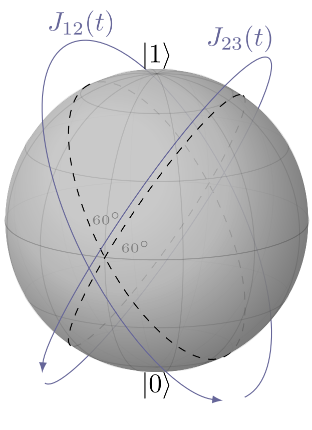
Κβαντική Μηχανική

Εισαγωγή στις Βασικές Αρχές



Γιώργος Παπαδημητρίου

Made with LaTeX and TikZ

Περιεχόμενα

Πρόλογος 1

1 Κυματομηχανική 3

1.1 Ορισμοί . . . 3
1.2 Κανόνες . . . 3
1.3 Σχόλια . . . 4
1.4 Πέρα από την Κυματομηχανική . . . 6

2 Διανυσματικοί Χώροι 7

2.1 Διανυσματικοί Χώροι - Τα βασικά . . . 7
2.2 Σταθμητός Διανυσματικός Χώρος . . . 9
2.3 Χώρος με Εσωτερικό Γινόμενο . . . 9
2.4 Διανυσματικός χώρος εσωτερικού γινομένου . . . 11
2.4.1 Ανάπτυξη σε ορθοκανονική βάση . . . 11
2.4.2 Αναστροφοσυζυγής διαδικασία . . . 12
2.4.3 Gram-Schmidt διαδικασία . . . 12
2.4.4 Ανισότητες: Schwarz και τριγωνική . . . 13
2.5 Χώρος Hilbert . . . 14
2.6 Δυϊκός Χώρος . . . 14
2.7 Κατανομές . . . 15
2.7.1 Παράγωγος κατανομής . . . 15
2.7.2 Σύγκλιση ακολουθίας κατανομών . . . 16

3 Θεωρία Τελεστών 19

3.1 Γραμμικοί Τελεστές . . . 19
3.1.1 Στοιχεία Πίνακα Τελεστών . . . 21
3.1.2 Ταυτοτικός Τελεστής . . . 22
3.1.3 Προβολικός Τελεστής . . . 22
3.1.4 Αντίστροφος Τελεστής . . . 23
3.1.5 Ερμιτιανός Τελεστής . . . 23
3.1.6 Μοναδιαίος Τελεστής . . . 24
3.2 Το Φάσμα του Τελεστή . . . 24
3.2.1 Το φασματικό θεώρημα . . . 26
3.2.2 Παράδειγμα . . . 27

4 Γενικές Αρχές Κβαντομηχανικής **31**
4.1 Οι Κανόνες της Κβαντικής Θεωρίας . . . 31
4.1.1 Προλεγόμενα . . . 31
4.1.2 Οι κανόνες . . . 32
4.1.3 Σχόλια . . . 32
4.2 Κβάντωση ενός Συστήματος . . . 33
4.2.1 Διατήρηση της Κλασσικής Δομής . . . 33
4.2.2 Ο ορισμός του $\mathcal{F}(\widehat{A})$ . . . 34

5 Διάφορα Τεχνικά Θέματα **37**
5.1 Κλασσική και Κβαντική Πιθανότητα . . . 37
5.1.1 Κλασσική Πιθανότητα . . . 37
5.1.2 Κβαντική Πιθανότητα . . . 38
5.2 Πίνακας Πυκνότητας . . . 38
5.2.1 Pure State . . . 38
5.2.2 Mixed State . . . 40
5.2.3 Χρονική Εξέλιξη Πίνακα Πυκνότητας . . . 44

6 Αλληλεπίδραση Ατόμου - Πεδίου **45**
6.1 Ημικλασσική Προσέγγιση . . . 45
6.1.1 Ταλαντώσεις Rabi . . . 48
6.1.2 Εξισώσεις Bloch . . . 49
6.1.3 Πίνακας Πυκνότητας . . . 50

7 Κβάντωση Ηλεκτρομαγνητικού Πεδίου **53**
7.1 Κβάντωση του Πεδίου . . . 53
7.2 Αναπαράσταση Fock . . . 55
7.3 Σύμφωνες Καταστάσεις . . . 56
7.3.1 Οι σύμφωνες καταστάσεις είναι ελάχιστης αβεβαιότητας . . . 56
7.3.2 Ορθογωνιότητα . . . 57
7.3.3 Οι σύμφωνες καταστάσεις είναι υπερπλήρεις . . . 58
7.3.4 Ο Τελεστής Μετατόπισης . . . 58

8 Αλληλεπίδραση Ατόμου - Πεδίου ΙΙ **61**
8.1 Χαμιλτονιανή και η διπολική προσέγγιση . . . 61

9 Προβλήματα **63**
9.1 Κβάντωση Ηλεκτρομαγνητικού Πεδίου . . . 63

Βιβλιογραφία **65**

Στις κόρες μου

Ανδριανή, Χριστίνα, Νικολία

είθε να ευτυχήσουν σ' αυτό και κάθε παράλληλο σύμπαν

Πρόλογος

Οι σημειώσεις αυτές δεν φιλοδοξούν να είναι μία πλήρης εισαγωγή στην Κβαντική Θεωρία και στις φιλοσοφικές της διαμάχες, οι οποίες ακόμα και τώρα συνεχίζονται. Είναι απλώς σημειώσεις που κρατούσα κατά καιρούς, σε περιβάλλον LaTeX μια και βρίσκω το περιβάλλον αυτό πολύ καλύτερο από τις χειρόγραφες σημειώσεις σε διάφορα τετράδια και φύλλα.

Επομένως μπορεί να διαβαστεί ως αυτό που είναι: σκόρπιες σημειώσεις περί κβαντικής θεωρίας και των συνεπειών της για την ερμηνεία του κόσμου.

1 Κυματομηχανική

1.1 Ορισμοί

Μία μικρή εισαγωγή στην Κυματομηχανική (wave mechanics), για κινήσεις σε μία διάσταση. Χρειαζόμαστε τους εξής ορισμούς:

Ένας (διαφορικός) **τελεστής** $\widehat{A}$ δρα σε μία συνάρτηση $u(x)$ και μας δίνει μία νέα συνάρτηση $v(x)$, δηλαδή ισχύει $\widehat{A}u(x) = v(x)$.

Ο **Ερμιτιανός συζυγής** $\widehat{A}^\dagger$ του τελεστή $\widehat{A}$ (ή αλλιώς συναφής) ορίζεται μέσω της ιδιότητας

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(\widehat{A}\phi)(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\widehat{A}^\dagger\psi)^*(x)\phi(x)dx \tag{1.1}$$

για οποιεσδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις $u(x), v(x)$.

Τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση είναι αυτή για την οποία ισχύει: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$.

- Ο αριθμός a είναι **ιδιοτιμή** (eigenvalue) του διαφορικού τελεστή $\widehat{A}$ εάν ισχύει

  $$\widehat{A}u(x) = au(x) \tag{1.2}$$

  Η συνάρτηση $u(x)$ ονομάζεται **ιδιοσυνάρτηση** (eigenfunction) του τελεστή $\widehat{A}$ σχετικά με την ιδιοτιμή a.

- Ένας **αυτοσυναφής** (self-adjoint) τελεστής, ή απλά **Ερμιτιανός** τελεστής, $\widehat{A}$ είναι αυτός για τον οποίο ισχύει:

  $$\int_{-\infty}^{\infty} (\widehat{A}\psi)^*(x)\phi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(\widehat{A}\phi)(x)dx \tag{1.3}$$

  για όλες τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις ψ και ϕ. [Το αστεράκι δηλώνει μιγαδικό συζυγή]

1.2 Κανόνες

Οι τέσσερις κανόνες της Κυματομηχανικής είναι οι παρακάτω:

***Κανόνας* 1.2.1.** *Η κβαντική κατάσταση ενός σημειακού σώματος που κινείται σε μία διάσταση περιγράφεται εξ' ολοκλήρου από μία μιγαδική συνάρτηση $\psi(x)$ [κυματοσυνάρτηση] η οποία μπορεί να κανονικοποιηθεί στη μονάδα.*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \tag{1.4}$$

Κάθε γραμμικός συνδυασμός κυματοσυναρτήσεων είναι επίσης μία κυματοσυνάρτηση, δηλαδή η έκφραση $c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$ είναι μία κυματοσυνάρτηση αν οι μιγαδικοί συντελεστές c_1, c_2 είναι τέτοιοι ώστε η έκφραση να είναι κανονικοποιημένη.

***Κανόνας* 1.2.2.** *Κάθε φυσική ποσότητα που μπορεί να μετρηθεί (observable) μπορεί να παρασταθεί με ένα γραμμικό διαφορικό τελεστή, ο οποίος είναι αυτοσυναφής.*

***Κανόνας* 1.2.3.** *(i) Οι μοναδικές τιμές που μπορεί να μετρηθούν για ένα μέγεθος A είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{A}$.*

(ii) Υποθέτοντας ότι δεν έχουμε εκφυλισμό (degeneracy) και ότι ο τελεστής $\hat{A}$ έχει ένα διακεκριμένο σύνολο ιδιοτιμών $a_1, a_2, \ldots$ με τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις $u_1, u_2, \ldots$ τότε, αν η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σωματίδιο είναι η $\psi(x)$, η πιθανότητα να μετρηθεί η ιδιοτιμή a_n του μεγέθους A είναι

$$\boxed{\mathrm{Prob}\,(A = a_n; \psi) = |\psi_n|^2} \tag{1.5}$$

όπου οι μιγαδικές τιμές ψ_n είναι οι συντελεστές στον γραμμικό συνδυασμό (ανάπτυξη) της κυματοσυνάρτησης ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις $u_1, u_2, \ldots$, δηλαδή

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n u_n(x) \tag{1.6}$$

***Κανόνας* 1.2.4.** *Η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης γίνεται με την εξίσωση του Shroedinger:*

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \widehat{H}\psi(x,t)} \tag{1.7}$$

Ο τελεστής $\widehat{H}$ (γνωστός ώς Χαμιλτονιανή) προέρχεται από την ενέργεια του συστήματος $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ στην οποία αντικαθιστούμε την θέση x και την ορμή p με τους αντίστοιχους τελεστές θέσης $\widehat{x}$ και ορμής $\widehat{p}$.

1.3 Σχόλια

1. Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις ενός Ερμιτιανού τελεστή έχουν τις παρακάτω ιδιότητες που τους καθιστούν μοναδικούς στην περιγραφή της κβαντικής μηχανικής:
   - Οι ιδιοτιμές Ερμιτιανού τελεστή είναι *πραγματικές* ($\in \mathbb{R}$), αφού είναι πιθανές τιμές μετρούμενων μεγεθών.
   - Οι ιδιοσυναρτήσεις Ερμιτιανού τελεστή αποτελούν ένα *πλήρες σύνολο*, δηλαδή κάθε συνάρτηση μπορεί να γραφεί με μοναδικό τρόπο όπως στην εξίσωση (1.6).
   - Οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις είναι *ορθογώνιες*, δηλαδή

     $$\int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn} \tag{1.8}$$

     όπου δ_{mn} είναι το δέλτα του Kronecker με τιμή 1 αν $m = n$ και 0 αλλιώς.

     Οι συντελεστές ψ_n στο ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης ψ μπορούν να βρεθούν από την ίδια την κυματοσυνάρτηση, ως

     $$\psi_n = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\psi(x) dx \tag{1.9}$$

Για δύο κυματοσυναρτήσεις ψ και ϕ ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\phi(x)dx = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n^* \phi_n \tag{1.10}$$

άρα και:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \tag{1.11}$$

Αυτό έχει μεγάλη σημασία για τον ερμηνεία των πιθανοτήτων. Αν η κυματοσυνάρτηση είναι κανονικοποιημένη, τότε θα ισχύει (όπως πρέπει να ισχύει)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{Prob}\,(A = a_n; \psi) = 1 \tag{1.12}$$

2. Ο κανόνας 1.2.3 υπονοεί ότι η αναμενόμενη μέση τιμή μετά από πολλές μετρήσεις για το μέγεθος A είναι:

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(\widehat{A}\psi)(x)dx \tag{1.13}$$

3. Οι παραπάνω τέσσερεις κανόνες είναι τουλάχιστον μη-πλήρεις. Ένα πρώτο σημείο αμφιβολίας είναι το πως κατασκευάζουμε τον τελεστή $\widehat{A}$ για το παρατηρήσιμο μέγεθος A. Ένας απλοϊκός κανόνας είναι ότι αντικαθιστούμε την θέση x και ορμή p στο μέγεθος A με τους αντίστοιχους τελεστές $\widehat{x}$ και $\widehat{p}$, δηλαδή: $A(x,p) \to \widehat{A} = A(\widehat{x}, \widehat{p})$, κάτι που κάναμε και στον τελεστή της Χαμιλτονιανής $\widehat{H}$.

   Επίσης πρέπει να αποφασίσουμε για τους ίδιους τους τελεστές $\widehat{x}, \widehat{p}$. Γενικά αυτό είναι το κρίσιμο πρόβλημα του πως να καταστρώσουμε ένα κβαντικό σύστημα από το κλασσικό ανάλογο. Για την απλοϊκή κυματομηχανική μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι τελεστές αυτοί είναι:

$$(\widehat{x}\psi)(x) = x\psi(x) \tag{1.14}$$

$$(\widehat{p}\psi)(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}(x) \tag{1.15}$$

   Οι τελεστές αυτοί ικανοποιούν την μεταθετική ιδιότητα:

$$[\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar \tag{1.16}$$

4. Οι τελεστές της στροφορμής παράγονται από τις κλασσικές εκφράσεις των συνιστωσών $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$ και $L_z = xp_y - yp_x$.

   Οι μεταθετικές σχέσεις είναι

$$\left[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y\right] = i\hbar \widehat{L}_z \tag{1.17}$$

   και με κυκλική εναλλαγή προκύπτουν και οι άλλες δύο σχέσεις.

   Αν ορίσουμε τον τελεστή της ολικής στροφορμής ως $\widehat{L}\cdot\widehat{L}$, όπου $\widehat{L}\cdot\widehat{L} = \widehat{L}_x\widehat{L}_x + \widehat{L}_y\widehat{L}_y + \widehat{L}_z\widehat{L}_z$, τότε εύκολα βρίσκουμε τις μεταθετικές σχέσεις

$$\left[\widehat{L}\cdot\widehat{L}, \widehat{L}_x\right] = \left[\widehat{L}\cdot\widehat{L}, \widehat{L}_y\right] = \left[\widehat{L}\cdot\widehat{L}, \widehat{L}_z\right] = 0 \tag{1.18}$$

   Επειδή ο τελεστής της ολικής στροφορμής μετατίθεται με τους τελεστές των συνιστωσών της στροφορμής μπορούμε να βρούμε ένα σύνολο κοινών ιδιοδιανυσμάτων της ολικής στροφορμής και μίας από τις συνιστώσες της. Για ψυχολογικούς και ιστορικούς λόγους επιλέγουμε την $\widehat{L}_z$. Οι ιδιοτιμές της $\widehat{L}\cdot\widehat{L}$ έχουν την μορφή $\ell(\ell+1)\hbar$ με ℓ ακέραιος με $\ell > 0$. Για κάθε τιμή του ℓ οι ιδιοτιμές της $\widehat{L}_z$ είναι $m\hbar$ με m ακέραιος με όλες τις τιμές από $-\ell$ έως ℓ. Οι αντίστοιχες κοινές ιδιοσυναρτήσεις u_{lm} είναι τα associated Legendre πολυώνυμα.

1.4 Πέρα από την Κυματομηχανική

Οι κανόνες της κυματομηχανικής είναι αναμφίβολα χρήσιμοι και ακριβείς στην πράξη, για μια σειρά από φυσικά συστήματα. Όμως υπάρχουν μερικά πολύ υποχθόνια ασαφή σημεία.

- Ποιό είναι ακριβώς το νόημα της πιθανότητας όπως πηγάζει από τον φορμαλισμό της κβαντικής θεωρίας; Γιατί η μέτρηση παίζει τόσο σκοτεινό ρόλο στην κβαντική θεώρηση; Πρόκειται για μία ακόμα φυσική διαδικασία ή πρόκειται για κάτι καθοριστικό και αποκλειστικά κβαντικό;
- Οι αναπαράσταση των τελεστών της θέσης και της ορμής καθώς και η μεταθετική σχέση τους μπορεί να προκύψει από βαθύτερες αρχές στην κβαντική θεωρία ή πρέπει να θεωρηθεί μία ad hoc κατασκευή;
- Ποιο είναι το βαθύτερο μήνυμα της σχέσης απροσδιοριστίας $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$;

Στην πραγματικότητα το παραπάνω οικοδόμημα μπορεί να εφαρμοστεί σε ένα περιορισμένο σύνολο φυσικών συστημάτων. Μπορούμε εύκολα να το γενικεύσουμε για τρεις ή n διαστάσεις, ή για πολλά σωματίδια που κινούνται σε τρεις διαστάσεις. Όμως υπάρχουν φαινόμενα στα οποία ο προηγούμενος φορμαλισμός αδυνατεί να εφαρμοστεί.

Μία τέτοια περίπτωση είναι η σχετικιστική αλληλεπίδραση σωματιδίων υψηλής ενέργειας, όπου, π.χ., δύο σωματίδια σκεδάζονται (συγκρούονται) και δημιουργούν ένα τρίτο σωματίδιο. Η αρχική κυματοσυνάρτηση είναι δύο μεταβλητών $\psi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ ενώ η τελική τριών μεταβλητών $\psi_f(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$. Είναι πολύ δύσκολο να φανταστούμε μία εξίσωση Schroedinger που να μετατρέπει ομαλά μία συνάρτηση δύο μεταβλητών σε μία τριών μεταβλητών.

Μία άλλη περίπτωση στην οποία ο φορμαλισμός της κυματομηχανικής είναι ανεπαρκής είναι η περίπτωση του spin του ηλεκτρονίου. Στην περίπτωση αυτή οι κατάσταση του ηλεκτρονίου περιγράφεται ως ένας πίνακας στήλης $\binom{a_1}{a_2}$, και τα παρατηρήσιμα μεγέθη ως πίνακες 2×2. Και είναι αδύνατο να κατασκευάσουμε γι' αυτούς διαφορικούς τελεστές που να δρουν σε κυματοσυναρτήσεις.

2 | Διανυσματικοί Χώροι

2.1 Διανυσματικοί Χώροι - Τα βασικά

***Ορισμός* 2.1.1.** *Γραμμικός ή Διανυσματικός χώρος* $\mathbb{V}$ *επί ενός σώματος* $\mathcal{F}$ *(*$\mathbb{R}$ *ή* $\mathbb{C}$*) είναι μία συλλογή αντικειμένων* $|1\rangle$, $|2\rangle$, ..., $|K\rangle$, ..., $|M\rangle$, ..., *που τα ονομάζουμε διανύσματα, για τα οποία υπάρχουν:*

1. Ένας συγκεκριμένος κανόνας σχηματισμού του αθροίσματος $|K\rangle + |M\rangle$.
2. Ένας συγκεκριμένος κανόνας σχηματισμού του γινομένου του διανύσματος με ένα βαθμωτό μέγεθος a, δηλαδή $a|K\rangle$.

   Οι παραπάνω πράξεις πρέπει να έχουν τα παρακάτω χαρακτηριστικά:

   - Το άθροισμα $|W\rangle = |K\rangle + |M\rangle$ πρέπει να είναι ένα διάνυσμα του χώρου $\mathbb{V}$. Τότε λέμε ότι ο χώρος είναι κλειστός ώς προς το άθροισμα.
   - Ο πολλαπλασιασμός με βαθμωτό είναι επιμεριστικός ως προς τα διανύσματα, δηλαδή ισχύει: $a(|K\rangle + |M\rangle) = a|K\rangle + a|M\rangle$
   - Ο πολλαπλασιασμός είναι επιμεριστικός ως προς τα βαθμωτά, δηλαδή ισχύει: $(a+b)|K\rangle = a|K\rangle + b|K\rangle$
   - Ο πολλαπλασιασμός είναι προσεταιριστικός, δηλαδή ισχύει: $a(b|K\rangle) = (ab)|K\rangle$
   - Η πρόσθεση είναι μεταθετική $|K\rangle + |M\rangle = |M\rangle + |K\rangle$
   - Η πρόσθεση είναι προσεταιριστική $|K\rangle + (|M\rangle + |W\rangle) = (|M\rangle + |K\rangle) + |W\rangle$
   - Υπάρχει ουδέτερο στοιχείο για την πρόσθεση, το $|0\rangle$, για το οποίο ισχύει $\forall\ |K\rangle \in \mathbb{V}$: $|0\rangle + |K\rangle = |K\rangle$
   - Υπάρχει το αντίθετο διάνυσμα $|-K\rangle$, $\forall\ |K\rangle \in \mathbb{V}$ έτσι ώστε $|K\rangle + |-K\rangle = |0\rangle$

Ο Διανυσματικός Χώρος λέγεται *πραγματικός* ($\mathbb{V}(\mathbb{R})$), αν τα βαθμωτά είναι πραγματικοί αριθμοί και *μιγαδικός* ($\mathbb{V}(\mathbb{C})$) αν είναι μιγαδικοί αριθμοί αντίστοιχα. Τα ίδια τα διανύσματα δεν είναι ούτε πραγματικά ούτε μιγαδικά.

Μερικές άμεσες συνέπειες των παραπάνω ορισμών είναι:

- Το ουδέτερο στοιχείο $|0\rangle$ είναι μοναδικό.
- Ισχύει $0|K\rangle = |0\rangle$ και $a|0\rangle = |0\rangle$
- Ισχύει $|-K\rangle = -|K\rangle$
- Το αντίθετο $|-K\rangle$ του $|K\rangle$ είναι μοναδικό.

