

Κβαντική Θεωρία

Χάρης Αναστόπουλος¹
Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Πατρών



Περιεχόμενα

1	Ο κλασικός κόσμος	1
1.1	Η Νευτώνεια θεωρία	1
1.2	Η Χαμιλτονιανή μηχανική	2
1.3	Κλασικός ηλεκτρομαγνητισμός	4
1.4	Θεωρία πιθανοτήτων	6
1.5	Οι πιθανότητες στις φυσικές επιστήμες	12
1.6	Η μαθηματική περιγραφή της κλασικής φυσικής	17
2	Η γέννηση της κβαντικής θεωρίας Α'	21
2.1	Κβάντα ενέργειας	21
2.2	Κβάντα φωτός	23
2.3	Το άτομο του Μπορ	25
2.4	Σωματίο η κύμα;	28
3	Η γέννηση της κβαντικής θεωρίας Β'	35
3.1	Οι πίνακες του Χάιζενμπεργκ	35
3.2	Η κυματομηχανική του Σρέντινγκερ	37
3.3	Πιθανότητες και αβεβαιότητα	45
3.4	Η μεγάλη σύνθεση	50
4	Χώροι Χίλμπερτ και αρχή της επαλληλίας	55
4.1	Χώροι Χίλμπερτ	55
4.2	Κβαντικές καταστάσεις	59
4.3	Η αρχή της επαλληλίας	61
4.4	Μαθηματικές ιδιότητες	66
4.5	Φορμαλισμός Ντιράκ	72
5	Τελεστές: Ι. Γενική θεωρία	75
5.1	Βασικές έννοιες	75
5.2	Είδη τελεστών	79
5.3	Συναρτήσεις τελεστών	83
5.4	Μεταθέτες τελεστών	84
5.5	Το φασματικό θεώρημα σε πεπερασμένες διαστάσεις	87
5.6	Το γενικό φασματικό θεώρημα	91
5.7	Ίχνος	98
5.8	Η φυσική ερμηνεία των τελεστών	99

6	Τελεστές: II. Εφαρμογές	105
6.1	Τελεστές σε κιούμπιτ	105
6.2	Αρμονικός ταλαντωτής	108
6.3	Ο μονοδιάστατος τελεστής Σρέντινγκερ	113
6.4	Ο τελεστής Σρέντινγκερ με τμηματικά σταθερά δυναμικά	120
6.5	Δυναμικό συνάρτησης δέλτα	123
6.6	Ο ρόλος των συνοριακών συνθηκών	126
6.7	Τελεστής Σρέντινγκερ με περιοδικά δυναμικά	130
6.8	Θεωρία διαταραχών	132
7	Κβαντικές πιθανότητες	141
7.1	Γενίκευση του κανόνα του Μπορν	141
7.2	Στατιστική μίξη και μήτρα πυκνότητας	143
7.3	Φυσική σημασία της κβαντικής κατάστασης	148
7.4	Σχέσεις αβεβαιότητας	157
7.5	Η συνάρτηση Βίγκνερ	160
7.6	Συνδυασμός αποτελεσμάτων από διαφορετικά πειράματα	163
8	Χρονική εξέλιξη	169
8.1	Ο κανόνας χρονικής εξέλιξης	169
8.2	Φυσική σημασία του κανόνα χρονικής εξέλιξης	171
8.3	Χρονική εξέλιξη σε απλά συστήματα	177
8.4	Συστήματα με χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή	184
8.5	Η αδιαβατική προσέγγιση	190
9	Αναγωγή της κβαντικής κατάστασης	197
9.1	Κλασική αναγωγή της κατάστασης	197
9.2	Κβαντική αναγωγή της κατάστασης	198
9.3	Ερμηνεία της αναγωγής της κβαντικής κατάστασης	201
9.4	Εφαρμογές	206
10	Σύνθετα κβαντικά συστήματα και εναγκαλισμός	215
10.1	Τανυστικό γινόμενο	215
10.2	Κβαντική σύνθεση συστημάτων	218
10.3	Σύστημα δύο κιούμπιτ	223
10.4	Το θεώρημα του Μπελ	225
10.5	Εφαρμογές	233
11	Συμμετρία στην κβαντική θεωρία: I. Περιστροφές	241
11.1	Η κβαντική περιγραφή των συμμετριών	241
11.2	Η συμμετρία των περιστροφών	244
11.3	Οι τελεστές της στροφορμής	247
11.4	Τροχιακή στροφορμή	253
11.5	Σύνθεση στροφορμών	256
12	Συμμετρία στην κβαντική μηχανική: II. Θεωρία ομάδων	263
12.1	Βασικές έννοιες θεωρίας ομάδων	263
12.2	Άλγεβρες Λι	266
12.3	Αναπαραστάσεις ομάδων	270

12.4	Κινηματικές συμμετρίες	273
12.5	Δυναμικές συμμετρίες	278
13	Σωμάτια στις τρεις διαστάσεις	283
13.1	Ο τελεστής Σρέντινγκερ στις τρεις διαστάσεις	283
13.2	Σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά: γενικές ιδιότητες	288
13.3	Σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά: ακριβείς λύσεις	294
13.4	Αλληλεπίδραση σωματιδίων με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο	300
13.5	Συμμετρία βαθμίδας στην κβαντική θεωρία	306
14	Σωμάτια με σπιν	313
14.1	Η εισαγωγή του σπιν	313
14.2	Η κβαντική περιγραφή του σπιν	315
14.3	Αλληλεπίδραση σωματιδίων με σπιν με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο	317
14.4	Η συμμετρία της μη-σχετικιστικής φυσικής	321
15	Συστήματα πολλών σωματιδίων	329
15.1	Ταυτοτικά σωμάτια	329
15.2	Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων ταυτοτικών σωματιδίων	334
15.3	Η ευστάθεια της ύλης	337
15.4	Χώροι Φοκ	338
15.5	Κβαντικά πεδία	344
16	Ενεργειακά φάσματα και δομή σύνθετων συστημάτων	349
16.1	Το υπό επίλυση πρόβλημα	349
16.2	Διαταραχές	350
16.3	Μέθοδος των μεταβολών	355
16.4	Προσέγγιση μέσου πεδίου	358
16.5	Η θεωρία Τόμας-Φέρμι	365
16.6	Η προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμερ	368
17	Θεωρία σκέδασης	375
17.1	Σκέδαση από δυναμικό	375
17.2	Η προσέγγιση Μπορν	382
17.3	Σκέδαση σε σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά	384
17.4	Γενική θεωρία σκέδασης	393
A'	Ειδικές συναρτήσεις	405
A'.1	Πολυώνυμα Ερμίτ	405
A'.2	Σφαιρικές αρμονικές	406
A'.3	Γενικευμένα πολυώνυμα Λαγκέρ	408

Κεφάλαιο 1

Ο κλασικός κόσμος

Μπορούμε να θεωρήσουμε την τωρινή κατάσταση του σύμπαντος σαν το αποτέλεσμα του παρελθόντος του και σαν αιτία του μέλλοντος. Μία διάνοια, η οποία σε κάθε στιγμή του χρόνου, γνωρίζει τις δυνάμεις που κινούν τη Φύση και τις αμοιβαίες κινήσεις των όντων που τη συνθέτουν, αν αυτή η διάνοια ήταν τόσο αχανής ώστε να υποβάλλει τα δεδομένα της σε ανάλυση, θα μπορούσε να συμπυκνώσει σε έναν απλό τύπο την κίνηση των μεγαλύτερων σωμάτων του σύμπαντος και αυτή του ελαφρότερου ατόμου. Για μια τέτοια διάνοια τίποτε δε θα ήταν αβέβαιο και τόσο το μέλλον όσο και το παρελθόν θα ήταν παρόν μπροστά στο βλέμμα της.

Π. Σ. ντε Λαπλάς [1]

1.1 Η Νευτώνεια θεωρία

Η πρώτη μεγάλη σύνθεση της σύγχρονης φυσικής ήταν η Νευτώνεια μηχανική, που από την πρώτη διατύπωσή της το 1687 έως τις αρχές του 20ου αιώνα προσέφερε τη βασική θεώρηση για το πώς λειτουργεί ο φυσικός κόσμος. Οι βασικές αρχές της Νευτώνειας θεωρίας είναι οι εξής.

1. Υπάρχει ως υπόβαθρο ένας *απόλυτος χρόνος* και ένας *απόλυτος χώρος*. Αυτό σημαίνει ότι κάθε φυσικό γεγονός προσδιορίζεται μοναδικά (i) από έναν αριθμό $t \in \mathbf{R}$ που προσδιορίζει τη στιγμή του χρόνου στην οποία συμβαίνει, και (ii) από μία τριάδα αριθμών (ένα διάνυσμα θέσης) $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbf{R}^3$, που προσδιορίζει το σημείο του χώρου στο οποίο συμβαίνει.

2. Ο κόσμος αποτελείται από σωματίδια, τα οποία περιγράφονται ως σημειακά. Ένα σύστημα N σωματιδίων σε μία στιγμή του χρόνου t προσδιορίζεται από N διανύσματα θέσης \mathbf{r}_i , όπου $i = 1, 2, \dots, N$. Για να περιγράψουμε την εξέλιξη των σωματιδίων στο χρόνο πρέπει να γράψουμε τα διανύσματα θέσης ως συνάρτηση του χρόνου, δηλαδή να προσδιορίσουμε τις N διαδρομές $\mathbf{r}_i(t)$.

3. Τα σωματίδια δρούν το ένα στο άλλο μέσω των επιταχύνσεών τους. Δηλαδή, οι διαδρομές $\mathbf{r}_i(t)$ ικανοποιούν το λεγόμενο *δεύτερο νόμο του Νεύτωνα*

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (1.1)$$

όπου m_i είναι η *αδρανειακή μάζα* του σωματίου i , και το διάνυσμα \mathbf{F}_i είναι η συνολική *δύναμη* που ασκείται στο σωματίο i .

4. Αν οι δυνάμεις εξασκούνται μόνο από σωματίδιο σε σωματίδιο, τότε $\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j)$, όπου $\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j)$ είναι η δύναμη που ασκεί το σωματίο j στο σωματίο i . Για αυτές τις δυνάμεις ισχύει ο λεγόμενος *τρίτος νόμος του Νεύτωνα*

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j) = -\mathbf{F}_j(\mathbf{r}_i). \quad (1.2)$$

Οι εξισώσεις του Νεύτωνα για N σωματίδια αποτελούν ένα σύστημα $3N$ συνήθων διαφορικών εξισώσεων δεύτερης τάξης. Σύμφωνα με το *θεμελιώδες θεώρημα των συνήθων διαφορικών εξισώσεων*, ο προσδιορισμός των διανυσμάτων θέσης $r_i(t_0)$ και των πρώτων παραγώγων τους $\dot{r}_i(t_0)$ σε μία αρχική χρονική στιγμή t_0 επιτρέπει την εύρεση μίας και μοναδικής λύσης $r_i(t)$ για κάθε $t \in \mathbf{R}$.

Αυτό σημαίνει ότι η Νευτώνεια θεωρία περιγράφει έναν απόλυτα αιτιοκρατικό (ντετερμινιστικό) κόσμο. Η πλήρης γνώση της κατάστασης του συστήματος σε μία χρονική στιγμή t_0 μας προσφέρει πλήρη γνώση του συστήματος για οποιαδήποτε χρονική στιγμή t στο παρελθόν ή στο μέλλον του t_0 . Αυτή η ιδιότητα περιγράφεται χαρακτηριστικά από τον Λαπλάς στο κείμενο που παρέθεσα στην αρχή του κεφαλαίου.

1.2 Η Χαμιλτονιανή μηχανική

1.2.1 Εξισώσεις Χάμιλτον

Η περιγραφή της αλληλεπίδρασης μεταξύ σωματιδίων χρησιμοποιώντας την έννοια της δύναμης αποδείχτηκε ανεπαρκής για να περιγράψει τις βαρυτικές και ηλεκτρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις και πλέον έχει εγκαταλειφθεί στο επίπεδο της θεμελιώδους φυσικής. Όταν σήμερα μιλάμε για θεμελιώδεις δυνάμεις (πυρηνική, βαρυτική κοκ) η λέξη "δύναμη" δε χρησιμοποιείται τεχνικά, ως αναφερόμενη σε διανύσματα που εμφανίζονται στις εξισώσεις του Νεύτωνα, αλλά ως λέξη της καθομιλουμένης, με χαλαρό εννοιολογικό περιεχόμενο.

Ιστορικά, η έννοια της ενέργειας υπερκέρασε αυτή της δύναμης. Ειδικότερα, η έννοια της ενέργειας όπως εκφράζεται μέσα σε ένα μαθηματικό φορμαλισμό που ανέπτυξε ο Χάμιλτον όχι μόνο προσφέρει μία κομψή επαναδιατύπωση της κλασικής φυσικής, αλλά μεταφέρεται στην κβαντική θεωρία.

Θα περιγράψω το φορμαλισμό του Χάμιλτον για ένα σύστημα N σωματιδίων. Συμβολίζουμε τις $3N$ συντεταγμένες που προσδιορίζουν τα διανύσματα θέσης του συστήματος ως q_a , όπου $a = 1, 2, \dots, 3N$. Οι μεταβλητές q_a ορίζουν τον *θεσεογραφικό χώρο* Q του συστήματος. Δεδομένου ότι οι q_a μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε πραγματική τιμή, $Q = \mathbf{R}^{3N}$.

Για κάθε σωματίο i ορίζεται το διάνυσμα της ορμής του $p_i = m_i \dot{r}_i$. Τα N διανύσματα ορμής αντιστοιχούν σε $3N$ συντεταγμένες ορμής, τις οποίες συμβολίζουμε ως p_a . Ο δείκτης a είναι ο ίδιος με αυτόν που χρησιμοποιείται για τις θέσεις, έτσι ώστε η συντεταγμένη ορμής p_a να αντιστοιχίζεται σωστά στη συντεταγμένη θέσης q_a .

Αν προσδιορίσουμε ακριβώς τις $3N$ συντεταγμένες θέσεις και τις $3N$ συντεταγμένες ορμής ενός συστήματος σε μία δεδομένη χρονική στιγμή t_0 , τότε μπορούμε να προσδιορίσουμε μοναδικά τις συντεταγμένες θέσεις και ορμής σε οποιαδήποτε άλλη χρονική στιγμή t , χρησιμοποιώντας το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα. Συγκεκριμένα, περιγράψουμε τη χρονική εξέλιξη του συστήματος ως μία διαδοχή καταστάσεων, όπου κάθε κατάσταση αντιστοιχεί σε ένα στοιχείο

$$\xi = (q_1, p_1, q_2, p_2, \dots, q_{3N}, p_{3N}).$$

Τα στοιχεία ξ ορίζουν ένα χώρο $\Gamma = \mathbf{R}^{6N}$ που καλείται *καταστατικός χώρος* του συστήματος των N σωματιδίων (άλλο όνομα είναι "χώρος των φάσεων").

Ορίζουμε τη συνάρτηση Χάμιλτον ή *Χαμιλτονιανή* του συστήματος ως μία συνάρτηση $H : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$,

$$H(q_a, p_a) = \sum_{a=1}^{3N} \frac{p_a^2}{2m_a} + V(q_1, q_2, \dots, q_{3N}), \quad (1.3)$$

όπου $V : Q \rightarrow \mathbf{R}$ είναι η δυναμική ενέργεια του συστήματος.

Η Χαμιλτονιανή είναι μία συνάρτηση της οποίας οι τιμές αντιστοιχούν στην ενέργεια E του φυσικού συστήματος¹. Ενσωματώνει όλην την πληροφορία για τη χρονική εξέλιξη του συστήματος σε συμπαγή μορφή.

Παρατηρούμε ότι το σύστημα εξισώσεων

$$\dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a} \quad \dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a} \quad (1.4)$$

δίνει τη σχέση

$$\ddot{q}_a = -\frac{\partial V}{\partial q_a}, \quad (1.5)$$

η οποία είναι ισοδύναμη με τις εξισώσεις του Νεύτωνα (1.1), αν οι δυνάμεις είναι της μορφής $F_a = -\partial V/\partial q_a$. Γνωρίζουμε ότι τέτοιες δυνάμεις καλούνται *διατηρητικές* καθότι διατηρούν την ενέργεια E του συστήματος. Οι εξισώσεις (1.4) καλούνται *εξισώσεις Χάμιλτον* και ενσωματώνουν όλη την πληροφορία για τη δυναμική εξέλιξη ενός φυσικού συστήματος στον ορισμό της Χαμιλτονιανής H . Η Χαμιλτονιανή δεν είναι ανάγκη να έχει τη μορφή (1.3), αλλά μπορεί να είναι οποιαδήποτε συνάρτηση.

1.2.2 Αγκύλες Πουασόν

Κάθε φυσική ποσότητα σε ένα σύστημα N σωματιδίων μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση των θέσεων και των ορμών των σωματιδίων, δηλαδή ότι αντιστοιχεί σε μία συνάρτηση $F : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$. Η χρονική εξέλιξη της F δίνεται από τη σχέση

$$\dot{F} = \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \dot{q}_a + \frac{\partial F}{\partial p_a} \dot{p}_a \right) = \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial F}{\partial p_a} \frac{\partial H}{\partial q_a} \right) = \{F, H\}. \quad (1.6)$$

Στην Εξ. (1.6) ορίσαμε την *αγκύλη Πουασόν* (Poisson) μεταξύ δύο συναρτήσεων F και G στον καταστατικό χώρο Γ ως μία άλλη συνάρτηση στο Γ ,

$$\{F, G\} := \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \frac{\partial G}{\partial p_a} - \frac{\partial F}{\partial p_a} \frac{\partial G}{\partial q_a} \right). \quad (1.7)$$

Από τον ορισμό υπολογίζουμε αμέσως τις παρακάτω θεμελιώδεις αγκύλες Πουασόν

$$\{q_a, q_b\} = 0, \quad \{p_a, p_b\} = 0, \quad \{q_a, p_b\} = \delta_{ab}, \quad (1.8)$$

όπου το σύμβολο δ_{ab} καλείται *δέλτα του Κρόνεκερ* (Kronecker) και ορίζεται ως

$$\delta_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{αν } a = b \\ 0 & \text{αν } a \neq b \end{cases}. \quad (1.9)$$

Οι αγκύλες Πουασόν χαρακτηρίζονται από τις ακόλουθες ιδιότητες, η απόδειξη των οποίων προκύπτει κατευθείαν από τον ορισμό και τις ιδιότητες των μερικών παραγώγων.

