Συμπληρωμα Θεωριας Κεφαλαιου 4

2. Απόδειξη των σχέσεων αβεβαιότητας

α) Θεωρώντας εύλογο ότι το εσωτερικό γινόμενο δυο κυματοσυναρτήσεων −όπως ορίστηκε στη σελ. 168 του Κεφ. 3− έχει παρόμοιες ιδιότητες με το σύνηθες εσωτερικό γινόμενο $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}$ δύο διανυσμάτων, τότε είναι λογικό να υποθέσουμε ότι θα ισχύει και για τα κβαντομηχανικά *διανύσματα* ψ και ϕ μια ανισότητα ανάλογη με την

$$|\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}| = |AB\cos\theta| \leqq A \cdot B,$$

η οποία ισχύει για τα κοινά διανύσματα. Υποθέτουμε δηλαδή ότι θα ισχύει και η

$$\|\psi\| \cdot \|\phi\| \geqq \big|(\psi, \phi)\big| \tag{1}$$

που είναι γνωστή ως *ανισότητα του Schwartz* και διατυπώνεται ως εξής:

Το γινόμενο των μέτρων(*) *δύο κβαντικών διανυσμάτων είναι πάντα μεγαλύτερο ή ίσο από την απόλυτη τιμή του εσωτερικού τους γινομένου.*

Με αφετηρία τη βασική ανισότητα $(\psi, \psi) \geqq 0$ −που ισχύει για κάθε εσωτερικό γινόμενο άξιο του ονόματός του− αποδείξτε την ανισότητα του Schwartz.

β) Με αφετηρία μόνο τη μεταθετική σχέση $[x, p] = i\hbar$ και κάνοντας χρήση της ανισότητας του Schwartz αποδείξτε τώρα την *ανισότητα του Heisenberg*

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqq \frac{\hbar}{2}.$$

Υποθέστε για λόγους απλότητας ότι είναι $\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$, οπότε θα είναι

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle = (\psi, x^2\psi) = \big(\psi, x(x\psi)\big) = (x\psi, x\psi) = \|x\psi\|^2$$

και επίσης $(\Delta p)^2 = \|p\psi\|^2$, οπότε η σύνδεση με την ανισότητα του Schwartz είναι άμεση.

γ) Η προηγούμενη απόδειξη μπορεί εύκολα να επεκταθεί και στην περίπτωση δυο τυχόντων μη μετατιθέμενων φυσικών μεγεθών A και B, για τα οποία η σχέση αβεβαιότητας παίρνει τη γενικότερη μορφή

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqq \frac{1}{2}\big|\big\langle [A, B]\big\rangle\big|, \tag{2}$$

που μας λέει ότι: *Το γινόμενο των αβεβαιοτήτων δυο ασυμβίβαστων φυσικών μεγεθών είναι πάντα μεγαλύτερο ή ίσο από το ήμισυ της απόλυτης μέσης τιμής του*

(*) Υπενθυμίζουμε ότι $\|\psi\| = (\psi, \psi)^{1/2}$, όπως και στα κοινά διανύσματα όπου είναι επίσης $A = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A})^{1/2}$.

μεταθέτη τους. Υποθέστε όπως πριν ότι $\langle A\rangle = \langle B\rangle = 0$, οπότε θα είναι και εδώ $\Delta A = \|A\psi\|$, $\Delta B = \|B\psi\|$ και η εφαρμογή της ανισότητας του Schwartz για το πρώτο μέλος της (2) είναι άμεση. Θα χρειαστείτε όμως επίσης και την ανισότητα

$$\big|\langle A, B\rangle\big| \geqq \frac{1}{2}\big|\big\langle [A,B]\big\rangle\big|,$$

η οποία προκύπτει αμέσως από το γεγονός ότι ο τελεστής AB *δεν είναι ερμιτιανός* (γιατί;) και η μέση του τιμή θα είναι μιγαδικός εν γένει αριθμός, του οποίου το πραγματικό και το φανταστικό μέρος διαχωρίζονται με βάση την ταυτότητα

$$AB \equiv \frac{AB+BA}{2} + \frac{AB-BA}{2} = \frac{AB+BA}{2} + i\,\frac{[A,B]}{2i},$$

αρκεί να δείξετε πρώτα ότι οι τελεστές $(AB+BA)/2$ και $[A,B]/2i$ είναι *ερμιτιανοί* και άρα έχουν πραγματική μέση τιμή.

