Αναπαράσταση μέ πίνακες

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$$

$|\phi_n\rangle$ - ιδιοδιανύσμα[τα]
ερμιτιανού τελε[στή]
(συνήθως κάποιας
πλήρες σύνολο

ϕ_n - γνωστά

c_n - άγνωστα

$$|\psi\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \qquad \langle\psi| \Leftrightarrow (c_1^* \; c_2^* \cdots$$

αναπαράσταση τής $|\psi\rangle$ ως διάνυσμα
στήν βάση $|\phi_n\rangle$

Η δράση ενός τελεστή A σέ μια
κατάσταση ψ είναι εύκολη εφόσον γν[ω-]
ρίζουμε τήν δράση σέ όλα τά διανύ[σμα-]
τα βάσης $|\phi_n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow$ - n - σειρά

Έτσι έχουμε τήν αναπαράσταση τού
τελεστή A στήν βάση $|\phi_n\rangle$ μέ πίνακ[α]

$$A \Leftrightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & & A_{NN} \end{pmatrix} \qquad A_{ij} = \langle\phi_i|$$

Γιατί είναι χρήσιμη αυτή η μορφή;

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x) \qquad c_n = \int dx\, \phi_n^*(x)\psi($$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \qquad c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle$$

Έστω ότι θέλουμε νά λύσουμε τό πρόβλημα ιδιοτιμών

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\sum_{n'} H c_{n'} |\phi_{n'}\rangle = E \sum_{n'} c_{n'} |\phi_{n'}\rangle$$

Παίρνουμε τήν προβολή στό $\langle \phi_n|$

$$\sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\langle \phi_n | H | \phi_{n'} \rangle}_{H_{nn'}} = E \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle}_{\delta_{nn'}} \qquad n=1,2$$

$$\sum_{n'} H_{nn'} c_{n'} = E c_n$$ ή

$$\sum_{n'} (H_{nn'} - E\delta_{nn'}) c_{n'} = 0 \qquad n = 1, 2, \dots N$$

Ισοδύναμο μέ

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad \text{ή} \quad \overline{\overline{H}}\, \vec{c} = E$$

Λύση ομογενούς συστήματος αν

$|H - E\mathbb{1}| = 0 \Rightarrow N$ ρίζες E_m, $m=1,$

μέ ιδιοδιανύσματα $\begin{pmatrix} C_{m1} \\ C_{m2} \\ C_{\vdots} \\ C_{mN} \end{pmatrix} = \vec{C}_m$

C_{m1} → προβολή του m ιδιοδιανύσματος στό ϕ_1

↙ m-ιδιοδιάνυσμα τού H

Αριθμητικά πιό εύκολο νά λύνουμε αλγεβρικές εξισώσεις

Ιδιαίτερα αν μπορούμε γιά λόγους Φυσικής η προσεγγιστικά νά περιορίσουμε τά στοιχεία της βάσης $|\phi_n\rangle$

Γενικότερα η δράση ενός τελεστή A στην $\psi(x)$ είναι εύκολη

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \equiv \sum_{n'} c'_{n'}|\phi_{n'}\rangle$$

Αρκεί νά βρώ τά c'_n μέ προβολή σά

$$c'_n = \langle \phi_n | A | \psi \rangle = \sum_m c_m \underbrace{\langle \phi_n | A | \phi_m \rangle}_{A_{nm}}$$

$$\boxed{c'_n = \sum_m A_{nm} c_m} \qquad \vec{c}\,' = \bar{\bar{A}}\,\vec{c}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi\rangle$$

$$+\langle\frac{\partial}{\partial t}\psi|A|\psi\rangle + \langle\psi|A|\frac{\partial}{\partial t}\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|[A,H]|\psi\rangle$$

$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H}$

Εν γένει $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

Αν $[A,H]=0$ τότε λέμε ότι ο A είναι σταθερά της κίνησης

H - είναι σταθερά της κίνησης

Π.χ. για $A = x$ $\quad H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|x|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[x,H]|\psi\rangle =$$

$\langle\dot{x}\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}$

$$= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[x,\frac{p^2}{2m}]|\psi\rangle = \frac{\langle\psi|p|\psi\rangle}{m}$$

$A = p$

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|p|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[p,H]|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[p,V$$

$$= -\langle\psi|\frac{\partial V(x)}{\partial x}|\psi\rangle \simeq -\frac{\partial V}{\partial x}\Big|_{x=x_0}$$

$\langle\dot{p}\rangle =$

$$[x,p^2] = p[x,p] + [x,p]p = 2i\hbar p$$

Κλασσικά $x(t)$, $p(t)$

εξισώσεις Νεύτωνα ΣΔΕ.