1. *Αντισυμμετρία*: $\{G, F\} = -\{F, G\}$.
2. *Κανόνας του Λάιμπνιτς* (Leibnitz): $\{F, GH\} = \{F, G\}H + \{F, H\}G$.
3. *Ταυτότητα Γιακόμπι* (Jacobi): $\{\{F, G\}, H\} + \{\{H, F\}, G\} + \{\{G, H\}, F\} = 0$.

όπου F, G και H συναρτήσεις στον καταστατικό χώρο Γ .

¹Προσοχή, η Χαμιλτονιανή είναι μία συνάρτηση ενώ η ενέργεια είναι ένας αριθμός που αντιστοιχεί στην τιμή της συνάρτησης. Αυτή η διάκριση είναι σημαντική και μεταφέρεται και στην κβαντική θεωρία.

1.2.3 Το θεώρημα του Λιουβίλ

Το θεώρημα του Λιουβίλ (Liouville) αναδεικνύει μία θεμελιώδη συμμετρία των εξισώσεων του Χάμιλτον. Έστω μία περιοχή U του καταστατικού χώρου Γ ($U \subset \Gamma$). Η U μπορεί για παράδειγμα να αντιστοιχεί στις πιθανές αρχικές θέσεις και ορμές ενός σωματιδίου, τις οποίες δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε με απόλυτη ακρίβεια.

Ο όγκος $[U]$ της περιοχής U ορίζεται ως

$$[U] := \int_U d^{3N}q d^{3N}p. \quad (1.10)$$

Οι θέσεις και οι ορμές μεταβάλλονται σύμφωνα με τις εξισώσεις Χάμιλτον. Ένα σημείο του U που τη χρονική στιγμή t περιγράφεται από συντεταγμένες q_a και p_a , τη χρονική στιγμή $t + \delta t$ θα περιγράφεται από συντεταγμένες $q'_a = q_a + \delta t \partial H / \partial p_a$ και $p'_a = p_a - \delta t \partial H / \partial q_a$. Αποδεικνύεται ότι η Ιακωβιανή αυτού του μετασχηματισμού είναι ίση με τη μονάδα [2]

$$\frac{\partial(q'_a, p'_a)}{\partial(q_a, p_a)} = 1. \quad (1.11)$$

Οπότε ο όγκος της περιοχής U τη χρονική στιγμή $t + \delta t$ θα είναι

$$\begin{aligned} [U']_{t+\delta t} &= \int_U d^{3N}q' d^{3N}p' = \int_U \frac{\partial(q'_a, p'_a)}{\partial(q_a, p_a)} d^{3N}q d^{3N}p \\ &= \int_U d^{3N}q d^{3N}p = [U]_t. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Δηλαδή, ο όγκος μίας περιοχής του καταστατικού χώρου παραμένει σταθερός κάτω από χρονική εξέλιξη με τις εξισώσεις Χάμιλτον. Αυτή η πρόταση είναι γνωστή ως *θεώρημα του Λιουβίλ*.

Το θεώρημα του Λιουβίλ προσφέρει ένα βασικό κριτήριο για να ορίσει κανείς την έννοια του κλειστού φυσικού συστήματος. Συγκεκριμένα, οδηγεί στον ακόλουθο ορισμό.

Στην κλασική φυσική λέμε ότι ένα σύστημα είναι κλειστό, αν η χρονική του εξέλιξη διατηρεί την ενέργεια και τους όγκους στον καταστατικό του χώρο.

1.3 Κλασικός ηλεκτρομαγνητισμός

Αναφέραμε προηγουμένως ότι στη Νευτώνεια μηχανική αφορά κυρίως την περιγραφή του κόσμου ως αποτελούμενου από αλληλεπιδρώντα σωματίδια. Ωστόσο το 19ο αιώνα αναπτύχθηκε η αντίληψη ότι οι δυνάμεις είναι αυτόνομες οντότητες, ανεξάρτητες από τα σωματίδια και έχουν τη δική τους δυναμική. Αυτή η ιδέα ξεκίνησε με το Φάραντεϊ (M. Faraday) και ολοκληρώθηκε με τον Μάξγουελ (J. C. Maxwell) ο οποίος πέτυχε την ενοποίηση των ηλεκτρικών, μαγνητικών και οπτικών φαινομένων μέσω μίας θεωρίας πεδίου, που πλέον καλείται *κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία*.

Θυμίζουμε ότι στην κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία οι βασικές ποσότητες είναι δύο διανυσματικά πεδία στο χώρο, το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} και το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} . Ένα σωματίδιο φορτίου q που βρίσκεται εντός ενός συνδυασμού ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου δέχεται δύναμη \mathbf{F} (*δύναμη Λόρεντς*) ίση με

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (1.13)$$

όπου v είναι η ταχύτητα του σωματιδίου.

Οι ιδιότητες και η δυναμική του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου περιγράφονται συνοπτικά από τις εξισώσεις του Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (1.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.16)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j} \right), \quad (1.17)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα φορτίου, \mathbf{j} η πυκνότητα ρεύματος και c η ταχύτητα του φωτός².

Το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει του ηλεκτρικού δυναμικού ϕ και του μαγνητικού δυναμικού \mathbf{A} ως

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (1.18)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (1.18) στις εξισώσεις Μάξγουελ, βρίσκουμε ότι οι Εξ. (1.15) και (1.16) ικανοποιούνται ταυτοτικά. Επίσης βλέπουμε ότι τα πεδία \mathbf{E} και \mathbf{B} είναι αναλλοίωτα κάτω από το μετασχηματισμό βαθμίδας

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad (1.19)$$

για οποιαδήποτε βαθμωτή συνάρτηση f .

Στο κενό, εξ ορισμού $\rho = \mathbf{j} = 0$ και οι εξισώσεις Μάξγουελ οδηγούν στην κυματική εξίσωση για τη διάδοση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (1.20)$$

Η κυματική εξίσωση επιδέχεται ως λύσεις επίπεδα κύματα της μορφής

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t}, \quad (1.21)$$

όπου \mathbf{E}_0 το πλάτος του κύματος, \mathbf{k} το διάνυσμα του κυματαριθμού και ω η γωνιακή συχνότητα. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (1.20) βρίσκουμε τη σχέση διασκεδασμού για τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα στο κενό

$$\omega = c|\mathbf{k}|. \quad (1.22)$$

Επίσης αντικαθιστώντας το κύμα (1.21) στην Εξ. (1.14) για $\rho = 0$ βρίσκουμε ότι $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0$. Αυτό σημαίνει ότι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα είναι εγκάρσιο, δηλαδή η ένταση του πεδίου ταλαντώνεται κάθετα στην κατεύθυνση διάδοσης του κύματος. Οι δύο ανεξάρτητες δυνατές κατευθύνσεις ταλάντωσης του \mathbf{E} είναι οι δύο δυνατές πολώσεις του ηλεκτρομαγνητικού κύματος.

²Σ' αυτό το βιβλίο χρησιμοποιούμε το σύστημα μονάδων Λόρεντς-Χεβισάιντ (Lorentz- Heavyside), στο οποίο η ηλεκτρική και η μαγνητική σταθερά του κενού είναι ίσες με τη μονάδα: $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$. Σ' αυτές τις μονάδες το φορτίο του ηλεκτρονίου $e = 0,54 \times 10^{-13} m^{3/2} kg^{1/2} / s$.

1.4 Θεωρία πιθανοτήτων

Η θεωρία πιθανοτήτων έχει γίνει ένα αναπόσπαστο κομμάτι της σύγχρονης φυσικής, τόσο στο επίπεδο των μαθηματικών εργαλείων όσο και στο επίπεδο των θεμελιωδών θεωριών. Η πιθανότητα είναι μια έννοια που εμφανίζεται τόσο στην κλασική όσο και στην κβαντική φυσική. Επειδή οι πιθανότητες στην κβαντική θεωρία έχουν πολύ σημαντικές διαφοροποιήσεις τόσο μαθηματικά όσο και ερμηνευτικά από τις πιθανότητες όπως χρησιμοποιούνται σε όλους τους άλλους τομείς των επιστημών, θα παρουσιάσουμε πρώτα τις βασικές ιδιότητες των δευτέρων, χαρακτηρίζοντάς τις ως "κλασικές".

1.4.1 Ο δειγματικός χώρος

Οι πιθανότητες πάντα αναφέρονται σε κάποια ενδεχόμενα. Για παράδειγμα, μπορεί να ενδιαφερόμαστε για την πιθανότητα "να έρθουν εξάρεις στην επόμενη ζαριά στο τάβλι" ή για την πιθανότητα "να κερδίσει η Βραζιλία το Παγκόσμιο Κύπελλο". Επιπλέον, η πιθανότητα έχει νόημα όταν συγκρίνονται διαφορετικά ενδεχόμενα μεταξύ τους, άρα πρέπει να έχουμε ένα *σύνολο διαφορετικών ενδεχομένων*.

Επίσης πρέπει να ξεχωρίσουμε μεταξύ των στοιχειωδών και των σύνθετων ενδεχομένων. Σε ρίψη ενός ζαριού, τα στοιχειώδη ενδεχόμενα είναι να έρθει ένας από τους ακέραιους 1, 2, 3, 4, 5 ή 6. Ωστόσο μπορούμε εύκολα να διατυπώσουμε το ενδεχόμενο $A =$ "να έρθει περιττός αριθμός" ή $B =$ "να έρθει 5 ή 6". Τα στοιχειώδη ενδεχόμενα αντιστοιχούν σε σύνολα με ένα μέλος $\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}, \{5\}, \{6\}$, το ενδεχόμενο A στο σύνολο $\{1, 3, 5\}$ και το ενδεχόμενο B στο σύνολο $\{5, 6\}$. Δηλαδή κάθε ενδεχόμενο αντιστοιχεί σε ένα υποσύνολο του συνόλου $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Το παραπάνω παράδειγμα οδηγεί στον ακόλουθο ορισμό. Καλούμε *τυχαίο πείραμα* οποιαδήποτε διαδικασία οδηγεί στην πραγματοποίηση ενός αποτελέσματος ανάμεσα από πολλά δυνατά ενδεχόμενα. Το σύνολο των στοιχειωδών ενδεχομένων ενός πειράματος καλείται *δειγματικός χώρος*. Θα συμβολίζουμε το δειγματικό χώρο με κεφαλαία ελληνικά γράμματα (για παράδειγμα Γ ή Ω). Κάθε ενδεχόμενο, στοιχειώδες ή μη, αντιστοιχεί σε ένα υποσύνολο του δειγματικού χώρου. Θα συμβολίζουμε αυτά τα υποσύνολα με κεφαλαία λατινικά γράμματα³.

Για κάθε ενδεχόμενο A ορίζουμε το *συμπληρωματικό* του ενδεχόμενου ως το σύνολο $\bar{A} = \Omega - A$, δηλαδή το μοναδικό σύνολο \bar{A} που ικανοποιεί τις σχέσεις $A \cup \bar{A} = \Omega$ και $A \cap \bar{A} = \emptyset$.

Δύο ενδεχόμενα A και B καλούνται *αμοιβαίως αποκλειόμενα*, αν $A \cap B = \emptyset$. Προφανώς δύο στοιχειώδη ενδεχόμενα είναι πάντα αμοιβαίως αποκλειόμενα. Δεν μπορεί να ρίξεις ένα ζάρι και να έρθει και άσσος και έξι.

Παράδειγμα 1.1 Έστω το τυχαίο πείραμα που αντιστοιχεί στην ταυτόχρονη ρίψη δύο ζαριών. Ο δειγματικός χώρος Ω αποτελείται από 36 ζεύγη αριθμών από το 1 ως το 6.

$$\Omega = \{(1, 1), (1, 2), (1, 3), (1, 4), (1, 5), (1, 6), (2, 1), (2, 2), (2, 3), (2, 4), (2, 5), (2, 6), (3, 1), (3, 2), (3, 3), (3, 4), (3, 5), (3, 6), (4, 1), (4, 2), (4, 3), (4, 4), (4, 5), (4, 6), (5, 1), (5, 2), (5, 3), (5, 4), (5, 5), (5, 6), (6, 1), (6, 2), (6, 3), (6, 4), (6, 5), (6, 6)\}.$$

Για παράδειγμα, μπορούμε να έχουμε τα ακόλουθα ενδεχόμενα

1. $A =$ "εξάρεις" = $\{(6, 6)\}$ (1 μέλος).

³Η έννοια του τυχαίου πειράματος δεν περιορίζεται μόνο σε πραγματικά πειράματα φυσικής. Για παράδειγμα, το Παγκόσμιο Κύπελλο ποδοσφαίρου μπορεί να θεωρηθεί ως ένα τυχαίο πείραμα, με δειγματικό χώρο το σύνολο των 32 ομάδων που μετέχουν στην τελική φάση και αποτέλεσμα την ομάδα που θα κερδίσει το κύπελλο. Παρομοίως, στο επίπεδο των στοιχημάτων, ένας ποδοσφαιρικός αγώνας μπορεί να ιδωθεί ως τυχαίο πείραμα με δειγματικό χώρο $\Gamma = \{1, 2, X\}$.

2. $B = \text{"ασσόδυσο"} = \{(1, 2), (2, 1)\}$ (2 μέλη)
3. $C = \text{"άθροισμα έξι"} = \{(1, 5), (5, 1), (2, 4), (4, 2), (3, 3)\}$ (5 μέλη)
4. $D = \text{"άθροισμα επτά"} = \{(1, 6), (6, 1), (2, 5), (5, 2), (3, 4), (4, 3)\}$ (6 μέλη)
5. Το κενό σύνολο είναι ενδεχόμενο με τετριμμένο τρόπο (αυτό που ποτέ δε συμβαίνει) όπως και το ίδιο το σύνολο Ω ("τα ζάρια ρίχτηκαν και μπορεί να ήρθε οτιδήποτε").

Στη φυσική και ιδιαίτερα στην κβαντική θεωρία έχει επικρατήσει να αποκαλούνται τα στοιχειώδη γεγονότα "λεπτομερή" (fine-grained) και τα σύνθετα "αδρομερή" (coarse-grained). Αυτοί είναι οι όροι που θα χρησιμοποιούμε από εδώ και στο εξής.

1.4.2 Κατανομή πιθανοτήτων

Έστω ότι έχουμε ένα δεδομένο δειγματικό χώρο Ω . Ως κατανομή πιθανοτήτων (ή μέτρο πιθανότητας) ορίζουμε την απόδοση πιθανοτήτων σε κάθε ένα από τα ενδεχόμενα του Ω . Δηλαδή μία συνάρτηση Prob που σε κάθε υποσύνολο A του Ω αντιστοιχίζει έναν αριθμό $\text{Prob}(A)$, ο οποίος παίρνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$. Η τιμή $\text{Prob}(A)$ καλείται *πιθανότητα* του ενδεχομένου A .

Μία κατανομή πιθανοτήτων πρέπει να ικανοποιεί τις ακόλουθες ιδιότητες.

Αξιώματα Κολμογκόροφ (Kolmogorov)

1. για κάθε $A, B \subset \Omega$, αν $A \cap B = \emptyset$, τότε

$$\text{Prob}(A \cup B) = \text{Prob}(A) + \text{Prob}(B).$$

2. $\text{Prob}(\emptyset) = 0$.

3. $\text{Prob}(\Omega) = 1$.

Συνέπειες των αξιωμάτων

Από τα αξιώματα Κολμογκόροφ προκύπτουν άμεσα οι ακόλουθες ιδιότητες

- (i) $\text{Prob}(\bar{A}) = 1 - \text{Prob}(A)$, για κάθε $A \subset \Omega$.

- (ii) Έστω $B \subset A$. Τα σύνολα B και $A - B$ είναι ξένα μεταξύ τους και ικανοποιούν $B \cup (A - B) = A$. Από το πρώτο αξίωμα του Κολμογκόροφ παίρνουμε

$$\text{Prob}(A - B) = \text{Prob}(A) - \text{Prob}(B) \tag{1.23}$$

για κάθε $B \subset A$.

- (iii) $\text{Prob}(A \cup B) = \text{Prob}(A) + \text{Prob}(B) - \text{Prob}(A \cap B)$, για κάθε $A, B \subset \Omega$.

Απόδειξη. Τα τρία σύνολα $A' = A - (A \cap B)$, $B' = B - (A \cap B)$, $C = A \cap B$ είναι ξένα μεταξύ τους και ικανοποιούν $A' \cup B' \cup C = A \cup B$. Οπότε από το 1ο αξίωμα του Κολμογκόροφ, $\text{Prob}(A \cup B) = \text{Prob}(A - (A \cap B)) + \text{Prob}(B - (A \cap B)) + \text{Prob}(A \cap B)$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (1.23) προκύπτει το ζητούμενο.