Ένα παράδειγμα διανυσματικού χώρου στο σώμα των πραγματικών αριθμών είναι το σύνολο των διανυσμάτων (ως βέλη) $\vec{a}$, $\vec{b}$, ...στον χώρο ή στο επίπεδο. Γνωρίζουμε πως να σχηματίζουμε το άθροισμα με τον κανόνα του παραλληλογράμμου και ο πολλαπλασιασμός διανύσματος με αριθμό τεντώνει το διάνυσμα, μεγαλώνοντας ή μικραίνοντας το μήκος του. Αν τα βαθμωτά είναι μιγαδικοί αριθμοί όμως αυτή η ερμηνεία του πολλαπλασιασμού δεν έχει νόημα. Το ουδέτερο στοιχείο είναι το μηδενικό διάνυσμα $\vec{0}$.

Όμως αυτή η εικόνα εμπεριέχει δύο χαρακτηριστικά τα οποία δεν είναι απαραίτητα σε ένα διανυσματικό χώρο: την έννοια του *μήκους* (μέτρου) του διανύσματος και την έννοια της *διεύθυνσης* (ή κατεύθυνσης). Ο ορισμός του Δ.Χ. δεν απαιτεί αυτές τις ιδιότητες, αν και υπάρχουν χώροι στους οποίους μπορούμε να κατασκευάσουμε μέτρο και κατεύθυνση. Γι' αυτό και συμβολίζουμε τα διανύσματα ως $|K\rangle$ και όχι ως $\vec{K}$.

Επίσης ο συμβολισμός $|K\rangle$ διαβάζεται ket K και οφείλεται στον Dirac.

Ο επόμενος ορισμός έχει να κάνει με την γραμμική ανεξαρτησία και εξάρτηση.

***Ορισμός* 2.1.2.** *Ένα σύνολο n διανυσμάτων ονομάζεται γραμμικώς ανεξάρτητο όταν ένας γραμμικός συνδυασμός τους είναι μηδέν, δηλαδή $\sum_{i=1}^{n} a_i|i\rangle = |0\rangle$, μόνο αν όλα τα a_i είναι μηδέν. Ένα σύνολο διανυσμάτων που δεν είναι γραμμικά ανεξάρτητα είναι γραμμικά εξαρτημένα.*

Για παράδειγμα δύο μή-παράλληλα διανύσματα του επιπέδου είναι γραμμικώς ανεξάρτητα, ενώ τρία είναι γραμμικώς εξαρτημένα.

***Ορισμός* 2.1.3.** *Εάν υπάρχουν n το πολύ διανύσματα γραμμικώς ανεξάρτητα σε ένα χώρο $\mathbb{V}$, τότε ο αριθμός n ονομάζεται διάσταση του χώρου $\mathbb{V}$. Ο χώρος συμβολίζεται ως $\mathbb{V}^n(\mathbb{R})$ ή $\mathbb{V}^n(\mathbb{C})$.*

***Θεώρημα* 2.1.4.** *Κάθε διάννσμα $|V\rangle$ σε n-διάστατο χώρο μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός n γραμμικώς ανεξάρτητων διανυσμάτων του χώρου.*

***Ορισμός* 2.1.5.** *Σε n-διάστατο διανυσματικό χώρο, n γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα ονομάζονται βάση του χώρου.*

Επομένως, αν $|1\rangle$, $|2\rangle$, ..., $|n\rangle$ μία βάση, μπορούμε να γράφουμε:

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i|i\rangle \tag{2.1}$$

Οι αριθμοί v_i (πραγματικοί ή μιγαδικοί) ονομάζονται συνιστώσες του $|V\rangle$ στη συγκεκριμένη βάση. Αν $|V\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i|i\rangle$ και $|W\rangle = \sum_{i=1}^{n} w_i|i\rangle$, τότε ισχύει:

$$|V\rangle + |W\rangle = \sum_i (v_i + w_i)\,|i\rangle \tag{2.2}$$

δηλαδή για να προσθέσουμε δύο διανύσματα απλά προσθέτουμε τις συνιστώσες.

Επίσης ισχύει:

$$a|V\rangle = a\sum_i v_i|i\rangle = \sum_i a v_i|i\rangle \tag{2.3}$$

δηλαδή για να πολ/με απλά πολλαπλασιάζουμε τις συνιστώσες.

2.2 Σταθμητός Διανυσματικός Χώρος

***Ορισμός* 2.2.1.** *διανυσματικός χώρος ονομάζεται σταθμητός όταν είναι εφοδιασμένος με μία απεικόνιση*

$$|\ \ |: \mathbb{V} \to \mathbb{R}$$

που ονομάζεται στάθμη (μέτρο) και έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

$$1.\ |x| \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{V} \text{ και } |x| = 0 \Leftrightarrow x = 0 \tag{2.4}$$

$$2.\ |ax| = |a||x|, \quad \forall x \in \mathbb{V}, \forall a \in \mathbb{C} \tag{2.5}$$

$$3.\ |x+y| \leq |x| + |y|, \quad \forall x, y \in \mathbb{V} \tag{2.6}$$

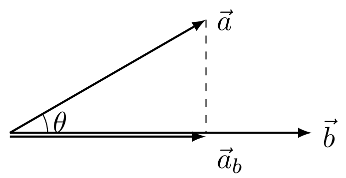
Εάν υπάρχει ορισμένο εσωτερικό γινόμενο στον χώρο τότε το μέτρο μπορεί να οριστεί με βάση το εσωτερικό γινόμενο, αλλά αυτό δεν είναι απαραίτητο.

2.3 Χώρος με Εσωτερικό Γινόμενο

Είμαστε εξοικειωμένοι με το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων (ως βέλη). Ξέρουμε ότι:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}||\vec{b}| \cos\theta \tag{2.7}$$

όπου $|\vec{a}|, |\vec{b}|$ τα μέτρα των διανυσμάτων και θ η γωνία μεταξύ τους.



Σχήμα 1. Διανύσματα και εσωτερικό γινόμενο
$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}_b||\vec{b}|$

Αν γνωρίζουμε το εσωτερικό γινόμενο τότε μπορούμε να ορίσουμε το μέτρο ενός διανύσματος $\vec{a}$, ως $|\vec{a}| = \sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}} = \sqrt{\vec{a}^2}$ και τη γωνία δύο διανυσμάτων ως $\cos\theta = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}||\vec{b}|}$. Όμως φαίνεται ότι χρειαζόμαστε μέτρα και γωνία ώστε να ορίσουμε το εσωτερικό γινόμενο. Κι όμως, ενώ η εικόνα του εσωτερικού γινομένου με μέτρα και γωνίες είναι πολύ χρήσιμη, δεν είναι απαραίτητη, αφού υπάρχει και άλλος τρόπος να ορίσουμε το εσωτερικό γινόμενο, ως γινόμενο των συντεταγμένων (συνιστωσών) των διανυσμάτων ως προς μία βάση.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \tag{2.8}$$

Έτσι ορισμένο το εσωτερικό γινόμενο επαληθεύει την (2.7). Επίσης εύκολα βρίσκουμε ότι έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- $\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{b} \cdot \vec{a}$, (**Συμμετρικότητα**)
- $\vec{a} \cdot \vec{a} \geq 0$, και είναι μηδέν μόνο όταν $\vec{a} = \vec{0}$
- $\vec{a} \cdot (\kappa\vec{b} + \lambda\vec{c}) = \kappa\vec{a} \cdot \vec{b} + \lambda\vec{a} \cdot \vec{c}$,
  (**γραμμικότητα**)

Με βάση τα παραπάνω ορίσουμε για τα διανύσματα $|K\rangle$, $|M\rangle$ το *εσωτερικό (ή βαθμωτό) γινόμενο* το οποίο θα συμβολίζουμε $\langle K|M\rangle$ που είναι αριθμός (εν γένει μιγαδικός), και έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- $\langle K|M\rangle = \langle M|K\rangle^*$, (**Αντισυμμετρικότητα**)
- $\langle K|K\rangle \geq 0$, και είναι μηδέν μόνο όταν $|K\rangle = |0\rangle$
- $\langle K|(a|M\rangle + b|W\rangle) \equiv \langle K|aM + bW\rangle = a\langle K|M\rangle + b\langle K|W\rangle$,
(**γραμμικότητα ως προς το ket**)

***Ορισμός* 2.3.1.** *Ένας διανυσματικός χώρος εφοδιασμένος με μία απεικόνιση*

$$\langle \ | \ \rangle : \mathbb{V} \times \mathbb{V} \to \mathbb{C}$$

(εσωτερικό γινόμενο με τις παραπάνω ιδιότητες) ονομάζεται ***χώρος εσωτερικού γινομένου*** *(inner product vector space).*

Μία βασική διαφορά του εσωτερικού γινομένου των $|K\rangle$, $|M\rangle$ διανυσμάτων σε σχέση με τα $\vec{a}, \vec{b}$ είναι ότι είναι ευαίσθητο στη σειρά του πολλαπλασιασμού αφού $\langle K|M\rangle \neq \langle M|K\rangle$. Συγκεκριμένα το $\langle M|K\rangle$ είναι το μιγαδικό συζυγές του $\langle K|M\rangle$. Αυτό ορίζεται έτσι ώστε $\langle K|K\rangle$ να είναι πραγματικός, ιδιότητα που είναι απολύτως επιθυμητή. Αυτή η αντισυμμετρικότητα οδηγεί και στην **αντιγραμμικότητα ως προς το bra** $\langle K|$.

$$\langle aK + bM|W\rangle = a^*\langle K|W\rangle + b^*\langle M|W\rangle \tag{2.9}$$

Να σημειωθεί ότι τα ονόματα bra για το $\langle K|$, ket για το $|M\rangle$ και bracket για το $\langle K|M\rangle$ οφείλονται στον Dirac.

***Ορισμός* 2.3.2.** *Αν το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων $|K\rangle$, $|M\rangle$ είναι μηδέν τα διανύσματα ονομάζονται ορθογώνια.*

***Ορισμός* 2.3.3.** *Το μέτρο ενός διανύσματος είναι $|K| = \sqrt{\langle K|K\rangle}$. Ένα διάνυσμα είναι κανονικοποιημένο (νορμαλισμένο) αν το μέτρο του είναι μονάδα, $|K| = 1$.*

Άρα ένας χώρος εσωτερικού γινομένου μπορεί να γίνει πάντα και σταθμητός χώρος. Στον χώρο εσωτερικού γινομένου μπορούμε να ορίσουμε και γωνία μεταξύ διανυσμάτων ορίζοντας το συνημίτονο

$$\text{συν}\,\theta = \frac{\langle V|W\rangle}{|V||W|}$$

αφού λόγω της ανισότητας Schwarz $\frac{\langle V|W\rangle}{|V||W|} \leq 1$.

***Ορισμός* 2.3.4.** *Μία βάση του χώρου που όλα τα διανύσματα είναι κανονικοποιημένα και ανά δύο ορθογώνια ονομάζεται ορθοκανονική.*

Αν $|i\rangle$, $|j\rangle$ είναι δύο διανύσματα μίας ορθοκανονικής βάσης τότε

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{2.10}$$

όπου δ_{ij} το δέλτα του Kronecker.

Αν υποθέσουμε ότι έχουμε μία ορθοκανονική βάση στον χώρο $\mathbb{V}$ και $|V\rangle, |W\rangle \in \mathbb{V}$ τότε

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \tag{2.11}$$

$$|W\rangle = \sum_j w_j |j\rangle \tag{2.12}$$

και το εσωτερικό γινόμενο μπορεί να γραφεί

$$\langle V|W\rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \langle i|j\rangle = \sum_i v_i^* w_i \tag{2.13}$$

Με βάση αυτό μπορούμε να δούμε ότι επαληθεύεται και η δεύτερη απαίτηση για το θετικό του $\langle V|V\rangle$.

$$\langle V|V\rangle = \sum_i v_i^2 \geq 0 \tag{2.14}$$

***Θεώρημα* 2.3.5** (Gram-Schmidt)**.** *Αν διαθέτουμε μία βάση σε ένα χώρο τότε μπορούμε με γραμμικούς μετασχηματισμούς να κατασκευάσουμε μία ορθοκανονική βάση.*

Αφού κάθε διάνυσμα $|V\rangle$ μπορεί να αναπαραστεί πλήρως από τις συνιστώσες του σε μία βάση, μπορούμε να το γράψουμε ως πίνακα στήλη:

$$|V\rangle \to \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \tag{2.15}$$

Και τότε το εσωτερικό γινόμενο των $|V\rangle$, $|W\rangle$ είναι το γινόμενο των πινάκων:

$$\langle V|W\rangle = [v_1^*, v_2^*, \ldots, v_n^*] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \tag{2.16}$$

Ισχύει επίσης το θεώρημα Bessel:

***Θεώρημα* 2.3.6** (Bessel)**.** *Αν $|1\rangle$, $|2\rangle$, ..., $|n\rangle$ ένα ορθοκανονικό σύνολο n-διάστατου χώρου, τότε ισχύει η ανισότητα του Bessel*

$$\sum_1^n |\langle i|\psi\rangle \leq |\psi|^2 \tag{2.17}$$

2.4 Διανυσματικός χώρος εσωτερικού γινομένου

2.4.1 Ανάπτυξη σε ορθοκανονική βάση

Για να βρούμε τους συντελεστές στο ανάπτυγμα ενός ket $|V\rangle$ ως προς μία ορθοκανονική βάση, μπορούμε να πολλαπλασιάσουμε το υποθετικό ανάπτυγμα με ένα διάνυσμα $|j\rangle$

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \tag{2.18}$$

$$\langle j|V\rangle = \sum_i v_i \langle j|i\rangle \Leftrightarrow \langle j|V\rangle = \sum_i v_i \delta_{ji} \Leftrightarrow \tag{2.19}$$

$$\langle j|V\rangle = v_j \tag{2.20}$$

και έτσι μπορούμε να γράφουμε τυπικά:

$$|V\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|V\rangle \tag{2.21}$$

Επίσης κάθε διάνυσμα στήλη μπορεί να γραφεί:

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = v_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \\ 0 \end{bmatrix} + v_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \cdots v_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.22}$$

2.4.2 Αναστροφοσυζυγής διαδικασία

Ξέρουμε πως να βρούμε τον adjoint (αναστροφοσυζυγή) $\langle V|$ του διανύσματος $|V\rangle$. Όμως πως βρίσκουμε τον adjoint του διανύσματος $a|V\rangle$;

Με βάση την αναπαράσταση των διανυσμάτων σε κάποια βάση βρίσκουμε:

$$a|V\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} av_1 \\ av_2 \\ \vdots \\ av_n \end{bmatrix} \rightarrow [a^* v_1^*, a^* v_2^*, \ldots, a^* v_n^*] \rightarrow \langle V|a^* \tag{2.23}$$

Το bra $\langle V|a^*$ γράφεται απλούστερα $\langle aV|$ ή

$$\langle aV| = \langle V|a^* \tag{2.24}$$

Έτσι μία παράσταση με ket

$$a|V\rangle = b|W\rangle + c|Z\rangle + \ldots \tag{2.25}$$

μπορεί να γραφεί:

$$a^*\langle V| = b^*\langle W| + c^*\langle Z| + \ldots \tag{2.26}$$

Οι παραπάνω παραστάσεις λέμε ότι είναι η μία αναστροφοσυζυγής (adjoint) της άλλης.

2.4.3 Gram-Schmidt διαδικασία

Το θεώρημα Gram-Schmidt μας λέει ότι μπορούμε να κατασκευάσουμε μία ορθοκανονική βάση δοθείσας μία βάσης του χώρου. Η διαδικασία είναι ως εξής (με bra και ket διανύσματα):

Έστω $|I\rangle$, $|II\rangle$, $|III\rangle$, ...μία απλή βάση.

1. Διαλέγουμε ένα διάνυσμα της βάσης, έστω το $|I\rangle$, και το διαιρούμε με το μέτρο του $|I| = \sqrt{\langle I|I\rangle}$ ώστε να έχει μέτρο μονάδα:
$$|I\rangle \to |1\rangle = \frac{|I\rangle}{|I|} \tag{2.27}$$
2. Αφαιρούμε από το επόμενο διάνυσμα $|II\rangle$ την προβολή του στο διάνυσμα $|1\rangle$, έτσι ώστε να μείνει μόνο το μέρος του ορθογώνιο στο $|1\rangle$.
$$|2'\rangle = |II\rangle - |1\rangle\langle 1|II\rangle \tag{2.28}$$
3. Διαιρούμε το $|2'\rangle$ με το μέτρο του |2'| ώστε να γίνει μοναδιαίο.
$$|2\rangle = \frac{|2'\rangle}{|2'|} \tag{2.29}$$
4. Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία...
$$|3'\rangle = |III\rangle - |1\rangle\langle 1|III\rangle - |2\rangle\langle 2|III\rangle \tag{2.30}$$
...

Τελικά θα έχουμε μία ορθοκανονική βάση $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, ...

2.4.4 Ανισότητες: Schwarz και τριγωνική

Σε κάθε διανυσματικό χώρο με εσωτερικό γινόμενο ισχύουν δύο πολύ σημαντικές ανισώσεις:

***Θεώρημα* 2.4.1** (Schwarz)**.**
$$|\langle V|W\rangle| \leq |V||W| \tag{2.31}$$
***Θεώρημα* 2.4.2** (Τριγωνική ανισότητα)**.**
$$|V + W| \leq |V| + |W| \tag{2.32}$$

Απόδειξη. **Schwarz.**

Έστω το διάνυσμα $|Z\rangle = |V\rangle - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2}|W\rangle$

Θα εκμεταλλευτούμε το γεγονός ότι $\langle Z|Z\rangle \geq 0$.
$$\begin{aligned}\langle Z|Z\rangle =& \langle V - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2}W|V - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2}W\rangle \\ =&\langle V|V\rangle - \frac{\langle W|V\rangle\langle V|W\rangle}{|W|^2} - \frac{\langle W|V\rangle^*\langle W|V\rangle}{|W|^2} + \frac{\langle W|V\rangle^*\langle W|V\rangle\langle W|W\rangle}{|W|^4} \\ =&\langle V|V\rangle - \frac{\langle W|V\rangle\langle V|W\rangle}{|W|^2} - \frac{\langle W|V\rangle^*\langle W|V\rangle}{|W|^2} + \frac{\langle W|V\rangle^*\langle W|V\rangle}{|W|^2} \\ =&\langle V|V\rangle - \frac{\langle W|V\rangle\langle V|W\rangle}{|W|^2}\end{aligned} \tag{2.33}$$
Όμως $\langle Z|Z\rangle \geq 0$, άρα
$$\begin{aligned}\langle V|V\rangle &\geq \frac{\langle W|V\rangle\langle V|W\rangle}{|W|^2} \\ |V|^2|W|^2 &\geq \langle W|V\rangle\langle W|V\rangle^* \\ |V|^2|W|^2 &\geq |\langle W|V\rangle|^2\end{aligned} \tag{2.34}$$
και από την τελευταία βγαίνει η ζητούμενη σχέση. ■

2.5 Χώρος Hilbert

Σε κάθε χώρο εσωτερικού γινομένου μπορούμε να ορίσουμε μία στάθμη και από την στάθμη να ορίσουμε μία μετρική, με την σχέση

$$d(x, y) = |x - y| \tag{2.35}$$

Με τη βοήθεια της μετρικής ο χώρος γίνεται τοπολογικός χώρος. Μέσω της μετρικής ορίζουμε τη σύγκλιση και την πληρότητα, έννοιες απαραίτητες στους απειροδιάστατους χώρους.

***Ορισμός* 2.5.1.** *Μία ακολουθία $\chi_1, \chi_2 \ldots$ ενός μετρικού χώρου συγκλίνει σε ένα σημείο χ του χώρου, όταν*

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists\, N(\epsilon) \text{ τέτοιο ώστε } d(\chi, \chi_n) = |\chi - \chi_n| < \epsilon \quad \forall\, n > N \tag{2.36}$$

***Ορισμός* 2.5.2.** *Μία ακολουθία $\chi_1, \chi_2 \ldots$ ενός μετρικού χώρου είναι ακολουθία Cauchy, όταν*

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists\, N(\epsilon) \text{ τέτοιο ώστε } d(\chi_m, \chi_n) < \epsilon \quad \forall\, n, m > N \tag{2.37}$$

Αν μία ακολουθία συγκλίνει τότε είναι ακολουθία Cauchy. Μπορεί όμως να συγκλίνει σε σημείο (διάνυσμα) εκτός του χώρου.

***Ορισμός* 2.5.3.** *Ένας μετρικός χώρος είναι πλήρης αν κάθε ακολουθία Cauchy συγκλίνει σε σημείο του χώρου.*

***Ορισμός* 2.5.4.** *Ένας πλήρης μετρικός διανυσματικός χώρος ονομάζεται χώρος Hilbert.*

***Ορισμός* 2.5.5.** *Ένας πλήρης σταθμητός διανυσματικός χώρος ονομάζεται χώρος Banach.*

Θα δεχθούμε ότι κάθε χώρος Hilbert περιέχει ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο, δηλαδή μία βάση από αριθμήσιμα, πεπερασμένα ή άπειρα, διανύσματα.

Κάθε n-διάστατος χώρος εσωτερικού γινομένου είναι χώρος Hilbert.

Παράδειγμα. Ο χώρος $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κατά Lebesque συναρτήσεων είναι χώρος Hilbert.

2.6 Δυϊκός Χώρος

Τα ket $|V\rangle$ διανύσματα ανήκουν στον χώρο $\mathbb{V}$, όμως προφανώς τα bra $\langle V|$ διανύσματα δεν ανήκουν στον ίδιο χώρο, αλλά σε κάποιον διανυσματικό χώρο που είναι ισόμορφος με αυτόν και λέγεται *δυϊκός χώρος* του $\mathbb{V}$.

Όπως είδαμε μπορούμε να αναπαραστήσουμε κάθε ket διάνυσμα $|V\rangle$ με ένα πίνακα στήλη. Για κάθε πίνακα στήλη μπορούμε να δημιουργήσουμε ένα πίνακα γραμμή, ο οποίος λέγεται ανάστροφος (transpose) του αρχικού. Αν ταυτόχρονα μετατρέψουμε κάθε στοιχείο στο μιγαδικό συζυγές του ο νέος πίνακας ονομάζεται συναφής (adjoint) ή συζυγής-ανάστροφος.

