Συνεχές φάσμα - Συνάρτηση δ (Dirac).

Αυτοσυζυγής τελεστής $\hat{A}$ $\Rightarrow$ (α_i, ψ_i)

↱ ψ_i ιδιοσυναρτήσεις

↳ διακριτές ιδιοτιμές (πραγματικές)

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}$$

$\{\psi_i\}$ ορθοκανονική βάση $\Rightarrow$

Κάθε $\quad \psi = \sum_i c_i \psi_i \quad$ με $\quad c_i = \int \psi_i^* \psi \, dx \; (= \psi_i \circ \psi)$

και $\quad |c_i|^2 = P(\alpha_i)$

Δεν έχουν όλοι οι αυτοσυζυγείς τελεστές διακριτό φάσμα (π.χ. η ορμή).

- Έστω: $\quad \hat{\Omega} \quad$ με $\{\omega, \psi_\omega\}$ ιδιοσυναρτήσεις

$\omega \in I$, συνεχές φάσμα (I διάστημα των πραγματικών αριθμών)

Προφανώς: $\quad \psi_\omega \circ \psi_{\omega'} = 0 \quad$ όταν $\omega \neq \omega'$.

Ισχύει ότι: $\{\psi_\omega\}$ ορθο-"κανονική" βάση (?)

$$\boxed{\psi = \int_I c(\omega) \psi_\omega \, d\omega}$$

$\forall \omega_0 \in I$: $\quad c(\omega_0) = \psi_{\omega_0} \circ \psi = \int \psi_{\omega_0}^*(x) \psi(x) \, dx \quad \Rightarrow$

$$c(\omega_0) = \int \psi_{\omega_0}^*(x) \left\{ \int_I c(\omega) \psi_\omega(x) \, d\omega \right\} dx$$

$$= \int_I c(\omega) \Big[\underbrace{\int \psi_{\omega_0}^*(x) \psi_\omega(x) \, dx}_{= \psi_{\omega_0} \circ \psi_\omega} \Big] d\omega$$

Το $\psi_{\omega_0} \circ \psi_\omega$ είναι $\neq 0$ μόνο όταν $\omega = \omega_0$, επομένως εάν για $\omega = \omega_0$ είχε πεπερασμένη τιμή το αποτέλεσμα της (η $c(\omega)$ είναι συνεχής και πεπερασμένη)

ολοκλήρωσης στο ω θα είναι μηδέν ($\neq c(\omega_0)$).

{Το συνεχές φάσμα μπορούμε να το χειριστούμε με τρόπο "ανάλογο" που διακριτού με την εισαγωγή της συνάρτησης δ:}

$$\psi_{\omega_0} \cdot \psi_\omega = \delta(\omega - \omega_0)$$

όπου:

$$\delta(\omega-\omega_0) = \begin{cases} 0 & \text{όταν } \omega \neq \omega_0 \\ \infty & \text{όταν } \omega = \omega_0 \quad (*) \end{cases}$$

και $$\int_I c(\omega)\,\delta(\omega-\omega_0)\,d\omega = c(\omega_0)$$

$\forall$ συνάρτηση συνεχή στο I (I ανοιχτό διάστημα).

Προφανώς $$\int_{I' \subset I} c(\omega)\,\delta(\omega-\omega_0)\,d\omega = \begin{cases} 0 & \text{εάν } \omega_0 \notin I', \\ c(\omega_0) & \text{εάν } \omega_0 \in I'. \end{cases}$$

$*$ π.χ. για τις ιδιοσυναρτήσεις της ορμής

$$f_p(x) = N e^{ipx/\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_p^*(x)\, f_p(x)\, dx = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad \text{είναι άπειρο}$$

Αναπαραστάσεις της συνάρτησης δ.