Ιδιότητες των πιθανοτήτων

Έστω ένας δειγματικός χώρος $\Omega = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, όπου n ακέραιος. Για να ορίσουμε μία κατανομή πιθανοτήτων αρκεί να προσδιορίσουμε n θετικούς αριθμούς $p_i = \text{Prob}(\{x_i\})$, $i = 1, \dots, n$, κάθε ένας εκ των οποίων δίνει την πιθανότητα του λεπτομερούς ενδεχομένου $\{x_i\}$. Οι αριθμοί αυτοί ικανοποιούν τη *συνθήκη κανονικοποίησης*

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1. \quad (1.24)$$

Συχνά οι n θετικοί αριθμοί p_i αναπαρίστανται ως στοιχεία ενός *διανύσματος πιθανοτήτων*

$$\vec{w} = (p_1, p_2, \dots, p_n). \quad (1.25)$$

Χρησιμοποιώντας τα αξιώματα Κολμογκόροφ μπορούμε να βρούμε την πιθανότητα οποιουδήποτε αδρομερούς ενδεχομένου. Για παράδειγμα,

$$\text{Prob}(\{x_1, x_3\}) = \text{Prob}(\{x_1\}) + \text{Prob}(\{x_3\}) = p_1 + p_3.$$

Έστω $f : \Omega \rightarrow \mathbf{R}$ μια συνάρτηση στο δειγματικό χώρο

$$\Omega = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}.$$

Με δεδομένη μία κατανομή πιθανοτήτων που εκφράζεται από τους θετικούς αριθμούς p_i , όπως παραπάνω, ορίζουμε

- τη μέση τιμή της f : $\langle f \rangle := \sum_{i=1}^n p_i f(x_i)$.
- τη n -στη ροπή της f : $\langle f^n \rangle := \sum_{i=1}^n p_i f(x_i)^n$.
- την τυπική απόκλιση Δf της f : $(\Delta f)^2 := \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$.

Μία πολύ σημαντική ιδιότητα των κατανομών πιθανοτήτων είναι η ανισότητα του Γιένσεν (Jensen),

$$\langle F(f) \rangle \geq F(\langle f \rangle), \quad (1.26)$$

για κάθε κυρτή συνάρτηση $F : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ και κάθε συνάρτηση $f : \Omega \rightarrow \mathbf{R}$.

Η απόδειξη προκύπτει ως εξής. Έστω δειγματικός χώρος με δύο σημεία, $\Omega = \{x_1, x_2\}$. Γράφοντας $y_1 = f(x_1)$ και $y_2 = f(x_2)$, $p = p_1$, $p_2 = 1 - p_1$, η Εξ. (1.26) γράφεται $pF(y_1) + (1 - p)F(y_2) \geq F(py_1 + (1 - p)y_2)$ που σημαίνει ότι η ευθεία που ενώνει τα σημεία y_1 και y_2 βρίσκεται πάνω από το γράφημα της F . Αυτός είναι ο ορισμός της κυρτής συνάρτησης. Η γενίκευση για $n > 2$ γίνεται με επαγωγή.

Παράδειγμα 1.2. Έστω το τυχαίο πείραμα της ταυτόχρονης ρίψης δύο ζαριών που μελετήσαμε στο παράδειγμα 1.1. Θεωρούμε μία κατανομή πιθανοτήτων που αποδίδει ίση πιθανότητα $p = 1/36$ στα 36 μέλη του Ω . Τότε για τα σύνολα A, B, C και D του παραδείγματος 1.1 θα ισχύει

$$\text{Prob}(A) = \frac{1}{36}, \quad \text{Prob}(B) = \frac{2}{36} = \frac{1}{18}, \quad \text{Prob}(C) = \frac{5}{36}, \quad \text{Prob}(D) = \frac{6}{36} = \frac{1}{6}.$$

1.4.3 Περιθωριακές πιθανότητες

Έστω ότι ο δειγματικός χώρος Ω είναι της μορφής $\Omega_1 \times \Omega_2$, όπου $\Omega_1 = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ και $\Omega_2 = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$. Τέτοιος ήταν ο δειγματικός χώρος του παραδείγματος 1.1, που αντιστοιχεί στη ρίψη ενός ζεύγους ζαριών, με $\Omega_1 = \Omega_2 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Ένα λεπτομερές ενδεχόμενο αντιστοιχεί σε ένα ζεύγος (x_i, y_a) , όπου $i = 1, \dots, n$ και $a = 1, \dots, m$. Οι αντίστοιχες πιθανότητες προσδιορίζονται από τους θετικούς αριθμούς $p_{ia} := \text{Prob}[\{(x_i, y_a)\}]$.

Ορίζουμε τις περιθωριακές πιθανότητες p_i^1 και p_a^2 ως

$$p_i^1 = \sum_{a=1}^m p_{ia} = \text{Prob}(\{x_i\} \times \Omega_2) \quad (1.27)$$

$$p_a^2 = \sum_{i=1}^n p_{ia} = \text{Prob}(\Omega_1 \times \{y_a\}). \quad (1.28)$$

Οι ποσότητες p_i^1 ορίζουν μία κατανομή πιθανοτήτων στο Ω_1 και οι p_a^2 μία κατανομή πιθανοτήτων στο Ω_2 . Οι δύο κατανομές αυτές περιέχουν όλη την πληροφορία της αρχικής για τα ενδεχόμενα του Ω_1 και του Ω_2 αντίστοιχα, αλλά δεν περιέχουν καθόλου πληροφορία για το πώς τα ενδεχόμενα του Ω_1 και του Ω_2 σχετίζονται μεταξύ τους.

1.4.4 Δεσμευμένη πιθανότητα

Έστω ότι εμείς χρησιμοποιούμε ένα μέτρο πιθανότητας για να περιγράψουμε ένα πείραμα τύχης με δειγματικό χώρο Ω . Παίρνουμε κάποια επιπλέον πληροφορία για το σύστημά μας και θέλουμε να αλλάξουμε ανάλογα την κατανομή πιθανοτήτων που έχουμε αποδώσει. Αυτό επιτυγχάνεται με τον ακόλουθο ορισμό της δεσμευμένης πιθανότητας.

Για όλα τα ενδεχόμενα $A, B \subset \Omega$, η δεσμευμένη πιθανότητα του A δεδομένου του B , $\text{Prob}(A|B)$, ορίζεται ως

$$\text{Prob}(A|B) = \frac{\text{Prob}(A \cap B)}{\text{Prob}(B)}. \quad (1.29)$$

Παράδειγμα 1.3. Έστω το πείραμα τύχης ρίψης δύο ζαριών που περιγράψαμε στα παραδείγματα 1.1 και 1.2. Έστω $D =$ "άθροισμα επτά" και $E =$ "κανένα ζάρι δεν έδειξε ένα ή δύο" και θέλουμε να υπολογίσουμε τη δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(D|E)$. Αφού έχει πραγματοποιηθεί το E είναι σαν αυτό να αποτελεί πλέον το δειγματικό μας χώρο,

$$E = \{(3, 3), (3, 4), (3, 5), (3, 6), (4, 3), (4, 4), (4, 5), (4, 6), \\ (5, 3), (5, 4), (5, 5), (5, 6), (6, 3), (6, 4), (6, 5), (6, 6)\}.$$

Το E έχει 16 μέλη. Από αυτά σε άθροισμα επτά αντιστοιχούν μόνο το (3,4) και το (4,3). Άρα εκτιμούμε τη δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(D|E) = 2/16 = 1/8$. Από την άλλη, βρίσκουμε

$$D \cap E = \{(3, 4), (4, 3)\},$$

άρα $\text{Prob}(D \cap E) = 2/36 = 1/18$. Επίσης $\text{Prob}(E) = 16/36 = 4/9$. Οπότε παίρνουμε $\text{Prob}(D \cap E)/\text{Prob}(E) = (1/18)/(4/9) = 1/8$, επιβεβαιώνοντας τη συνέπεια του ορισμού της δεσμευμένης πιθανότητας.

Αν για δύο ενδεχόμενα ισχύει ότι $P(A|B) = P(A)$, τότε αυτά τα ενδεχόμενα καλούνται *στατιστικά ανεξάρτητα*: το αν θα συμβεί ή όχι το B δεν επηρεάζει καθόλου το αν θα συμβεί ή όχι το A . Σ' αυτήν την περίπτωση ισχύει $P(A \cap B) = \text{Prob}(A)\text{Prob}(B)$.

Παράδειγμα 1.4. Σε ένα τυχερό παιχνίδι ο παίκτης ρίχνει τρεις διαδοχικές ζαριές (με δύο ζάρια κάθε φορά) και κερδίζει αν σε μία τουλάχιστον φέρει 7. Θεωρώντας ισοπίθανα τα στοιχειώδη ενδεχόμενα κάθε ζαριάς, ποια είναι η πιθανότητα να κερδίσει;

Απάντηση. Έστω A_i το ενδεχόμενο "δεν έφερε 7 στην i ζαριά", $i = 1, 2, 3$. Σύμφωνα με το παράδειγμα 1.2, αφού η πιθανότητα να έρθει σε μια ζαριά 7 είναι ίση με $\frac{1}{6}$, $p(A_i) = 1 - \frac{1}{6} = \frac{5}{6}$. Το ενδεχόμενο L να χάσει ο παίκτης αντιστοιχεί στο να μη φέρει σε καμία ζαριά 7, δηλαδή $L = A_1 \cap A_2 \cap A_3$. Θεωρώντας τις τρεις ζαριές στατιστικά ανεξάρτητες, $\text{Prob}(L) = \text{Prob}(A_1 \cap A_2 \cap A_3) = \text{Prob}(A_1)\text{Prob}(A_2)\text{Prob}(A_3) = (5/6)^3 = \frac{125}{216}$. Το ενδεχόμενο W να κερδίσει ο παίκτης είναι το συμπληρωματικό του L , οπότε $\text{Prob}(W) = 1 - \text{Prob}(L) = 1 - \frac{125}{216} = \frac{91}{216} \simeq 0,42$.

Παράδειγμα 1.5. Έστω ένα πείραμα τύχης έχει δύο στοιχειώδη ενδεχόμενα, το 1 με πιθανότητα p και το 0 με πιθανότητα $q = 1 - p$. Ένα τέτοιο πείραμα τύχης καλείται *δικοτομικό*. Θεωρούμε ένα σύνθετο πείραμα τύχης που αποτελείται από N ανεξάρτητα τέτοια πειράματα. Η πιθανότητα $\text{Prob}(n)$ να πραγματοποιηθεί το ενδεχόμενο 1 ακριβώς n φορές (και άρα το ενδεχόμενο 0 να πραγματοποιηθεί $N - n$ φορές) δίνεται από τη *διωνυμική κατανομή*

$$\text{Prob}(n) = p^n q^{N-n} \frac{N!}{(N-n)!n!}. \quad (1.30)$$

Παράδειγμα 1.6. Θεωρούμε τη διωνυμική κατανομή του παραδείγματος 1.4, στην περίπτωση που το ενδεχόμενο 1 είναι εξαιρετικά απίθανο: $p \ll 1$ και ο αριθμός N των επαναλήψεων του δικοτομικού πειράματος είναι εξαιρετικά μεγάλος. Μαθηματικά, παίρνουμε το όριο $N \rightarrow \infty$, έτσι ώστε η ποσότητα $\lambda = Np$ να παραμένει σταθερή. Σ' αυτήν την περίπτωση

$$\text{Prob}(n) = \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{N!}{(N-n)!N^n} \right) \left(1 - \frac{\lambda}{N} \right)^{-n} \left(1 - \frac{\lambda}{N} \right)^N. \quad (1.31)$$

Στο όριο $N \rightarrow \infty$ με το n να παραμένει σταθερό, οι τρεις όροι σε παρένθεση στην Εξ. (1.31) έχουν όρια 1, 1 και $e^{-\lambda}$ αντίστοιχα. Έτσι καταλήγουμε στην *κατανομή Πουασόν*,

$$\text{Prob}(n) = \frac{\lambda^n e^{-\lambda}}{n!} \quad (1.32)$$

Η κατανομή Πουασόν μας δίνει τον αριθμό συγκεκριμένων γεγονότων σε μεγάλο αριθμό ανεξάρτητων επαναλήψεων ενός δικοτομικού πειράματος, όταν είναι γνωστός ο μέσος αριθμός γεγονότων λ .

1.4.5 Συνεχής δειγματικός χώρος

Οι παραπάνω ορισμοί αφορούν πειράματα τύχης που χαρακτηρίζονται από δειγματικούς χώρους με πεπερασμένο αριθμό μελών. Μπορεί κανείς να ισχυριστεί ότι αυτό αρκεί για την περιγραφή πραγματικών φυσικών πειραμάτων. Ωστόσο είναι ανεπαρκές για τη διατύπωση θεμελιωδών φυσικών θεωριών οι οποίες βασίζονται σε συνεχείς μεταβλητές, όπως η θέση στο χώρο και ο χρόνος. Γι' αυτό το λόγο είναι απαραίτητη η γενίκευση των αξιωμάτων του Κολμογκόροφ ώστε να περιγραφούν πειράματα τύχης όπου οι δειγματικοί χώροι είναι απειροσύνολα ή ακόμα και συνεχή σύνολα.

Ας θεωρήσουμε ως δειγματικό χώρο $\Omega = \mathbf{R}$, δηλαδή ότι τα λεπτομερή ενδεχόμενα αντιστοιχούν σε σημεία x της πραγματικής ευθείας (π.χ. η θέση ενός σωματιδίου). Τα αδρομερή ενδεχομενα αντιστοιχούν σε υποσύνολα του \mathbf{R} . Μία κατανομή πιθανοτήτων ορίζεται ως

$$\text{Prob}(A) = \int_A dx p(x), \quad (1.33)$$

όπου $p(x)$ μία θετική συνάρτηση $p : \Omega \rightarrow \mathbf{R}^+$, η οποία είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα: $\int_{\mathbf{R}} dxp(x) = 1$. Η συνάρτηση $p(x)$ καλείται *πυκνότητα πιθανότητας*.

Για κάθε υποσύνολο A του Ω ορίζουμε τη *χαρακτηριστική συνάρτηση* του A : $\chi_A : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$,

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & x \notin A \end{cases} \quad (1.34)$$

Με βάση αυτόν τον ορισμό η Εξ. (1.33) γράφεται στη χρήσιμη μορφή

$$\text{Prob}(A) = \int dxp(x)\chi_A(x). \quad (1.35)$$

Για οποιαδήποτε συνάρτηση $f : \Omega \rightarrow \mathbf{R}$, ορίζουμε

- τη μέση τιμή της f : $\langle f \rangle := \int_{\mathbf{R}} dxp(x)f(x)$.
- τη n -στη ροπή της f : $\langle f^n \rangle := \int_{\mathbf{R}} dxp(x)f(x)^n$.
- την τυπική απόκλιση Δf της f : $(\Delta f)^2 := \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$.

Η ανισότητα του Γιένσεν (1.26) ικανοποιείται και για συνεχείς κατανομές πιθανοτήτων.

Έστω ότι έχουμε μία πυκνότητα πιθανότητας $p(x, y)$ σε ένα δισδιάστατο δειγματικό χώρο $\Omega = \mathbf{R}^2$, που αντιστοιχεί σε μεταβλητές x και y . Οι *περιθωριακές πυκνότητες πιθανότητας* ορίζονται ως

$$p_1(x) = \int dy p(x, y) \quad p_2(y) = \int dx p(x, y) \quad (1.36)$$

και αποδίδουν τις πιθανότητες ως προς τη μεταβλητή x και τις πιθανότητες ως προς τη μεταβλητή y αντίστοιχα.

Ένθετο 1.1. Μαθηματική περιγραφή του συνεχούς δειγματικού χώρου

Υπάρχουν αρκετές τεχνικές μαθηματικές λεπτομέρειες που ξεχωρίζουν την περίπτωση του συνεχούς δειγματικού χώρου από αυτή του διακριτού. Κατ' αρχάς είναι απαραίτητο να γενικευτεί το πρώτο αξίωμα του Κολμογορον, ώστε να δέχεται άπειρη ένωση από ενδεχόμενα. Δηλαδή το αξίωμα γίνεται ως εξής.

Για κάθε $A_n \subset \Omega$, όπου $n = 1, \dots, \infty$, αν $A_n \cap A_m = \emptyset$ για $n \neq m$, τότε

$$\text{Prob}(\cup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \text{Prob}(A_n).$$

Επίσης δεν είναι αποδεκτά όλα τα υποσύνολα του δειγματικού χώρου ως αντιστοιχούντα σε ενδεχόμενα, γιατί ένα συνεχές σύνολο εμπεριέχει πολλά "παθολογικά" υποσύνολα. Αν θεωρήσουμε ότι ο δειγματικός χώρος είναι η ευθεία των πραγματικών \mathbf{R} , περιοριζόμαστε σε σύνολα U τα οποία είναι

- είτε είναι κλειστά διαστήματα της μορφής $[a, b]$
- είτε μπορούν να παραχθούν από τα παραπάνω μέσα από αριθμήσιμες πράξης ένωσης και τομής συνόλων.

Αυτά τα σύνολα καλούνται *μετρήσιμα σύνολα*. Επίσης περιοριζόμαστε σε *μετρήσιμες* συναρτήσεις $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$, οι οποίες ορίζονται από την ιδιότητα να απεικονίζουν μετρήσιμα σύνολα σε μετρήσιμα.

Τέλος, ως συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας γίνονται αποδεκτά και μαθηματικά αντικείμενα που αυστηρά μιλώντας δεν είναι συναρτήσεις, αλλά ορίζονται ως όρια συναρτήσεων. Στη μαθηματική βιβλιογραφία καλούνται *κατανομές*. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι η *συνάρτηση δέλτα*, την οποία θα αναλύσουμε στο κεφ. 5 στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας.

Η ακριβής μαθηματική περιγραφή των μέτρων πιθανότητας σε συνεχείς δειγματικούς χώρους εμπίπτει καταρχάς στη *θεωρία μέτρου*, και οφείλεται κυρίως στον Κολμογορον, ο οποίος έθεσε τα βασικά αξιώματα

αυτής της περιγραφής.

Παράδειγμα 1.7. Δύο πολύ συχνά χρησιμοποιούμενες κατανομές πιθανοτήτων στο \mathbf{R} είναι η Γκαουσιανή και η Λορεντζιανή. Η Γκαουσιανή κατανομή ορίζεται από την πυκνότητα πιθανότητας

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1.37)$$

και εξαρτάται από δύο παραμέτρους, την πραγματική παράμετρο x_0 και τη θετική παράμετρο σ . Για υπολογισμούς με την Γκαουσιανή κατανομή χρησιμοποιείται η ταυτότητα

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{(2a)^n} \quad (1.38)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n+1} e^{-ax^2} = 0, \quad (1.39)$$

όπου n θετικός ακέραιος και $a > 0$.