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \rightarrow [v_1^*, v_2^*, \ldots, v_n^*] \tag{2.38}$$

Με τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου όπως στην εξίσωση (2.16), βλέπουμε ότι μπορούμε να αντιστοιχήσουμε σε κάθε ket $|V\rangle$ ένα διάνυσμα bra $\langle V|$ που αντιστοιχεί στον συναφή πίνακα γραμμή.

$$|V\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \leftrightarrow [v_1^*, v_2^*, \dots v_n^*] \leftrightarrow \langle V| \tag{2.39}$$

2.7 Κατανομές

Τα διανύσματα bra $\langle V|$ μπορούν να θεωρηθούν και συναρτησιακά (functional), δηλαδή αντικείμενα που ορίζουν μία απεικόνιση από τον διανυσματικό χώρο στο σώμα $\mathbb{R}$ ή $\mathbb{C}$.

$$\langle V| : \langle V|W\rangle \in \mathbb{R} \tag{2.40}$$

***Ορισμός* 2.7.1.** *Ένα γραμμικό συναρτησιακό λέγεται συνεχές όταν*

$$\lim_{n\to\infty} \langle f|\varphi_n\rangle = 0 \tag{2.41}$$

για κάθε μηδενική ακολουθία φ_n δοκιμαστικών συναρτήσεων

***Ορισμός* 2.7.2.** *Το σύνολο των γραμμικών συνεχών συναρτησιακών είναι ο δυϊκός χώρος και τα στοιχεία του ονομάζονται* κατανομές ή γενικευμένες συναρτήσεις.

Ένα παράδειγμα είναι η **συνάρτηση του Heavyside** (συνάρτηση βήματος)

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 1 \end{cases} \tag{2.42}$$

η οποία ορίζει μία κατανομή με την σχέση

$$H(\varphi(x)) = \langle H|\varphi(x)\rangle = \int_{\mathbb{R}} H(x)\varphi(x)dx = \int_0^\infty \varphi(x)dx \tag{2.43}$$

Το ποιο γνωστό παράδειγμα κατανομής είναι η **συνάρτηση δέλτα του Dirac**, η οποία άτυπα είναι η συνάρτηση $\delta(x)$ με τιμή μηδέν παντού εκτός από το $x = 0$ στο οποίο απειρίζεται.

Τυπικά:

$$\delta(x-x_0)(\varphi(x)) = \langle \delta(x-x_0)|\varphi(x)\rangle = \varphi(x_0) \tag{2.44}$$

ή

$$\delta(x-x_0)(\varphi(x)) = \int_{\mathbb{R}} \delta(x-x_0)\varphi(x)dx \overset{\text{ορισ}}{=} \varphi(x_0) \tag{2.45}$$

2.7.1 Παράγωγος κατανομής

***Ορισμός* 2.7.3.** *Η παράγωγος μίας κατανομής ορίζεται από την σχέση*

$$\langle f'|\varphi\rangle = -\langle f|\varphi'\rangle \tag{2.46}$$

Ο ίδιος ορισμός ισχύει και για μερικές παραγώγους

$$\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} | \varphi \rangle = -\langle f | \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \rangle \tag{2.47}$$

Αν η κατανομή είναι μία ομαλή συνάρτηση ο προηγούμενος ορισμός βγαίνει εύκολα με τη μέθοδο ολοκλήρωσης κατά παράγοντες.

Η παράγωγος της συνάρτησης βήματος $H(x)$ είναι η δ συνάρτηση:

$$H'(x) = \delta(x) \tag{2.48}$$

Πράγματι αν $\varphi(x)$ μία δοκιμαστική συνάρτηση:

$$\langle H'(x) | \varphi(x) \rangle = \langle H(x) | \varphi'(x) \rangle = -\int_0^\infty \varphi'(x) dx = \varphi(0) \tag{2.49}$$

Επίσης

$$\langle \delta(x) | \varphi(x) \rangle = \varphi(0) \tag{2.50}$$

Άρα οι συναρτήσεις δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα στην τυχαία συνάρτηση.

Η παράγωγος της συνάρτησης δέλτα είναι:

$$\langle \delta'(x - x_0) | \varphi(x) \rangle = -\varphi'(x_0) \tag{2.51}$$

και γενικότερα

$$\langle \delta^{(n)}(x - x_0) | \varphi(x) \rangle = (-1)^n \varphi^{(n)}(x_0) \tag{2.52}$$

2.7.2 Σύγκλιση ακολουθίας κατανομών

***Ορισμός* 2.7.4.** *Μία ακολουθία κατανομών f_a λέμε ότι συγκλίνει στην κατανομή f όταν $a \to a_0$ όταν*

$$\lim_{a \to a_0} \langle f_a | \varphi \rangle = \langle f | \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \tag{2.53}$$

Το παρακάτω θεώρημα μας επιτρέπει να κατασκευάσουμε ακολουθίες ομαλών κατανομών που να συγκλίνουν στη συνάρτηση δέλτα.

***Θεώρημα* 2.7.5.** *Αν $f(x)$ μία μη αρνητική συνάρτηση του $\mathbb{R}^n$ για την οποία ισχύει:*

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x) dx = 1$$

τότε η οικογένεια $(a > 0)$

$$f_a(x) = \frac{1}{a^n} f(\frac{x}{a})$$

συγκλίνει στην $\delta(x)$ όταν $a \to 0$.

Επίσης η ακολουθία $S_k(x) = k^n f(kx)$ συγκλίνει στην $\delta(x)$ όταν $k \to \infty$.

Παράδειγμα: Οι παρακάτω συναρτήσεις συγκλίνουν στην $\delta(x)$ και είναι εφαρμογές του παραπάνω θεωρήματος.

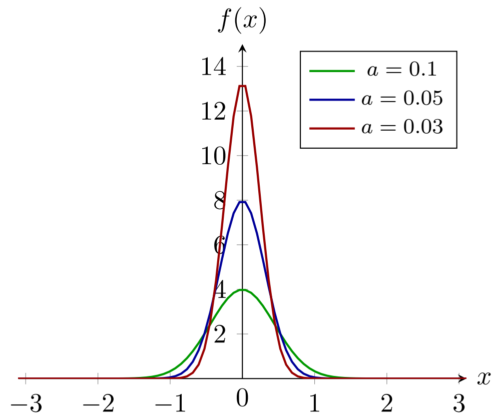
$$f_a(x) = \frac{a}{\pi(a^2+x^2)} \to \delta(x), \quad a \to 0^+ \tag{2.54}$$

$$f_a(x) = \frac{\text{ημ}^2(ax)}{\pi a x} \to \delta(x), \quad a \to \infty \tag{2.55}$$

$$f_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{x^2}{4a}} \to \delta(x), \quad a \to 0^+ \tag{2.56}$$

$$\tag{2.57}$$

Όπου η τελευταία είναι μία ακολουθία από κανονικές κατανομές.



Σχήμα 2. Γραφική παράσταση της $f_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-x^2/4a}$ για διάφορες τιμές του a

Η $\delta(x)$ συνάρτηση (και κάθε άλλη κατανομή) μπορεί να αναλυθεί σε σειρά Fourier, όπου ανάλυση σε σειρά Fourier ονομάζουμε την ανάλυση ως προς κάποιο ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων. Συνήθως ως προς το

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Μιά σειρά Fourier έχει την μορφή (αν συγκλίνει στο $-\pi < x < \pi$ στην $f(x)$)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx} \tag{2.58}$$

και οι συντελεστές C_k δίνονται από τη σχέση

$$C_k = \langle \varphi_k | f \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-ikx} dx \tag{2.59}$$

Για την $\delta(x)$ συνάρτηση η ανάλυση σε σειρά Fourier είναι:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx} \tag{2.60}$$

και οι συντελεστές:

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \delta(x - x_0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \tag{2.61}$$

Επομένως η δέλτα συνάρτηση γράφεται:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} \tag{2.62}$$

Η παραπάνω σειρά δεν συγκλίνει με καμία κλασσική έννοια, απλώς τα μέλη της ισότητας έχουν την ίδια επίδραση ως κατανομές σε συνάρτηση στο διάστημα $(-\pi, \pi)$.

Επίσης μπορούμε να βρούμε και τον μετασχηματισμό Fourier της $\delta(x)$:

$$\delta(x - \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{\infty}^{\infty} e^{ik(x-\xi)} d\xi \tag{2.63}$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα είναι σημαντικό γιατί αν $|\varphi(p)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ είναι διανύσματα τότε είναι κανονικοποιημένα αφού

$$\langle \varphi(p') | \varphi(p) \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = \delta(p' - p) \tag{2.64}$$

3 | Θεωρία Τελεστών

3.1 Γραμμικοί Τελεστές

Ένας γραμμικός τελεστής Ω δρα σε κάποιο διάνυσμα $|V\rangle$ και δίνει ένα άλλο διάνυσμα $|V'\rangle$ του χώρου, ή σε κάποιο bra $\langle K|$ και δίνει κάποιο άλλο bra $\langle K'|$

$$\Omega|V\rangle = |V'\rangle \tag{3.1}$$
$$\langle K|\Omega = \langle K'| \tag{3.2}$$

Ενδιαφερόμεστε για τελεστές που δεν μας βγάζουν έξω από τον χώρο $\mathbb{V}$ και που είναι γραμμικοί με την έννοια:

$$\begin{aligned} \Omega\alpha\,|V_i\rangle &= \alpha\Omega\,|V_i\rangle \\ \Omega\left\{a\,|V_i\rangle + \beta\,|V_j\rangle\right\} &= \alpha\Omega\,|V_i\rangle + \beta\Omega\,|V_j\rangle \\ \langle V_i|\,\alpha\Omega &= \langle V_i|\,\Omega\alpha \\ \left(\langle V_i\,|a + \langle V_j|\,\beta\right)\Omega\, &= \alpha\,\langle V_i\,|\Omega + \beta\,\langle V_j|\,\Omega \end{aligned} \tag{3.3}$$

Παράδειγμα 1. Ο απλούστερος τελεστής είναι ο ταυτοτικός τελεστής I ο οποίος ορίζεται από την σχέση:

$$I|V\rangle = |V\rangle \tag{3.4}$$

και την αντίστοιχη για τα bra.

Παράδειγμα 2. Στον χώρο $\mathbb{V}^3(\mathbb{R})$ ένας λιγότερο τετριμμένος τελεστής είναι ο $R(\frac{1}{2}\pi\hat{i})$ ο οποίος ορίζεται ως:

$$R(\frac{1}{2}\pi\hat{i}) \rightarrow \text{Στροφή κατά } \frac{1}{2}\pi \text{ γύρω από το διάνυσμα } \hat{i} \tag{3.5}$$

Αν ονομάσουμε τα μοναδιαία διανύσματα $\hat{i}$, $\hat{j}$, $\hat{k}$ στους άξονες x, y, z αντίστοιχα ώς $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ τότε:

$$R(\frac{1}{2}\pi\hat{i})|1\rangle = |1\rangle \tag{3.6}$$

$$R(\frac{1}{2}\pi\hat{i})|2\rangle = |3\rangle \tag{3.7}$$

$$R(\frac{1}{2}\pi\hat{i})|3\rangle = -|2\rangle \tag{3.8}$$

Επίσης είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι ο τελεστής είναι γραμμικός.

Μία πολύ χρήσιμη ιδιότητα των γραμμικών τελεστών είναι ότι αν γνωρίζουμε την δράση τους σε μία βάση τότε γνωρίζουμε και την δράση τους σε κάθε διάνυσμα $|V\rangle = \sum_i v_i|i\rangle$ του χώρου:

$$\Omega|V\rangle = \sum_i \Omega v_i|i\rangle = \sum_i v_i \Omega|i\rangle = \sum_i v_i \left|i'\right\rangle \tag{3.9}$$

Για το προηγούμενο παράδειγμα του τελεστή R, αν $|V\rangle = v_1|1\rangle + v_2|2\rangle + v_3|3\rangle$ τότε

$$R|V\rangle = v_1 R|1\rangle + v_2 R|2\rangle + v_3 R|3\rangle = v_1|1\rangle + v_2|3\rangle - v_3|2\rangle \tag{3.10}$$

Το γινόμενο δύο τελεστών είναι απλά η διαδοχική εφαρμογή τους:

$$\Lambda\Omega|V\rangle = \Lambda(\Omega|V\rangle) = \Lambda|\Omega V\rangle \tag{3.11}$$

Η σειρά έχει σημασία γιατί $\Lambda\Omega|V\rangle \neq \Omega\Lambda|V\rangle$, και μάλιστα η διαφορά

$$\Omega\Lambda - \Lambda\Omega = [\Omega, \Lambda] \tag{3.12}$$

ονομάζεται *μεταθέτης* (commutator) των τελεστών.

Ο μεταθέτης δύο τελεστών ικανοποιεί τις παρακάτω σχέσεις:

$$[T_1, T_2] = -[T_2, T_1] \qquad \textbf{Αντισυμμετρικότητα} \tag{3.13}$$
$$[T_1 + T_2, T_3] = [T_1, T_3] + [T_2, T_3] \qquad \textbf{Γραμμικότητα} \tag{3.14}$$
$$[T_1, [T_2, T_3]] + [T_2, [T_3, T_1]] + [T_3, [T_1, T_2]] \qquad \textbf{Jacobi} \tag{3.15}$$

***Ορισμός* 3.1.1.** *Μιά άλγεβρα που είναι εφοδιασμένη με μία πράξη που λέγεται Lie παρένθεση και ικανοποιεί τις τρεις παραπάνω ιδιότητες ονομάζεται Lie άλγεβρα.*

Μία χρήσιμη ιδιότητα των μεταθετών είναι

$$[\Omega, \Lambda\Theta] = \Lambda[\Omega, \Theta] + [\Omega, \Lambda]\Theta \tag{3.16}$$
$$[\Lambda\Omega, \Theta] = \Lambda[\Omega, \Theta] + [\Lambda, \Theta]\Omega \tag{3.17}$$

Αν υπάρχει ο αντίστροφος ενός τελεστή Ω τότε συμβολίζεται Ω^{-1} και είναι τέτοιος ώστε να ισχύει:

$$\Omega\Omega^{-1} = \Omega^{-1}\Omega = I \tag{3.18}$$

Και ο αντίστροφος ενός γινομένου τελεστών $\Lambda\Omega$ είναι το γινόμενο των αντιστρόφων με ανάποδη σειρά όμως:

$$(\Lambda\Omega)^{-1} = \Omega^{-1}\Lambda^{-1} \tag{3.19}$$

γιατί τότε μόνο ισχύει:

$$(\Lambda\Omega)(\Lambda\Omega)^{-1} = (\Lambda\Omega)\left(\Omega^{-1}\Lambda^{-1}\right) = \Lambda\Omega\Omega^{-1}\Lambda^{-1} = \Lambda\Lambda^{-1} = I \tag{3.20}$$

3.1.1 Στοιχεία Πίνακα Τελεστών

Όταν είναι δεδομένη μία βάση ενός χώρου $\mathbb{V}^n$ ($n < \infty$) τότε κάθε τελεστής μπορεί να γραφεί ως ένας πίνακας $n \times n$. Η αναπαράσταση αυτή εξαρτάται από την επιλογή της βάσης αλλά είναι χρήσιμη στην πράξη.

Έστω ότι ξέρουμε την δράση του τελεστή στην βάση $|i\rangle$:

$$\Omega|i\rangle = \left|i'\right\rangle \tag{3.21}$$

Τότε όπως έχουμε βρει θα ισχύει:

$$\Omega|V\rangle = \sum_i \Omega v_i|i\rangle = \sum_i v_i\Omega|i\rangle = \sum_i v_i \left|i'\right\rangle \tag{3.22}$$

Τα διανύσματα $|j'\rangle$ είναι γνωστά δηλαδή οι συντεταγμένες τους στην αρχική βάση $|i\rangle$ είναι γνωστές, ή

$$\left\langle j|i'\right\rangle = \langle j|\Omega|i\rangle \equiv \Omega_{ji} \tag{3.23}$$

Οι n^2 αριθμοί Ω_{ji} είναι τα *στοιχεία πίνακα του τελεστή* στη συγκεκριμένη βάση.

Τότε αν $\Omega|V\rangle = |V'\rangle$ μπορούμε να εκφράσουμε τις συντεταγμένες v_i' του $|V'\rangle$ με τις συντεταγμένες v_i του $|V\rangle$:

$$\begin{aligned} v_i' = \left\langle i|V'\right\rangle = \langle i|\Omega|V\rangle &= \langle i|\Omega\left(\sum_j v_j|j\rangle\right) \\ &= \sum_j v_j\langle i|\Omega|j\rangle \\ &= \sum_j \Omega_{ij}v_j \end{aligned} \tag{3.24}$$

ή σε μορφή πίνακα:

$$\begin{bmatrix} v_1' \\ v_2' \\ \vdots \\ v_n' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle|1\Omega|1\rangle & \langle 1|\Omega|2\rangle & \cdots & \langle 1|\Omega|n\rangle \\ \langle 2|\Omega|1\rangle & \langle 2|\Omega|2\rangle & \cdots & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \langle n|\Omega|1\rangle & \cdots & & \langle n|\Omega|n\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \tag{3.25}$$

Ένα κόλπο για να "βλέπουμε" εύκολα τον πίνακα είναι το εξής: Η πρώτη στήλη είναι οι συντεταγμένες στη βάση $|i\rangle$ του πρώτου διανύσματος $|1'\rangle = \Omega|1\rangle$ και αντίστοιχα για τις άλλες στήλες.

Για τον τελεστή R στροφής κατά $90°$ ως προς τον άξονα x, βρήκαμε ότι $R|1\rangle = |1\rangle$, $R|2\rangle = |3\rangle$ και $R|3\rangle = -|2\rangle$. Επομένως στη βάση αυτή:

$$|1'\rangle = 1|1\rangle + 0|2\rangle + 0|3\rangle \tag{3.26}$$

$$|2'\rangle = 0|1\rangle + 0|2\rangle + 1|3\rangle \tag{3.27}$$

$$|3'\rangle = 0|1\rangle - 1|2\rangle + 0|3\rangle \tag{3.28}$$

Άρα ο πίνακας του τελεστή R θα είναι

$$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.29}$$

Γενικά για χώρο πεπερασμένων διαστάσεων υπάρχει μία προς μία (αμφιμονοσήμαντη) αντιστοιχία μεταξύ τελεστών και πινάκων $n \times n$.

3.1.2 Ταυτοτικός Τελεστής

Από την εξίσωση:

$$I_{ij} = \langle i|I|j\rangle = \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{3.30}$$

βλέπουμε ότι η αναπαράσταση του ταυτοτικού τελεστή I είναι ένας πίνακας με 1 στη διαγώνιο και μηδενικά σε όλες τις άλλες θέσεις.

3.1.3 Προβολικός Τελεστής

Η γνωστή σχέση:

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|V\rangle \tag{3.31}$$

μπορεί να γραφεί:

$$|V\rangle = \left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\right)|V\rangle \tag{3.32}$$

Το άθροισμα $\sum_{i=1}^{n}|i\rangle\langle i|$ είναι ο ταυτοτικός τελεστής I.

Η έκφραση $|i\rangle\langle i|$ είναι προφανώς ένας τελεστής (γραμμικός) που προβάλλει το τυχαίο διάνυσμα $|V\rangle$ στην $|i\rangle$ συνιστώσα του. Ονομάζεται $\mathbb{P}_i = |i\rangle\langle i|$.

$$|i\rangle\langle i||V\rangle = |i\rangle v_i = v_i|i\rangle \tag{3.33}$$

και η έκφραση

$$\sum_i \mathbb{P}_i = \sum_i |i\rangle\langle i| = I \tag{3.34}$$

ονομάζεται εξίσωση πληρότητας.

Ο προβολικός τελεστής μπορεί να δρα και στα bra $\langle V|$:

$$\langle V|\mathbb{P}_i = \langle V|i\rangle\langle i| = \langle i|v_i^* \tag{3.35}$$

Η αναπαράσταση ενός προβολικού τελεστή $\mathbb{P}$ ως πίνακας είναι ένας πίνακας με μηδενικά παντού εκτός από την i θέση στη διαγώνιο όπου έχει τη μονάδα (1), στην αναπαράσταση στην κανονική βάση.

Γενικά το γινόμενο $|\psi\rangle\langle\psi|$ ονομάζεται *εξωτερικό γινόμενο διανυσμάτων* (outer product) και εύκολα φαίνεται ότι είναι Ερμιτιανός τελεστής (αφού ο συζυγής του $|\psi\rangle\langle\varphi|$ είναι ο $|\varphi\rangle\langle\psi|^*$, που εδώ ταυτίζεται με τον αρχικό τελεστή) και ότι είναι "αδύναμος", άρα είναι προβολικός τελεστής στον υποχώρο που γεννά το διάνυσμα $|\psi\rangle$.

Οι προβολικοί τελεστές έχουν ακόμα τις παρακάτω ιδιότητες:

$$\mathbb{P}_i\mathbb{P}_j = \delta_{ij}\mathbb{P}_j \tag{3.36}$$

$$\mathbb{P}^2 = \mathbb{P} = \mathbb{P}^\dagger \tag{3.37}$$

3.1.4 Αντίστροφος Τελεστής

***Ορισμός* 3.1.2.** *Ένας τελεστής T έχει αντίστροφο, εάν υπάρχει τελεστής T^{-1} τέτοιος ώστε:*

$$TT^{-1} = T^{-1}T = I \tag{3.38}$$

***Θεώρημα* 3.1.3.** *Ένας τελεστής σε ν-διάστατο χώρο έχει αντίστροφο εάν:*

1. *Δεν υπάρχει μη μηδενικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ τέτοιο ώστε $T|\psi\rangle = 0$*
2. *Ο πίνακας του τελεστή T έχει μη μηδενική ορίζουσα.*

Αν υπάρχει τότε ο αντίστροφος είναι μοναδικός.