Η συμπεριφορά και οι ιδιότητες της συνάρτησης δ γίνονται εύκολα κατανοητές εάν θεωρήσουμε την συνάρτηση δ ως το όριο μιας οικογένειας συναρτήσεων:

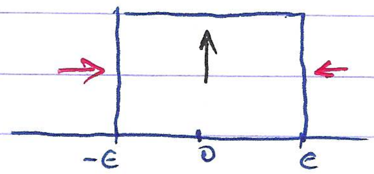
$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \to 0} g(x;\epsilon)$$

εάν:

$$\lim_{\epsilon \to 0} g(x;\epsilon) = \begin{cases} 0, & \text{εάν } x \neq 0, \\ \infty, & \text{εάν } x = 0, \end{cases}$$

και $\int_{-\infty}^{\infty} g(x;\epsilon) = 1 \ , \ \forall \epsilon.$

Παράδειγμα.



$$g(x;\epsilon) = \begin{cases} 0, & |x| > \epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon}, & |x| < \epsilon \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, g(x;\epsilon)\, dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(x) \frac{1}{2\epsilon}\, dx = f(\xi_\epsilon) \quad \text{(Θεώρημα μέσης τιμής)}$$

$$-\epsilon < \xi_\epsilon < \epsilon$$

Επομένως: $\lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x;\epsilon)\, dx = \lim_{\epsilon \to 0} f(\xi_\epsilon) = f(0).$

Από οποιαδήποτε συνάρτηση $g(x)$ με $\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = 1$

μπορούμε να πάρουμε αναπαράσταση της συνάρτησης δ:

$$g(x;\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} g\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$$

π.χ.

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\epsilon} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{2\epsilon} e^{-\frac{|x|}{2\epsilon}}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\pi x} \sin\frac{x}{\epsilon} .$$

Ιδιότητες της συνάρτησης δ.

1. $\delta(x) = \delta(-x)$

2. $f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0)$

3. $\int \delta(a-x)\delta(\beta-x)\,dx = \delta(a-\beta)$

4. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$

5. $\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2|a|}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\}$

6. $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(\rho_i)|}\delta(x-\rho_i)$ εάν η f έχει απλές ρίζες $(f(\rho_i)=0,\ f'(\rho_i)\neq 0)$.

7. $$\delta(x) = \frac{d}{dx}\Theta(x)$$

όπου $\Theta(x)$ η συνάρτηση βήματος: $\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x<0, \\ \frac{1}{2}, & x=0, \\ 1, & x>0 . \end{cases}$

Οι 1,2,3,4 αποδεικνύονται ολοκληρώνοντας αριστερό και δεξιό μέλος με τυχαία (συνεχή) συνάρτηση $g(x)$.

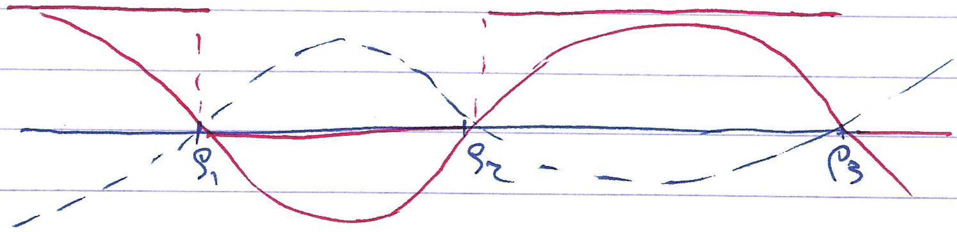
7. $$\Theta(x-x_0) = \int_{-\infty}^{x} \delta(y-x_0) \Rightarrow$$

$$\frac{d\Theta(x-x_0)}{dx} = \delta(x-x_0)$$

(Αιτιολόγηση και όχι αυστηρή απόδειξη).

5, 6. Έστω $f(x)$ ότι έχει 3 απλές ρίζες $\rho_1 < \rho_2 < \rho_3$

π.χ.



$$\Theta(f(x)) = 1 - \Theta(x-\rho_1) + \Theta(x-\rho_2) - \Theta(x-\rho_3) \Rightarrow$$

$$f'(x)\,\delta(f(x)) = -\delta(x-\rho_1) + \delta(x-\rho_2) - \delta(x-\rho_3) \Rightarrow$$

$$\delta(f(x)) = -\frac{1}{f'(x)}\delta(x-\rho_1) + \frac{1}{f'(x)}\delta(x-\rho_2) - \frac{1}{f'(x)}\delta(x-\rho_3) \Rightarrow$$

$$\delta(f(x)) = -\frac{1}{f'(\rho_1)}\delta(x-\rho_1) + \frac{1}{f'(\rho_2)}\delta(x-\rho_2) - \frac{1}{f'(\rho_3)}\delta(x-\rho_3)$$

$$= \sum_i \frac{1}{|f'(\rho_i)|}\delta(x-\rho_i)$$

8. $$\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x)\frac{d}{dx} \qquad \left(f(x)\delta'(x) = -f'(x)\delta(x) \right)$$

Σειρά Fourier - Αναπαράσταση της συνάρτησης δ σε σειρά.