Από τις σχέσεις (1.38, 1.39) βρίσκουμε ότι για την Γκαουσιανή κατανομή

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \Delta x = \sigma. \quad (1.40)$$

Άλλα σημαντικά Γκαουσιανά ολοκληρώματα που θα χρησιμοποιήσουμε σ' αυτό το βιβλίο είναι τα εξής.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad \text{αν } \text{Re} a > 0 \quad (1.41)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ax^2-by^2+2cxy} = \frac{\pi}{\sqrt{ab-c^2}}, \quad \text{αν } a, b > 0, ab > c^2. \quad (1.42)$$

Παράδειγμα 1.8. Η Λορεντζιανή κατανομή ορίζεται από την πυκνότητα πιθανότητας

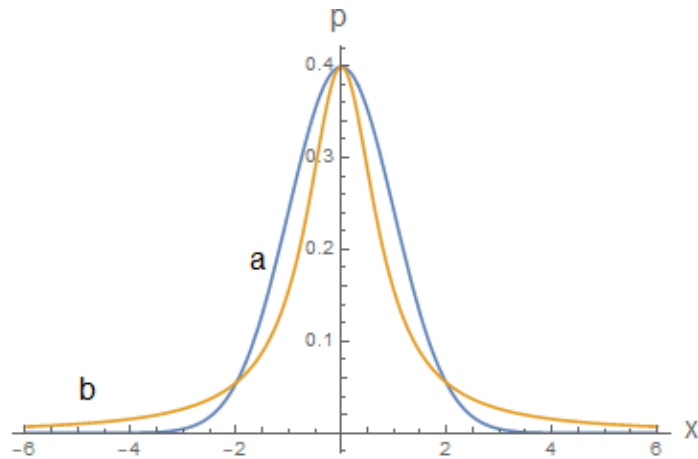
$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + (x-x_0)^2}, \quad (1.43)$$

η οποία εξαρτάται από την πραγματική παράμετρο x_0 και τη θετική παράμετρο γ . Η Λορεντζιανή κατανομή έχει μέση τιμή $\langle x \rangle = x_0$. Ωστόσο είναι ιδιάζουσα γιατί η τυπική της απόκλιση Δx απειρίζεται ($\Delta x = \infty$) καθώς $\langle x^2 \rangle = \infty$).

1.5 Οι πιθανότητες στις φυσικές επιστήμες

1.5.1 Ερμηνείες και χρήσεις της έννοιας της πιθανότητας

Οι βασικές αρχές της θεωρίας των πιθανοτήτων είναι αυτές που περιγράφηκαν στην ενότητα 1.4.2. Ωστόσο αυτές είναι μαθηματικές αρχές και δεν προσφέρουν κάποια οδηγία πώς θα εφαρμοστούν για την περιγραφή ή την πρόβλεψη γεγονότων του φυσικού κόσμου. Σ' αυτό το επίπεδο πρέπει να ξεχωρίσουμε διαφορετικά είδη πιθανότητας, τα οποία παρότι περιγράφονται από τα ίδια μαθηματικά, αναφέρονται σε τελείως διαφορετικές καταστάσεις και, κατά συνέπεια, χρησιμοποιούνται με διαφορετικό τρόπο.



Σχήμα 1.1: Η Γκαουσιανή κατανομή (α) και η Λορεντζιανή κατανομή (β) για $\sigma = \gamma$. Παρατηρείστε ότι η Λορεντζιανή κατανομή αποδίδει σημαντικά υψηλότερες πιθανότητες για ενδεχόμενα μακριά από τη μέση τιμή σε σύγκριση με την Γκαουσιανή.

Μπορούμε κατ' αρχάς να ξεχωρίσουμε τις πιθανότητες ως προς το αντικείμενο αναφοράς τους, οπότε διακρίνουμε τις υποκειμενικές, τις γνωσιολογικές και τις φυσικές πιθανότητες.

Οι *υποκειμενικές πιθανότητες* αναφέρονται στις εκτιμήσεις που μπορεί να κάνει ένα άτομο για κάποιο ενδεχόμενο και εκφράζουν το βαθμό πεποίθησής του ότι αυτό το γεγονός θα συμβεί. Χαρακτηριστικό παράδειγμα υποκειμενικής πιθανότητας είναι οι πιθανότητες των στοιχημάτων. Όταν αποδέχομαι ένα στοίχημα για να κερδίσει μία ομάδα Α με απόδοση 3 προς 1, σημαίνει ότι εκτιμώ ότι η πιθανότητα να κερδίσει η ομάδα είναι μεγαλύτερη του $1/(3 + 1) = 1/4$. Το ότι οι πιθανότητες είναι υποκειμενικές δε σημαίνει ότι είναι αυθαίρετες: αν κανείς στοιχηματίζει ασυνάρτητα και χωρίς λογική συγκρότηση πάνω στο αντικείμενο του στοιχήματος θα τα χάσει τα λεφτά του. Οι υποκειμενικές πιθανότητες σπανίως εμφανίζονται στα πλαίσια της φυσικής και δε θα ασχοληθούμε μαζί τους σ' αυτό το μάθημα.

Οι *γνωσιολογικές πιθανότητες* αφορούν τη χρήση υπαρχόντων δεδομένων προκειμένου να γίνει μία εκτίμηση, για παράδειγμα η εκτίμηση της πραγματικής τιμής ενός φυσικού μεγέθους με βάση τις μετρήσεις σε ένα πείραμα. Όταν κανείς χρησιμοποιεί στα εργαστήρια τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων για να προσδιορίσει την κλίση μιας ευθείας (η οποία κλίση αντιστοιχεί σε κάποια φυσική ποσότητα) τότε χρησιμοποιεί τη θεωρία πιθανοτήτων με γνωσιολογικό τρόπο. Παρόμοια χρήση της θεωρίας πιθανοτήτων γίνεται και στις δημοσκοπήσεις: από τις μετρήσεις σε ένα μικρό δείγμα πληθυσμού, επιχειρείται η εκτίμηση της πρόθεσης ψήφου του εκλογικού σώματος. Οι γνωσιολογικές πιθανότητες είναι μεν εξαιρετικά σημαντικές στη φυσική, αλλά στο επίπεδο της επεξεργασίας δεδομένων και όχι στο επίπεδο των βασικών θεωριών. Γι' αυτό το λόγο ούτε με αυτές θα ασχοληθούμε σ' αυτό το μάθημα.

Οι *φυσικές πιθανότητες* είναι αυτές που αφορούν τη συμπεριφορά ενός φυσικού συστήματος και όχι μόνο την επεξεργασία της πληροφορίας που έχουμε για αυτό. Η αιτία τους μπορεί να είναι η έλλειψη ελέγχου στις αρχικές συνθήκες ενός φυσικού συστήματος, η επίδραση ενός περιβάλλοντος ή ένα φυσικό σύστημα μπορεί να εμφανίζει πιθανοτική συμπεριφορά ενδογενώς. Οι φυσικές πιθανότητες αφορούν πρωταρχικά στο ίδιο το φυσικό σύστημα και όχι τη στατιστική επεξεργασία των μετρήσεων που έχουμε κάνει σ' αυτό το σύστημα. Σ' αυτό το μάθημα θα ασχοληθούμε αποκλειστικά με αυτού του είδους τις πιθανότητες.

Επιπλέον, οι πιθανότητες μπορούν να *οριστούν* με δύο διαφορετικούς τρόπους: ως αναφερόμενες σε *συχνότητες γεγονότων* ή ως αναφερόμενες στις *λογικές προτάσεις* για ένα σύστημα. Στην πρώτη περίπτωση μιλάμε για την *συχνοτική ερμηνεία* των πιθανοτήτων και στη δεύτερη για τη *λογική*

ερμηνεία των πιθανοτήτων.

Στη *συχνοτική ερμηνεία* των πιθανοτήτων δεν έχει νόημα να αποδίδουμε τις πιθανότητες σε μεμονωμένα συστήματα ή μεμονωμένα πειράματα τύχης. Αντί' αυτού, ορίζουμε ένα *στατιστικό σύνολο* το οποίο αποτελείται από N πανομοιότυπες επαναλήψεις του ίδιου πειράματος τύχης. Έστω A ένα ενδεχόμενο του πειράματος τύχης, το οποίο βρίσκουμε ότι πραγματοποιείται n_A φορές μέσα στο στατιστικό σύνολο. Ορίζουμε τη *σχετική συχνότητα* του A ως το λόγο n_A/N . Σύμφωνα με τη συχνοτική ερμηνεία των πιθανοτήτων, όταν ο αριθμός N γίνει επαρκώς μεγάλος, η σχετική συχνότητα n_A/N συγκλίνει στην πιθανότητα $\text{Prob}(A)$. (Αν δε συγκλίνει δεν έχει νόημα η έννοια της πιθανότητας για αυτό το σύστημα.)

Η συχνοτική ερμηνεία της πιθανότητας είναι η πιο συνηθισμένη στη φυσική και εφαρμόζεται στην ερμηνεία όλων των πειραμάτων. Για να συνδέσουμε τις θεωρητικές πιθανότητες με το πείραμα είναι απαραίτητη η επανάληψη πολλών φορών του ίδιου πειράματος, ή η ύπαρξη πολλών αντιγράφων του ίδιου συστήματος προετοιμασμένα με πανομοιότυπο τρόπο.

Σύμφωνα με τη *λογική ερμηνεία* των πιθανοτήτων έχει νόημα να μιλάει κανείς για πιθανότητες ακόμα και για ένα μεμονωμένο πείραμα τύχης, χωρίς να χρειάζεται η επίκληση ενός στατιστικού συνόλου. Στη λογική ερμηνεία των πιθανοτήτων δίνεται ιδιαίτερη βαρύτητα στις δεσμευμένες πιθανότητες $\text{Prob}(A|B)$, οι οποίες μας επιτρέπουν εκτιμήσεις για την έκβαση ενός πειράματος τύχης με βάση την προϋπάρχουσα πληροφορία.

Ιδιαίτερα σημαντική είναι η περίπτωση όπου μπορούν να βρεθούν ενδεχόμενα A και B για τα οποία ισχύει ότι $\text{Prob}(A|B) = 1$. Τότε λέμε ότι ισχύει η *λογική συνεπαγωγή* $B \rightarrow A$. Δηλαδή αν διαπιστώσουμε ότι πραγματοποιήθηκε το ενδεχόμενο B , μπορούμε να είμαστε σίγουροι ότι πραγματοποιήθηκε (ή θα πραγματοποιηθεί) το ενδεχόμενο A . Μπορούμε επίσης να μιλήσουμε για συνεπαγωγή $B \rightarrow A$ με βαθμό προσέγγισης ϵ , αν $\text{Prob}(A|B) = 1 - \epsilon$, όπου $0 < \epsilon \ll 1$.

Η λογική ερμηνεία της πιθανότητας χρησιμοποιείται επίσης πολύ συχνά στη φυσική. Είναι συνεπής με τη συχνοτική ερμηνεία, αλλά μπορεί κανείς να τη χρησιμοποιήσει ακόμα και αν δεν έχει στατιστικά σύνολα. Για παράδειγμα, όταν κανείς χρησιμοποιεί τη θεωρία πιθανοτήτων για να μελετήσει τη μακροπρόθεσμη συμπεριφορά του χρηματιστηρίου, ή το μακρινό μέλλον του ηλιακού συστήματος, η μελέτη αφορά ένα και μοναδικό σύστημα με συγκεκριμένη ιστορία και μη επαναλαμβανόμενα χαρακτηριστικά, για το οποίο δεν έχει νόημα η έννοια του στατιστικού συνόλου. Αναγκαστικά θα πρέπει κανείς να χρησιμοποιήσει τη λογική ερμηνεία των πιθανοτήτων. Το ίδιο φαίνεται ότι πρέπει να γίνει και στην κβαντική θεωρία, σε πειράματα όπου γίνονται μετρήσεις πάνω σε ένα μεμονωμένο και απομονωμένο άτομο. Αυτό σημαίνει ότι τουλάχιστον κάποιες από τις πιθανότητες που μας δίνονται από την κβαντική θεωρία πρέπει να τις αντιλαμβανόμαστε ως λογικές πιθανότητες.

Οι παραπάνω ερμηνείες των πιθανοτήτων δεν είναι αμοιβαία αποκλειόμενες. Μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει μία ερμηνεία σε μία περίπτωση και την άλλη σε άλλη, αν και υπάρχουν πολλοί "φονταμελιστές" που θεωρούν ότι μόνο μία από τις δύο είναι θεμελιωδώς σωστή. Επίσης, πολλοί προκρίνουν διακρίσεις ειδών πιθανότητας κάπως διαφορετικές από αυτές που παρουσιάσαμε εδώ. Αυτή η συζήτηση αφορά τα θεμέλια της θεωρίας των πιθανοτήτων και της στατιστικής, και παρότι πολύ ενδιαφέρουσα τόσο θεωρητικά όσο και σε πρακτικό επίπεδο, οι λεπτομέρειες της είναι έξω από τα πλαίσια αυτού του μαθήματος. Αξίζει όμως να παρατηρηθεί ότι στην κβαντική θεωρία αντιμετωπίζουμε μια διαφορετική εκδοχή αυτής της συζήτησης. Η διαφορά μεταξύ της συχνοτικής και της λογικής ερμηνείας της πιθανότητας θέτει και το θεμελιώδες ερώτημα αν η λεγόμενη κβαντική κατάσταση αφορά ένα μεμονωμένο φυσικό σύστημα (π.χ. ένα ηλεκτρόνιο) ή έχει νόημα μόνο σε ένα στατιστικό σύνολο από ηλεκτρόνια (μια δέσμη) που προετοιμάστηκαν με πανομοιότυπο τρόπο για ένα πείραμα.

1.5.2 Κλασική στατιστική μηχανική

Η στατιστική μηχανική αποτελεί τη σύνθεση της Νευτώνειας μηχανικής (στη Χαμιλτονιανή της μορφή) και της θεωρίας πιθανοτήτων. Αναπτύχθηκε προκειμένου να προσφέρει μία μικροσκοπική εξήγηση των νόμων της θερμοδυναμικής, οι οποίοι εμφανίζονται στο μακροσκοπικό επίπεδο. Τόσο επειδή περιέχει την έννοια της πιθανότητας, όσο και γιατί ενσωματώνει τη διάκριση μεταξύ μικροσκοπικού και μακροσκοπικού επιπέδου παρατήρησης αποτελεί την πιο κατάλληλη θεωρία της κλασικής φυσικής να συγκριθεί με την κβαντική μηχανική.

Δε θα περιγράψουμε τις λεπτομέρειες της στατιστικής μηχανικής, απλώς θα δώσουμε τις βασικές έννοιες που δείχνουν πώς χρησιμοποιείται η έννοια της πιθανότητας σε μία θεμελιώδη φυσική θεωρία.

Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα N σωματιδίων όπου N μεγάλος αριθμός. Όπως περιγράψαμε στο Κεφ. 1.2, τα σωματίδια αυτά χαρακτηρίζονται από τον καταστατικό χώρο $\Gamma = \mathbf{R}^{6N}$. Σ' αυτό το σύστημα των N σωματιδίων κάνουμε μετρήσεις διαφόρων φυσικών ποσοτήτων. Σε μία αιτιοκρατική θεωρία, αν ξέρουμε πλήρως την αρχική κατάσταση του συστήματος (και τη δυναμική του) θα μπορούσαμε να προσδιορίσουμε πλήρως και μοναδικά το αποτέλεσμα κάθε μέτρησης. Αλλά, είτε επειδή η πλήρης γνώση της αρχικής κατάστασης του συστήματος στο μικροσκοπικό επίπεδο είναι πρακτικά αδύνατη, είτε επειδή το σύστημα πάντα δέχεται μικρές εξωτερικές αλληλεπιδράσεις που σωρευτικά καταστρέφουν την πλήρη αιτιοκρατία, το αποτέλεσμα των μετρήσεων θα υπόκεινται σε διακυμάνσεις. Αυτό σημαίνει ότι *μία φυσική μέτρηση μπορεί να ταυτιστεί με ένα πείραμα τύχης*.

Επιπλέον, στην κλασική φυσική δεν υπάρχει περιορισμός στο πόσο ακριβής μπορεί να είναι μία μέτρηση, οπότε ιδεατά θα μπορούσε κανείς να προσδιορίσει τη θέση και την ορμή του κάθε σωματιδίου με οσοδήποτε μεγάλη ακρίβεια. Αυτό σημαίνει ότι τα σημεία του Γ αποτελούν τα λεπτομερή ενδεχόμενα για αυτό το σύστημα, άρα είναι λογικό να ταυτιστεί ο καταστατικός χώρος με το δειγματικό χώρο που αντιστοιχεί στις παραπάνω μετρήσεις. Στα πλαίσια αυτής της ταύτισης, έχει επικρατήσει η χρήση της λέξης "μικροκατάσταση" για τα σημεία του Γ , δηλαδή για τα λεπτομερή ενδεχόμενα. Εξ ορισμού δύο μικροκαταστάσεις είναι αμοιβαία αποκλειόμενες (για μία δεδομένη χρονική στιγμή): δεν μπορεί, για παράδειγμα, ένα μόριο να έχει ορμή $5m/s$ και ταυτόχρονα το ίδιο μόριο να έχει ορμή $10m/s$.

Έχουμε λοιπόν τις ακόλουθες ταυτίσεις εννοιών

- μέτρηση = πείραμα τύχης
- καταστατικός χώρος = δειγματικός χώρος
- μικροκατάσταση = λεπτομερές ενδεχόμενο

Αφού ταυτίζουμε τον καταστατικό χώρο Γ με ένα δειγματικό χώρο είναι λογικό να περιγράψουμε την τυχαιότητα με μία πυκνότητα πιθανότητας $\rho : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}^+$, έτσι ώστε η ποσότητα

$$\rho(q_1, p_1, q_2, p_2 \dots, q_{3N}, p_{3N}) d^{3N}q d^{3N}p \quad (1.44)$$

να ορίζει την πιθανότητα το σύστημα να βρίσκεται εντός ενός στοιχειώδους όγκου $d^{3N}q d^{3N}p$. Η πυκνότητα πιθανότητας ρ , είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα,

$$\int d^{3N}q d^{3N}p \rho(q_1, p_1, q_2, p_2 \dots, q_{3N}, p_{3N}) = 1. \quad (1.45)$$

Θα χρησιμοποιούμε συχνά τη συντομογραφία $\xi = (q_1, p_1, \dots, q_{3N}, p_{3N})$ για τα σημεία του Γ , οπότε η εξίσωση (1.45) θα γράφεται $\int d\xi \rho(\xi) = 1$, όπου $d\xi = d^{3N}q d^{3N}p$.