3.1.5 Ερμιτιανός Τελεστής

***Ορισμός* 3.1.4.** *Ο τελεστής $T^\dagger$ ονομάζεται συζυγής (συναφής, ή ερμιτιανός συζυγής) του τελεστή T εάν:*

$$\langle\chi|T\psi\rangle = \langle T^\dagger\chi|\psi\rangle, \quad \forall\, \chi, \psi \in \mathbb{H} \tag{3.39}$$

Εύκολα αποδεικνύονται οι ιδιότητες:

$$(T^\dagger)^\dagger = T \qquad (T_1 + T_2)^\dagger = T_1^\dagger + T_2^\dagger$$
$$(aT)^\dagger = a^* T^\dagger \qquad (T_1T_2)^\dagger = T_1^\dagger T_2^\dagger$$

***Ορισμός* 3.1.5.** *Ένας τελεστής T ονομάζεται ερμιτιανός εάν:*

$$T^\dagger = T \tag{3.40}$$

Ή αλλιώς

$$\langle\chi|T\psi\rangle = \langle T\chi|\psi\rangle, \quad \forall\, \chi, \psi \in \mathbb{H} \tag{3.41}$$

Για ένα κβαντικό σύστημα που βρίσκεται στην κανονικοποιημένη κατάσταση $|\chi\rangle$ η έκφραση $\langle\chi|T\chi\rangle$ είναι η μέση τιμή του μεγέθους που παριστάνει ο τελεστής T, άρα πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός. Πράγματι:

$$\langle\chi|T\chi\rangle = \langle T\chi|\chi\rangle = \langle\chi|T\chi\rangle^* \quad \forall\, \chi \in \mathbb{H} \tag{3.42}$$

Άρα είναι πραγματικός αριθμός. Αυτός είναι ο λόγος που τα μεγέθη πρέπει να παριστάνονται με ερμιτιανούς τελεστές.

Αν ο τελεστής είναι φραγμένος (ή αν ορίζεται σε n-διάστατο χώρο) τότε πάντοτε μπορεί να παρασταθεί ως πίνακας. Αν A_{ij} τα στοιχεία πίνακα του T και B_{ij} του συζυγή του $T^\dagger$, τότε θα ισχύει:

$$A_{ij} = \langle\psi_i|T\psi_j\rangle = \langle T^\dagger\psi_i|\psi_j\rangle = \langle\psi_j|T^\dagger\psi_i\rangle^* = B_{ji}^* \tag{3.43}$$

Δηλαδή ο πίνακας B_{ij} είναι ο μιγαδικός συζυγής ανάστροφος του A_{ij}.

Επομένως αν ο T είναι ερμιτιανός τότε

$$A_{ij} = A^*ji \tag{3.44}$$

3.1.6 Μοναδιαίος Τελεστής

***Ορισμός* 3.1.6.** *Ένας τελεστής U ονομάζεται μοναδιαίος (unitary) όταν έχει αντίστροφο και ισχύει:*

$$|U\psi| = |\psi| \quad \forall\, \psi \in \mathbb{H} \tag{3.45}$$

Προφανώς $|U| = 1$.

***Θεώρημα* 3.1.7.** *Αν U είναι μοναδιαίος τελεστής τότε ισχύει:*

$$\langle U\chi|U\psi\rangle = \langle\chi|\psi\rangle, \quad \forall\, \chi, \psi \in \mathbb{H} \tag{3.46}$$

Δηλαδή ο μοναδιαίος τελεστής διατηρεί το μήκος των διανυσμάτων και το εσωτερικό γινόμενο.

***Θεώρημα* 3.1.8.** *Αν $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, ...μία ορθοκανονική βάση ενός χώρου τότε τα διανύσματα $|U\varphi_1\rangle$, $|U\varphi_2\rangle$, ...είναι επίσης μία βάση του χώρου.*

Αφού:

$$\langle U\varphi_i|U\varphi_j\rangle = \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{3.47}$$

Αποεικνύεται επίσης ότι αν $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, ...και $|\varphi_1'\rangle$, $|\varphi_2'\rangle$, ...δύο ορθοκανονικές βάσεις ενός χώρου τότε υπάρχει μοναδιαίος τελεστής U:

$$|\varphi_i'\rangle = U|\varphi_i\rangle \tag{3.48}$$

***Θεώρημα* 3.1.9.** *Ένας τελεστής U είναι μοναδιαίος τότε και μόνο τότε αν*

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I \tag{3.49}$$

Άρα και $U^{-1} = U^\dagger$

3.2 Το Φάσμα του Τελεστή

***Ορισμός* 3.2.1.** *Ο αριθμός a ονομάζεται ιδιοτιμή του τελεστή T αν υπάρχει $|\varphi_a\rangle$ ώστε να ισχύει:*

$$T|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle \tag{3.50}$$

Τότε το διάνυσμα $|\varphi_a\rangle$ ονομάζεται *ιδιοδιάνυσμα* του τελεστή για την ιδιοτιμή a.

Μια καθιερωμένη πρακτική είναι να γράφουμε το ιδιοδιάνυσμα $|\varphi_a\rangle$ απλά ως $|a\rangle$ και την εξίσωση των ιδιοτιμών ως

$$T|a\rangle = a|a\rangle \tag{3.51}$$

Κάθε τελεστής έχει ιδιοτιμές; Όχι, σαφώς και όχι. Το πρόβλημα εύρεσης των ιδιοτιμών ενός τελεστή T εν γένει είναι δύσκολο. Σε λίγες περιπτώσεις έχει λυθεί, και θεωρήματα ύπαρξης είναι ελάχιστα.

Το σύνολο των ιδιοτιμών ενός τελεστή ονομάζεται *φάσμα* του τελεστή. Μπορεί να είναι σημειακό ή συνεχές.

Αν ο τελεστής ορίζεται σε n-διάστατο χώρο τότε το a είναι ιδιοτιμή του T αν ο τελεστής $T - aI$ δεν έχει αντίστροφο. Αυτό μας δίνει ένα τρόπο να βρίσκουμε τις ιδιοτιμές του τελεστή αφού τότε η ορίζουσα του πίνακα που αντιστοιχεί στον $T - aI$ είναι μηδέν:

$$\mathrm{Det}(T - aI) = 0 \tag{3.52}$$

Η προηγούμενη ονομάζεται χαρακτηριστική εξίσωση του τελεστή (πίνακα).

***Θεώρημα* 3.2.2 (Ιδιοτιμές Ερμιτιανού, Μοναδιαίου, Προβολικού Τελεστή).** *Οι ιδιοτιμές Ερμιτιανού (ή συμμετρικού) τελεστή είναι πραγματικές, οι ιδιοτιμές μοναδιαίου τελεστή είναι μιγαδικές και οι ιδιοτιμές προβολικού τελεστή είναι ή το 0 ή το 1.*

Π.χ. Για τον προβολικό τελεστή: Έστω ένα κανονικοποιημένο ket $|V\rangle$ και ο τελεστής προβολής $\mathbb{P}_V = |V\rangle\langle V|$. Τότε:

1. Κάθε διάνυσμα $a|V\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του $\mathbb{P}_V$ αφού

$$\mathbb{P}_V|aV\rangle = a|V\rangle = |aV\rangle$$

   επομένως έχει ιδιοτιμή 1.

2. Κάθε διάνυσμα $b|V\rangle_\perp$ κάθετο στο $|V\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του $\mathbb{P}_V$ με ιδιοτιμή μηδέν, αφού

$$\mathbb{P}_V b|V_\perp\rangle = 0 = 0|V\rangle$$

3. Κάθε διάνυσμα της μορφής $a|V\rangle + b|V_\perp\rangle$ δεν είναι ιδιοδιάνυσμα του $\mathbb{P}_V$.

Άρα οι ιδιοτιμές του τελεστή είναι 0 ή 1.

***Θεώρημα* 3.2.3.** *Τα ιδιοδιανύσματα Ερμιτιανού (ή συμμετρικού) τελεστή που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνια.*

Το ίδιο ισχύει και για τους μοναδιαίους τελεστές.

Απόδειξη. Έστω $a_1 \neq a_2$ ιδιοτιμές ερμιτιανού τελεστή T και $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Τότε:

$$\begin{aligned}(a_1 - a_2)\langle\psi_1|\psi_2\rangle &= \langle a_1\psi_1|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|a_2\psi_2\rangle = \langle T\psi_1|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|T\psi_2\rangle \\ &= 0\end{aligned} \tag{3.53}$$

Για τον μοναδιαίο τελεστή U, έστω $a_1 \neq a_2$. Τότε $a_1^{-1}a_2 \neq 1 \Leftrightarrow a_1^* a_2 \neq 1$.

$$a_1^* a_2 \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle a_1\psi_1|a_2\psi_2\rangle = \langle U\psi_1|U\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle \tag{3.54}$$

Σε κάθε περίπτωση παραπάνω ισχύει $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, άρα τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια. ■

***Θεώρημα* 3.2.4.** *Για κάθε ερμιτιανό τελεστή T υπάρχει (τουλάχιστο) μία βάση που αποτελείται από τα ορθοκανονικά ιδιοδιανύσματά του. Ο πίνακας που παριστάνει τότε τον τελεστή είναι διαγώνιος με τις ιδιοτιμές στην διαγώνιο.*

3.2.1 Το φασματικό θεώρημα

Το παρακάτω *Φασματικό Θεώρημα* (spectral theorem) μας επιτρέπει να αναπτύσσουμε κάθε τελεστή ως άθροισμα ιδιοδιανυσμάτων, εάν ξέρουμε τις ιδιοτιμές-ιδιοδιανύσματα.

***Ορισμός* 3.2.5.** *Ένας γραμμικός τελεστής ονομάζεται* κανονικός (normal) *αν* $A^\dagger A = AA^\dagger$

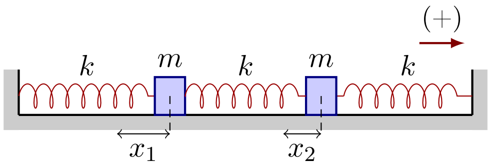
***Θεώρημα* 3.2.6.** *Κάθε κανονικός τελεστής* A *μπορεί να αναπτυχθεί στο φάσμα του* $\{\lambda_i\}$ *με προβολικούς τελεστές:*

$$\boxed{A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|} \tag{3.55}$$

3.2.2 Παράδειγμα

Χρήση του φορμαλισμού των τελεστών και των διανυσματικών χώρων για επίλυση ενός προβλήματος μηχανικής. Είναι από το βιβλίο Principles of Quantum Mechanics του Shankar [1].

Έστω δύο σώματα με ίδιες μάζες m ανάμεσα σε τρία ίδια ελατήρια σταθεράς k, όπως στο παρακάτω σχήμα:



Με εφαρμογή του δεύτερου νόμου του Newton βρίσκουμε για τις επιταχύνσεις a_1 και a_2, που θα τις γράφουμε ως δεύτερες παραγώγους των απομακρύνσεων x_1 και x_2 από τις θέσεις ισορροπίας (και φυσικού μήκους):

$$\ddot{x}_1 = -\frac{k}{m}x_1 + \frac{k}{m}(x_2 - x_1)$$
$$\ddot{x}_1 = -\frac{k}{m}x_2 + \frac{k}{m}(x_1 - x_2)$$

ή αλλιώς

$$\ddot{x}_1 = -\frac{2k}{m}x_1 + \frac{k}{m}x_2 \tag{3.56}$$
$$\ddot{x}_1 = \frac{k}{m}x_1 - \frac{2k}{m}x_2 \tag{3.57}$$

Σκοπός μας είναι να λύσουμε τις εξισώσεις (3.56), (3.57) και να βρούμε τα $x_1(t)$, $x_2(t)$, με τις δεδομένες αρχικές τιμές απομακρύνσεων και ταχυτήτων. Έστω ότι δεν υπάρχουν αρχικές ταχύτητες παρά μόνο αρχικές απομακρύνσεις $x_1(0)$, $x_2(0)$.

Σαν πρώτο βήμα θα γράψουμε τις εξισώσεις (3.56), (3.57) με μορφή πίνακα:

$$\begin{bmatrix}\ddot{x}_1\\ \ddot{x}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\Omega_{11} & \Omega_{12}\\ \Omega_{21} & \Omega_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} \tag{3.58}$$

όπου προφανώς

$$\Omega_{11} = \Omega_{22} = -\frac{2k}{m}, \quad \Omega_{12} = \Omega_{21} = \frac{k}{m} \tag{3.59}$$

Ο πίνακας των θέσεων έχει δύο συνιστώσες και μπορεί να θεωρηθεί ένα διάνυσμα στον χώρο $\mathbb{V}^2(\mathbb{R})$ και ο πίνακας Ω ως τελεστής στον ίδιο χώρο, μάλιστα ερμιτιανός, αφού εύκολα φαίνεται ότι $\Omega^\dagger = \Omega$. Η εξίσωση τότε μπορεί να γραφεί:

$$|\ddot{x}\rangle = \Omega|x\rangle \tag{3.60}$$

Μία βάση σε αυτόν τον χώρο είναι η $|1\rangle$, $|2\rangle$ όπου

$$|1\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Η πρώτη μάζα μετατοπ. κατά 1}\\ \text{Η δεύτερη μάζα δεν μετατοπ.}\end{bmatrix} \tag{3.61}$$

$$|2\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Η πρώτη μάζα δεν μετατοπ.}\\ \text{Η δεύτερη μάζα μετατοπ. κατά 1}\end{bmatrix} \tag{3.62}$$

Με αυτές ο διάνυσμα $|x\rangle$ γράφεται:

$$|x\rangle = x_1|1\rangle + x_2|2\rangle \tag{3.63}$$

Η βάση $|1\rangle$, $|2\rangle$ είναι πολύ εύκολη στην κατανόησή της, αλλά δυστυχώς δεν μας βοηθάει στο να λύσουμε το πρόβλημα. Με αυτή τη βάση ο πίνακας Ω περιέχει τα μή-διαγώνια στοιχεία Ω_{12}, Ω_{21}, που κάνουν τις εξισώσεις (3.56), (3.57) να έχουν αυτή την πεπλεγμένη μορφή. Αν ο πίνακας ήταν διαγώνιος οι εξισώσεις θα ήταν ανεξάρτητες, άρα πολύ εύκολες στη λύση τους. Σκοπός μας είναι λοιπόν να διαγωνιοποιήσουμε τον πίνακα Ω. Αυτό το πετυχαίνουμε βρίσκοντας μία νέα βάση.

Γνωρίζουμε από την θεωρία ότι ο πίνακας διαγωνιοποιείται αν βρούμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματά του. Επομένως πρέπει να λύσουμε την εξίσωση:

$$\mathrm{Det}(\Omega - aI) = 0 \tag{3.64}$$

ή

$$\begin{vmatrix} \Omega_{11} - a & \Omega_{12} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} - a \end{vmatrix} = 0 \tag{3.65}$$

από την οποία προκύπτει ένα τριώνυμο ώς προς a με λύση

$$a_1 = -\frac{k}{m}, \quad a_2 = -\frac{3k}{m} \tag{3.66}$$

Η εξίσωση ιδιοτιμών $\Omega|I\rangle = a_1|I\rangle$ δίνει μετά από απλές πράξεις πινάκων τον πίνακα με μορφή

$$|I\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \alpha \end{bmatrix} \tag{3.67}$$

και η αντίστοιχη για το $|II\rangle$

$$|II\rangle = \begin{bmatrix} \beta \\ -\beta \end{bmatrix} \tag{3.68}$$

Κανονικοποιώντας τους δύο πίνακες έχουμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα:

$$a_1 = -\frac{k}{m} = -\omega_1^2, \qquad |I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.69}$$

$$a_1 = -\frac{3k}{m} = -\omega_2^2, \qquad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{3.70}$$

Μπορούμε να γράψουμε το διάνυσμα $|x(t)\rangle$ στη νέα βάση

$$|x(t)\rangle = |I\rangle x_I(t) + |II\rangle x_{II}(t) \tag{3.71}$$

Τώρα οι συνιστώσες x_I, x_{II} θα ικανοποιούν την εξίσωση:

$$\begin{bmatrix} \ddot{x}_I \\ \ddot{x}_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega_1^2 & 0 \\ \Omega_{21} & -\omega_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_I \\ x_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega_1^2 x_I \\ -\omega_2^2 x_{II} \end{bmatrix} \tag{3.72}$$

Που σημαίνει ότι τώρα έχουμε δύο απλές διαφορικές εξισώσεις (μη-πεπλεγμένες!), οπότε

$$\ddot{x}_I + \omega_1^2 x_I = 0 \qquad x_I(t) = x_I(0)\,\text{συν}\,\omega_1 t \tag{3.73}$$

$$\ddot{x}_{II} + \omega_2^2 x_{II} = 0 \qquad x_{II}(t) = x_{II}(0)\,\text{συν}\,\omega_2 t \tag{3.74}$$

Αντικαθιστούμε στην (3.71) και έχουμε:

$$\begin{aligned}|x(t)\rangle &= |I\rangle x_I(0)\,\text{συν}\,\omega_1 t + |II\rangle x_{II}(0)\,\text{συν}\,\omega_2 t\\ &= |I\rangle\langle I|x(0)\rangle\,\text{συν}\,\omega_1 t + |II\rangle\langle II|x(0)\rangle\,\text{συν}\,\omega_2 t\end{aligned} \tag{3.75}$$

(όπου $\langle I|x(0)\rangle = x(0)$ κτλ, οι συντελεστές στο ανάπτυγμα του $|x(0)\rangle$ στη νέα βάση.)

Ουσιαστικά η δουλειά έχει τελειώσει. Μπορούμε όμως να λύσουμε και το πρόβλημα αρχικών τιμών $x_1(0)$, $x_2(0)$, βρίσκοντας τα $\langle I|x(0)\rangle$, $\langle II|x(0)\rangle$.

$$x_I(0) = \langle I|x(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[1,1]\begin{bmatrix}x_1(0)\\x_2(0)\end{bmatrix} = \frac{x_1(0)+x_2(0)}{\sqrt{2}} \tag{3.76}$$

$$x_{II}(0) = \langle II|x(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[1,-1]\begin{bmatrix}x_1(0)\\x_2(0)\end{bmatrix} = \frac{x_1(0)-x_2(0)}{\sqrt{2}} \tag{3.77}$$

Επομένως το διάνυσμα $|x(t)\rangle$ μπορεί να γραφεί:

$$|x(t)\rangle = |I\rangle\frac{x_1(0)+x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_1 t + |II\rangle\frac{x_1(0)-x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_2 t \tag{3.78}$$

Αλλά μπορούμε να γίνουμε και περισσότερο αναλυτικοί στη λύση μας. Να γράψουμε το παραπάνω διάνυσμα στην αρχική βάση $|1\rangle$, $|2\rangle$. Άρα πρέπει να προβάλλουμε το $|x(0)\rangle$ στην αρχική βάση.

$$\begin{aligned}x_1(t) &= \langle 1|x(t)\rangle = \langle 1|I\rangle\frac{x_1(0)+x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_1 t + \langle 1|II\rangle\frac{x_1(0)-x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_2 t\\ x_1(t) &= \frac{1}{2}(x_1(0)+x_2(0))\,\text{συν}\,\omega_1 t + \frac{1}{2}(x_1(0)-x_2(0))\,\text{συν}\,\omega_2 t\end{aligned} \tag{3.79}$$

και όμοια:

$$\begin{aligned}x_2(t) &= \langle 2|x(t)\rangle = \langle 2|I\rangle\frac{x_1(0)+x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_1 t + \langle 2|II\rangle\frac{x_1(0)-x_2(0)}{\sqrt{2}}\,\text{συν}\,\omega_2 t\\ x_2(t) &= \frac{1}{2}(x_1(0)+x_2(0))\,\text{συν}\,\omega_1 t - \frac{1}{2}(x_1(0)-x_2(0))\,\text{συν}\,\omega_2 t\end{aligned} \tag{3.80}$$

Η παραπάνω είναι και η τελική λύση μετά την αντικατάσταση των ω_1, ω_2.

Το ταξίδι δεν τελειώνει όμως εδώ! Αν κάνουμε μερικούς πολλαπλασιασμούς μπορούμε να γράψουμε τις παραπάνω δύο εξισώσεις σε μορφή πινάκων:

$$\begin{bmatrix}x_1(t)\\x_2(t)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{\text{συν}\,\omega_1 t+\text{συν}\,\omega_2 t}{2} & \frac{\text{συν}\,\omega_1 t-\text{συν}\,\omega_2 t}{2}\\ \frac{\text{συν}\,\omega_1 t-\text{συν}\,\omega_2 t}{2} & \frac{\text{συν}\,\omega_1 t+\text{συν}\,\omega_2 t}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1(0)\\x_2(0)\end{bmatrix} \tag{3.81}$$

Ο Διαδότης

Μπορούμε να δούμε την παραπάνω εξίσωση πινάκων ως

$$|x(t)\rangle = U(t)|x(0)\rangle \tag{3.82}$$

όπου ο τελεστής $U(t)$ είναι ανεξάρτητος από τις αρχικές συνθήκες και δημιουργείται από τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή Ω, και ονομάζεται *διαδότης (propagator)*. Η τελική τιμή του διανύσματος σε χρόνο t είναι απλώς η δράση του διαδότη στην αρχική τιμή σε χρόνο 0.

Εύκολα βρίσκουμε ότι

$$U(t) = |I\rangle\langle I|\,\text{συν}\,\omega_1 t + |II\rangle\langle II|\,\text{συν}\,\omega_2 t \tag{3.83}$$

Επομένως η γενική συνταγή για τη λύση παρόμοιων προβλημάτων είναι:

1. Λύνουμε το πρόβλημα των ιδιοτιμών-ιδιοσυναρτήσεων.
2. Βρίσκουμε τον διαδότη.
3. $|x(t)\rangle = U(t)|x(0)\rangle$.