Hamilton

Κβαντομηχανική

$\psi(x,t)$ έχει όλη την πληροφορία για τη[ν]

χρονική εξέλιξη

$$x, p \longrightarrow \hat{x}, \hat{p}$$ ανεξάρτητα του χρόνου

$$x(t), p(t) \longrightarrow \langle\hat{x}\rangle \equiv \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$$

$$\langle\hat{p}\rangle \equiv \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$$

$$\text{Ενέργεια} \longrightarrow \hat{H}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

Αν $\hat{H}$ ανεξάρτητη του $t \Rightarrow$

ιδιοκαταστάσεις $\hat{H} \Rightarrow$ στάσιμες καταστ[άσεις]

$$H|\phi_n\rangle = \varepsilon_n|\phi_n\rangle$$

$$|\phi_n(x,0)\rangle \xrightarrow{t} |\phi_n(x,t)\rangle$$

$$|\phi_n(x,t)\rangle = |\phi_n(x,0)\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$$

$$\phi_n^*(x,t)\,\phi_n(x,t) = \phi_n(x,0)|\phi_n(x,0) = |\psi$$

ανεξάρτητο του χρόνου

Επίσης μέτρηση ενέργειας δίνει πάντ[α]

ε

Ένας γραμμικός συνδιασμός δέν (
είναι στάσιμη κατάσταση

Π.χ

$$|\psi\rangle_{t=0} = c_1 |\phi_1\rangle + c_2 |\phi_2\rangle$$

$$|\psi\rangle_t = c_1 e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} |\phi_1\rangle + c_2 e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar} |\phi_2\rangle$$

$$|\psi|^2 \equiv \quad = |c_1|^2 \underbrace{|\phi_1|^2}_{1} + |c_2|^2 |\phi_2|^2$$

$$+ \underbrace{c_1^* c_2 \phi_1^* \phi_2 e^{-i(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)t/\hbar} + c.c.}_{2 \mathrm{Re}\, c_1^* c_2 \phi_1^* \phi_2 e^{-i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t/\hbar}}$$

εξαρτάται από τόν χρόνο (εκτός άν $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$

Ας πάρουμε $\quad c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, ϕ_1, ϕ_2 - πραγματικά

Σέ $t=0$ $\quad \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2) \equiv u_+$

$$t_\pi = \frac{\hbar \pi}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} = \frac{\pi}{\omega_{21}} \qquad |\psi(x, t_\pi)|^2 = \frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2)^2$$

$$\psi(x, t_\pi) = e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 - \phi_2) \equiv u_-$$

Μέτρηση τής θέσης δίνει διαφορετική
κατανομή μέ τόν χρόνο.
Μετάβαση μεταξύ u_+ καί u_-
μέ περίοδο $T = \frac{\pi}{\omega_{21}}$

Πυκνότητα Ρεύματος

$$\rho(\vec{r},t) = e|\psi(\vec{r},t)|^2 \quad \leftarrow \quad e\,n(\vec{r},t)$$

κλασσικά

πυκνότητα φορτίου

πυκνότητα πιθανότητας

πυκνότητα ηλεκτρονίω[ν]

Διατήρηση φορτίου ⇒ εξίσωση συνέχεια[ς]

τοπική μεταβολή σέ όγκο δV = ροή φορτίου μέσω επιφάνειας δS

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t)$$

πυκνότητα ρεύματος

ή $$\int_{\delta V}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t)\,dV = -\int_{\delta V}(\vec{\nabla}\cdot\vec{J})\,dV$$

Gauss

ή $$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\int_{\delta V}\rho(\vec{r},t)\,dV}_{\text{φορτίο σέ όγκο } \delta V} = -\underbrace{\int_{\delta S}\vec{J}\cdot d\vec{S}}_{\text{ροή φορτίου μέσω } dS}$$

Κλασσικά

$$\vec{J} \sim n(\vec{r},t)\,e\,\vec{v}$$

$$n(\vec{r},t)\,e\,\frac{\vec{p}}{m}$$

Κβαντικά

$\vec{J} \rightarrow$ τελεστής ερμιτ[ια]ν[ός]

$\vec{J} \rightarrow$?