Αν θεωρήσουμε ότι το σύστημα είναι κλειστό ώστε να περιγράφεται από τις εξισώσεις του Χάμιλτον (άρα η πηγή της τυχαιότητας βρίσκεται στις αρχικές συνθήκες), τότε η πυκνότητα πιθανότητας ρ ικανοποιεί την εξίσωση του Λιουβίλ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}, \quad (1.46)$$

όπου H η Χαμιλτονιανή του συστήματος.

Απόδειξη. Για να ισχύει η εξίσωση κανονικοποίησης (1.45) σε όλες τις χρονικές στιγμές t , πρέπει να ισχύει $d\rho/dt = 0$, η ισοδύναμα

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_a \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_a} \dot{q}_a + \frac{\partial \rho}{\partial p_a} \dot{p}_a \right) = 0. \quad (1.47)$$

Αντικαθιστώντας τα \dot{q}_a, \dot{p}_a από τις εξισώσεις Χάμιλτον (1.4) και χρησιμοποιώντας τον ορισμό Εξ. (1.7) καταλήγουμε στην Εξ. (1.46).

Η στατιστική μηχανική κατά Γκιμπς (J. W. Gibbs) στηρίζεται στην υπόθεση ότι στο όριο μεγάλου χρόνου, όταν το σύστημα φτάνει σε κατάσταση ισορροπίας, βρισκόμενο σε επαφή με μια δεξαμενή θερμότητας σταθερής θερμοκρασίας T , η πυκνότητα πιθανότητα ρ δίνεται από την *κανονική κατανομή*

$$\rho_{can}(\xi) = Z^{-1} e^{-\frac{H(\xi)}{k_B T}}, \quad (1.48)$$

όπου k_B η σταθερά του Μπόλτςμαν (Boltzmann), και Z η λεγομένη *συνάρτηση επιμερισμού*. Η συνάρτηση επιμερισμού εισάγεται προκειμένου να ικανοποιηθεί η συνθήκη κανονικοποίησης (1.45),

$$Z = \int d\xi e^{-\frac{H(\xi)}{k_B T}}. \quad (1.49)$$

Ειδικότερα η μέση τιμή της ενέργειας δίνεται από τη σχέση

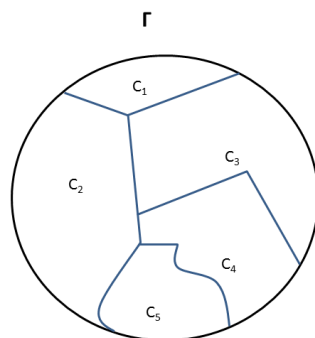
$$\langle E \rangle = \frac{\int d\xi H(\xi) e^{-\beta H(\xi)}}{\int d\xi e^{-\beta H(\xi)}} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}, \quad (1.50)$$

όπου $\beta = 1/(k_B T)$.

1.5.3 Μετρήσεις

Οι μετρήσεις σε ένα φυσικό σύστημα γίνονται πάντα στο μακροσκοπικό επίπεδο, ενώ τα συστατικά (μόρια) του συστήματος είναι μικροσκοπικά. Τα ενδεχόμενα που εξετάζει μία μέτρηση είναι πάντα εξαιρετικά αδρομερή σε σύγκριση με το επίπεδο των μορίων. Ας εξετάσουμε ως παράδειγμα την πτώση ενός ζαριού. Ο καταστατικός χώρος Γ του ζαριού περιγράφει τις κινήσεις των μορίων που αποτελούν το ζάρι. Εμάς μας ενδιαφέρει όμως πολύ πιο αδρή πληροφορία για το ζάρι, ποια από τις 6 πλευρές του κατέληξε να είναι πάνω όταν το ζάρι έμεινε ακίνητο. Οπότε το αποτέλεσμα της μέτρησης είναι μία τιμή $\lambda \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Προφανώς μία τιμή του λ αντιστοιχεί σε πολλές διαφορετικές μικροκαταστάσεις του ζαριού. Αντίθετα, μία μικροκατάσταση δεν μπορεί παρά να αντιστοιχεί σε μία και μοναδική τιμή του λ . Αυτό σημαίνει ότι η μέτρηση του λ σπάει τον καταστατικό χώρο σε έναν αριθμό υποσυνόλων του C_λ κάθε ένα εκ των οποίων αντιστοιχεί σε μία και μοναδική τιμή του λ . Αυτά τα υποσύνολα ικανοποιούν τις σχέσεις



Σχήμα 1.2: Μία κλασική μέτρηση αντιστοιχεί στην κατάτμηση του καταστατικού χώρου σε υποσύνολα C_λ τα οποία είναι αμοιβαία αποκλειόμενα και εξαντλητικά του Γ .

(i) $C_\lambda \cap C_{\lambda'} = \emptyset$, αν $\lambda \neq \lambda'$ (αμοιβαία αποκλειόμενα ενδεχόμενα)

(ii) $\cup_\lambda C_\lambda = \Gamma$ (ενδεχόμενα εξαντλητικά του Γ).

Αυτή η παρατήρηση γενικεύεται. Δεν υπάρχει τίποτα ξεχωριστό στην περίπτωση του ζαριού. Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι μία μέτρηση αντιστοιχεί στο σπάσιμο του καταστατικού χώρου Γ σε ένα σύνολο ενδεχομένων (υποσυνόλων του Γ) τα οποία είναι αμοιβαίως αποκλειόμενα και εξαντλούν το Γ . Επιπλέον η πληροφορία των μετρήσεων ενσωματωθεί σε μία συνάρτηση $F : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$, ως

$$F(\xi) = \sum_\lambda \lambda \chi_{C_\lambda}(\xi), \quad x \in \Gamma, \quad (1.51)$$

όπου χ_{C_λ} η χαρακτηριστική συνάρτηση του συνόλου C_λ και $\xi \in \Gamma$.

Αντίστροφα, αν έχουμε μία συνάρτηση $F : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$, ορίζουμε ένα σύνολο αμοιβαίως αποκλειόμενων και εξαντλητικών του Γ ενδεχομένων C_λ , ως

$$C_\lambda = \{\xi \in \Gamma | F(\xi) = \lambda\}. \quad (1.52)$$

Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα: Κάθε μέτρηση στην κλασική φυσική αντιστοιχεί σε μια συνάρτηση F στον καταστατικό χώρο Γ του μελετώμενου φυσικού συστήματος.

1.6 Η μαθηματική περιγραφή της κλασικής φυσικής

Συνοψίζουμε την ως τώρα συζήτηση δίνοντας μία σύντομη περιγραφή των βασικών μαθηματικών αρχών της κλασικής φυσικής, σε μία μορφή που θα επιτρέπει άμεσα τη σύγκριση με την κβαντική φυσική στα επόμενα κεφάλαια.

1. *Ο θεμελιώδης χώρος.* Ένα φυσικό σύστημα περιγράφεται από τον καταστατικό του χώρο Γ . Κάθε σημείο $\xi \in \Gamma$ καλείται μικροκατάσταση του συστήματος, και αντιστοιχεί στην πλέον λεπτομερή περιγραφή που μπορεί να γίνει στο σύστημα σε μία δεδομένη χρονική στιγμή (πλήρης προσδιορισμών θέσεων και ορμών όλων των σωματιδίων που το αποτελούν).
2. *Μετρήσεις.* Μία διαδικασία μέτρησης αντιστοιχεί μία συνάρτηση F στον καταστατικό χώρο. Βάσει της εξίσωσης (1.52), μία συνάρτηση F ορίζει ένα διαχωρισμό του Γ σε ένα σύνολο από αμοιβαία αποκλειόμενα και εξαντλητικά ενδεχόμενα.

3. *Πιθανότητες.* Οι πιθανότητες σε ένα κλασικό σύστημα περιγράφονται από μία πυκνότητα πιθανότητας ρ στον καταστατικό χώρο. Αν ένα ενδεχόμενο αποτέλεσμα μίας μέτρησης αντιστοιχεί σε ένα υποσύνολο U του Γ , τότε η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί αυτό το ενδεχόμενο είναι $\text{Prob}(U) = \int d\xi \rho(\xi) \chi_U(\xi)$.
4. *Χρονική εξέλιξη.* Αν το σύστημα είναι κλειστό, τότε η εξέλιξη των μικροκαταστάσεων περιγράφεται από τις εξισώσεις Χάμιλτον (1.4) και τις πυκνότητας πιθανότητας από την εξίσωση Λιουβίλ (1.46).
5. *Ενσωμάτωση πληροφορίας.* Η ενσωμάτωση πληροφορίας στην πιθανοτική περιγραφή του συστήματος γίνεται μέσω του κανόνα δεσμευμένης πιθανότητας, Εξ. (1.29).
6. *Σύνθεση συστημάτων.* Αν Γ_1 είναι ο καταστατικός χώρος του συστήματος 1, και Γ_2 ο καταστατικός χώρος του συστήματος 2, τότε το σύνθετο σύστημα που περιέχει και το 1 και το 2 περιγράφεται από τον καταστατικό χώρο $\Gamma_1 \times \Gamma_2$. Λέμε ότι η σύνθεση συστημάτων γίνεται χρησιμοποιώντας το Καρτεσιανό γινόμενο στο επίπεδο των διανυσματικών χώρων⁴.

Ερωτήσεις

1. Βεβαιωθείτε ότι κατανοείτε
 - τη διαφορά μεταξύ Χαμιλτονιανής συνάρτησης και ενέργειας.
 - την έννοια του πειράματος τύχης και του στατιστικού συνόλου.
 - ότι δύο διαφορετικά λεπτομερή ενδεχόμενα είναι αναγκαστικά αμοιβαίως αποκλειόμενα.
 - τί σημαίνει καταστατικός χώρος και τί δειγματικός χώρος.
 - τί σημαίνει ανεξάρτητα ενδεχόμενα και σε τί διαφέρουν από τα αμοιβαίως αποκλειόμενα ενδεχόμενα.
 - την αντιστοίχιση μεταξύ μετρήσεων και συναρτήσεων στον καταστατικό χώρο.
2. Είστε στο καζίνο και ακούτε κάποιον να λέει, "Αφού η ρουλέτα ήρθε 14 φορές σερί κόκκινο, την επόμενη θα έρθει μαύρο. Γι' αυτό θα ποντάρω στο μαύρο όλα τα λεφτά μου". Τί λάθος κάνει;
3. Σε μια αριθμητική προσομοίωση της κίνησης των πλανητών του Ηλιακού συστήματος μελετήθηκαν πολλές διαφορετικές τροχιές των πλανητών (λύσεις των εξισώσεων Χάμιλτον) που είναι συμβατές με τα τρέχοντα παρατηρησιακά δεδομένα (που έχουν πεπερασμένη ακρίβεια) [3]. Στο 1% αυτών των τροχιών υπήρξε μία σύγκρουση πλανητών μέσα στα επόμενα 5 δισεκατομμύρια έτη και καμία σύγκρουση στο υπόλοιπο 99%. Οι ερευνητές που έκαναν αυτή τη μελέτη καταλήγουν ότι "η πιθανότητα να γίνει σύγκρουση πλανητών στο Ηλιακό σύστημα στα επόμενα 5 δισεκατομμύρια έτη είναι 0,01". Με ποιον τρόπο χρησιμοποιούν την έννοια της πιθανότητας; (Θεωρείστε ότι το Ηλιακό σύστημα είναι ένα πλήρως αιτιοκρατικό φυσικό σύστημα.)
4. Μία πειραματική ομάδα φυσικής υψηλών ενεργειών ανακοινώνει στον τύπο την ανακάλυψη ενός σωματιδίου X . Η ανακοίνωση περιλαμβάνει τις ακόλουθες φράσεις
 - (α') "με βεβαιότητα 95% το σωματίο X έχει μάζα μεταξύ 300 και 400 GeV ".
 - (β') "το σωματίο X διασπάται κατά 30% μέσω της α' αντίδρασης και κατά 70% μέσω της β' αντίδρασης".
 - (γ') "πιθανότατα θα έχουμε ακριβή εκτίμηση της μάζας του ως τον Ιούλιο του 2016".

Εξηγείστε τί είδος πιθανότητας χρησιμοποιείται σε κάθε μία από τις φράσεις.

⁴Αυτή η αρχή είναι τόσο προφανής (αν ένα σωματίο περιγράφεται από καταστατικό χώρο \mathbf{R}^6 , τα δύο σωματίδια περιγράφονται από καταστατικό χώρο $\mathbf{R}^6 \times \mathbf{R}^6 = \mathbf{R}^{12}$), που δε θα χρειαζόταν μνεία, αν η κβαντική θεωρία δεν είχε έναν άλλον, ριζικά διαφορετικό, κανόνα σύνθεσης συστημάτων.

Ασκήσεις

1. Θεωρείστε ένα πείραμα τύχης με την ταυτόχρονη ρίψη δύο "ζαριών" τα οποία έχουν τη φαινομενικά παράδοξη ιδιότητα να μην μπορούν να διακριθούν μεταξύ τους (μποζονικά ζάρια). Αυτό έχει ως συνέπεια τα ενδεχόμενα (1,2) και (2,1) ενός κλασικού ζεύγους ζαριών να αντιστοιχούν σε ένα και μοναδικό λεπτομερές ενδεχόμενο αντί για δύο. Προσδιορίστε το δειγματικό χώρο και υπολογίστε την πιθανότητα να έρθει άθροισμα επτά, αν θεωρήσουμε όλα τα λεπτομερή ενδεχόμενα ως ισοπίθανα.
2. Θεωρείστε ένα πείραμα τύχης με την ταυτόχρονη ρίψη δύο "ζαριών" τα οποία έχουν τις εξής ιδιότητες: δεν μπορούν να διακριθούν μεταξύ τους και δεν μπορούν να φέρουν και τα δύο ταυτόχρονα τον ίδιο αριθμό (φερμιονικά ζάρια). Αυτό έχει ως συνέπεια τα ενδεχόμενα (1,2) και (2,1) ενός κλασικού ζεύγους ζαριών να αντιστοιχούν σε ένα και μοναδικό λεπτομερές ενδεχόμενο αντί για δύο, ενώ ενδεχόμενα όπως το (2,2) δεν είναι δυνατά. Προσδιορίστε το δειγματικό χώρο και υπολογίστε την πιθανότητα να έρθει άθροισμα επτά, αν θεωρήσουμε όλα τα λεπτομερή ενδεχόμενα ως ισοπίθανα.
3. Ποια είναι η μέση τιμή του αθροίσματος στη ρίψη ενός ζεύγους ζαριών και ποια η τυπική απόκλιση; Επαναλάβετε τον υπολογισμό για τα μποζονικά και φερμιονικά ζάρια των ασκήσεων 1 και 2.
4. Απατεώνας λιμάρει τα ζάρια του έτσι ώστε η πιθανότητα να έρθει 6 σε μια ζαριά είναι 50%, ενώ τα άλλα πέντε ενδεχόμενα είναι ισοπίθανα. Ποια είναι η πιθανότητα σε ταυτόχρονη ρίψη δύο τέτοιων ζαριών να έρθουν (i) εξάρεις, (ii) άθροισμα επτά, και (iii) άθροισμα δέκα;
5. Η θεωρητική μελέτη ενός πυρήνα καταλήγει στο εξής συμπέρασμα. Η πιθανότητα να διασπαστεί σε ένα χρονικό διάστημα εύρους τ είναι σταθερή και ίση με $p \ll 1$ και δεν εξαρτάται από τη στιγμή που αρχίζει το χρονικό διάστημα. Έστω ότι τη χρονική στιγμή $t = 0$ ο πυρήνας είναι αδιάσπαστος. Δείξτε ότι η πιθανότητα να έχει παραμείνει ο πυρήνας αδιάσπαστος τη χρονική στιγμή t , όπου $t \gg \tau$, είναι περίπου ίση με $e^{-pt/\tau}$. Υπολογίστε την πυκνότητα πιθανότητας $p(t)$, να γίνει η διάσπαση στο χρονικό διάστημα $[t, t + \delta t]$.
6. Ένα μακρομόριο κινείται κάτω από την επίδραση των κρούσεων μικρότερων μορίων (κίνηση Brown). Η κίνηση αυτή περιγράφεται πιθανοτικά. Για ευκολία θεωρούμε ότι η κίνηση γίνεται μόνο σε μία διάσταση. Η θέση του μακρομορίου τη χρονική στιγμή t περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας $\rho_t(x)$, που ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση *διάχυσης*

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 \rho_t}{\partial x^2}, \quad (1.53)$$

όπου D μία σταθερά. (α) Δείξτε ότι η Εξ. (1.53) έχει γενική λύση

$$\rho_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \int dx_0 \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2Dt} \right] \rho_0(x_0), \quad (1.54)$$

όπου ρ_0 η πυκνότητα πιθανότητας ως προς τη θέση για τη χρονική στιγμή $t = 0$. (β) Θεωρώντας ότι τη χρονική στιγμή $t = 0$ το μακρομόριο βρίσκεται στη θέση $x_0 = 0$, υπολογίστε τη μέση τιμή $\langle x(t) \rangle$ και την τυπική απόκλιση $\Delta x(t)$.