Normal modes

Υπάρχουν δύο αρχικές συνθήκες (καταστάσεις) $|x(0)\rangle$ για τις οποίες η χρονική εξέλιξη είναι πολύ απλή. Είναι τα ιδιοδιανύσματα $|I\rangle$ και $|II\rangle$.

Έστω ότι $|x(0)\rangle = |I\rangle$. Τότε η κατάσταση μετά από χρόνο t θα είναι:

$$\begin{aligned}|I(t)\rangle &= U(t)|I\rangle \\ &= (|I\rangle\langle I| \,\text{συν}\,\omega_1 t + |II\rangle\langle II| \,\text{συν}\,\omega_2 t)\,|I\rangle \\ &= |I\rangle \,\text{συν}\,\omega_1 t\end{aligned} \tag{3.84}$$

Αν κοιτάξουμε την μορφή του $|I\rangle$

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

βλέπουμε ότι τα δύο σώματα έχουν κάθε στιγμή ίσες μετατοπίσεις προς την ίδια διεύθυνση και ταλαντώνονται με συχνότητα $\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Το ενδιάμεσο ελατήριο παραμένει συνεχώς στο φυσικό μήκος του.

Αν ξεκινήσουμε με αρχικές συνθήκες $|x(0)\rangle = |II\rangle$ τότε βρίσκουμε εύκολα

$$\begin{aligned}|I(t)\rangle &= U(t)|I\rangle \\ &= |II\rangle \,\text{συν}\,\omega_2 t\end{aligned} \tag{3.85}$$

και επειδή

$$|II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$$

βλέπουμε ότι τα δύο σώματα έχουν κάθε στιγμή αντίθετες μετατοπίσεις και ταλαντώνονται με συχνότητα $\omega_1 = \sqrt{\frac{3k}{m}}$. Η ισοδύναμη σταθερά ελατηρίου είναι $3k$.

4 Γενικές Αρχές Κβαντομηχανικής

4.1 Οι Κανόνες της Κβαντικής Θεωρίας

4.1.1 Προλεγόμενα

Οι κανόνες της κβαντομηχανικής είναι γενικεύσεις των κανόνων της κυματομηχανικής στο κεφάλαιο 1.2. Είναι το καταστάλαγμα πλήθους επιστημόνων μετά από ένα αιώνα προσπαθειών από την αρχική διατύπωσή τους. Όμως οι παρακάτω κανόνες, αν και μοιάζουν με τα αξιώματα μίας μαθηματικής θεωρίας, δεν έχουν το δικό τους απόλυτο κύρος. Γι' αυτό και λέγονται κανόνες και όχι αξιώματα (αν και διατυπώνονται αξιωματικά!). Τίποτα δεν μας εξασφαλίζει ότι ένα αυριανό πείραμα ή ένα νέο φαινόμενο δεν θα απαιτήσει την τροποποίηση ενός κανόνα, την ολική αλλαγή του, ή την πλήρη απόρριψη όλου του παρόντος φορμαλισμού.

Με την κβαντική θεωρία και τις διαμάχες που προκαλεί περί της θεώρησης της πραγματικότητας, είναι δύσκολο να διατυπωθούν κανόνες για φυσικά φαινόμενα χωρίς να θιγεί το θέμα της *ύπαρξης* του φυσικού κόσμου. Αν προσπαθήσουμε να διατυπώσουμε τη θεωρία χωρίς να εισάγουμε τις προκαταλήψεις και τις πεποιθήσεις μας, πρέπει να μείνουμε στα απολύτως βασικά. Να διατυπώσουμε ένα *ελάχιστο σύνολο κανόνων*. Γι' αυτό ακολουθώντας τον C. Isham [2], θα αρκεστούμε στα παρακάτω:

- Η κβαντική θεωρία θεωρείται ως ένα σχήμα πρόβλεψης των πιθανοτήτων εμφάνισης των αποτελεσμάτων μέτρησης σε κατάλληλα προετοιμασμένα φυσικά συστήματα.
- Οι πιθανότητες ερμηνεύονται στατιστικώς ως σχετικές συχνότητες εμφάνισης των αποτελεσμάτων μετά από ένα μεγάλο πλήθος μετρήσεων.
- Δεν θα κάνουμε ισχυρισμούς για το πόσο θεμελιώδες είναι στη θεωρία η στατιστική ερμηνεία της πιθανότητας ή η έννοια της *μέτρησης*. Επίσης δεν θα αναφερθούμε στο κατά πόσο τοο φυσικό σύστημα *έχει* τιμές στα φυσικά μεγέθη πριν από τη μέτρηση.

Αυτή είναι μία μεθοδολογία που ο Isham ονομάζει "πρακτική αντιμετώπιση" (pragmatic approach). Ένα ελάχιστο σύνολο κανόνων που όλοι οι φυσικοί δέχονται ως απαραίτητο ώστε να προχωρήσουν στην πρακτική επίλυση των προβλημάτων.

Γιατί η *ερμηνεία* της κβαντομηχανικής έχει διαιρέσει τους φυσικούς σε ένα (σχεδόν συνεχές) φιλοσοφικό φάσμα, από τους "αντι-ρεαλιστές", για τους οποίους η έννοια ότι τα μεγέθη ενός φυσικού συστήματος έχουν τιμές στερείται πλήρως νοήματος, μέχρι τους "ρεαλιστές", για τους οποίους οι πιθανότητες ερμηνεύονται ως απλή έλλειψη γνώσης για το πραγματικό φυσικό σύστημα που εξετάζουμε.

Σε όποιο μέρος του φάσματος και αν κλίνουμε δεν μπορούμε παρά να συμφωνήσουμε ότι ο παρόντας φορμαλισμός δεν μπορεί να θεωρηθεί μία πλήρης ερμηνεία της κβαντομηχανικής.

4.1.2 Οι κανόνες

Οι παρακάτω τέσσερεις κανόνες είναι το γενικό μαθηματικό οπλοστάσιο που μέχρι τώρα έχουμε στη διάθεσή μας για να περιγράψουμε κάθε κβαντομηχανικό σύστημα.

***Κανόνας* 4.1.1.** *Οι προβλέψεις των αποτελεσμάτων των μετρήσεων σε ένα απομονωμένο σύστημα είναι πιθανοκρατικής φύσης. Όπου μπορούμε να έχουμε τη μέγιστη πληροφορία, αυτή αναπαριστάνεται μαθηματικά με ένα διάνυσμα σε ένα μιγαδικό χώρο Hilbert $\mathcal{H}$ που ονομάζεται* καταστατικός χώρος *της κβαντικής θεωρίας. Το διάνυσμα ονομάζεται* καταστατικό διάνυσμα.

***Κανόνας* 4.1.2.** *Κάθε παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος του συστήματος παριστάνεται μαθηματικά με ένα αυτοσυναφή τελεστή που δρα στον χώρο Hilbert $\mathcal{H}$.*

***Κανόνας* 4.1.3.** *Αν το παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος A παριστάνεται από τον αυτοσυναφή τελεστή $\widehat{A}$ και η κατάσταση παριστάνεται από το κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, τότε η αναμενόμενη τιμή $\langle A\rangle_\psi$ της μέτρησης του A είναι*

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{4.1}$$

***Κανόνας* 4.1.4.** *Σε ένα κλειστό σύτημα (δηλαδή απουσία εξωτερικών επιδράσεων) το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ αλλάζει ομαλά με τον χρόνο t σύμφωνα με την χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \widehat{H}|\psi\rangle \tag{4.2}$$

όπου $\widehat{H}$ είναι ένας ειδικός τελεστής που ονομάζεται Χαμιλτονιανή.

4.1.3 Σχόλια

1. Οι κανόνες 1-3 είναι κανόνες αντιστοίχησης των φυσικών μεγεθών-ποσοτήτων στο μαθηματικό σύμπαν. Όπως είναι διατυπωμένοι δεν αναφέρονται σε ιδιότητες που *έχει ή διαθέτει* το σύστημα, αλλά σε αποτελέσματα μετρήσεων που μπορούν να πραγματοποιηθούν. Αυτή η προσπάθεια να δούμε το σύστημα ως ένα "μαύρο κουτί" είναι αποτέλεσμα της "πρακτικής προσέγγισης".

Σίγουρα η έννοια της "κατάστασης του συστήματος" και του "καταστατικού διανύσματος" για πολλούς φυσικούς αναφέρεται σε ένα μεγάλο πλήθος (μία συλλογή) κατάλληλα προετοιμασμένων συστημάτων στα οποία θα πραγματοποιηθούν οι μετρήσεις, και όχι σε ένα συγκεκριμένο σύστημα. Βεβαίως η έννοια της κατάστασης του συστήματος (state of the system) είναι αρκούντως ασαφής από μόνη της, σε αντιδιαστολή με την πρόταση ότι ένα αντικείμενο έχει την τάδε ιδιότητα.

Όμως για να είναι ακριβής η στατιστική μας μέθοδος απαιτούνται *άπειρο πλήθος* προετοιμασμένων συστημάτων, επομένως οσοδήποτε μεγάλο πεπερασμένο πλήθος δίνει απλώς μετρήσεις που προσεγγίζουν τις θεωρητικές. Επίσης η διαδικασία της προετοιμασίας καταλλήλως ενός συστήματος (από αυτό το μεγάλο πλήθος) εμπεριέχει τη δημιουργία μίας συγκεκριμένης κατάστασης, οπότε είναι δυνατό να πούμε ότι το δεδομένο σύστημα *έχει* ένα καταστατικό διάνυσμα.

2. Ένα δεύτερο θέμα ανακύπτει από την θεώρηση αυτών των πολλών κατάλληλα προετοιμασμένων συστημάτων. Συγκεκριμένα ποιό είναι το ελάχιστο πλήθος ώστε οι μετρήσεις μας να έχουν στατιστική ακρίβεια; Επίσης, πως εγγυόμαστε ότι ένα από τα συστήματα του μεγάλου πλήθους από τις διαδοχικές επαναλήψεις, είναι στην σωστή κατάσταση, όταν δυσκολευόμαστε να προσδιορίσουμε καταστατικό διάνυσμα σε μεμονωμένο σύστημα;

3. Στον χώρο $\mathcal{H}$ υπάρχουν διανύσματα που δεν αντιστοιχούν σε καμία πρακτική φυσική κατάσταση. Αυτό συμβαίνει για διανύσματα που είναι υπερθέσεις ιδιοκαταστάσεων συγκεκριμένων τελεστών, όπως για παράδειγμα του ηλεκτρικού φορτίου.

4. Στην αρχική αξιωματική διατύπωση της κβαντικής θεωρίας υποτέθηκε ότι κάθε αυτοσυναφής τελεστής αντιστοιχεί σε κάποιο παρατηρήσιμο μέγεθος. Ωστόσο πολλοί τέτοιοι τελεστές αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα που πολύ δύσκολα μπορούμε να φανταστούμε εργαστηριακό εξοπλισμό ικανό να τα μετρήσει. Επίσης οι τελεστές που μας μεταφέρουν στον χώρο των διανυσμάτων που δεν αντιστοιχούν σε φυσική κατάσταση, μάλλον είναι τελεστές που δεν αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα μεγέθη. Άρα υπάρχουν τελεστές χωρίς φυσική σημασία.

5. Υπάρχουν φυσικά παρατηρήσιμα μεγέθη που δεν αντιστοιχούν σε (αυτοσυναφείς) τελεστές στον χώρο $\mathcal{H}$. Ένα τέτοιο μέγεθος είναι η μάζα m ενός σώματος, που στην Νευτώνεια φυσική είναι ένα ουσιαστικό και θεμελιώδες μέγεθος και στην κβαντική φυσική εμφανίζεται ως *παράμετρος* στην Χαμιλτονιανή $\widehat{H}$ και όχι ως τελεστής. Ένα άλλο μέγεθος είναι ο χρόνος t.

6. Μία συλλογή αντικειμένων που αποτελούν ένα φυσικό σύστημα είναι δυνατό (ή είναι το περισσότερο πιθανό σενάριο) να βρίσκονται σε διαφορετικές καταστάσεις, η καθεμία με τη δική της κλασσική πιθανότητα, λόγω, π.χ. θερμικής αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε την λεγόμενη "μικτή κατάσταση" (mixed state) και τότε η κατάλληλη αντιμετώπιση είναι με τον πίνακα πυκνότητας.

7. Από την εξίσωση (4.1) βλέπουμε ότι οι φυσικές προβλέψεις της θεωρίας είναι αμετάβλητες αν το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$πολλαπλασιαστεί με τυχαίο μιγαδικό αριθμό α τέτοιον ώστε $\|\alpha\| = 1$.

4.2 Κβάντωση ενός Συστήματος

4.2.1 Διατήρηση της Κλασσικής Δομής

Για να μπορέσουμε να εργαστούμε με την κβαντική θεωρία πρέπει να έχουμε ένα τρόπο κατασκευής της κατάλληλης Χαμιλτονιανής $\widehat{H}$ αλλά και των τελεστών των παρατηρήσιμων ποσοτήτων.

Στην πράξη σε πολλές περιπτώσεις αναζητούμε ένα τρόπο να κατασκευάσουμε το κβαντικό ανάλογο ενός κλασσικού συστήματος με ένα καταστατικό χώρο $\mathcal{S}$.

Στην κλασσική θεωρία σε κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος αντιστοιχεί μία (Borel) συνάρτηση (μεταξύ τοπολογικών χώρων) $f : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$. Επομένως η "κβάντωση" είναι στην ουσία μία απεικόνιση $f \mapsto \widehat{f}$, η οποία σχετίζει κάθε συνάρτηση f σε ένα αυτοσυναφή τελεστή $\widehat{f}$ στον χώρο $\mathcal{H}$.

Ο χώρος $C(\mathcal{S}.\mathbb{R})$ των συναρτήσεων $f : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ εμπεριέχει στη δομή του τρεις μαθηματικές ιδιότητες: Την γραμμικότητα, δηλαδή

$$(a_1 f_1 + a_2 f_2)(s) = a_1 f_1(s) + a_2 f_2(s) \tag{4.3}$$

για κάθε $f_1, f_2 \in C(\mathcal{S}, \mathbb{R})$, για κάθε $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ και για κάθε $s \in \mathcal{S}$. Επομένως ο χώρος $C(\mathcal{S}, \mathbb{R})$ γίνεται διανυσματικό χώρος.

Η δεύτερη ιδιότητα είναι το γινόμενο δύο συναρτήσεων $f_1, f_2 \in C(\mathcal{S}, \mathbb{R})$

$$(f_1 f_2)(s) = f_1(s) f_2(s) \tag{4.4}$$

για κάθε $s \in \mathcal{S}$.

Και η τρίτη είναι η ύπαρξη της πράξης $\{f, g\}$ (αγκύλη Poisson), που αντιστοιχεί σε κάθε ζεύγος συναρτήσεων $f_1, f_2 \in C(\mathcal{S}, \mathbb{R})$ μία τρίτη συνάρτηση $\{f, g\}$. Η ιδιότητα αυτή έχει κεντρικό ρόλο στην κβάντωση κατά Dirac, ο οποίος θεωρεί τον μεταθέτη $[f, g]$ ανάλογο της αγκύλης Poisson $\{f, g\}$.

Η κβάντωση ενός συστήματος γίνεται θεωρώντας τις δύο παρακάτω υποθέσεις:

Q1 Η διαδικασία της κβάντωσης διατηρεί τη γραμμικότητα, ή αλλιώς η απεικόνιση $f \mapsto \widehat{f}$ είναι γραμμική

$$a_1 f_1 + a_2 f_2 \mapsto a_1 \widehat{f_1} + a_2 \widehat{f_2} \tag{4.5}$$

Q2 Η διαδικασία της κβάντωσης διατηρεί την συνάρτηση, με την έννοια: Αν $\mathcal{F} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ είναι οποιαδήποτε πραγματική συνάρτηση, τότε η συνάρτηση $\mathcal{F}(f)$ του $\mathcal{S}$ ορίζεται ως

$$\mathcal{F}(f)(s) = \mathcal{F}(f(s)), \quad \forall\, s \in \mathcal{S} \tag{4.6}$$

Και αν $\widehat{f}$ ο τελεστής που αντιπροσωπεύει την f τότε ο τελεστής που αντιπροσωπεύει την $\mathcal{F}(f)$ είναι ο $\mathcal{F}(\widehat{f})$, δηλαδή:

$$\widehat{\mathcal{F}(f)} = \mathcal{F}(\widehat{f}) \tag{4.7}$$

Στην κυματομηχανική υπάρχει επίσης και ο κανόνας ότι οι τελεστές $\widehat{x}$ και $\widehat{p}$ πρέπει να ικανοποιούν και τη μεταθετική σχέση

$$[\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar \tag{4.8}$$

Επίσης εάν $f(x, p)$ ένα φυσικό μέγεθος, τότε ο αντίστοιχος κβαντικός τελεστής υποτίθεται ότι είναι $f(\widehat{x}, \widehat{p})$. Ωστόσο αυτό δεν είναι τόσο απλό όσο φαίνεται αφού, για παράδειγμα, το κλασσικό μέγεθος xp, που είναι το ίδιο με το px δεν μπορεί να αντιστοιχεί στο κβαντικό $\widehat{x}, \widehat{p}$ γιατί είναι διαφορετικό από το $\widehat{p}, \widehat{x}$. Σε τέτοιες περιπτώσεις ο κβαντικός τελεστής γράφεται συνήθως $\frac{\widehat{x}\widehat{p}+\widehat{p}\widehat{x}}{2}$.

Ακόμα χειρότερα είναι τα πράγματα για πολλαπλασιασμό συναρτήσεων, όπου ο απλός κανόνας

$$fg \to \frac{1}{2}(\widehat{f}\widehat{g} + \widehat{g}\widehat{f}) \tag{4.9}$$

οδηγεί σε ατοπήματα! Για παράδειγμα: τα κλασσικά ισοδύναμα $x(xp)$ και $(x^2)p$.

Ένα άλλο ενδιαφέρον είναι η πρόσθεση δύο μεγεθών, έστω $A + B$. Ιδίως εάν δεν μετατίθονται. Η έννοια που έχει το άθροισμα είναι ότι μετράμε ταυτόχρονα την τιμή του A και του B και προσθέτουμε τα αποτελέσματα; Ακόμα και αν μπορούσαμε να μετρήσουμε ταυτόχρονα τα μεγέθη πάλι υπάρχει πρόβλημα, όπως μπορεί να δειχθεί εύκολα με τους τελεστές του spin $\widehat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ και $\widehat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ και $\widehat{S}_x + \widehat{S}_y$ όπου οι πρώτοι έχουν ιδιοτιμές $\pm\hbar/2$ και ο τελευταίος $\pm\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$.

4.2.2 Ο ορισμός του $\mathcal{F}(\widehat{A})$

Οι πολυωνυμικές συναρτήσεις του τελεστή $\widehat{A}$ είναι πολύ εύκολο να οριστούν. Αν ο $\widehat{A}$ έχει ιδιοτιμές a και ιδιοδιανύσματα $|a\rangle$, τότε $\widehat{A}^n|a\rangle = a^n|a\rangle$ και γενικότερα:

$$Q(\widehat{A})|a\rangle = Q(a)|a\rangle \tag{4.10}$$

και γενικότερα

$$\mathcal{F}(\widehat{A})|a\rangle \equiv \mathcal{F}(a)|a\rangle \tag{4.11}$$

δηλαδή, για παράδειγμα, $\ln \widehat{A}|a\rangle = \ln a|a\rangle$.

Τώρα για να επεκτείνουμε τα παραπάνω για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$ θα χρησιμοποιήσουμε την ανάλυση (θεώρημα ανάπτυξης, expansion theorem)

$$|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{M} \sum_{j=1}^{d(m)} \langle a_m, j|\psi\rangle |a_m, j\rangle \tag{4.12}$$

όπου $a_1, a_2, \ldots, a_M$ είναι οι ξεχωριστές ιδιοτιμές του $\widehat{A}$ και $j = 1, 2, \ldots, d(m)$ είναι οι δείκτες των εκφυλισμένων ιδιοδιανυσμάτων με κοινή ιδιοτιμή a_m. Τότε μπορούμε να γράψουμε

$$\mathcal{F}(\widehat{A})|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{M} \mathcal{F}(a_m)\widehat{P}(m)|\psi\rangle \tag{4.13}$$

όπου $\widehat{P}_m = \sum_{j=1}^{d(m)} |a_m, j\rangle\langle a_m, j|$ είναι ο τελεστής προβολής στον υποχώρο των ιδιοδιανυσμάτων με ιδιοτιμή a_m. Και τελικά

$$\mathcal{F}(\widehat{A}) = \sum_{m=1}^{M} \mathcal{F}(a_m)\widehat{P}(m) \tag{4.14}$$

Επίσης αν $\mathcal{F}(a)$ είναι πραγματικές για κάθε a τότε ο $\mathcal{F}(\widehat{A})$ είναι αυτοσυναφής.

Σχόλια

1. Αν υπάρχουν εκφυλισμένα ιδιοδιανύσματα τότε ο κανόνας για την πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής a_n του τελεστή $\widehat{A}$ είναι

$$\mathrm{Prob}(A = a_n; |\psi\rangle) = \langle\psi|\widehat{P}_n|\psi\rangle \tag{4.15}$$

όπου $\widehat{P}_n = \sum_{j=1}^{d(n)} |a_n, j\rangle\langle a_n, j|$ είναι ο τελεστής προβολής στον υποχώρο των ιδιοδιανυσμάτων με ιδιοτιμή a_n.

2. Ο κανόνας $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle$ είναι τελείως ισοδύναμος με το ζεύγος των κανόνων:

(i) Οι μετρήσεις πάντα μας δίνουν ιδιοτιμές.