Στο διάστημα $(-L, L)$ είναι γνωστό το ανάπτυγμα σε σειρά Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{-\infty}^{\infty} f_n \, e^{\frac{in\pi}{L}x}$$

με:

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2L}} \int_{-L}^{L} f(x') \, e^{-\frac{in\pi}{L}x'} \, dx'$$

$\Rightarrow$

$$f(x) = \frac{1}{2L} \sum_{-\infty}^{\infty} \int_{-L}^{L} f(x') \, e^{\frac{in\pi}{L}(x-x')} \, dx' =$$

$$= \int_{-L}^{L} f(x') \boxed{\underbrace{\left\{ \frac{1}{2L} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{in\pi}{L}(x-x')} \right\}}_{\delta(x-x')}} dx'$$

(Σχέση πληρότητας των $\frac{1}{\sqrt{2L}} e^{\frac{in\pi}{L}x}$).

Μετασχηματισμός Fourier - Ολοκληρωτική αναπαράσταση της συνάρτησης δ.

Για συναρτήσεις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες σε όλη την ευθεία έχουμε τον μετασχηματισμό Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \tilde{f}(k) \, dk$$

ο οποίος αντιστρέφεται ως:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) \, dx$$

Επομένως:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\left[e^{ikx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'} f(x')\,dx'\right]$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\,dk}\,dx'$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\,dk}$$

Ιδιοσυναρτήσεις $\hat{x}$, $\hat{p}$.

(i). $\hat{x}\,\psi_{x_0}(x) = x_0\,\psi_{x_0}(x) \Rightarrow (x-x_0)\,\psi_{x_0}(x) = 0$

$\Rightarrow \psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$ (Συνάρτηση εντοπισμένη στο x_0).

Ορθοκανονικότητα:

$$\psi_{x_0}\cdot\psi_{x_1} = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\,\delta(x-x_1)\,dx = \delta(x_0-x_1).$$

(ii). $\hat{p} f_p(x) = p f_p(x) \Rightarrow f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{ipx/\hbar}$

$$f_p\cdot f_{p'} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-i(p-p')x/\hbar}\,dx = \delta(p-p').$$

Για τυχαία κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$

$$\psi_{x_0} \cdot \psi = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)\, \psi(x)\, dx = \psi(x_0)$$

Δηλαδή $\psi(x_0)$ "συνιστώσα" της ψ σε ανάπτυγμα ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις της θέσης

$|\psi(x_0)|^2$: πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο στο x_0.

$$f_p \cdot \psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x)\, dx = \tilde{\psi}(p)$$

Αντίστροφα:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\, \tilde{\psi}(p)\, dp$$

Τα πλάτη πιθανότητας για την θέση και την ορμή συνδέονται με μετασχηματισμό Fourier.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\, \psi^*(x)\, dx \right] \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx'/\hbar}\, \psi(x')\, dx'$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp\; e^{ip(x-x')/\hbar}\, \psi^*(x)\, \psi(x')\, dx\, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x')\, \psi^*(x)\, \psi(x')\, dx\, dx' = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx .$$

1. Να δειχθεί ότι:

$$\langle p\rangle = \int \psi^*(x)\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)\right)dx = \int \tilde{\psi}^*(p)\, p\, \tilde{\psi}(p)\, dp,$$

$$\langle x\rangle = \int \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = \int \tilde{\psi}^*(p)\, i\hbar \frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p)\, dp.$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-ipx/\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\, dp$$

$$\langle p\rangle = \int\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-ipx/\hbar}\,\tilde{\psi}^*(p)dp\right]\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{+ip'x/\hbar}\,\tilde{\psi}(p')dp'\right]dx$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\iiint \tilde{\psi}^*(p)\, e^{i(p'-p')x/\hbar}\, p'\,\tilde{\psi}(p')\, dx\, dp\, dp'$$