Βιβλιογραφία

- Για την κλασική μηχανική και ειδικότερα για το Χαμιλτονιανό φορμαλισμό, βλ. το βιβλίο του Goldstein [2]. Για τον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό. βλ. το βιβλίο του Griffiths [5]. Για μία μη τεχνική επισκόπηση της κλασικής φυσικής έως τη γέννηση της κβαντικής θεωρίας, βλ. τα κεφάλαια 1-2 στο βιβλίο Particle or Wave του συγγραφέα [4].
- Για βασική εισαγωγή στη θεωρία πιθανοτήτων, βλ. το βιβλίο του Spiegel [6], καθώς και το βιβλίο των Μπερτσέκα και Τσιτσικλή [7]. Για τα ζητήματα ερμηνείας των κλασικών πιθανοτήτων συνιστώ τα βιβλία εισαγωγής στη θεωρία πιθανοτήτων των Hacking [8] και Mellor [9].

- Για την έννοια του καταστατικού χώρου και τη βασική μαθηματική και εννοιολογική δομή της κλασικής φυσικής, βλ. το κεφ. 4 από το βιβλίο κβαντομηχανικής του Isham [10].

Κεφάλαιο 2

Η γέννηση της κβαντικής θεωρίας Α'

«Σε εμάς που μορφωθήκαμε αφότου το φως και η λογική είχαν εισέλθει στην τελική διατύπωση της κβαντικής μηχανικής, τα λεπτά προβλήματα και η περιπετειώδης ατμόσφαιρα των ημερών πριν την κβαντική μηχανική, γεμάτων ελπίδες και απογοητεύσεις, φαίνονται να έχουν ένα σχεδόν απόκοσμο χαρακτήρα. Μπορούσαμε μόνο να φανταστούμε πώς ήταν η εποχή όπου το να φτάνεις σε σωστά συμπεράσματα με ένα ξεκάθαρα ασυνεπές σκεπτικό αποτελούσε το βασικό στοιχείο του επαγγέλματος.»

Τσ. Ν. Γιάνγκ [11]

2.1 Κβάντα ενέργειας

Το πρώτο βήμα προς την ανατροπή της κλασικής φυσικής προέκυψε από ένα πρόβλημα στο οποίο οι βασικές ιδέες και μέθοδοι της κλασικής φυσικής δεν μπορούσαν να δώσουν λύση: την ακτινοβολία μελανού σώματος.

Ένα σώμα είναι μελανό, αν απορροφά όλο το φως που πέφτει πάνω του χωρίς να αντανακλά τίποτε. Τα συνηθισμένα μαύρα αντικείμενα δεν είναι τελείως μελανά, γιατί αντανακλούν κάποιο φως. Καλύτερο παράδειγμα μελανού σώματος είναι μία τρύπα. Έστω ένα ξύλινο κουτί με χοντρά τοιχώματα και με μία εσωτερική κοιλότητα. Υποθέτουμε ότι τα τοιχώματα της κοιλότητας έχουν τραχιά επιφάνεια. Ανοίγουμε μία μικρή τρύπα σε μία πλευρά του κουτιού. Το φως που μπαίνει στην κοιλότητα από αυτήν την τρύπα θα απορροφηθεί από τα τοιχώματα. Αν μία φωτεινή ακτίνα δεν απορροφηθεί με την πρώτη, θα ανακλαστεί από το εσωτερικό τοίχωμα, θα ανακλαστεί και θα απορροφηθεί τη δεύτερη ή την τρίτη φορά κλπ, αλλά σίγουρα πριν βρει έξοδο από την τρύπα από την οποία εισήλθε. Μια τέτοια τρύπα λοιπόν απορροφά όλο το φως που πέφτει μέσα της και είναι τελείως μαύρη.

Ανακαλύφθηκε όμως ότι τα μελανά σώματα εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητικά (ΗΜ) κύματα, κυρίως στο υπέρυθρο κομμάτι του ΗΜ φάσματος. Η εξήγηση γι' αυτό το φαινόμενο δίνεται από στοιχειώδη επιχειρήματα θερμοδυναμικής. Το κουτί δεν είναι ποτέ τελείως απομονωμένο. Ανταλλάσσει θερμότητα με το περιβάλλον του, έως ότου να αποκτήσουν την ίδια θερμοκρασία. Αλλά η θερμοκρασία αντιστοιχεί σε ενέργεια, την οποία λαμβάνουν τα ηλεκτρόνια των τοιχωμάτων. Αυτά είναι δεσμευμένα στα τοιχώματα και ταλαντώνονται: οι ταλαντώσεις τους γεννούν ΗΜ κύματα. Γι' αυτό το λόγο μέσα στην κοιλότητα υπάρχουν πάντα ΗΜ κύματα. Αυτά τα κύματα θα εξέλθουν τελικά από την τρύπα και θα γίνουν αντικείμενο παρατήρησης.

Έστω ω η γωνιακή συχνότητα με την οποία ταλαντώνεται ένα ηλεκτρόνιο του τοιχώματος. Αυτό παράγει έναν τρόπο ταλάντωσης του πεδίου με συχνότητα ω , ο οποίος θα φέρει ενέργεια ανάλογη

της μέσης ενέργειας $\langle E \rangle$ των ταλαντώσεων. Έστω ότι σε μία κοιλότητα όγκου V ο αριθμός των τρόπων ταλάντωσης του πεδίου με συχνότητα στο διάστημα $[\omega, \omega + \delta\omega]$ είναι ίσος με $g(V, \omega)\delta\omega$, όπου η ποσότητα $g(V, \omega)$ καλείται πυκνότητα καταστάσεων. Στην άσκηση 1, αποδεικνύεται ότι

$$g(V, \omega) = \frac{8V\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (2.1)$$

Συμπεραίνουμε ότι η ΗΜ ενέργεια ενός μελανού σώματος όγκου V σε συχνότητες στο διάστημα $[\omega, \omega + \delta\omega]$ είναι $\epsilon(\omega)\delta\omega$, όπου

$$\epsilon(\omega) = g(V, \omega)\langle E \rangle. \quad (2.2)$$

Για να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της ενέργειας $\langle E \rangle$ ενός ταλαντωτή θεωρούμε τη Χαμιλτονιανή ενός αρμονικού ταλαντωτή μάζας m και συχνότητας ω

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \quad (2.3)$$

Η αντίστοιχη συνάρτηση επιμερισμού για θερμοκρασία T υπολογίζεται ως $Z = \frac{2\pi k_B T}{\omega}$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (1.50) βρίσκουμε ότι $\langle E \rangle = k_B T$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (2.2), καταλήγουμε ότι

$$\epsilon(\omega) = \frac{8V\omega^2 k_B T}{\pi^2 c^3}. \quad (2.4)$$

Η εξίσωση (2.4) είναι προβληματική γιατί η ολική ενέργεια του μελανού σώματος

$$\int_0^\infty d\omega \epsilon(\omega) \sim \int_0^\infty d\omega \omega^2$$

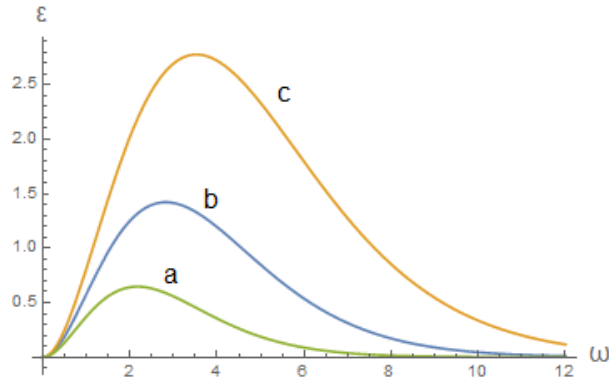
απειρίζεται. Πέρα από αυτό, βρίσκεται σε πλήρη ανακολουθία με τα πειραματικά δεδομένα. Οι μετρήσεις της έντασης της ακτινοβολίας από ένα μελανό σώμα προσδιορίζουν το $\epsilon(\omega)$ ως μία συνάρτηση με ένα τοπικό μέγιστο που τείνει στο μηδέν για μεγάλες συχνότητες.

Το πρόβλημα ήταν σοβαρό. Οι κλασικές προβλέψεις για την ακτινοβολία μελανού σώματος προέρχονταν από απλές υποθέσεις κοινώς αποδεκτών θεωριών της φυσικής και δεν απαιτούσαν πολύπλοκη μοντελοποίηση. Το γεγονός ότι το πείραμα έδινε τελείως διαφορετική ποιοτικά συμπεριφορά των φυσικών ποσοτήτων σήμαινε ότι κάπου υπήρχε ένα μεγάλο λάθος στην κατανόηση του συστήματος.

Η λύση ήρθε από τον Μαξ Πλανκ (Max Planck) και πρωτοπαρουσιάστηκε σε μία συνάντηση της Γερμανικής Φυσικής Εταιρείας το 1900. Καταρχάς ο Πλανκ βρήκε έναν ημι-εμπειρικό τύπο για την πειραματική μορφή του $\epsilon(\omega)$, απαιτώντας το σεβασμό των βασικών αρχών της θερμοδυναμικής. Αλλά έτσι το πρόβλημα μεταφέρθηκε στην εύρεση μιας εξήγησης για αυτόν τον τύπο. Και τέτοια εξήγηση δεν υπήρχε μέσα στη γνωστή φυσική.

Η εξήγηση στην οποία κατέληξε ήταν ριζοσπαστική και καινοτόμα: υπέθεσε ότι η ενέργεια των ταλαντωτών των τοιχωμάτων δεν παίρνει συνεχείς τιμές, αλλά διακριτές. Για έναν ταλαντωτή γωνιακής συχνότητας ω , υπάρχει μία ελάχιστη τιμή της ενέργειας ίση με $\hbar\omega$, ένα κβάντο (quantum) όπως το ονόμασε. Οι τιμές της εκπεμπόμενης ενέργειας μπορούν να είναι μόνο πολλαπλάσια του ενός κβάντου $n\hbar\omega$, όπου $n = 0, 1, 2, \dots$. Η σταθερά \hbar είναι μία νέα θεμελιώδης φυσική σταθερά, που πλέον καλείται *σταθερά του Πλανκ* και έχει μετρηθεί πειραματικά ως $\hbar = 1.0545 \times 10^{-34} \text{m}^2 \text{kg/s}$.

Με βάση την κβαντική υπόθεση, η κατανομή πιθανότητας της ενέργειας ενός αρμονικού ταλαντωτή είναι διακριτή. Γενικεύοντας την κανονική κατανομή, η πιθανότητα p_n ώστε ένας ταλαντωτής



Σχήμα 2.1: Η κατανομή ενεργειών Εξ. (2.8) για διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας. Η θερμοκρασία αυξάνει από το a στο b στο c.

γωνιακής συχνότητας ω να έχει ενέργεια ίση με $n\hbar\omega$ (δηλαδή n κβάντα), όπου n θετικός ακέραιος, είναι

$$p_n = \frac{e^{-n\beta\hbar\omega}}{Z}, \quad (2.5)$$

όπου τώρα η συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (2.6)$$

Η κατανομή (2.5) καλείται *κατανομή Πλανκ*.

Η μέση τιμή της ενέργειας ενός ταλαντωτή είναι

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (n\hbar\omega) e^{-n\beta\hbar\omega}}{Z} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (2.7)$$

Κατά συνέπεια η κατανομή ενεργειών $\epsilon(\omega)$ γίνεται

$$\epsilon(\omega) = \frac{8V\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\beta\hbar\omega} - 1)}, \quad (2.8)$$

η οποία αποδίδει σωστά τα πειραματικά δεδομένα. Η γραφική παράσταση της Εξ. (2.8) δίνεται στο Σχ. 2.1. Παρατηρούμε ότι για μικρές συχνότητες $\hbar\omega \ll k_B T$, $e^{\beta\hbar\omega} \simeq 1 + \beta\hbar\omega$ και η Εξ. (2.8) ταυτίζεται με την κλασική έκφραση (2.4).

Η θεωρία του Πλανκ αποδείχθηκε εξαιρετικά επιτυχημένη για να περιγράψει την εκπομπή του μελανού σώματος, αλλά άνοιξε τον ασκό του Αιόλου: ποια είναι η ρίζα της κβαντικής υπόθεσης; Φαινόταν εντελώς ασύμβατη με όλη τη γνωστή φυσική και ειδικότερα με τους νόμους του Νεύτωνα.

2.2 Κβάντα φωτός

Το επόμενο βήμα προς την ανάπτυξη της κβαντικής θεωρίας ήρθε λίγα χρόνια αργότερα από τον Άλμπερτ Αϊνστάιν (Albert Einstein), στη λεγόμενη "θαυματουργή χρονιά" του (1905), στη διάρκεια της οποίας παρουσίασε και την ειδική θεωρία της σχετικότητας. Ο Αϊνστάιν πρότεινε [12] ότι

"...[όλα τα] φαινόμενα εκπομπής και μετατροπής του φωτός μπορούν να κατανοηθούν καλύτερα με βάση την υπόθεση ότι η ενέργεια του φωτός κατανέμεται ασυνεχώς στο χώρο. Σύμφωνα με αυτήν την υπόθεση, όταν

μία φωτεινή ακτίνα διαδίδεται από ένα σημείο, η ενέργεια δεν κατανέμεται συνεχώς σε έναν ολόενα αυξανόμενο όγκο, αλλά αποτελείται από έναν πεπερασμένο αριθμό κβάντων ενέργειας, εντοπισμένων στο χρόνο, που κινούνται χωρίς να διαιρούνται και που μπορούν να απορροφηθούν ή να εκπεμφθούν μόνο ολόκληρα.”

Είναι αξιοσημείωτο ότι το κυριότερο θεωρητικό κίνητρο του Αϊνστάιν για την εισαγωγή των κβάντων φωτός ήταν ότι αντιλαμβανόταν μία ασυμβατότητα ανάμεσα στην κυματική θεωρία του φωτός και την ατομική θεώρηση της ύλης. Πώς μπορεί να αλληλεπιδρά ένα άτομο με ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα, όταν το δεύτερο εκτείνεται σε πολύ μεγαλύτερο όγκο από το πρώτο; (Το τυπικό μήκος κύματος του φωτός είναι $10^3 - 10^4$ φορές μεγαλύτερο από ένα άτομο.) Πόσο μάλλον όταν ένα σφαιρικό κύμα που εκπέμπεται από ένα σημείο καλύπτει ολόενα και περισσότερο όγκο όπως διαδίδεται, έτσι ώστε η μέση πυκνότητα ενέργειας του μακριά από την πηγή να μπορεί να γίνει αμελητέα.

Με βάση την υπόθεση του Αϊνστάιν, ένα μονοχρωματικό ηλεκτρομαγνητικό κύμα γωνιακής συχνότητας ω αποτελείται από άτομα κβάντα φωτός, το καθένα με ενέργεια

$$E = \hbar\omega. \quad (2.9)$$

Αργότερα ο Αϊνστάιν αντιλήφθηκε ότι αυτά τα κβάντα ενέργειας πρέπει να έχουν ορμή. Αν k είναι ο κυματάριθμος του κύματος, τότε κάθε κβάντο φωτός έχει ορμή

$$p = \hbar k. \quad (2.10)$$

Αφού το κάθε κβάντο φωτός έχει και ενέργεια και ορμή, δεν μπορεί παρά να είναι σωματίο. Αρκετά αργότερα (το 1926) τα κβάντα φωτός ονομάστηκαν *φωτόνια* [13].

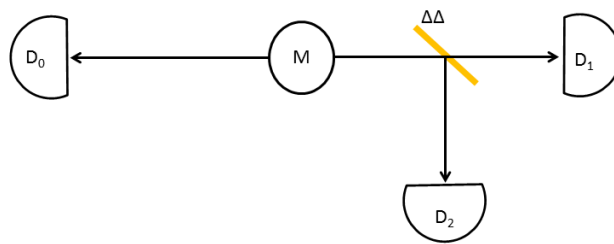
Η αποδοχή της ύπαρξης των φωτονίων από την επιστημονική κοινότητα απαιτήσε πολλά χρόνια. Παρότι από την πρώτη στιγμή ο Αϊνστάιν κατόρθωσε να δώσει επαρκείς εξηγήσεις για φαινόμενα που αφορούν την εκπομπή και απορρόφηση του φωτός από την ύλη, η ιδέα των σωματιδίων του φωτός ήταν δύσκολο να γίνει αποδεκτή. Έρχονταν σε αντίφαση με το φαινόμενο της συμβολής (βλ. Ασκ. 6), το οποίο είχε χρησιμοποιηθεί ως απόδειξη της κυματικής φύσης του φωτός ήδη από τον 19ο αιώνα. Και πραγματικά, η έννοια των φωτονίων ως σωματία είναι συνεπής μόνο στα πλαίσια της ολοκληρωμένης κβαντικής θεωρίας, που εμφανίστηκε 20 χρόνια μετά την υπόθεση του Αϊνστάιν. Σωματία που περιγράφονται από την κλασική μηχανική δεν είναι συμβατά με την κυματική περιγραφή του φωτός σύμφωνα με τις εξισώσεις του Μάξγουελ.

Το κρίσιμο αποτέλεσμα που οδήγησε στην αποδοχή της έννοιας των κβάντων φωτός ήταν τα πειράματα του Κόμπτον (Arthur Compton) το 1923, στα οποία μελέτησε την ελαστική σκέδαση ακτίνων Χ πάνω σε ηλεκτρόνια [14]. Το πείραμα δίνει ότι το μήκος κύματος των σκεδαζόμενων φωτονίων εξαρτάται από τη γωνία σκέδασης, κάτι το οποίο δεν μπορεί να εξηγηθεί με βάση της κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία. Αντίθετα αν θεωρήσει κανείς τα φωτόνια ως σωματία με ενέργεια να δίνεται από την Εξ. (2.9) και ορμή από την Εξ. (2.10), η αρχή διατήρησης ενέργειας και ορμής δίνει τη σχέση (για την απόδειξη, βλ. Ασκ. 3)

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (2.11)$$

όπου λ το αρχικό μήκος κύματος του εισερχόμενου φωτός, λ' το μήκος κύματος μετά τη σκέδαση, θ είναι η γωνία σκέδασης (στο σύστημα αναφοράς που το ηλεκτρόνιο είναι αρχικά ακίνητο) και m_e η μάζα του ηλεκτρονίου. Η Εξ. (2.11) ήταν σε εξαιρετική ακρίβεια με το πείραμα, και δεδομένου ότι απαιτούσε την απόδοση ορμής στα φωτόνια, συνέβαλλε ιδιαίτερα στην αποδοχή τους ως πραγματικά σωματία.