(ii) $\mathrm{Prob}(A = a_n; |\psi\rangle) = \langle\psi|\widehat{P}_n|\psi\rangle$

3. Η συνθήκη κανονικοποίησης $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ και αναγωγή στη μονάδα $\sum_{m=1}^{M} \widehat{P}_m = \hat{\mathcal{I}}$ φανερώνουν ότι

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{M} \langle\psi|\widehat{P}_m|\psi\rangle = 1 \tag{4.16}$$

έτσι ώστε να ισχύει (όπως απαιτείται)

$$\sum_{m=1}^{M} \mathrm{Prob}(A = a_m; |\psi\rangle) = 1 \tag{4.17}$$

Το αποτέλεσμα αυτό είναι θεμελιώδους σημασίας για την πιθανοκεντρική ερμηνεία της κβαντικής θεωρίας και φανερώνει την βαθιά φυσική σημασία του θεωρήματος επέκτασης (4.12), το οποίο είναι απλά η γενίκευση του Πυθαγόρειου θεωρήματος σε χώρους διάστασης $n > 3$. Δηλαδή στην καρδιά του φορμαλισμού της κβαντικής θεωρίας υπάρχει το Πυθαγόρειο θεώρημα.

5 | Διάφορα Τεχνικά Θέματα

5.1 Κλασσική και Κβαντική Πιθανότητα

5.1.1 Κλασσική Πιθανότητα

Έστω ένα φυσικό σύστημα και ένα παρατηρήσιμο μέγεθος A που μπορεί να πάρει μία από τις τιμές του πεπερασμένου συνόλου $a_1, a_2, \ldots, a_N$. Σκοπός μας είναι να καταστρώσουμε μία θεωρία που να αντιστοιχεί σε κάθε κατάσταση s του συστήματος ένα σύνολο από πιθανότητες $\mathrm{Prob}(A = a_i; s)$, $i = 1, 2, \ldots, N$ μέτρησης της τιμής a_i του μεγέθους A.

Οι αριθμοί $\mathrm{Prob}(A = a_i; s)$ πρέπει να ικανοποιούν τις δύο προϋποθέσεις:

$$0 \le \mathrm{Prob}(A = a_i; s) \le 1 \tag{5.1}$$

$$\sum_{i=1}^{N} \mathrm{Prob}(A = a_i; s) = 1 \tag{5.2}$$

όπου η πρώτη έχει να κάνει με την πιθανότητα ώς σχετική συχνότητα απόκτησης μίας τιμής από ένα μεγάλο πλήθος πειραμάτων, που φυσικά είναι ένας αριθμός από μηδέν έως ένα, και η δεύτερη αντανακλά μαθηματικώς το γεγονός ότι η πιθανότητα μέτρησης *κάποιας τιμής* πρέπει να είναι 1.

Ο κλασσικός τρόπος κατασκευής των πιθανοτήτων είναι μέσω των γενικευμένων όγκων (ή καλύτερα της θεωρίας μέτρων). Αν X μία περιοχή ενός N-διάστατου χώρου με Καρτεσιανές συντεταγμένες $x^1, x^2, \ldots, x^N$ τότε ο όγκος της περιοχής ορίζεται ως

$$V_X = \int \cdots \int_X dx^1 dx^2 \cdots dx^N \tag{5.3}$$

Αν η περιοχή X χωρίζεται σε N disjoint περιοχές $X_1, X_2, \ldots X_N$ που η ένωσή τους μας δίνει τον χώρο X, με όγκους $V_1, V_2, \ldots, V_N$ μπορούμε να ορίζουμε την πιθανότητα $\mathrm{Prob}(A = a_1; s) = V_i/V$ και να ικανοποιούνται οι δύο παραπάνω προϋποθέσεις.

Επίσης μπορούμε να ορίσουμε τον γενικευμένο όγκο ως

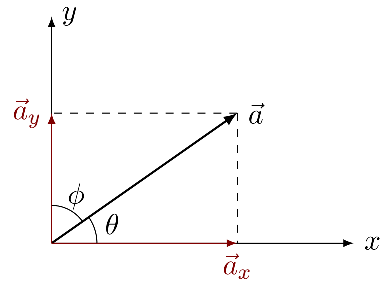
$$V(X) = \int \cdots \int_X \rho(x^1, x^2, \ldots, x^N) dx^1 dx^2 \cdots dx^N \tag{5.4}$$

όπου η συνάρτηση $\rho(x^1, x^2, \ldots, x^N)$ ονομάζεται πυκνότητα πιθανότητας και μπορεί να οριστεί έτσι ώστε $V_X = 1$, πράγμα που μας επιτρέπει να ορίσουμε την πιθανότητα ως

$$\mathrm{Prob}(A = a_1; s) = V(X_i) = \int \cdots \int_{X_i} \rho(x^1, x^2, \ldots, x^N) dx^1 dx^2 \cdots dx^N \tag{5.5}$$

5.1.2 Κβαντική Πιθανότητα

Η ουσιαστική διαφορά της κβαντικής πιθανότητας είναι ότι δεν πηγάζει από τον προηγούμενο φορμαλισμό των όγκων, αλλά από μία τελείως διαφορετική μαθηματική θεώρηση, και συγκεκριμένα, από το Πυθαγόρειο Θεώρημα.



Σχήμα 3. Το Πυθαγόρειο θεώρημα σε δύο διαστάσεις

Στο σχήμα 3 φαίνεται ένα διάνυσμα σε χώρο δύο διαστάσεων. Το Πυθαγόρειο θεώρημα μας λέει ότι $a^2 = a_x^2 + a_y^2$ ή $\left(\frac{a_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{a_y}{a}\right)^2 = 1$. Αυτό είναι η γνωστή σχέση $\text{συν}^2\theta + \text{ημ}^2\theta = 1$ ή αλλιώς

$$\text{συν}^2\theta + \text{συν}^2\varphi = 1 \tag{5.6}$$

όπου θ και φ είναι οι γωνίες που σχηματίζει το διάνυσμα με τους άξονες x και y αντίστοιχα. Τα συνημίτονα στο τετράγωνο είναι συναρτήσεις μεταξύ του 0 και του 1, άρα είναι δυνατό να θεωρηθούν ως πιθανότητες του μεγέθους A με δύο μόνο δυνατές τιμές a_1, a_2. Επίσης τα συνημίτονα ορίζονται πολύ όμορφα με τα μοναδιαία διανύσματα $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ στον τρισδιάστατο χώρο ως $\text{συν}\,\theta_1 = \vec{a}\cdot\vec{i}$, $\text{συν}\,\theta_2 = \vec{a}\cdot\vec{j}$, $\text{συν}\,\theta_3 = \vec{a}\cdot\vec{k}$.

Αυτό το μοντέλο μπορεί να γενικευτεί σε χώρους N διαστάσεων (και ακόμα και σε απειροδιάστατους χώρους). Η μόνη διαφορά στην κβαντική θεωρία είναι ότι οι συντεταγμένες των διανυσμάτων είναι μιγαδικοί και όχι πραγματικοί αριθμοί. Οι καταστάσεις του συστήματος περιγράφονται ως διανύσματα $|\psi\rangle$ σε κάποιο διανυσματικό χώρο (Hilbert) και σε κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος αντιστοιχεί ένα σύνολο "ειδικών" διανυσμάτων (ιδιοδιανύσματα $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, κτλ) που είναι οι γενικεύσεις των $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}, \ldots$. Σε κάθε ένα $|a_i\rangle$ από τα "ειδικά" αυτά διανύσματα αντιστοιχεί και μία συγκεκριμένη τιμή a_1 του παρατηρήσιμου μεγέθους και η πιθανότητα εμφάνισης αυτής της τιμής δίνεται από το μιγαδικό ανάλογο του τετραγώνου του συνημιτόνου ($\langle\psi|a_i\rangle$) της γωνίας του διανύσματος $|a_i\rangle$ και του καταστατικού διανύσματος $|\psi\rangle$.

Είναι μία άξια γιορτής σκέψη, ότι η ουσία της διαφοράς κλασσικής και κβαντικής πιθανότητας είναι απλώς η διαφορά μεταξύ των αριθμών που ορίζονται ως πηλίκα όγκων και των αριθμών που προκύπτουν από το Πυθαγόρειο θεώρημα.

5.2 Πίνακας Πυκνότητας

5.2.1 Pure State

***Ορισμός* 5.2.1.** *Το* ίχνος (trace) *ενός τελεστή A δίνεται από την έκφραση:*

$$\text{Tr}\,A = \sum_n \langle n|A|n\rangle \tag{5.7}$$

όπου $|n\rangle$ μία ορθοκανονική βάση.

Παράδειγμα, για τον τελεστή $T = |\psi\rangle\langle\varphi|$:

$$\operatorname{Tr} T = \sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\varphi|n\rangle = \sum_n \langle\varphi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle \tag{5.8}$$

Αν $|\psi\rangle$ μία καθαρή κατάσταση (pure state) τότε ο πίνακας πυκνότητας ορίζεται ως

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{5.9}$$

και έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

$$i)\quad \rho^2 = \rho \tag{5.10}$$
$$ii)\quad \rho^\dagger = \rho \tag{5.11}$$
$$iii)\quad \operatorname{Tr}\rho = 1 \tag{5.12}$$
$$iv)\quad \rho \geq 0 \tag{5.13}$$

Τότε η αναμενόμενη τιμή ενός μεγέθους (observable) σε μία κατάσταση που περιγράφεται από τον πίνακα πυκνότητας ρ δίνεται από τη σχέση:

$$\langle A\rangle_\rho = \operatorname{Tr}(\rho A) \tag{5.14}$$

Απόδειξη. Πράγματι:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\rho = \operatorname{Tr}(\rho A) = \operatorname{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|A) &= \sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\psi|A|n\rangle \\ = \sum_n \langle\psi|A|n\rangle\langle n|\psi\rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A\rangle \end{aligned}\tag{5.15}$$

Όπου χρησιμοποιήθηκε η σχέση πληρότητας για τα $|n\rangle$. ∎

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα κβαντικό σύστημα που αποτελείται από πολλά (N) σώματα. Το καθένα από αυτά μπορεί να έχει κατάσταση που ανήκει στο $\{|\psi_i\rangle\}$. Αν όλα τα σώματα του συστήματος βρίσκονται στην ίδια κατάσταση το σύστημα αντιπροσωπεύεται από μία *καθαρή κατάσταση*. Για να κάνουμε όμως στατιστικές προβλέψεις πρέπει να αναφερθούμε σε όλο το στατιστικό σύστημα.

Έστω ότι το σύστημα βρίσκεται στην $|\psi\rangle$ κατάσταση, η οποία μπορεί να αναλυθεί ως προς τα ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή A ($A|n\rangle = a_n|n\rangle$) ως

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \tag{5.16}$$

Η αναμενόμενη τιμή είναι

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n |c_n|^2 a_n = \sum_n \frac{N_n}{N} a_n \tag{5.17}$$

όπου $|c_n|^2$ η πιθανότητα να μετρήσουμε την ιδιοτιμή a_n, η οποία θα ισούται με τον λόγο του αριθμού N_n που συναντάμε την ιδιοτιμή προς τον αριθμό N των αντικειμένων στο σύνολο. Οι ιδιότητες (5.10)-(5.13) ισχύουν και τώρα, όπως επίσης και η

$$\operatorname{Tr}\rho^2 = 1 \tag{5.18}$$

5.2.2 Mixed State

Ξέρουμε τους κανόνες της κβαντομηχανικής για καθαρές (pure) καταστάσεις. Μπορούν όμως να υπάρχουν φυσικά συστήματα που περιγράφονται από μικτές καταστάσεις (mixed state) της μορφής

$$\rho = (|\psi_1\rangle, |\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_D\rangle; w_1, w_2, \ldots, w_D) \tag{5.19}$$

στην οποία η κλασσική πιθανότητα να είναι το καταστατικό διάνυσμα στην $|\psi_k\rangle$ κατάσταση είναι w_k και ισχύει $0 < w_k \leq 1$ και $\sum_{k=1}^{D} w_k = 1$.

Γενικά η πιθανότητα να μετρηθεί η ιδιοτιμή a_n στο καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ είναι

$$\text{Prob}(A = a_n; |\psi\rangle) = \langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi\rangle$$

άρα για την μικτή κατάσταση θα είναι:

$$\text{Prob}(A = a_n; \rho) = \sum_{k=1}^{D} \text{Prob}(A = a_n; |\psi_k\rangle) = \sum_{k=1}^{D} w_k \langle\psi_k|\mathbb{P}_n|\psi_k\rangle \tag{5.20}$$

(όπου υποθέτουμε ότι η κλασσική και κβαντική πιθανότητα είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους.)

Σκοπός μας είναι να γράψουμε με πιο συμπαγή μορφή την εξίσωση (5.20). Αν B ένας τελεστής και $\{|e_1\rangle, |e_2, \ldots, |e_N\rangle\rangle\}$ μία ορθοκανονική βάση στον $\mathcal{H}$, τότε το *ίχνος* του τελεστή ορίζεται ως

$$\text{Tr}\, B = \sum_{i=1}^{N} \langle e_i|B|e_i\rangle \tag{5.21}$$

Αν $|\psi\rangle$ ένα διάνυσμα στον $\mathcal{H}$. Τότε:

$$\begin{aligned}
\langle\psi|B|\psi\rangle &= \sum_{i=1}^{N} \langle\psi|B|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle e_i|\psi\rangle\langle\psi|B|e_i\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{N} \langle e_i|P_\psi B|e_i\rangle = \text{Tr}(P_\psi B)
\end{aligned} \tag{5.22}$$

όπου $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ είναι ο προβολικός τελεστής στο διάνυσμα $|\psi\rangle$. Τότε η βασική κβαντική πιθανότητα γράφεται:

$$\text{Prob}(A = a_n; |\psi\rangle) = \text{Tr}(P_\psi P_n) \tag{5.23}$$

και η αναμενόμενη τιμή του A

$$\langle A\rangle_\psi = \text{Tr}(P_\psi A) \tag{5.24}$$

Τώρα αν ορίσουμε *τελεστή μικτής κατάστασης* τον $\widehat{\rho}$ ως ένα σταθμισμένο άθροισμα τελεστών καθαρών καταστάσεων:

$$\widehat{\rho} = \sum_{k=1}^{D} w_k P_{|\psi_k\rangle} \tag{5.25}$$

η πιθανότητα μπορεί να γραφεί:

$$\text{Prob}(A = a_n; \rho) = \sum_{k=1}^{D} w_k \,\text{Tr}(P_{|\psi_k\rangle} P_n) = \text{Tr}\left(\sum_{k=1}^{D} w_k P_{|\psi_k\rangle} P_n\right) \tag{5.26}$$

ή τελικά:

$$\boxed{\mathrm{Prob}(A = a_n; \rho) = \mathrm{Tr}\,(\widehat{\rho} P_n)} \tag{5.27}$$

Και η αναμενόμενη τιμή του A

$$\boxed{\langle A \rangle_\rho) = \mathrm{Tr}\,(\widehat{\rho} A)} \tag{5.28}$$

Αν $\widehat{\rho} = P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ τότε παίρνουμε το αποτέλεσμα για την αναμενόμενη τιμή σε μία καθαρή κατάσταση.

Ο τελεστής $\widehat{\rho}$ όπως ορίστηκε έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

$$II. \quad \widehat{\rho} = \widehat{\rho}^\dagger \tag{5.29}$$

$$III. \quad \mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1 \tag{5.30}$$

$$IV. \quad \langle\psi|\widehat{\rho}|\psi\rangle \geq 0 \text{ για κάθε διάνυσμα } |\psi\rangle \tag{5.31}$$

Κάθε τελεστής που πληρεί τις παραπάνω ιδιότητες λέγεται *πίνακας πυκνότητας* (density matrix).

Η ιδιότητα (i) (5.10) δεν ισχύει πλέον αφού

$$\widehat{\rho}^2 = \sum_i \sum_j w_i w_j |\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_i||\psi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle\psi_j| = \sum_i w_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \neq \widehat{\rho} \tag{5.32}$$

Επίσης μπορούμε να υπολογίσουμε το ίχνος του $\widehat{\rho}^2$ που τώρα είναι μικρότερο από το ένα γιατί:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho}^2 &= \sum_n \langle n| \left(\sum_i \sum_j w_i w_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i||\psi_j\rangle\langle\psi_j| \right) |n\rangle \\
&= \sum_i \sum_j w_i w_j \langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \sum_n |n\rangle\langle n||\psi_i\rangle \\
&= \sum_i \sum_j w_i w_j \langle\psi_i|\psi_j\rangle^2 \\
&= \sum_i w_i^2 < \sum_i w_i = 1
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Αυτή η ιδιότητα είναι ένας δείκτης αν έχουμε καθαρή κατάσταση αφού τότε $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1$, ή αν έχουμε μικτές καταστάσεις, όπου $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} < 1$.

Ο τελεστής $\widehat{\rho}$ είναι αυτοσυζυγής οπότε έχει πραγματικές ιδιοτιμές, που είναι οι τιμές $w_1, w_2, \ldots, w_D$, όπως φαίνεται από την εξίσωση (5.25). Όμως ούτε οι ιδιοτιμές είναι αναγκαστικά διαφορετικές, ούτε τα ιδιοδιανύσματα του $\widehat{\rho}$ ορθογώνια μεταξύ τους. Επομένως ένας δεδομένος πίνακας πυκνότητας δεν επιδέχεται μία μοναδική επέκταση με την έννοια της εξίσωσης (5.25).

Thermal State

Ένα πολύ καλό πρακτικό παράδειγμα μικτής κατάστασης είναι η thermal state που περιγράφει ένα κβαντικό στατιστικό σύστημα σε θερμοκρασία T. Ο πίνακα πυκνότητας τότε είναι:

$$\widehat{\rho}_T = \frac{e^{-\widehat{H}/kT}}{Z(T)} \tag{5.34}$$

με

$$Z(T) = \mathrm{Tr}(e^{-\widehat{H}/kT}) \tag{5.35}$$

η συνάρτηση καταμέρισης και k η σταθερά του Boltzmann. Αν θεωρήσουμε ότι η Χαμιλτονιανή έχει (μη-εκφυλισμένες) ιδιοτιμές ενέργειας $E_1, E_2, \ldots, E_M$ μπορούμε να γράψουμε τον πίνακα

$$\widehat{\rho}_T = \sum_{m=1}^{M} \frac{e^{-E_m/kT}}{Z(T)} |E_m\rangle\langle E_m| \tag{5.36}$$

που δείχνει την κλασσική απροσδιοριστία στην πρόβλεψη της κατάστασης του συστήματος λόγω θερμικών ανακατανομών. Η πιθανότητα να είναι η κατάσταση η $|E_m\rangle$ είναι $\frac{e^{-E_m/kT}}{Z(T)}$. Επίσης μπορούμε να βρούμε την συνάρτηση κατανομής ως

$$Z(T) = \sum_{m=1}^{M} e^{-E_m/kT} \tag{5.37}$$

Η θερμική κατάσταση αυτή λέγεται και Gibbs state.

Κατάσταση μέγιστης ανάμιξης

Αν $\{|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |D\rangle\}$ μία ορθοκανονική βάση και κάθε κατάσταση από αυτές έχει ίση πιθανότητα εμφάνισης τότε αυτή θα είναι $1/D$. Ο πίνακας πυκνότητας θα είναι:

$$\widehat{\rho} = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^{D} |i\rangle\langle i| = \frac{1}{D} \tag{5.38}$$

και είναι ανεξάρτητος από την επιλογή της βάσης. Η κατάσταση αυτή ονομάζεται *κατάσταση μέγιστης ανάμιξης*.

Παράδειγμα

Η κατάσταση spin ενός ηλεκτρονίου (στη βάση των ιδιοδιανυσμάτων του $\widehat{S}_z$) περιγράφεται στο $\mathbb{C}^2$ από τον πίνακα $\widehat{\rho} = \left(\begin{smallmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{smallmatrix}\right)$ όπου a και b είναι πραγματικοί αριθμοί με $a, b \geq 0$ και $a + b = 1$.

(i) Αν μετρήσουμε το spin S_x ποια η πιθανότητα να είναι (α) $\frac{\hbar}{2}$ (β) $-\frac{\hbar}{2}$;

(ii) Υπολογίστε την αναμενόμενη τιμή.

Λύση

(i) Ο πίνακας Pauli $\widehat{\sigma}_x = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$ έχει ιδιοτιμές που προκύπτουν από την χαρακτηριστική εξίσωση

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 = 1 \Leftrightarrow \lambda = 1,\ \lambda = -1$$

Ένα ιδιοδιάνυσμα του $\widehat{\sigma}_x$ με ιδοτιμή $\lambda = 1$ ικανοποιεί την εξίσωση $\left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)\left(\begin{smallmatrix} a \\ b \end{smallmatrix}\right) = 1\left(\begin{smallmatrix} a \\ b \end{smallmatrix}\right)$ η οποία δίνει εύκολα $a = b$. Το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα θα είναι $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)$. Όμοια για την ιδιοτιμή $\lambda = -1$ έχουμε το ιδιοδιάνυσμα $|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ -1 \end{smallmatrix}\right)$.

Από την βασική εξίσωση (5.27) βλέπουμε ότι την πιθανότητα είναι $\mathrm{Prob}(A = a_n; \rho) = \mathrm{Tr}(\widehat{\rho} P_{A=a_n})$, όπου $P_{A=a_n}$ είναι ο τελεστής προβολής στον υποχώρο των ιδιοδιανυσμάτων του A με ιδιοτιμή a_n.

Εδώ οι ιδιοτιμές του τελεστή $S_x = \frac{\hbar}{2}\widehat{\sigma}_x$ είναι μη-εκφυλισμένες και ίσες με $\frac{\hbar}{2}$ και $-\frac{\hbar}{2}$. Επομένως πρέπει να βρούμε τους τελεστές προβολής $P_{S_x=\hbar/2} = P_{|\rightarrow\rangle}$ και $P_{S_x=-\hbar/2} = P_{|\leftarrow\rangle}$.

Κάθε τελεστής σε ένα διανυσματικό χώρο μπορεί να γραφεί ως πίνακας σε κάποια βάση. Εδώ μπορούμε να διαλέξουμε ως βάση τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή S_z, $|e_1\rangle = \binom{1}{0}$ και $|e_2\rangle = \binom{0}{1}$. Επομένως ο τελεστής προβολής στην $|\rightarrow\rangle$ θα έχει τα στοιχεία πίνακα

$$(P_{|\rightarrow\rangle})_{ij} = \langle e_i|P_{|\rightarrow\rangle}|e_j\rangle = \langle e_i|\rightarrow\rangle\langle\rightarrow|e_j\rangle \tag{5.39}$$

για $i, j = 1, 2$.