Υπόδειξη: Για το τελευταίο βήμα θα σας χρειαστεί το *Συμπλήρωμα θεωρίας* (Πρόβλημα Β.13) του προηγούμενου κεφαλαίου.

δ) Για την απόδειξη της αρχής αβεβαιότητας χρόνου-ενέργειας χρειαζόμαστε πρώτα έναν *αυστηρό ορισμό* του χαρακτηριστικού χρόνου εξέλιξης τ, και ένας τέτοιος ορισμός είναι ο ακόλουθος

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{\big|d\langle A\rangle/dt\big|}, \tag{3}$$

ο οποίος ορίζει τον χαρακτηριστικό χρόνο εξέλιξης για ένα φυσικό μέγεθος A ως *εκείνον τον χρόνο που χρειάζεται να περιμένουμε για να δούμε τη μέση του τιμή να έχει μετακινηθεί κατά μια τυπική απόκλιση*, οπότε η μετακίνηση είναι σίγουρα παρατηρήσιμη άρα το ίδιο και η χρονική εξέλιξη του συστήματος.

Για την απόδειξη της (3) χρειαζόμαστε λοιπόν, πρώτα απ' όλα, το νόμο της χρονικής εξέλιξης του (τυχόντος) μεγέθους A. Με αφετηρία τον ορισμό

$$\langle A\rangle_t = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\big(A\psi(\boldsymbol{r},t)\big)\,dV$$

και χρήση της εξίσωσης Schrödinger, δείξτε λοιπόν ότι θα είναι

$$i\hbar\,\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \big\langle [A,H]\big\rangle, \tag{4}$$

που μας λέει ότι: *ο ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής ενός φυσικού μεγέθους είναι ανάλογος με τη μέση τιμή του μεταθέτη του με τη χαμιλτονιανή του συστήματος*. Χρησιμοποιώντας την (4) τον ορισμό (3) και το αποτέλεσμα του προηγούμενου ερωτήματος, δείξτε ότι

$$\tau_A \cdot \Delta E \geqq \hbar/2$$

και θα έχετε έτσι όχι μόνο την απόδειξη της αρχής αβεβαιότητας χρόνου-ενέργειας αλλά και τον ακριβή ορισμό του περιεχομένου της.

Λύση

α) Θα αποδείξουμε την ανισότητα του Schwartz στην ειδικότερη περίπτωση που οι κυματοσυναρτήσεις ψ και ϕ είναι πραγματικές και θα αφήσουμε τον αναγνώστη να κάνει μόνος του τη σχετική επέκταση.

Για να εμφανίσουμε το επιθυμητό εσωτερικό γινόμενο (ψ, ϕ), εφαρμόζουμε τη βασική ανισότητα $(\psi, \psi) \geqq 0$ για $\psi \to \psi + \lambda\phi$, όπου λ τυχών πραγματικός αριθμός, και παίρνουμε

$$(\psi + \lambda\phi, \psi + \lambda\phi) = (\psi, \psi) + \lambda(\psi, \phi) + \lambda(\phi, \psi) + \lambda^2(\phi, \phi) \geqq 0$$

και δεδομένου ότι $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)$, για πραγματικές κυματοσυναρτήσεις, η προηγούμενη ανισότητα γράφεται επίσης ως

$$(\phi, \phi)\lambda^2 + 2(\psi, \phi)\lambda + (\psi, \psi) \geqq 0$$

ή, ακόμα, ως

$$\alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma \geqq 0,$$

όπου

$$\alpha = (\phi, \phi), \qquad \beta = 2(\psi, \phi), \qquad \gamma = (\psi, \psi).$$