Ωστόσο ακόμα και στο φαινόμενο Κόμπτον, η απόδειξη της ύπαρξης φωτονίων είναι έμμεση. Όμως, πλέον είναι εύκολα τα πειράματα που αποδεικνύουν άμεσα την ύπαρξη των άτμητων και εντοπισμένων στο χώρο και στον χρόνο κβάντων του φωτός—βλ. ένθετο 2.1.



Σχήμα 2.2: Πειραματική διάταξη για την απόδειξη ύπαρξης φωτονίων (βλ. ένθετο 2.1 για επεξήγηση).

Ένθετο 2.1. Πειραματική απόδειξη της ύπαρξης φωτονίων

Μια διάταξη με την οποία αποδεικνύεται πειραματικά η ύπαρξη των φωτονίων δίνεται στο σχήμα 2.2.

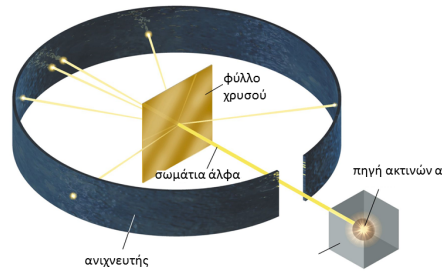
- M είναι ένας μετατροπέας (down converter). Ο μετατροπέας είναι ένας κρύσταλλος ο οποίος δέχεται στην είσοδο ένα φωτόνιο στο ιώδες ή υπεριώδες και βγάζει ως έξοδο δύο φωτόνια χαμηλότερων συχνοτήτων. Η απόδοση του μετατροπέα είναι πολύ χαμηλή ($10^{-12} - 10^{-10}$) κάτι που σημαίνει ότι αν η ένταση του εισερχόμενου φωτός είναι χαμηλή, τα εξερχόμενα ζεύγη φωτονίων εξέρχονται ξεχωριστά το καθένα από το επόμενο. Τα εξερχόμενα φωτόνια είναι συζευγμένα στο χρόνο (αφού δημιουργούνται ταυτόχρονα) και ως προς την ορμή.
- $\Delta\Delta$ είναι ένας διασπαστής δέσμης (beam splitter). Αυτός είναι ένα ημιαργυρωμένο κάτοπτρο: το 50% μιας φωτεινής δέσμης περνά χωρίς ανάκλαση και το άλλο 50% ανακλάται κατά 90° .
- D_0, D_1, D_2 είναι φωτοανιχνευτές, εξαιρετικά ευαίσθητες δίοδοι που μπορούν να ανιχνεύουν ακόμα και μοναδικά φωτόνια.

Από κάθε ζεύγος φωτονίων που εξέρχεται από τον μετατροπέα, το ένα φωτόνιο πηγαίνει στον ανιχνευτή D_0 και το άλλο προς το ημιαργυρωμένο κάτοπτρο, όπου αν περάσει χωρίς ανάκλαση καταλήγει στον ανιχνευτή D_1 ενώ αν ανακλαστεί καταλήγει στον ανιχνευτή D_2 . Αν το φως ήταν κλασικό κύμα, η δεύτερη συνιστώσα του θα διασπόταν στο ημιαργυρωμένο κάτοπτρο και ένα μέρος του θα κατέληγε στο D_1 και ένα μέρος στο D_2 , οπότε θα υπήρχαν ταυτόχρονες ανιχνεύσεις στο D_1 και στο D_2 . Στο πείραμα παρατηρούνται ταυτόχρονες ανιχνεύσεις των $D_0 - D_1$ και $D_0 - D_2$, αλλά ποτέ $D_1 - D_2$. Η απουσία συγχρονισμών $D_1 - D_2$ αποδεικνύει την ύπαρξη του φωτονίου ως εντοπισμένης στο χώρο και χρόνο οντότητας.

2.3 Το άτομο του Μπορ

Η περίοδος στην οποία έγιναν τα πρώτα βήματα της κβαντικής θεωρίας είναι η ίδια περίοδος που η τεχνολογία επέτρεψε το πρώτο βλέμμα στον κόσμο των ατόμων. Το 1895 ο Ρέντγκεν (Röntgen) ανακάλυψε τις ακτίνες X, το 1896 ο Τζ. Τόμσον (J. J. Thomson) ανακάλυψε το ηλεκτρόνιο και ο Α. Μπεκερέλ (Henri Becquerel) τη ραδιενέργεια, ενώ το 1900 οι Ράδερφορντ (E. Rutherford) και Σόντι (F. Soddy) έδειξαν ότι η ραδιενέργεια συνοδεύεται από αλλαγή στο είδος των ατόμων (μεταστοιχείωση). Η ραδιενεργός ακτινοβολία διαχωρίστηκε σε τύπους άλφα, βήτα και γάμμα, τους οποίους πλέον ταυτίζουμε με πυρήνες ηλίου, ηλεκτρόνια και φωτόνια υψηλής ενέργειας αντίστοιχα.

Αυτή η διαδοχή μεγάλων ανακαλύψεων κορυφώθηκε με ένα περιβόητο πείραμα που έγινε στο εργαστήριο του Ράδερφορντ (Rutherford) στο Μάντσεστερ [15]. Σ' αυτό το πείραμα οι Γκάιγκερ (H. Geiger) και Μάρσοντεν (E. Marsden), κατεύθυναν σωμάτια άλφα σε λεπτά φύλλα χρυσού—βλ. σχήμα 2.3. Παρατηρήθηκε οπισθοσκέδαση, δηλαδή κάποια σωμάτια άλφα μετά τη σκέδασή τους με τα άτομα χρυσού άλλαξαν κατεύθυνση κατά περισσότερο από 90° . Αυτή η συμπεριφορά ήταν ανεξήγητη αν υπέθετε κανείς ότι το άτομο αντιστοιχεί σε μία συνεχή κατανομή φορτίου. Οδήγησε τον



Σχήμα 2.3: Το πείραμα του Ράδερφορντ. Σωματία άλφα κατευθύνονται σε ένα λεπτό φύλλο χρυσού. Παρότι τα περισσότερα σωματία περνούν με μικρές γωνίες σκέδασης, κάποια οπισθοσκεδάζονται, κάτι που οδηγεί στην υπόθεση της ύπαρξης ενός ατομικού πυρήνα όπου συγκεντρώνεται το μεγαλύτερο μέρος της μάζας ενός ατόμου.

Ράδερφορντ στην υπόθεση ότι πρέπει να υπάρχει μία περιοχή στο εσωτερικό του ατόμου με μεγάλη συγκέντρωση μάζας και θετικά φορτισμένη, η οποία απωθεί έντονα τα (θετικά φορτισμένα) σωματία άλφα [16]. Αυτή η περιοχή είναι ο ατομικός πυρήνας.

Έτσι γεννήθηκε το σύγχρονο μοντέλο του ατόμου, ως μινιατούρα ενός ηλιακού συστήματος, με τα ηλεκτρόνια να περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα κάτω από τις δυνάμεις Κουλόμπ, και να είναι τόσα σε αριθμό ώστε να εξουδετερώνουν το φορτίο του πυρήνα και το άτομο να είναι ουδέτερο.

Καλά καλά δεν είχε προταθεί το μοντέλο του Ράδερφορντ και βρέθηκε να αντιμετωπίζει ένα σοβαρό πρόβλημα. Αν τα ηλεκτρόνια κινούνται γύρω από τον πυρήνα κάτω από δυνάμεις Κουλόμπ, τότε κάνουν επιταχυνόμενη κίνηση. Σύμφωνα με τον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, αυτό σημαίνει ότι εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητικά κύματα και άρα χάνουν ενέργεια. Ένας απλός υπολογισμός (βλ. άσκηση 4) δείχνει ότι αρκεί χρόνος της τάξης των $10^{-11} s$ ώστε το ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου να καταρρεύσει στον πυρήνα. Αυτό σημαίνει ότι τα άτομα στο μοντέλο του Ράδερφορντ δεν μπορεί να είναι ευσταθή.

Η λύση σ' αυτό το πρόβλημα δόθηκε από το Δανό Νιλς Μπορ (Niels Bohr) [17], και ήταν τέτοια ώστε να προσφέρει ταυτόχρονα απάντηση σε ένα άλλο μεγάλο ανοικτό πρόβλημα. Το άτομο του υδρογόνου, όπως και τα περισσότερα γνωστά στοιχεία, εξέπεμπε ακτινοβολία μόνο σε συγκεκριμένες διακριτές συχνότητες και δεν υπήρχε κανένας τρόπος να εξηγηθεί ούτε η διακριτότητα του φάσματος, ούτε για ποιο λόγο εκπέμπονταν ακτινοβολία σε αυτές τις συγκεκριμένες τιμές των συχνοτήτων.

Η πρόταση του Μπορ ήταν να συνδυαστούν οι ιδέες των κβάντων με τη φυσική των ατόμων. Τα δεδομένα της φασματοσκοπίας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι τα φωτόνια που εκπέμπονται από το άτομο χαρακτηρίζονται από συγκεκριμένες διακριτές τιμές ενέργειας. Είναι λογικό να υποθέσει κανείς ότι η εκπομπή ενός φωτονίου αντιστοιχεί σε ένα ηλεκτρόνιο που μεταβαίνει από μία τροχιά σε μία άλλη μικρότερης ενέργειας (πιο κοντά στον πυρήνα). Καθώς όμως οι ενέργειες των φωτονίων παίρνουν διακριτές τιμές, μόνο κάποιες συγκεκριμένες τροχιές από όλες τις δυνατές θα μπορούν να πραγματοποιηθούν— οποιαδήποτε άλλη να είναι απαγορευμένη. Αν αυτό ισχύει, τότε το ηλεκτρόνιο αποφεύγει την πτώση στον πυρήνα, αν η τροχιά που αντιστοιχεί σε αυτήν την πτώση απαγορεύεται. Το ζητούμενο ήταν να βρεθεί ένα απλό μοντέλο για την επιλογή των επιτρεπόμενων τροχιών.

Στο άτομο του υδρογόνου, όπου ένα μόνο ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα, ήταν εύκολο να εντοπιστεί η ζητούμενη συνθήκη. Ο Μπορ απαίτησε τον *κβαντισμό της στροφορμής*, δηλαδή ότι η στροφορμή είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του \hbar ,

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

Ο αριθμός n στην εξίσωση (2.12) αποκαλείται *κβαντικός αριθμός*.

Για να δούμε τις συνέπειες της συνθήκης (2.12) θεωρούμε σφαιρικά συμμετρικές τροχιές του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα. Ο 2ος νόμος του Νεύτωνα για τη δύναμη Coulomb $m_e v^2/r = e^2/(4\pi r^2)$, δίνει την ταχύτητα περιστροφής ως συνάρτηση της ακτίνας r της τροχιάς

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi m_e r}. \quad (2.13)$$

Δεδομένου ότι η στροφορμή γράφεται ως $m_e v r = n\hbar$, η εξίσωση (2.13) οδηγεί στη συνθήκη κβαντισμού των ακτίνων r

$$r_n = \frac{4\pi\hbar^2}{m_e e^2} n^2. \quad (2.14)$$

Η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι $E = \frac{1}{2} m v^2 - e^2/(4\pi r)$, οπότε η Εξ. (2.13) δίνει $E = -e^2/(8\pi r)$. Αντικαθιστώντας την τιμή της ακτίνας r από την Εξ. (2.14) παίρνουμε τις κβαντισμένες τιμές της ενέργειας

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2}, \quad (2.15)$$

όπου

$$E_1 = e^4 m_e / (32\pi^2 \hbar^2) \simeq 13,6 \text{ eV} \quad (2.16)$$

αντιστοιχεί στην τροχιά ελάχιστης ενέργειας του συστήματος ($n = 1$). Για την τροχιά ελάχιστης ενέργειας, η σχέση (2.14) δίνει $r_1 = a_0$, όπου

$$a_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0,5 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (2.17)$$

καλείται *ακτίνα του Μπορ* και προσδιορίζει την κλίμακα μήκους των ατόμων.

Από τη σχέση (2.15) προκύπτουν τα εξής.

- Δεδομένου ότι υπάρχει μία τροχιά ελάχιστης ενέργειας, η πτώση του ηλεκτρονίου στον πυρήνα απαγορεύεται.
- Η ενέργεια ενός εκπεμπόμενου φωτονίου αντιστοιχεί στη διαφορά μεταξύ δύο επιτρεπόμενων τιμών της ενέργειας $E_m - E_n$, όπου n και m ακέραιοι με $n < m$. Άρα οι εκπεμπόμενες συχνότητες ικανοποιούν τη σχέση

$$\hbar\omega_{m,m} = E_m - E_n = E_1 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (2.18)$$

η οποία ταυτίζονταν με ήδη γνωστές εμπειρικές εκφράσεις για το φάσμα ακτινοβολίας του υδρογόνου.

Έτσι, με τη θεωρία του Μπορ το μοντέλο του Ράδερφορντ δικαιώθηκε, οι παρατηρήσεις της φασματοσκοπίας εξηγήθηκαν και κυρίως οι νέες ιδέες περί της κβαντικής φύσης του μικρόκοσμου έγιναν ευρέως αποδεκτές.

Αλλά η νέα θεωρία είχε το τίμημά της. «Μου φαίνεται ότι υπάρχει μία σοβαρή δυσκολία στην υπόθεσή σου», έγραψε ο Ράδερφορντ στον Μπορ [18] «...πώς αποφασίζει ένα ηλεκτρόνιο με ποια συχνότητα να δονείται όταν μεταβαίνει από μία τροχιά σε μία άλλη. Μου φαίνεται ότι θα έπρεπε να υποθέσεις ότι το ηλεκτρόνιο ξέρει από πριν που πρόκειται να σταματήσει.» Ο Ράδερφορντ διέκρινε

το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό της νεαρής κβαντικής θεωρίας, ένα χαρακτηριστικό που θα παρέμενε και στην τελική της διατύπωση. Οι κβαντικοί νόμοι φαίνονταν να παραβιάζουν όλες τις έννοιες αιτιότητας και ντετερμινισμού της κλασικής φυσικής.

Ο Μπορ θεωρούσε ότι η θεωρία του δεν ήταν τίποτε περισσότερο από μία αρχική προσέγγιση. Άλλωστε το μοντέλο του δούλευε μόνο για το άτομο του υδρογόνου. Η βασική του υπόθεση δεν προσέφερε μία γενική φυσική αρχή που θα μπορούσε να εφαρμοστεί σε άλλα φυσικά συστήματα, όπως πολυπλοκότερα άτομα. Γι' αυτό θεωρούσε το μοντέλο του μόνο ως ένα μικρό βήμα προς τη διαμόρφωση μιας νέας ριζοσπαστικής φυσικής θεωρίας. Δε θεωρούσε τη μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από μία τροχιά σε μια άλλη ως μία συνεχή διαδικασία, όμοια με αυτή της κλασικής φυσικής. Την αντιμετώπιζε σαν ένα άλμα, μία απρόβλεπτη και μη αιτιακή διαδικασία που δεν μπορεί να περιγραφεί από τη σύνηθες εικόνα της κίνησης στο χώρο και στο χρόνο.

Σε αντίθεση με τους προκατόχους του ο Μπορ δεν αναζητούσε συσχέτιση μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής, αλλά έψαχνε για μία διατύπωση των κβαντικών εννοιών που θα ήταν τόσο συνεπής από τη μία πλευρά όσο και αυτή των κλασικών εννοιών από την άλλη. Οι δύο φυσικές περιγραφές θα σχετίζονταν με βάση έναν κανόνα που πρότεινε, την *αρχή της αντιστοιχίας*: στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών n οι προβλέψεις της κβαντικής θεωρίας θα πρέπει να συμπίπτουν με αυτές της κλασικής θεωρίας.

Στα συστήματα που έχουμε συναντήσει ως τώρα (αρμονικό ταλαντωτή, άτομο υδρογόνου) υπάρχει μόνο ένας κβαντικός αριθμός n από τον οποίον εξαρτώνται οι ενέργειες. Έστω $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$ η διαφορά μεταξύ δύο γειτονικών ενεργειακών σταθμών. Σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας θα πρέπει να ισχύει

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \rightarrow 0, \text{ όταν } n \rightarrow \infty, \quad (2.19)$$

έτσι ώστε στο όριο μεγάλων κβαντικών αριθμών οι ενέργειες να είναι σχεδόν συνεχείς. Εύκολα επιβεβαιώνεται ότι η σχέση (2.19) ισχύει και για τον αρμονικό ταλαντωτή ($\Delta E_n/E_n \sim n^{-1}$) και για το άτομο του υδρογόνου ($\Delta E_n/E_n \sim n^{-1}$).

2.4 Σωματίο η κύμα;

Η επόμενη μεγάλη φυσική αρχή, πάνω στην οποία χτίστηκε η κβαντική θεωρία, ήταν η επέκταση του δυϊσμού μεταξύ κυματικής και σωματιδιακής φύσης του φωτός σε όλα τα σωματίδια. Προτάθηκε το 1924, στη διδακτορική εργασία ενός νεαρού φοιτητή της Σορβόνης, του Λουί ντε Μπρέιγ (Louis de Broglie).

Ο ίδιος ο ντε Μπρέιγ περιγράφει το σκεπτικό του ως εξής [20].

”Όταν άρχισα να σκέφτομαι αυτές τις δυσκολίες δύο πράγματα μου έκαναν εντύπωση. Πρώτον η κβαντική θεωρία του φωτός δεν μπορεί να είναι ικανοποιητική καθώς ορίζει τη ενέργεια ενός σωματιδίου φωτός από τη σχέση $E = \hbar\omega$, η οποία περιέχει μία συχνότητα ω . Ωστόσο, μία πλήρως σωματιδιακή θεωρία δεν περιέχει κάποιο στοιχείο που να επιτρέπει τον ορισμό συχνότητας. Αυτός ο λόγος και μόνο καθιστά απαραίτητη την ταυτόχρονη εισαγωγή της έννοιας του σωματιδίου και της έννοιας της περιοδικότητας στο φως.