Μπορούμε εύκολα να βρούμε τα γινόμενα $\langle e_i|\rightarrow\rangle$ και $\langle\rightarrow|e_i\rangle$ οπότε προκύπτει ο πίνακας

$$P_{|\rightarrow\rangle} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.40}$$

Ο ίδιος πίνακας μπορεί να βρεθεί άμεσα με το εξωτερικό γινόμενο

$$P_{|\rightarrow\rangle} = |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}(1\,1) \tag{5.41}$$

Και με τον ίδιο τρόπο μπορεί να βρεθεί άμεσα και ο $P_{|\leftarrow\rangle}$

$$P_{|\leftarrow\rangle} = |\leftarrow\rangle\langle\leftarrow| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}(1\ -1) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.42}$$

Η πιθανότητα να μετρηθεί η τιμή $\frac{\hbar}{2}$ του S_x είναι $\mathrm{Tr}(\widehat{\rho}P_{|\rightarrow\rangle})$.

$$\widehat{\rho}P_{|\rightarrow\rangle} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & a \\ b & b \end{pmatrix} \tag{5.43}$$

με ίχνος προφανώς $\frac{1}{2}(a+b) = \frac{1}{2}$

Όμοια:

$$\widehat{\rho}P_{|\leftarrow\rangle} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -a \\ -b & b \end{pmatrix} \tag{5.44}$$

με ίχνος πάλι $\frac{1}{2}(a+b) = \frac{1}{2}$.

Επομένως

$$\mathrm{Prob}(S_x = \frac{\hbar}{2}; \widehat{\rho}) = \mathrm{Prob}(S_x = -\frac{\hbar}{2}; \widehat{\rho}) = \frac{1}{2} \tag{5.45}$$

(ii) Η αναμενόμενη τιμή μέτρησης του S_x στον $\widehat{\rho}$ είναι $\frac{1}{2}\frac{\hbar}{2} + \frac{1}{2}\frac{-\hbar}{2} = 0$.

Τυπικά η αναμενόμενη τιμή $\langle S_x\rangle_\rho$ είναι $\langle S_x\rangle_\rho = \mathrm{Tr}(S_x\widehat{\rho})$, επομένως

$$\langle S_x\rangle_\rho = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b \\ a & 0 \end{pmatrix} \tag{5.46}$$

με ίχνος μηδέν.

5.2.3 Χρονική Εξέλιξη Πίνακα Πυκνότητας

Η εξίσωση κίνησης για τον πίνακα πυκνότητας βρίσκεται από την εξίσωση Schrödinger και την ερμιτιανώς συζυγή της.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad \xrightarrow{\dagger} \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = H\langle\psi| \tag{5.47}$$

Παραγωγίζοντας (μερικά ως προς τον χρόνο) τον πίνακα πυκνότητας, που για απλότητα θα σημειώνουμε απλά ρ, και πολλαπλασιάζοντας επί $i\hbar$ έχουμε

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho &= \sum_i w_i(\underbrace{|\dot{\psi}\rangle}_{-\frac{i}{\hbar}H|\psi_i\rangle}\langle\psi_i| + |\psi_i\rangle\underbrace{\langle\dot{\psi}|}_{-\frac{i}{\hbar}\langle\psi_i|H}) \\ &= \sum_i w_i(H\rho_i - \rho_i H) \\ &= [H,\rho] \end{aligned} \tag{5.48}$$

Όπου ως ρ_i σημειώνεται ο προβολικός τελεστής $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$.

Θεώρημα* 5.2.2.** *Η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας ικανοποιεί την εξίσωση* ***von Neumann

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho = [H,\rho]} \tag{5.49}$$

Εναλλακτικά μπορούμε να βρούμε την χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας με τη δράση του μοναδιαίου *τελεστή χρονικής μετατόπισης* $U(t,t_0)$, ή αλλιώς του *διαδότη*

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \tag{5.50}$$

ως:

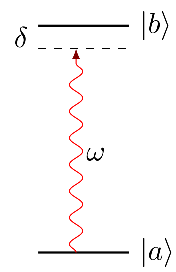
$$\rho(t) = U(t,t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t,t_0) \tag{5.51}$$

6 Αλληλεπίδραση Ατόμου - Πεδίου

6.1 Ημικλασσική Προσέγγιση

Στο κεφάλαιο αυτό μελετάμε την συντονιστική αλληλεπίδραση Ατόμου-Πεδίου (φωτός). Πολλά πραγματικά συστήματα, ατόμων, μορίων κτλ και η αλληλεπίδρασή τους με το φως μοντελοποιούνται με παρόμοιο τρόπο και οδηγούνται έτσι σε προσεγγιστικές λύσεις, οι οποίες συχνά είναι σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα.

Στην ημικλασσική προσέγγιση αντιμετωπίζουμε το φώς ως κλασσικό ηλεκτρομαγνητικό κύμα και το άτομο ως κβαντικό σύστημα και διατυπώνουμε τις εξισώσεις Bloch χωρίς και με όρους απόσβεσης.



Σχήμα 4. Σχηματική παράσταση της εξαναγκασμένης αλληλεπίδρασης ατόμου δύο επιπέδων με ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, με αποσυντονισμό δ

Το σύστημα αποτελείται από δύο ενεργειακά επίπεδα $|a\rangle$ (θεμελιώδης στάθμη) και $|b\rangle$ (διεγερμένη) με ενέργειες $\hbar\omega_a$ και $\hbar\omega_b$ αντίστοιχα. Ο αποσυντονισμός ορίζεται ώς $\delta = (\omega_b - \omega_a) - \omega$.

Ας υποθέσουμε ότι το άτομο αλληλεπιδρά με ένα ημιτονοειδές πεδίο

$$\vec{E} = \hat{e}E_0 \,\text{συν}\, \omega t \tag{6.1}$$

όπου $\hat{e}$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στη διεύθυνση της πόλωσης του πεδίου.

Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}'(t) \tag{6.2}$$

όπου $\widehat{H}_0$ είναι η χαμιλτονιανή του ατόμου με ενέργειες των σταθμών (α) και (β) είναι

$$E_a = \hbar\omega_a \text{ και } E_b = \hbar\omega_b \tag{6.3}$$

και $\widehat{H}'(t)$ είναι η ενέργεια της αλληλεπίδρασης του ατόμου με το ηλεκρομαγνητικό πεδίο. Στη διπολική προσέγγιση μπορεί να γραφεί ως

$$\widehat{H}'(t) = -e\vec{E}\vec{r} = -eE_0(\hat{e}\cdot\vec{r})\,\text{συν}\,\omega t \tag{6.4}$$

Για το ελεύθερο άτομο η εξίσωση Schrödinger είναι

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}_0\Psi \tag{6.5}$$

Με λύσεις της μορφής

$$\Psi = \psi_n(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar} \tag{6.6}$$

όπου E_n και ψ_n είναι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της $\widehat{H}_0$

$$\widehat{H}_0\psi_0(\vec{r}) = E_n\psi_0(\vec{r}) \tag{6.7}$$

Οι συναρτήσεις ψ_n ικανοποιούν τις συνήθεις ορθοκανονικές συνθήκες

$$\int d\vec{r}\psi_n^*(\vec{r})\psi_m(\vec{r}) = \delta_{nm} \tag{6.8}$$

Οι παραπάνω συναρτήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ανάπτυξη των κυματοσυναρτήσεων του χρονοεξαρτημένου προβλήματος

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt} \tag{6.9}$$

Αντικαθιστώντας την (6.9) στην εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\widehat{H}_0 + \widehat{H}')\Psi \tag{6.10}$$

έχουμε:

$$\begin{aligned} i\hbar\sum_n\left(\frac{dC_n}{dt} - i\omega_nC_n\right)\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt} &= \sum_n E_nC_n(t)\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt} \\ &\quad - eE_0(\hat{e}\cdot\vec{r})\sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt}\,\text{συν}\,\omega t \end{aligned}$$

$$i\hbar\sum_n\frac{dC_n}{dt}\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt} = -eE_0(\hat{e}\cdot\vec{r})\sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})e^{-i\omega_nt}\,\text{συν}\,\omega t \tag{6.11}$$

Πολλαπλασιάζουμε την παραπάνω με $\psi_m^*(\vec{r})e^{i\omega_mt}$ από αριστερά, ολοκληρώνοντας και θέτοντας $\text{συν}\,\omega t = \frac{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}}{2}$ έχουμε τελικά:

$$i\hbar\frac{dC_m}{dt} = \frac{E_0}{2}\sum_n d_{mn}Cn(t)[e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} + e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}] \tag{6.12}$$

όπου

$$\omega_{mn} = \omega_m - \omega_n$$

και

$$d_{mn} = |e|\int d\vec{r}\psi_m^*(\vec{r})(\hat{e}\cdot\vec{r})\psi_n(\vec{r}) \tag{6.13}$$

Ας υποθέσουμε ότι το σύστημά μας είναι αρχικά στην κατάσταση k, δηλαδή

$$C_k(t=0)=1$$
$$C_n(t=0)=0, \quad n\neq k$$

Τότε, θεωρώντας σε μία πρώτη προσέγγιση $C_n(t)=C_n(0)$ έχουμε:

$$i\hbar\frac{dC_m}{dt}=\frac{E_0}{2}d_{mk}[e^{i(\omega_{mk}+\omega)t}+e^{i(\omega_{mk}-\omega)t}] \tag{6.14}$$

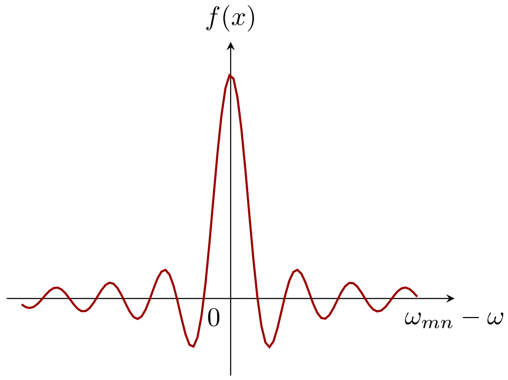
και ολοκληρώνοντας ως προς τον χρόνο

$$C_m(t)-C_m(0)=-\frac{E_0}{2\hbar}d_{mk}\left[\frac{e^{i(\omega_{mk}+\omega)t}-1}{(\omega_{mk}+\omega)}+\frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t}-1}{(\omega_{mk}-\omega)}\right] \tag{6.15}$$

Χρησιμοποιούμε την ταυτότητα $e^{i\omega t/2}\,\text{ημ}\,\omega t/2=\frac{e^{i\omega t}-1}{2i}$ (η οποία αποδεικνύεται εύκολα αν γράφουμε το ημίτονο ως εκθετικό) στο δεύτερο μέλος και έχουμε

$$\begin{aligned}C_m(t)=-i\frac{E_0}{\hbar}d_{mk}\Bigg[&e^{i(\omega_{mk}+\omega)t/2}\frac{\text{ημ}\,\frac{1}{2}(\omega_{mk}+\omega)t}{(\omega_{mk}+\omega)}\\&+e^{i(\omega_{mk}-\omega)t}\frac{\text{ημ}\,\frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{(\omega_{mk}-\omega)}\Bigg]\end{aligned} \tag{6.16}$$

Η συνάρτηση $\frac{\text{ημ}\,\frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{(\omega_{mk}-\omega)}$ για μεγάλες τιμές του t παριστάνεται γραφικά στο παρακάτω σχήμα, όπου βλέπουμε ότι παίρνει πολύ μεγάλες τιμές όταν $\omega\approx\omega_{mn}$.



Σχήμα 5. Η συνάρτηση $\frac{\text{ημ}\,\frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{(\omega_{mk}-\omega)}$ για μεγάλες τιμές του t έχει ισχυρή κορυφή όταν $\omega_{mn}\approx\omega$

Επομένως για ω πολύ διαφορετικό από το ω_{mn} η πιθανότητα μετάβασης είναι πολύ μικρή, επομένως είναι δικαιολογημένη η προσέγγιση των δύο επιπέδων (αν τα άλλα απέχουν αρκετά από αυτά). Επίσης η συχνότητα ω_{mn} είναι θετική για απορρόφηση και αρνητική για εκπομπή, επομένως για την απορρόφηση μεγαλύτερη συνεισφορά έχει ο δεύτερος όρος, ενώ για εκπομπή ο πρώτος.

Αν τώρα κοιτάξουμε το σύστημα των δύο επιπέδων μας, θεωρώντας ότι το άτομο είναι αρχικά στην θεμελιώδη $|a\rangle$ κατάσταση. Η πιθανότητα μετάβασης στην $|b\rangle$ θα είναι:

$$|C_b|^2=\frac{|d_{ba}|^2E_0^2}{4\hbar^2}\left(\frac{\text{ημ}\,\frac{1}{2}(\omega_{ba}-\omega)t}{\frac{1}{2}(\omega_{ba}-\omega)}\right)^2 \tag{6.17}$$

Όπου η παραπάνω μας δίνει την πιθανότητα εξαναγκασμένης απορρόφησης.

6.1.1 Ταλαντώσεις Rabi

Αν θεωρήσουμε μόνο δύο καταστάσεις από την αρχή, τότε το ανάπτυγμα της (6.9) γράφεται:

$$\psi(\vec{r},t) = C'_a\psi_a(\vec{r})e^{-i\omega_a t} + C'_b\psi_b(\vec{r})e^{-i\omega_b t} \tag{6.18}$$

και η (6.12) γίνεται δύο εξισώσεις:

$$i\hbar\frac{dC'_a}{dt} = \frac{E_0 d_{ab}}{2}C'_b(t)[e^{-i(\omega_{ba}-\omega)t} + e^{-i(\omega_{ba}+\omega)t}] \tag{6.19}$$

$$i\hbar\frac{dC'_b}{dt} = \frac{E_0 d_{ba}}{2}C'_a(t)[e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} + e^{i(\omega_{ba}+\omega)t}] \tag{6.20}$$

όπου θέσαμε $\omega_{ab} = -\omega_{ba}$.

Αν ορίσουμε

$$C_{a,b} = C'_{a,b}e^{\mp i\frac{\delta t}{2}} \tag{6.21}$$

και αγνοήσουμε τους όρους $\exp i(\omega_{ba}+\omega)t$ οι οποίοι μεταβάλλονται πολύ γρηγορότερα από τους $\exp i(\omega_{ba}-\omega)t$ εξαφανίζουμε τα εκθετικά

$$i\hbar\frac{dC_a}{dt} - i\hbar\frac{i\delta}{2}C_a = \frac{E_0 d_{ab}}{2}C_b \tag{6.22}$$

$$i\hbar\frac{dC_b}{dt} + i\hbar\frac{i\delta}{2}C_b = \frac{E_0 d_{ba}}{2}C_a \tag{6.23}$$

ή

$$\frac{dC_a}{dt} = -\frac{i}{2}(-\delta C_a + \frac{E_0 d_{ab}}{2\hbar}C_b) \tag{6.24}$$

$$\frac{dC_b}{dt} = -\frac{i}{2}(\delta C_b + \frac{E_0 d_{ba}}{2\hbar}C_a) \tag{6.25}$$

Οι εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως πίνακας

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C_a(t) \\ C_b(t) \end{pmatrix} = \frac{-i}{2}\begin{pmatrix} -\delta & \frac{E_0 d_{ab}}{\hbar} \\ \frac{E_0 d_{ba}}{\hbar} & \delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_a(t) \\ C_b(t) \end{pmatrix} \tag{6.26}$$

Οι ιδιοτιμές του είναι $\pm R$, όπου

$$R \equiv \sqrt{\delta^2 + |R_0|^2} \tag{6.27}$$

$$R_0 \equiv \frac{E_0 d_{ab}}{\hbar} \tag{6.28}$$

Η R_0 ονομάζεται *συχνότητα Rabi*.

Η λύση μπορεί να βρεθεί τώρα με τον τελεστή διάδοσης. Τελικά η λύση είναι:

$$\begin{pmatrix} C_a(t) \\ C_b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{συν}\,\frac{Rt}{2} + \frac{i\delta}{R}\,\text{ημ}\,\frac{Rt}{2} & -i\frac{E_0 d_{ab}}{R\hbar}\,\text{ημ}\,\frac{Rt}{2} \\ -i\frac{E_0 d_{ba}}{R\hbar}\,\text{ημ}\,\frac{Rt}{2} & \text{συν}\,\frac{Rt}{2} - \frac{i\delta}{R}\,\text{ημ}\,\frac{Rt}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_a(0) \\ C_b(0) \end{pmatrix} \tag{6.29}$$

6.1.2 Εξισώσεις Bloch

Οι εξισώσεις (6.19), (6.20) είναι ακριβείς εξισώσεις στην περίπτωση των δύο επιπέδων και γράφονται καλύτερα με την συχνότητα Rabi:

$$i\frac{dC'_a}{dt} = R_0 C'_b(t) e^{-i\omega_{ba}t}\,\text{συν}\,\omega t \tag{6.30}$$
$$i\frac{dC'_b}{dt} = R_0^* C'_a(t) e^{i\omega_{ba}t}\,\text{συν}\,\omega t \tag{6.31}$$

Η γενική μέθοδος είναι με τον πίνακα πυκνότητας. Αν ορίσουμε:

$$\begin{aligned} \rho_{aa} &= |C'_a|^2 \\ \rho_{bb} &= |C'_b|^2 \\ \rho_{ab} &= C'_a C'^*_b = \rho^*_{ba} \end{aligned} \tag{6.32}$$

ικανοποιείται η $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$.

Παραγωγίζουμε ως προς τον χρόνο την ρ_{ij}

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = C'_i \frac{dC'^*_j}{dt} + C'^*_j \frac{dC'_i}{dt} \tag{6.33}$$

και αντικαθιστούμε τις (6.30) (6.31) και εφαρμόζουμε την προσέγγιση του περιστρεφόμενου διανύσματος (rotating wave approximation), οπότε έχουμε

$$\frac{d\rho_{aa}}{dt} = \frac{i}{2} R_0^* e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} \rho_{ab} - \frac{i}{2} R_0 e^{-i(\omega_{ba}-\omega)t} \rho_{ba} \tag{6.34}$$
$$\frac{d\rho_{bb}}{dt} = -\frac{i}{2} R_0^* e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} \rho_{ab} + \frac{i}{2} R_0 e^{-i(\omega_{ba}-\omega)t} \rho_{ba} \tag{6.35}$$
$$\frac{d\rho_{ab}}{dt} = \frac{d\rho^*_{ba}}{dt} = \frac{i}{2} e^{-i(\omega_{ab}-\omega)t} (\rho_{aa} - \rho_{bb}) \tag{6.36}$$

Οι παραπάνω είναι οι **οπτικές εξισώσεις Bloch**.

Για να περιλάβουμε φαινόμενα αποδιέγερσης (απόσβεσης) εισάγουμε στις (6.19) ένα όρο της μορφής $-i\hbar\frac{\gamma_a}{2}C_a$.

Αν έχουμε φαινόμενα αποδιέγερσης και από τις δύο στάθμες σε κάποια απροσδιόριστη στάθμη, τότε η επίδραση στον πίνακα πυκνότητας είναι

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = \underbrace{(\quad\dots\quad)}_{\text{nondissipative terms}} - \frac{\gamma_i + \gamma_j}{2} \rho_{ij} \tag{6.37}$$

Αν έχουμε φαινόμενα αποδιέγερσης μεταξύ των δύο καταστάσεων, τότε η επάνω κατάσταση θα αποδιεγείρεται ως

$$\frac{d}{dt}\rho_{bb} = -\gamma \rho_{bb} \tag{6.38}$$

Ενώ η αποδιέγερση αυτή θα αυξάνει τον πληθυσμό της κάτω κατάστασης, έτσι

$$\frac{d}{dt}\rho_{aa} = \gamma \rho_{aa} \tag{6.39}$$

Τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα θα αποδιεγείρονται ως (αποδεικνύεται με πλήρως κβαντική ανάλυση)

$$\frac{d}{dt}\rho_{ba} = -\frac{\gamma}{2}\rho_{ba} \tag{6.40}$$

Επίσης μπορούμε να αντικαταστήσουμε την σταθερά γ με $\gamma' = \gamma + \gamma_{\rm col}$ στα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας ώστε να περιλάβουμε και φαινόμενα κρούσεων. Η εισαγωγή του $\gamma_{\rm col}$ γίνεται ad hoc (φαινομενολογικά).

Στην περίπτωση όπου είμαστε σε συντονισμό ($\omega = \omega_{ba}$) και το σύστημα είναι στην θεμελιώδη αρχικά η λύση των παραπάνω εξισώσεων δίνει ταλάντωση του πληθυσμού της b με συχνότητα $\lambda = \sqrt{R_0^2 + \frac{\gamma^2}{16}}$. Αυτή η ταλάντωση Rabi παρατηρείται όταν η συχνότητα Rabi R_0 είναι πολύ μεγαλύτερη από τη σταθερά γ.

6.1.3 Πίνακας Πυκνότητας

επομένως η χαμιλτονιανή $\hat{H}_0$ μπορεί να γραφεί ως πίνακας

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \hbar\omega_a & 0 \\ 0 & \hbar\omega_b \end{pmatrix} \tag{6.41}$$

ή

$$\hat{H}_{0ij} = E_i\delta_{ij} \tag{6.42}$$

Η αλληλεπίδραση ατόμου-πεδίου θεωρείται διπολική επομένως

$$\hat{V}(t) = -\mu\tilde{E}(t) \tag{6.43}$$

Επίσης θεωρούμε ότι οι καταστάσεις α και β του ατόμου έχουν συγκεκριμένη parity επομένως τα διαγώνια στοιχεία μ_{aa} και μ_{bb} μηδενίζονται, ενώ ισχύει $\mu_{ba} = \mu_{ab}^*$. Επομένως $V_{aa} = V_{bb} = 0$ και $V_{ba} = V_{ab}^*$.