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = e\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = e\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi$$

πολλαπλασιάζουμε μέ ψ^*

$$i\hbar\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + \psi^* V(\vec{r})\psi$$

c. c.

$$-i\hbar\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* + \psi V(\vec{r})\psi^*$$

$V(\vec{r})$ - πραγματικό

Αφαιρούμε $\Rightarrow$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{ie\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right)$$

$$= \frac{ie\hbar}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}$$

$$\boxed{\vec{J} = -\frac{ie\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)} = \frac{e\hbar}{m}\mathrm{Im}\,\psi^*\nabla$$

τελεστής πυκνότητας ρεύματος είναι ερμιτιανός

απλή αντικατάσταση λάθος

$$e\frac{\vec{P}}{m}n(\vec{r}) \rightarrow \cancel{e\psi^*\frac{\vec{P}}{m}\psi}$$

δέν είναι ερμιτιανός

Πυκνότητα ρεύματος

1. Ελεύθερο σωματίδιο σέ 3-δ

$$\psi \sim \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\omega t} \qquad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\vec{J} = -\frac{ie\hbar}{2m}\left(2i\vec{k}\right)|\psi|^2 = e\frac{\hbar\vec{k}}{m}|\psi|^2$$

2. Περιοδικές οριακές συνθήκες

$$\psi \to \sqrt{\frac{1}{\Omega}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, e^{-i\omega t}$$

$\Omega \leftarrow$ όγκος

$$\vec{J} = e\frac{\hbar\vec{k}}{m}\frac{1}{\Omega}$$

3. Απειρο πηγάδι εύρους L

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}\, e^{-i\omega_n t} \qquad E_n = \hbar\omega_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

$\vec{J} = 0$ διότι $\sin\frac{n\pi x}{L} \to \frac{1}{2i}\left\{e^{\frac{in\pi x}{L}} - e^{-\frac{in\pi x}{L}}\right.$

στάσιμο κύμα → συνδιασμός δύο αντίθετα οδεύοντων κυμάτων

4. $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1 + \psi_2\right)$ σέ άπειρο πηγάδι

$\vec{J} \neq 0$ Μή στάσιμες καταστάσεις δίνουν ρεύμα.

Σε 1-διάσταση

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

α) Συνέχεια πιθανότητας $|\psi|^2$

$\Rightarrow$ συνέχεια ψ (όχι απειρισμ

β) Συνέχεια ρεύματος $\vec{J}(\vec{r})$

$\Rightarrow$ συνέχεια $\partial_x\psi$

Αν $m(\vec{r}) \Rightarrow$ συνέχεια $\frac{1}{m}\partial_x\psi$

Εκτός αν $V \to \delta(x)$

$$\partial_x\psi(x=0^+) - \partial_x\psi(x=0^-) = \frac{2m}{\hbar}\psi(0)$$

ολοκληρώνοντας εξ-Sch. $\int_{0^-}^{0^+} dx$

ασυνέχεια στην παράγωγο

$\psi(0) \neq 0$ και συνεχής

Σε 1-διάσταση

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

α) Συνέχεια πιθανότητας $|\psi|^2$

$\Rightarrow$ συνέχεια ψ (όχι απειρισμ

β) Συνέχεια ρεύματος $\vec{J}(\vec{r})$

$\Rightarrow$ συνέχεια $\partial_x\psi$

Αν $m(\vec{r}) \Rightarrow$ συνέχεια $\frac{1}{m}\partial_x\psi$

Εκτός αν $V \to \delta(x)$

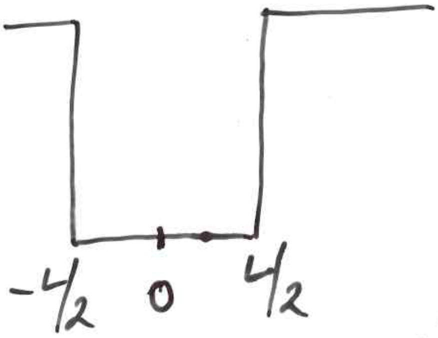
$$\partial_x\psi(x=0^+) - \partial_x\psi(x=0^-) = \frac{2m}{\hbar}\psi(0)$$

ολοκληρώνοντας εξ.-Sch. $\int_{0^-}^{0^+} dx$

ασυνέχεια στην παράγωγο

$\psi(0) \neq 0$ και συνεχής

Διπολική ροπή



$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\frac{n\pi}{L}\left(x-\frac{L}{2}\right)$$

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\, n^2$$

$$\vec{d} = e\overset{\text{τελεστής}}{\vec{r}} \quad \Rightarrow \quad d = ex \text{ - 1-διάστατα}$$

$\langle d \rangle$ - μέση τιμή

$\langle n|d|n\rangle = 0$ λόγω συμμετρία

$$\langle n|d|n\rangle = e\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \underbrace{u_n^*(x)\, x\, u_n(x)}_{\text{περιττή}} = 0$$

$\langle \psi|d|\psi\rangle \neq 0$ αν ψ - ούτε $\begin{cases}\text{άρτια} \\ \text{περιττή}\end{cases}$

Εφόσον $\langle d\rangle = 0$ πώς αλληλεπιδρά
μέ εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο $H' = -\vec{d}\cdot$

Τό ηλεκτρικό πεδίο μπορεί νά επά
διπολική ροπή $\vec{d}_{επ} \sim \vec{E}$