\vec{r})$$

$|\psi(\vec{r},t)|^2$ - ανεξάρ[τητο] από t

$$<\vec{r}>_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r},t)\, \vec{r}\, \psi(\vec{r},t)\, d^3r \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \vec{r}\, |\psi(\vec{r},t)|^2$$

$$<\vec{p}> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r},t)\, \hat{\vec{p}}\, \psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

Εύκολο διότι πρέπει

$$\hat{p}\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = \hbar k\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$\hbar\vec{k}$ - ιδιοτιμή τού $\hat{\vec{p}}$

μέ ιδιοδιάνυσμα

$$u_{\vec{k}} = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \text{ή} \quad \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} e^{ik\cdot\vec{r}} \equiv v$$

Έτσι $\boxed{\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}}$

Παρατήρηση

$$<u_{\vec{k}}|u_{\vec{k}'}> = \int_0^L\int_0^L\int_0^L d^3r \left(\frac{1}{L}\right)^3 e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} = 1\, \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$<v_{\vec{k}}|v_{\vec{k}'}> = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\, e^{i(k'-k)\cdot\vec{r}} = \delta(\vec{k}'-\vec{k}$$

$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ καί αν $\psi(\vec{r},t) \neq e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$

Απόδειξη ακολουθεί

Συμβολισμός Dirac

- Διευκολύνει τίς πράξεις
- Δυνατότητα γενικευμένης αναπαράστασ
- Περιέχει περισσότερες πληροφορίες από τήν αναπαράσταση στό χώρο [Ψ(

1. Συνάρτηση κατάστασης $| \;\rangle$ ket

π.χ. $|\psi\rangle$ ή $|a,b\rangle$

2. Παρατηρήσιμες ποσότητες $Q \longrightarrow \hat{Q}$

ερμιτιανό

δράση $\hat{Q}|a\rangle = |c\rangle$

$$[\hat{Q}_1, \hat{Q}_2] = \hat{Q}_1\hat{Q}_2 - \hat{Q}_2\hat{Q}_1 \neq 0$$ συνήθως

3. Ιδιοτιμές καί ιδιοσυναρτήσεις

$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$, $|n\rangle \equiv |u_n\rangle$

$\hat{A}$-ερμιτιανός τελεστής $\Rightarrow$ πλήρες σύ $|n\rangle$

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots = \sum_n c_n|n\rangle$$

$|c_n|^2$ - πιθανότητα γιά τό αποτέλεσμα μέτρησης τού $\hat{A}$ νά είναι α

4. Γιά τό εσωτερικό γινόμενο $\rightarrow$ bra$\equiv$

$\langle a|b\rangle$ $\langle a|$ bra τού ket $|a\rangle$

Ιδιότητες

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$$ π.χ $\int \psi_a^*(x)\psi_b(x)dx$

$$\langle a|a\rangle > 0$$ εκτός αν $|a\rangle = |0\rangle$

$$\langle ca|b\rangle = c^*\langle a|b\rangle \quad , \langle ca| \equiv c^*\langle a|$$

$$\langle a|cb\rangle = c\langle a|b\rangle$$

αν $\langle b|a\rangle = \delta_{ba} \Rightarrow$ $|a\rangle$ + $|b\rangle$ ορθοκανον

5. Τελεστές A^+ συζυγής τού A

στο ket $A|\phi\rangle \equiv |A\phi\rangle$ αντιστοιχεί

τό συζυγές $\langle A\phi| \equiv \langle \phi A^+| \equiv \langle\phi|A^+$

A-αυτοσυζυγής (ερμιτιανός) αν $A^+ =$

$$\langle \phi_1 A|\phi_2\rangle = \langle \phi_1|A\phi_2\rangle$$

A - εχει πραγματικές ιδιοτιμές
ορθογώνια ιδιοδιανύσματα.

6. $A|n\rangle = a_n|n\rangle \Rightarrow |n\rangle$ πλήρ σύνολ

Εστω

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \Rightarrow c_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle c_n = \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{1}\psi\rangle$$

ταυτοδιαίος τελ

7. Τελεστής προβολής

$$P_n = |n\rangle\langle n| \quad \text{χωρίς } \sum_n$$

$$P_n|\psi\rangle = |n\rangle\langle n|\psi\rangle = c_n|n\rangle$$

$$\sum_n P_n = \mathbb{1}$$

8. Μέση τιμή $\langle\psi|A|\psi\rangle$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \qquad A|n\rangle = a_n|n\rangle \qquad |\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$$

Αλλά

$$\langle\psi|B|\psi\rangle = ? \quad \text{όπου} \quad B|b_m\rangle = b_m|b_m\rangle$$

$$\text{ή } B|m\rangle = b_m|m\rangle$$

$$= \sum_{nn'} c_n^* c_{n'} \langle n|B|n'\rangle \qquad \mathbb{1} = \sum_{m'} |b_{m'}\rangle\langle b_{m'}|$$

$$= \sum_{nn'} \sum_{mm'} c_n^* c_{n'} \langle n|b_m\rangle \underbrace{\langle b_m|B|b_{m'}\rangle}_{b_m \delta_{mm'}} \langle b_{m'}|n'\rangle$$

$$= \sum_{nn'm} c_n^* c_{n'}\, b_m \langle n|b_m\rangle\langle b_m|n'\rangle$$

Πιό εύκολο εάν γνωρίζαμε και

$$|\psi\rangle = \sum_n d_n |b_n\rangle \quad \text{τα } d_n$$

9. Γενικευμένη σχέση αβεβαιότητα

Αν $[A,B] \neq 0$ δεν γίνεται ταυτόχρονη μέτρηση τῶν A καί B

διότι τά A, B ἔχουν διαφορετικές ιδιοκαταστάσεις

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση } A} |a_1\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση } B} |b_?$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση } B} |b_m\rangle \xrightarrow{\text{μέτρηση } A} |a_?$$

Αν όμως A καί B κοινά ιδιοδιανύσματα

$$|\psi\rangle \underset{\substack{\downarrow \\ a_1}}{\xrightarrow{\text{μετρηση } A}} |a_1\rangle \underset{\substack{\downarrow \\ b_1}}{\xrightarrow{\text{μετρηση } B}} |a_1\rangle$$

Αβεβαιότητα αν $[A,B] \neq 0$

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [A, B] \rangle \right|^2$$

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

Αν $[A,B] = 0$ κοινές ιδιοκαταστάσεις

Παράδειγμα x καί $p \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad \boxed{\Delta x \, \Delta p \geq \hbar/2}$$

$$xp - px = i\hbar$$