Μελετάμε την κατάσταση του συστήματος με τον πίνακα πυκνότητας $\hat{\rho}$ που έχει στοιχεία

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{aa} & \rho_{ab} \\ \rho_{ba} & \rho_{bb} \end{pmatrix} \tag{6.44}$$

όπου $\rho_{ba} = \rho_{ab}^*$.

Η εξίσωση χρονικής εξέλιξης του πίνακα πυκνότητας είναι η

$$\dot{\rho}_{nm} = \frac{-i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]_{mn} \tag{6.45}$$

$$\dot{\rho}_{nm} = \frac{-i}{\hbar}\left((\hat{H}\hat{\rho})_{mn} - (\hat{\rho}\hat{H})_{mn}\right) = \frac{-i}{\hbar}\sum_i (H_{mi}\rho_{in} - \rho_{mi}H_{in}) \tag{6.46}$$

όπου η τελεία παριστάνει την χρονική παράγωγο.

Χρησιμοποιώντας τώρα την χαμιλτονιανή (6.2) η εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας γίνεται:

$$\dot{\rho}_{nm} = -i\omega_{mn}\rho_{mn} - \frac{i}{\hbar}(V_{ni}\rho_{im} - \rho_{ni}V_{im}) \tag{6.47}$$

όπου με ω_{nm} παριστάνεται η συχνότητα μετάβασης $\omega_{nm} = \dfrac{E_n - E_m}{\hbar}$. Οι ακριβείς εκφράσεις της παραπάνω εξίσωσης είναι

$$\dot{\rho}_{ba} = -i\omega_{ba}\rho_{ba} + \frac{i}{\hbar}V_{ba}\left(\rho_{aa} - \rho_{bb}\right) \tag{6.48}$$

$$\dot{\rho}_{aa} = \frac{i}{\hbar}\left(V_{ba}\rho_{ab} - \rho_{ba}V_{ab}\right) \tag{6.49}$$

$$\dot{\rho}_{bb} = \frac{i}{\hbar}\left(V_{ab}\rho_{ba} - \rho_{ab}V_{ba}\right) \tag{6.50}$$

Από τις παραπάνω φαίνεται αμέσως ότι $\dot{\rho}_{aa} + \dot{\rho}_{bb} = 0$ οπότε ο συνολικός πληθυσμός των ενεργειακών σταθμών a και b διατηρείται σταθερός. Από τον ορισμό του πίνακα πυκνότητας ξέρουμε ότι τα διαγώνια στοιχεία παριστάνουν τις πιθανότητες κατάληψης μίας ενεργειακής στάθμης, επομένως θα ισχύει $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$.

Οι παραπάνω εξισώσεις περιγράφουν μή-γραμμικά φαινόμενα χωρίς όρους αποδιέγερσης (relaxation terms), όπως για παράδειγμα διέγερση με στενούς παλμούς.

7 | Κβάντωση Ηλεκτρομαγνητικού Πεδίου

7.1 Κβάντωση του Πεδίου

Ξεκινάμε από τις εξισώσεις του Maxwell

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{7.1}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{7.2}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \tag{7.3}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{7.4}$$

$$\tag{7.5}$$

όπου $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$, $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$ και μ_0, ϵ_0 η μαγνητική διαπερατότητα του κενού και η διηλεκτρική σταθερά του κενού, οι οποίες ικανοποιούν τη σχέση $\epsilon_0 \mu_0 = c^{-1}$, με $c = 3 \cdot 10^8 \mathrm{m/s}$ την ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Στην κβαντική οπτική χρησιμοποιούμε την βαθμίδα Coulomb όπου το $\vec{B}$ και το $\vec{E}$ μπορούν να κατασκευαστούν από το διανυσματικό δυναμικό $\vec{A}(\vec{r}, t)$ ως

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{7.6}$$

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \tag{7.7}$$

ικανοποιώντας την βαθμίδα Coulomb:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \tag{7.8}$$

Θέτοντας την (7.6) στην εξίσωση (7.4) και με απλές πράξεις, χρησιμοποιώντας και την βαθμίδα Coulomb, έχουμε την κυματική εξίσωση για το διανυσματικό δυναμικό

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} \tag{7.9}$$

Μπορούμε να χωρίσουμε το διανυσματικό δυναμικό σε δύο κομμάτια το $A^{(+)}$ που περιέχει όρους της μορφής $e^{-i\omega t}$, και το $A^{(-)}$ που περιέχει όρους της μορφής $e^{i\omega t}$, έτσι ώστε $A = A^{(+)} + A^{(-)}$ και $A^{(-)} = (A^{(+)})^*$. Αν θεωρήσουμε ότι το δυναμικό περιορίζεται σε μία περιοχή του χώρου, ώστε να έχουμε διακριτές και όχι συνεχείς τιμές, μπορούμε να γράψουμε το δυναμικό ως μία ανάπτυξη ορθογώνιων συναρτήσεων

$$A^{(+)} = \sum_k c_k \vec{u}_k(\vec{r}) e^{-i\omega_k t} \tag{7.10}$$

Οι διανυσματικές συναρτήσεις $\vec{u}(\vec{r})$ ικανοποιούν και αυτές την κυματική εξίσωση

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_k^2}{c^2}\right) \vec{u}_k(\vec{r}) = 0 \tag{7.11}$$

και την συνθήκη $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k(\vec{r}) = 0$. Επίσης είναι ένα πλήρες ορθοκανονικό σετ συναρτήσεων

$$\int_V \vec{u}_k^*(\vec{r}) \vec{u}_l(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{kl} \tag{7.12}$$

Η ακριβής μορφή των συναρτήσεων εξαρτάται από τις συνοριακές συνθήκες. Για παράδειγμα για επίπεδα κύματα σε κυβική περιοχή μήκους L Θα είναι:

$$\vec{u}_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \hat{e}^{(\lambda)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{7.13}$$

όπου $\vec{e}^{(\lambda)}$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα πόλωσης. Ο δείκτης k περιλαμβάνει τις δύο τιμές πόλωσης και τις τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες του διανύσματος διάδοσης $\vec{k}$ (κυματοδιάνυσμα). Επίσης η συνθήκη Coulomb απαιτεί τα κύματα να είναι εγκάρσια, δηλαδή $\vec{e}^{(\lambda)} \cdot \vec{k} = 0$.

Τελικά το διανυσματικό δυναμικό μπορεί να γραφεί

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_k \left(\frac{\hbar}{2\omega_k \epsilon_0}\right)^{1/2} [a_k \vec{u}_k(\vec{r}) e^{-i\omega_k t} + a_k^\dagger \vec{u}_k^*(\vec{r}) e^{i\omega_k t}] \tag{7.14}$$

επομένως το ηλεκτρικό πεδίο θα είναι

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = i \sum_k \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0}\right)^{1/2} [a_k \vec{u}_k(\vec{r}) e^{-i\omega_k t} - a_k^\dagger \vec{u}_k^*(\vec{r}) e^{i\omega_k t}] \tag{7.15}$$

όπου οι σταθερές κανονικοποίησης έχουν επιλεγεί έτσι ώστε τα πλάτη a_k και $a_k^\dagger$ να είναι καθαροί αριθμοί.

Τώρα μπορούμε να κβαντίσουμε το πεδίο, επιλέγοντας τους αριθμούς a_k και $a_k^\dagger$ να είναι τελεστές, ο ένας συναφής του άλλου. Και επειδή τα φωτόνια είναι μποζόνια επιλέγουμε τις μεταθετικές σχέσεις των μποζονίων:

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0 \tag{7.16}$$

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \tag{7.17}$$

Η Χαμιλτονιανή του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι

$$H = \frac{1}{2} \int (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \mu_0 \vec{H}^2) d\vec{r} \tag{7.18}$$

και αντικαθιστώντας τα παραπάνω γίνεται:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k (a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}) \tag{7.19}$$

Συνήθως απορρίπτουμε την ενέργεια του κενού, οπότε η ενέργεια γράφεται:

$$H = \sum_n \hbar\omega_n (a_n^\dagger a_n) \tag{7.20}$$

και η ορμή:

$$P = \sum_k \hbar k_n a_n^\dagger a_n \tag{7.21}$$

7.2 Αναπαράσταση Fock

Η Χαμιλτονιανή (7.19) έχει ιδιοτιμές $\hbar\omega_k(n_k + \frac{1}{2})$, όπου $n_k = 0, 1, 2, \ldots, \infty$. Οι ιδιοκαταστάσεις $|n_k\rangle$ ονομάζονται Fock καταστάσεις, και είναι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή $N_k = a_k^\dagger a_k$ (number operator) δηλαδή του τελεστή αριθμού φωτονίων στον τρόπο ταλάντωσης k. Στην κατάσταση $|n_k\rangle$ υπάρχουν n_k φωτόνια, οπότε ο χώρος Fock είναι ο χώρος του καθορισμένου αριθμού φωτονίων σε κάθε κατάσταση.

$$a_k^\dagger a_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \tag{7.22}$$

Για κάποιο τρόπο ταλάντωσης (mode), δηλαδή συγκεκριμένο αριθμό k, η παραπάνω γράφεται απλούστερα

$$a^\dagger a |n\rangle = n|n\rangle \tag{7.23}$$

Η ενέργεια του κενού είναι:

$$\langle 0|H|0\rangle = \frac{1}{2}\sum_m \hbar\omega_m \tag{7.24}$$

δηλαδή άπειρη. Οπότε έχουμε μία μικρή δυσκολία στην ερμηνεία του μαθηματικού φορμαλισμού μας. Όμως πάντα μετράμε διαφορές ενέργειας μεταξύ των καταστάσεων, οπότε μπορούμε να αγνοήσουμε την ενέργεια του κενού.

Από τις μεταθετικές σχέσεις (7.16),(7.16) μπορούμε να δούμε ότι οι σχέσεις

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{7.25}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{7.26}$$

ικανοποιούν την $aa^\dagger = (n+1)|n\rangle$ και την $a^\dagger a = n|n\rangle$.

Για τις παραπάνω σχέσεις οι τελεστές $a^\dagger$, a ονομάζονται τελεστές ανύψωσης και υποβιβασμού αντιστοίχως.

Για να βρούμε την κατάσταση Fock του k τρόπου ταλάντωσης ($|n_k\rangle$) από το κενό δρούμε διαδοχικά με τελεστές ανύψωσης στο κενό $|0\rangle$, παίρνοντας:

$$|n_k\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_k}}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{7.27}$$

Οι καταστάσεις $|n_k\rangle$ είναι ορθοκανονικές

$$\langle n_k|m_k\rangle = \delta_{nm} \tag{7.28}$$

και πλήρεις

$$\sum_{n_k=0}^{\infty} |n_k\rangle\langle n_k| = 1 \tag{7.29}$$

7.3 Σύμφωνες Καταστάσεις

Οι σύμφωνες καταστάσεις εισήχθηκαν από τον Glauber και ορίζονται ως ιδιοκαταστάσεις του τελεστή υποβιβασμού (ή καταστροφής)

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{7.30}$$

όπου α μιγαδικός αριθμός, γιατί ο τελεστής υποβιβασμού δεν είναι ερμιτιανός.

Αναπτύσσοντας την σύμφωνη κατάσταση στη βάση Fock

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \tag{7.31}$$

έχουμε

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= a\sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned} \tag{7.32}$$

από την οποία προκύπτει η αναδρομική σχέση:

$$c_n\sqrt{n} = \alpha c_{n-1} \tag{7.33}$$

Η λύση της παραπάνω αναδρομικής είναι

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0 \tag{7.34}$$

Η σταθερά c_0 βρίσκεται με κανονικοποίηση

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 = |c_0|^2\sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} \tag{7.35}$$

οπότε η ανάπτυξη σε βάση Fock γίνεται:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{7.36}$$

7.3.1 Οι σύμφωνες καταστάσεις είναι ελάχιστης αβεβαιότητας

Ξεκινώντας από τις εκφράσεις των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής συναρτήσει των τελεστών θέσης και ορμής

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega x + ip) \tag{7.37}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega x - ip) \tag{7.38}$$

όπου $[x, p] = i\hbar$ λύνοντας ως προς

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(a + a^\dagger) \tag{7.39}$$

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a) \tag{7.40}$$

Αν πάρουμε την αναμενόμενη τιμή του x σε μία σύμφωνη κατάσταση έχουμε:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_\alpha &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\langle\alpha|(a + a^\dagger)|\alpha\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(\alpha + \alpha^*)\end{aligned} \tag{7.41}$$

και

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle_\alpha &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\langle\alpha|(a + a^\dagger)^2|\alpha\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2\omega}(1 + (\alpha + \alpha^*)^2)\end{aligned} \tag{7.42}$$

Οπότε

$$(\Delta x)^2_\alpha = \langle x^2\rangle_\alpha - \langle x\rangle^2_\alpha = \frac{\hbar}{2\omega} \tag{7.43}$$

Με όμοιο τρόπο βρίσκουμε:

$$(\Delta p)^2_\alpha = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{7.44}$$

Επομένως:

$$(\Delta x)^2_\alpha(\Delta p)^2_\alpha = \frac{\hbar^2}{4} \tag{7.45}$$

Άρα οι σύμφωνες καταστάσεις έχουν την ελάχιστη δυνατή αβεβαιότητα.

7.3.2 Ορθογωνιότητα

Οι σύμφωνες καταστάσεις **δεν είναι ορθογώνιες**

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\beta\rangle &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\sum_{nm}\langle m|\frac{\alpha^n\beta^{*m}}{\sqrt{n!m!}}|n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}e^{\alpha\beta^*}\end{aligned} \tag{7.46}$$

ή αλλιώς

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-(|\alpha-\beta|)^2} \tag{7.47}$$

Όταν $|\alpha-\beta| \to 0$ τότε $\langle\alpha|\beta\rangle \to 1$ και όταν $|\alpha-\beta| \gg 1$ τότε $\langle\alpha|\beta\rangle \to 0$, δηλαδή πολύ διαφορετικές σύμφωνες καταστάσεις τείνουν στην ορθογωνιότητα.

7.3.3 Οι σύμφωνες καταστάσεις είναι υπερπλήρεις

Θέλουμε να υπολογίσουμε το $\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha$ όπου $d^2\alpha = (dRe\alpha)(dIm\alpha)$

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{mn} \frac{|n\rangle\langle m|}{\sqrt{n!m!}} \int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \alpha^n \alpha^{*m} \tag{7.48}$$

Γράφουμε σε πολική μορφή τον μιγαδικό $\alpha = re^{i\varphi}$, και το ολοκλήρωμα γίνεται:

$$\int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \alpha^n \alpha^{*m} = \int r dr e^{-r^2} r^{n+m} \int d\varphi e^{i(n-m)\varphi} \tag{7.49}$$

Το δεύτερο ολοκλήρωμα είναι

$$\int d\varphi e^{i(n-m)\varphi} = 2\pi\delta_{nm}$$

και έτσι έχουμε

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{n} \frac{|n\rangle\langle n|}{n!} \int dr e^{-r^2} r^{2n+1} \tag{7.50}$$

Το τελευταίο είναι γνωστό ολοκλήρωμα. Θέτουμε $r^2 = z$ και γίνεται

$$\frac{1}{2} \int e^{-z} z^n dz = \frac{1}{2}\Pi(n) = \frac{n!}{2} \tag{7.51}$$

όπου $\Pi(z) = z\Gamma(z) = \Gamma(z-1) = \int_0^\infty e^{-t} t^z dt = z!$ η συνάρτηση του Gauss.

Τελικά

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \pi \tag{7.52}$$

7.3.4 Ο Τελεστής Μετατόπισης

Ο τελεστής μετατόπισης (Displacement Operator) ορίζεται ως

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} \tag{7.53}$$

Με χρήση της ταυτότητας Baker-Campbell-Haussedorf (BCH)

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{7.54}$$

μπορούμε να δείξουμε ότι

$$D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle \tag{7.55}$$

Πράγματι

$$\begin{aligned}
D(\alpha)|0\rangle &= e^{(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)}|0\rangle \\
&= e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \sqrt{n!}|n\rangle
\end{aligned}$$

Οπότε μία σύμφωνη κατάσταση είναι η κατάσταση του κενού μετατοπισμένη κατά $D(\alpha)$.

8 Αλληλεπίδραση Ατόμου - Πεδίου II

8.1 Χαμιλτονιανή και η διπολική προσέγγιση

Είναι γνωστό ότι η Χαμιλτονιανή για άτομο που αλληλεπιδρά με ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι

$$H = \frac{1}{2m}[\vec{p}^2 - e\vec{A}(\vec{r},t)]^2 + eV(\vec{r}) + H_r \tag{8.1}$$

όπου $\vec{p}$ η ορμή του ηλεκτρονίου, $V(\vec{r})$ το δυναμικό Coulomb, $\vec{A}$ το διανυσματικό δυναμικό και H_r το ελεύθερο πεδίο ακτινοβολίας. Τώρα χρησιμοποιούμε τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[\frac{ie\vec{r}}{\hbar} \cdot \vec{A}(\vec{r},t)\right] |\chi(t)\rangle \equiv U|\chi(t)\rangle \tag{8.2}$$

Η εξίσωση του Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{8.3}$$

γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar U\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}|\chi(t)\rangle &= HU|\chi(t)\rangle \\ i\hbar U\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle &= HU|\chi(t)\rangle - i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}|\chi(t)\rangle \end{aligned}$$

και πολλαπλασιάζοντας από τα αριστερά με $U^\dagger = U^{-1}$ έχουμε

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle = H'|\chi(t)\rangle \tag{8.4}$$

όπου

$$H' = U^\dagger HU - i\hbar U^\dagger\frac{\partial U}{\partial t} \tag{8.5}$$

Ο δεύτερος όρος γράφεται εύκολα

$$-i\hbar U^\dagger\frac{\partial U}{\partial t} = e\vec{r}\cdot\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -e\vec{r}\cdot\vec{E}(\vec{r},t) \tag{8.6}$$

Μετά από πολλές πράξεις ο μετασχηματισμός $U^\dagger HU$ καταλήγει στο

$$\begin{aligned} U^\dagger HU = eV(\vec{r}) + \frac{\vec{p}^2}{2m} + H_r + \frac{e}{m}\sum x_i\frac{\partial A_i}{\partial x_j}p_j \\ + \frac{e\hbar}{2mi}\sum_{ij} x_i\frac{\partial^2 A_i}{\partial x_j^2} + \frac{e^2}{2m}\sum ijkx_ix_j\frac{\partial A_i}{\partial xk}\frac{\partial A_j}{\partial x_k} \end{aligned} \tag{8.7}$$

Στην διπολική προσέγγιση υποθέτουμε ότι το πεδίο είναι συνάρτηση μόνο του χρόνου. Για επίπεδα κύματα ισχύει

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \vec{A}_0 \exp\left(-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}\right) \\ &\approx \vec{A}_0 \exp\left(-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}_0\right) = \vec{A}(\vec{r}_0)\end{aligned} \tag{8.8}$$

όπου $\vec{r}_0$ είναι η θέση του ατομικού πυρήνα, αν το μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερο κατά τάξεις μεγέθους από το άτομο ή $\vec{k}\cdot\vec{r}_0 \ll 1$. Στην περίπτωση αυτή όλες οι παράγωγοι του $\vec{A}$ μηδενίζονται και καταλήγουμε

$$H' = eV(\vec{r}) + \frac{\vec{p}^2}{2m} + H_r - e\vec{r}\cdot\vec{E}(\vec{r},t) \tag{8.9}$$

ή

$$H' = \hbar\sum_i {}_i|i\rangle\langle i| + H_r - e\vec{r}\cdot\vec{E}(\vec{r},t) \tag{8.10}$$

όπου $|i\rangle$ είναι οι αδιατάρακτες ατομικές καταστάσεις με ενέργεια $\hbar\omega_i$.

9 Προβλήματα

9.1 Κβάντωση Ηλεκτρομαγνητικού Πεδίου

1. Δείξτε ότι ο τελεστής δημιουργίας δεν έχει ιδιοδιανύσματα.
   Λύση: Έστω ότι έχει ιδιοδιανύσματα. Τότε θα ισχύει

$$a^\dagger|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle \tag{9.1}$$

Αναπτύσσουμε το $|\psi\rangle$ με τα διανύσματα Fock

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \tag{9.2}$$

και έχουμε

$$\begin{aligned}
a^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle &= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \\
\sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n+1}|n+1\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \alpha c_n|n\rangle \\
\sum_{n=1}^{\infty} c_{n-1}\sqrt{n}|n\rangle &= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle
\end{aligned}$$

Από την τελευταία πρέπει σίγουρα $c_0 = 0$ και το ίδιο για $c_1, c_2, \ldots$. Άρα $c_i = 0$ για κάθε i.

Βιβλιογραφία

[1] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics.* Kluwer Academic/Plenum Press, 2nd edition, 1994.

[2] Chris J. Isham. *Lectures on Quantum Theory.* Imperial College Press, 2001.

[3] Αντώνης Στρέκλας. *Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική.* Εκδόσεις Πανεπιστημίου Πατρών, 1998.

[4] P. A. M. Dirac. *The principles of Quantum Mechanics.* Oxford University Press, 4th edition, 1958.

[5] Vladimir G. Ivancevic and Ivancevic Tijana T. *Quantum Leap.* World Scientific, 2008.

[6] Walton Greiner. *Quantum Mechanics. An introduction.* Springer, 4th edition, 2001.

[7] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics.* Wiley, 3rd edition, 1998.

[8] Peleg Yoav, Pnini Reuven, and Zaarur Elyahu. *Theory and Problems of Quantum Mechanics.* Mc Graw-Hills, 1998.

[9] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics.* Pearson Education, 1994.

[10] Reinhold A. Bertlmann. *Quantum Mechanics Course Notes.* University of Vienna, 2008.

[11] Miguel Orszag. *Quantum Optics.* Springer-Verlag, 2000.