$$= \iint \tilde{\psi}^*(p)\, p'\,\tilde{\psi}(p')\,\delta(p-p')\, dp\, dp'$$

$$= \int \tilde{\psi}^*(p)\, p\,\tilde{\psi}(p)\, dp.$$

$$\langle x\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\int e^{-ipx/\hbar}\,\tilde{\psi}^*(p)dp\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\underbrace{\left(\int x\, e^{ip'x/\hbar}\,\tilde{\psi}(p')dp'\right)}\, dx$$

$$\parallel$$

$$\int\left(-i\hbar\frac{d}{dp'}\left(e^{ip'x/\hbar}\right)\tilde{\psi}(p')\right)dp'$$

$\parallel$ παραγοντική ολοκλήρωση

$$i\hbar\int e^{ip'x/\hbar}\frac{d}{dp'}\tilde{\psi}(p')\, dp'$$

$$\rightarrow\quad \langle x\rangle = \int \tilde{\psi}^*(p)\, i\hbar\frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p)\, dp.$$

2. Να ευρεθεί το ανάπτυγμα Fourier των ακόλουθων συναρτήσεων:

α). $\delta(x-x_0)$

β). $\cos(2\pi k_0 x)$

γ). $$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2L}, & |x-x_0|<L, \\ 0, & |x-x_0|>L. \end{cases}$$

δ). $$f(x) = \begin{cases} 1+\frac{x}{a}, & -a<x<0, \\ 1-\frac{x}{a}, & 0<x<a, \\ 0, & |x|>a. \end{cases}$$

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x)\,dx.$$

α). $$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \delta(x-x_0)\,dx = \underline{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}}$$

β). $$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(2\pi k_0 x) e^{-ikx}\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{2\pi i k_0 x} e^{-ikx} + e^{-2i\pi k_0 x} e^{-ikx}\right) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{i(2\pi k_0 - k)x} + e^{-i(2\pi k_0 + k)x} \right] dx \right.$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{2\pi}\left[\delta(k-2\pi k_0) + \delta(k+2\pi k_0)\right] = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\delta(k-2\pi k_0) + \delta(k+2k_0)\right)$$

γ). $$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{x_0-L}^{x_0+L} \frac{1}{2L} e^{-ikx} \, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2L} \left(\frac{i}{k} e^{-ikx} \Big|_{x_0-L}^{x_0+L} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2L} \frac{i}{k} \left(e^{-ik(x_0+L)} - e^{-ik(x_0-L)} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2L} \frac{i}{k} e^{-ikx_0} \underbrace{\left(e^{-ikL} - e^{ikL} \right)}_{-2i \sin kL}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \frac{\sin kL}{kL} \Rightarrow$$

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \frac{\sin kL}{kL}$$

$$kL \to 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{f}(k) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}$$

Δηλαδή ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης $\delta(x-x_0)$.

δ). $$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\int_{-a}^{0}\left(1+\frac{x}{a}\right)e^{-ikx}\,dx + \int_{0}^{a}\left(1-\frac{x}{a}\right)e^{-ikx}\,dx\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\int_{-a}^{a} e^{-ikx}\,dx + \int_{-a}^{0}\frac{x}{a}e^{-ikx}\,dx - \int_{0}^{a}\frac{x}{a}e^{-ikx}\,dx\right\}$$

$$\Big\| \; x \to -x$$

$$-\int_{0}^{a}\frac{x}{a}e^{ikx}\,dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\frac{i}{k}\left(e^{-ika} - e^{ika}\right) - \frac{2}{a}\int_{0}^{a} x\cos kx\,dx\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{-2i(\sin ka)\frac{i}{k} - \frac{2}{ak}\int_{0}^{a} x(\sin kx)'\,dx\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left\{\cancel{\frac{\sin ka}{k}} - \cancel{\frac{1}{ak}a\sin ka} + \frac{1}{ak}\int_{0}^{a}\sin k\right.$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}}(-1)\frac{1}{ak^2}(\cos ka - 1) \Rightarrow$$

$$\tilde{f}(k) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{\cos ka - 1}{ak^2}$$