Όμως για να είναι ένα τριώνυμο της πραγματικής μεταβλητής λ θετικό για κάθε λ θα πρέπει να είναι $\alpha \geqq 0$ $-$το οποίο ισχύει εδώ, αφού $\alpha = (\phi, \phi) \geqq 0-$ και η διακρίνουσά του $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$ να είναι αρνητική, οπότε θα έχει συζυγείς μιγαδικές ρίζες. Δεδομένου λοιπόν ότι εδώ η ανισότητα $\alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma \geqq 0$ σίγουρα ισχύει, οι συντελεστές α, β, γ του τριωνύμου υποχρεούνται να ικανοποιούν την ανισότητα

$$\beta^2 - 4\alpha\gamma \leqq 0,$$

η οποία για α, β, γ όπως παραπάνω, γράφεται ως

$$4(\psi, \phi)^2 - 4(\phi, \phi)(\psi, \psi) \leqq 0 \quad \Rightarrow \quad \big|(\psi, \phi)\big| \leqq (\psi, \psi)^{1/2}(\phi, \phi)^{1/2} = \|\psi\| \cdot \|\phi\|,$$

που είναι ακριβώς η ανισότητα του Schwartz.

β) Δεδομένου ότι για $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ είναι

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle = (\psi, x^2\psi) = (\psi, xx\psi) = (x\psi, x\psi) = \|x\psi\|^2$$

και παρόμοια $(\Delta p)^2 = \|p\psi\|^2$, θα έχουμε

$$\Delta x = \|x\psi\|, \qquad \Delta p = \|p\psi\|$$

και επομένως (με εφαρμογή της ανισότητας του Schwartz)

$$\Delta x \cdot \Delta p = \|x\psi\| \cdot \|p\psi\| \geqq \big|(x\psi, p\psi)\big|. \tag{5}$$

Θα είναι όμως

$$(x\psi, p\psi) = (\psi, xp\psi) = \langle xp \rangle \tag{6}$$

και αν χρησιμοποιήσουμε την προφανή ταυτότητα

$$xp \equiv \frac{xp+px}{2} + \frac{xp-px}{2} = \frac{xp+px}{2} + \frac{[x,p]}{2} = \frac{xp+px}{2} + \frac{i\hbar}{2}$$

και λάβουμε επίσης υπ' όψιν ότι ο τελεστής $(xp+px)$ είναι ερμιτιανός$^{(*)}$ –και άρα θα έχει *πραγματική μέση τιμή*– τότε θα είναι

$$\langle xp \rangle = \left\langle \frac{xp+px}{2} \right\rangle + i\,\frac{\hbar}{2} = \text{πραγματικός αριθμός} + i\,\frac{\hbar}{2}$$

και επομένως

$$\big|\langle xp \rangle\big|^2 = (\text{πραγμ. αριθμός})^2 + \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\Rightarrow \quad \big|\langle xp \rangle\big| \geqq \frac{\hbar}{2}. \tag{7}$$

Από τις (5), (6) και (7) προκύπτει αμέσως ότι

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqq \frac{\hbar}{2}$$

που είναι, βεβαίως, η περίφημη *ανισότητα του Heisenberg*.

γ) Όπως πριν, για $\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0$, θα είναι

$$\Delta A = \|A\psi\|, \qquad \Delta B = \|B\psi\|,$$

οπότε η εφαρμογή ης ανισότητας του Schwartz θα δώσει

$$\Delta A \cdot \Delta B = \|A\psi\| \cdot \|B\psi\| \geqq \big|(A\psi, B\psi)\big|. \tag{8}$$

Θα είναι όμως όπως και πριν

$$(A\psi, B\psi) = (\psi, AB\psi) = \langle AB \rangle \tag{9}$$

και επειδή ο τελεστής AB δεν είναι ερμιτιανός $-(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA \neq AB-$ η μέση του τιμή θα έχει πραγματικό και φανταστικό μέρος, που μπορούν να διαχωριστούν με βάση την ταυτότητα

$$AB = \frac{AB+BA}{2} + \frac{AB-BA}{2},$$

αν παρατηρήσουμε ότι ο πρώτος όρος είναι ερμιτιανός –αφού $(AB+BA)^\dagger = BA + AB = AB + BA-$ ενώ για τον δεύτερο όρο ισχύει ότι

$$(AB-BA)^\dagger = BA - AB = -(AB-BA)$$

και επομένως αν θέσουμε

$$AB - BA \equiv [A,B] = iC$$

(*) διότι: $(xp+px)^\dagger = (xp)^\dagger + (px)^\dagger = p^\dagger x^\dagger + x^\dagger p^\dagger = px + xp = xp + px =$ ο αρχικός τελεστής.

ο τελεστής C θα είναι αναγκαστικά ερμιτιανός. Θα είναι λοιπόν

$$\langle AB\rangle = \left\langle \frac{AB+BA}{2}\right\rangle + i\left\langle \frac{C}{2}\right\rangle = \alpha + i\beta,$$

όπου οι μέσες τιμές

$$\alpha = \left\langle \frac{AB+BA}{2}\right\rangle, \qquad \beta = \left\langle \frac{C}{2}\right\rangle$$

είναι πραγματικοί αριθμοί, αφού οι σχετικοί τελεστές είναι ερμιτιανοί. Θα ισχύουν επομένως οι ανισότητες

$$\big|\langle AB\rangle\big| = \sqrt{\alpha^2+\beta^2} \quad \begin{cases} \geqq |\alpha| \\ \geqq |\beta| = \big|\langle C\rangle\big|/2 = \big|\big\langle [A,B]\big\rangle\big|/2 \end{cases}$$

και αν επιλέξουμε τη δεύτερη, η (8) και η (9) θα δώσουν τελικά

$$\Delta A\cdot\Delta B \geqq \frac{1}{2}\,\big|\big\langle [A,B]\big\rangle\big|,$$

που είναι ακριβώς η *γενικευμένη ανισότητα του Heisenberg*.

δ) Θα αποδείξουμε πρώτα τον νόμο της χρονικής εξέλιξης των μέσων τιμών

$$i\hbar\,\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \big\langle [A,H]\big\rangle. \tag{10}$$

Απόδειξη: Ξεκινάμε από την έκφραση της μέσης τιμής

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)A\psi(\boldsymbol{r},t)\,dV$$

και παραγωγίζοντας τα δύο μέλη ως προς t παίρνουμε

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\,A\psi\,dV + \int \psi^* A\,\frac{\partial\psi}{\partial t}\,dV. \tag{11}$$

Για να απαλείψουμε τώρα τις χρονικές παραγώγους των ψ και ψ^* χρησιμοποιούμε την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

και παίρνουμε

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

οπότε η (11) θα γράφεται ως

$$
\begin{aligned}
\frac{d\langle A\rangle}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar}\int (H\psi)^* A\psi\, dV + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* A(H\psi)\, dV \\
\Rightarrow \quad i\hbar\,\frac{d\langle A\rangle}{dt} &= \int \psi^*(AH\psi)\, dV - \int (H\psi)^* A\psi\, dV \\
&= (\psi, AH\psi) - (H\psi, A\psi) \\
&= (\psi, AH\psi) - (\psi, HA\psi) \\
&= \big(\psi, (AH - HA)\psi\big) = \big(\psi, [A,H]\psi\big) \\
&= \big\langle [A,H] \big\rangle \qquad\qquad \text{ό.έ.δ.}
\end{aligned}
$$

Εφαρμόζοντας τώρα τη γενικευμένη ανισότητα του Heisenberg για τα μεγέθη A και H παίρνουμε

$$
\Delta A \cdot \Delta H \geqq \frac{1}{2}\left|\big\langle [A,H] \big\rangle\right| \tag{12}
$$

και αν αντικαταστήσουμε το δεύτερο μέλος της (12) με το ίσον του από την (10) θα έχουμε

$$
\begin{aligned}
\Delta A \cdot \Delta H &\geqq \frac{1}{2}\left| i\hbar\,\frac{d\langle A\rangle}{dt}\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle A\rangle}{dt}\right| \\
\Rightarrow \quad \frac{\Delta A}{|d\langle A\rangle/dt|}\cdot \Delta H &\geqq \frac{\hbar}{2},
\end{aligned}
$$

που είναι ακριβώς η σχέση αβεβαιότητας χρόνου-ενέργειας, αν επικαλεστούμε τον ορισμό του χαρακτηριστικού χρόνου εξέλιξης

$$
\tau_A = \frac{\Delta A}{|d\langle A\rangle/dt|}
$$

και, βεβαίως, ότι $\Delta H = \Delta E$.