Από την άλλη ο προσδιορισμός των ευσταθών τροχιών των ηλεκτρονίων στο άτομο [κατά το μοντέλο του Μπορ] εμπεριέχει ακέραιους αριθμούς, και ως τώρα τα μόνα φαινόμενα στη φυσική που εμπεριέχουν ακέραιους είναι αυτά της συμβολής και των ιδιο-δονήσεων. Αυτό μου έδωσε την ιδέα ότι τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να αναπαρασταθούν ως απλά σωματίδια, αλλά πρέπει να αποδώσουμε μία περιοδικότητα και σ' αυτά.

Έτσι κατέληξα στην παρακάτω σύλληψη ως οδηγό για τις μελέτες μου: τόσο για την ύλη όσο και για τις ακτινοβολίες (και ειδικότερα για το φως) πρέπει να εισαγάγουμε την έννοια του σωματιδίου και την έννοια του κύματος ταυτόχρονα. Δηλαδή η ύπαρξη σωματιδίων που συνοδεύονται από κύματα πρέπει να υποτεθεί και

στις δύο περιπτώσεις. Ωστόσο, καθώς τα σωματίδια και τα κύματα δεν μπορούν να είναι ανεξάρτητα, επειδή [...] αποτελούν δύο συμπληρωματικές δυνάμεις της πραγματικότητας, πρέπει να είναι εφικτή η εύρεση μίας παραλληλίας μεταξύ της κίνησης ενός σωματιδίου και της διάδοσης του αντίστοιχου κύματος.”

Ακολουθώντας το σκεπτικό του ντε Μπρέιγ, εξετάζουμε τη σχέση μεταξύ της ταχύτητας ενός σωματιδίου και της ταχύτητας διάδοσης ενός κύματος. Η ταχύτητα διάδοσης ενός κύματος που χαρακτηρίζεται από κυματάρημο k και γωνιακή συχνότητα ω δίνεται από τη λεγόμενη *ταχύτητα ομάδας* (βλ. ένθετο 2.2)

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (2.20)$$

Από την άλλη, η ταχύτητα ενός ελεύθερου σωματιδίου μάζας m δίνεται από τη σχέση

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\partial E}{\partial p}, \quad (2.21)$$

για $E = \frac{p^2}{2m}$. Για να έχει νόημα ο δυϊσμός σωματιδίου-κύματος πρέπει το κύμα και το σωματίο να συμβαδίζουν, δηλαδή $v_g = v$. Δεδομένης της σχέσης του Πλανκ $E = \hbar\omega$, η σύγκριση των εξισώσεων (2.20) και (2.21) οδηγεί στο συμπέρασμα ότι

$$p = \hbar k. \quad (2.22)$$

Η Εξ. (2.22) σημαίνει ότι το μήκος κύματος $\lambda = 2\pi/|k|$ που αντιστοιχεί σε ένα σωματίο είναι

$$\lambda = 2\pi \frac{\hbar}{|p|}. \quad (2.23)$$

Η παραπάνω τιμή του λ καλείται *μήκος κύματος ντε Μπρέιγ* του σωματιδίου.

Όπως στην κλασική κυματική θεωρία έτσι και σ' αυτήν του ντε Μπρέιγ περιμένει κανείς ότι χαρακτηριστικά κυματικά φαινόμενα όπως η περίθλαση είναι πιο έντονα όταν το κύμα αναγκάζεται να περάσει από σχισμές ή διαφράγματα τυπικού ανοίγματος d της τάξης μεγέθους του μήκους κύματος (περίθλαση). Η θεωρία του ντε Μπρέιγ έκανε λοιπόν μία σαφή πρόβλεψη περί "κυμάτων ύλης", η οποία επιβεβαιώθηκε ξεκάθαρα στο πείραμα, αρχικά με στοιχειώδη σωματίια (ηλεκτρόνιο) και αργότερα με σύνθετα (βλ. ένθετο 2.3).

Ένθετο 2.2. Ταχύτητα ομάδας.

Θα δείξουμε ότι η διάδοση ενός κύματος στο χώρο γίνεται με την ταχύτητα ομάδας v_g .

Έστω ένα κύμα σε μία διάσταση το οποίο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $A(x, t)$. Η κυματοσυνάρτηση αναλύεται σε επίπεδα κύματα μέσω ενός μετασχηματισμού Φουριέ

$$A(x, t) = \int dk \tilde{A}(k) e^{ikx - i\omega(k)t}, \quad (2.24)$$

όπου η γωνιακή συχνότητα ω είναι συνάρτηση του κυματάρημου k .

Θεωρούμε σχεδόν μονοχρωματικό κύμα, δηλαδή ότι η συνάρτηση πλάτους $\tilde{A}(k)$ είναι μη-μηδενική μόνο για τιμές του k πολύ κοντά σε μια τιμή k_0 . Αναπτύσσοντας κατά Τέιλορ, γράφουμε τη γωνιακή συχνότητα

$$\omega_k = \omega_0 + v_g(k - k_0), \quad (2.25)$$

όπου $\omega_0 = \omega(k_0)$ και $v_g = (\partial\omega/\partial k)_{k=k_0}$ είναι η ταχύτητα ομάδας. Η σχέση (2.24) γίνεται

$$A(x, t) = e^{i(v_g k_0 - \omega_0)t} \int dk \tilde{A}(k) e^{ikx - i v_g t}, \quad (2.26)$$

που σημαίνει ότι $|A(x, t)| = |A(x - v_g t, 0)|$.

Καθώς η πυκνότητα ενέργειας ενός κύματος είναι ανάλογη του $|A(x, t)|^2$, καταλήγουμε ότι η ενέργεια του κύματος διαδίδεται με την ταχύτητα ομάδος v_g .

Ένθετο 2.3. Κύματα ύλης.

Η κυματική συμπεριφορά των υλικών σωματιδίων αρχικά επιβεβαιώθηκε με την παρατήρηση φαινομένων περίθλασης σε "σχισμές", διάστασης d ίδιας τάξης μεγέθους με το μήκος κύματος ντε Μπρέιγ των σωματιδίων. Η πρώτη πειραματική επιβεβαίωση έγινε από τους Ντέιβισον (C. Davisson) και Τζέρμερ (L. Germer) το 1927 (κατά σύμπτωση!) οι οποίοι παρατήρησαν περίθλαση των ηλεκτρονίων που είχαν κατευθυνθεί σε ένα στρώμα νικελίου [21]. Σ' αυτήν την περίπτωση το ρόλο των "σχισμών" τον έπαιζαν τα κρυσταλλικά στρώματα του μετάλλου και η τυπική διάσταση d ταυτίζονταν με την απόσταση μεταξύ δύο κρυσταλλικών επιπέδων του στερεού ($d \simeq 10^{-10} m$.)

Με τον ίδιο τρόπο, το 1929 οι Έστερμαν (I. Estermann) και Στερν (O. Stern) παρατήρησαν περίθλαση ατόμων υδρογόνου και ηλίου σε κρυστάλλους NaCl, επιβεβαιώνοντας τη σχέση του ντε Μπρέιγ και σε σύνθετα σωματίδια πέρα από τα στοιχειώδη [22]. Τη δεκαετία του 1940, οι Ουόλαν (E. O. Wollan) και Σουλ (C. Shull) πέτυχαν περίθλαση νετρονίων σε κρυσταλλικά υλικά.

Επειδή το μήκος κύματος ντε Μπρέιγ είναι αντιστρόφως ανάλογο της μάζας, η τιμή του γίνεται εξαιρετικά μικρή για βαρύτερα σωματίδια (μικρότερο από το ατομικό μέγεθος) κάτι που δυσχεραίνει τα πειράματα περίθλασης. Τη δεκαετία του 1960 ξεκίνησαν τα πρώτα πειράματα συμβολής υλικών κυμάτων, κατά αναλογία με το πείραμα των δύο σχισμών για το φως. Σ' αυτά τα πειράματα τα σωματίδια μιας δέσμης αναγκάζονται να ακολουθήσουν διαφορετικές διαδρομές προτού ανιχνευθούν και η διαφορά φάσης του κύματος ως προς τις δύο διαδρομές οδηγεί στην εμφάνιση μίας περιοδικότητας στην ανίχνευση (συμβολή).

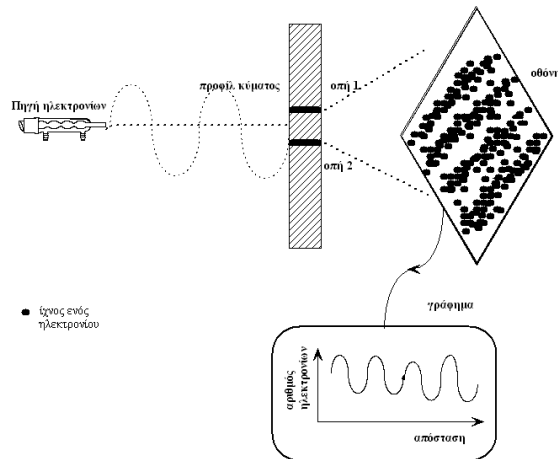
Τέτοια πειράματα έχουν πραγματοποιηθεί με ηλεκτρόνια [23, 24], με νετρόνια [25], με άτομα [26] και με μεγάλα μόρια [27]. Χαρακτηριστικό παράδειγμα ενός μεγάλου σωματιδίου στο οποίο έχει επιβεβαιωθεί κυματική συμπεριφορά είναι το μακρομόριο της φθαλοκυανίνης ($C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$) που αποτελείται από 114 άτομα και έχει μοριακό βάρος 1.298 [28]. Το εντυπωσιακό είναι ότι το μήκος κύματος ντε Μπρέιγ των μορίων σ' αυτό το πείραμα ($\lambda \simeq 5 pm$) είναι πολύ μικρότερο από το μέγεθός τους (περίπου $1 nm$)!

Ένα μεγάλο ανοιχτό ερώτημα παραμένει το κατά πόσο υπάρχει άνω όριο στις μάζες των σωματιδίων τα οποία μπορούν να εμφανίσουν κυματικές ιδιότητες. Η σύγχρονη κβαντική θεωρία δεν προβλέπει κάποιο όριο, οπότε η εύρεση ενός θεμελιωδώς αξεπέραστου ορίου θα αποτελούσε έλεγχο της καθολικότητας της κβαντικής θεωρίας. Κάποιοι εικάζουν ότι ένα άνω όριο της τάξης μεγέθους της μάζας Πλανκ $m_P = \sqrt{\hbar c/G} \simeq 2 \times 10^{-8} kg$ μπορεί να οφείλεται στη βαρύτητα (G η σταθερά της βαρύτητας του Νεύτωνα). Ακόμα όμως και αν υπάρχει αυτό το όριο, είναι συμβατό με την παρατήρηση κυματικών φαινομένων σε σύνθετα σώματα μεγέθους κυττάρου!

Το κατεξοχήν πείραμα επίδειξης της κυματικής συμπεριφοράς της ύλης είναι το πείραμα των δύο οπών (βλ. Σχ. 2.4), το οποίο είναι αντίστοιχο του αντίστοιχου πειράματος επίδειξης της κυματικής φύσης του φωτός το 19ο αιώνα (βλ. άσκηση 6). Στη συνέχεια περιγράφουμε το πείραμα των δύο οπών σχηματικά για ηλεκτρόνια.

Έστω ότι μία πηγή εκπέμπει ηλεκτρόνια, τα οποία κατευθύνονται προς ένα πέτασμα με δύο οπές. Πίσω από το πέτασμα τοποθετούμε μία οθόνη, στην οποία κάθε ηλεκτρόνιο αφήνει ένα σημάδι (μία τελεία). Υποθέτουμε επιπλέον ότι μπορούμε να ελέγχουμε με τέτοια ακρίβεια την εκπομπή των ηλεκτρονίων, ώστε να στέλνουμε ένα τη φορά. Στέλνουμε λοιπόν το πρώτο ηλεκτρόνιο. Αν δεν απορροφηθεί από το πέτασμα, θα περάσει μέσα από μία από τις οπές και θα αφήσει ένα σημάδι στην οθόνη. Κατόπιν στέλνουμε ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο, βλέπουμε ένα δεύτερο σημάδι στην οθόνη. Τα δύο ηλεκτρόνια μπορεί να έχουν περάσει από τη ίδια οπή, μπορεί και όχι. Δεν μπορούμε να πούμε σ' αυτό το πείραμα.

Εξακολουθούμε να στέλνουμε ηλεκτρόνια το ένα μετά το άλλο. Όσο πιο πολλά στέλνουμε, τόσο περισσότερα σημεία εμφανίζονται στην οθόνη. Αρχικά η κατανομή των σημείων φαίνεται τυχαία.



Σχήμα 2.4: Το πείραμα των δύο οπών. Μία πηγή εκπέμπει ηλεκτρόνια προς ένα πέτασμα με δύο οπές. Κάθε ηλεκτρόνιο διασχίζει μία από τις οπές και αφήνει ένα ίχθος σε μια οθόνη που βρίσκεται πίσω από το πέτασμα. Καθώς αυξάνει ο αριθμός των ηλεκτρονίων παρατηρούμε μια περιοδική εναλλαγή φωτεινών και σκοτεινών περιοχών. Το γράφημα του αριθμού των ηλεκτρονίων ως προς τη θέση τους στην οθόνη αντιστοιχεί σε κυματική συμβολή.

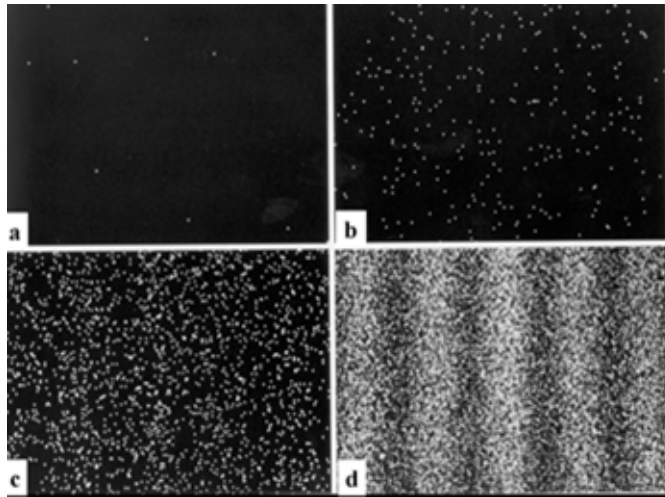
Αλλά μετά τις 10.000 επαναλήψεις μία εικόνα αρχίζει να σχηματίζεται, η οποία ξεκαθαρίζει μετά τις 50.000 (βλ. Σχ. 2.5). Τα σημεία στην οθόνη σχηματίζουν μία εικόνα συμβολής, ακριβώς αυτό που θα παρατηρούσαμε αν ένα κύμα είχε οδηγηθεί προς τις δύο οπές. Οι περιοχές στις οποίες τα σημάδια συγκεντρώνονται και οι περιοχές στις οποίες δεν έχουν προσπέσει ηλεκτρόνια εναλλάσσονται με περιοδικό τρόπο. Βέβαια αν επαναλάβουμε το πείραμα με μόνο μία οπή ανοικτή δεν παρατηρούμε συμβολή, αλλά μόνο μία συγκέντρωση ηλεκτρονίων ακριβώς πίσω από την οπή.

Τι συμπεραίνουμε από αυτά τα φαινόμενα; Τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν σωματίδια παρότι η κίνησή τους είναι απρόβλεπτη (δε γνωρίζουμε από ποια οπή περνούν). Αλλά φαίνεται ότι συμπεριφέρονται συλλογικά σαν κύμα, γιατί εμφανίζουν μία εικόνα συμβολής. Αυτό είναι πραγματικά περίεργο, γιατί νομίζουμε ότι ξέρουμε πώς συμπεριφέρονται οι δέσμες σωματιδίων: συνήθως «ανοίγουν» κατά την κίνησή τους, οπότε αυτό που θα περιμέναμε είναι δύο συγκεντρώσεις από κουκκίδες, μία πίσω από κάθε οπή. Αντίθετα παρατηρούμε αυτήν την κυματική συμπεριφορά, που είναι εντελώς ανεξήγητη στα πλαίσια της κλασικής φυσικής.

Πρέπει να εντοπίσουμε ένα λεπτό σημείο που δεν ήταν εμφανές την εποχή του ντε Μπρέιγ. Τις πρώτες μέρες της κβαντικής θεωρίας δεν ήταν πειραματικά εφικτό να στέλνει κανείς ηλεκτρόνια το ένα μετά το άλλο με διακρινόμενο τρόπο, αλλά έστελνε κανείς ένα μεγάλο αριθμό ηλεκτρονίων ταυτόχρονα¹. Οπότε δεν μπορούσε κανείς να διακρίνει ξεχωριστά κάθε μία της κουκκίδες να σχηματίζουν την εικόνα συμβολής. Γι' αυτό το λόγο ήταν φυσικό να προβεί ο ντε Μπρέιγ σε πιο ισχυρές διατυπώσεις της σχέσεως σωματιδίων και κυμάτων από αυτές που δικαιολογούν τα αποτελέσματα του πειράματος. Έλεγε για παράδειγμα ότι *κάθε* ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν κύμα ή ότι κάθε σωματίο συνοδεύεται από ένα κύμα το οποίο το καθοδηγεί στην κίνησή του.

Ωστόσο από τα σύγχρονα πειράματα δύο οπών παρατηρούμε ότι τα κυματικά χαρακτηριστικά εμφανίζονται μόνο όταν συλλέξουμε μετρήσεις από πολλά σωματίδια (δηλαδή σε ένα στατιστικό σύνολο από μετρήσεις), ενώ ένα μεμονωμένο σωματίο θα συμπεριφέρεται πάντα ως σωματίο, δηλαδή ανιχνεύεται σημειακά. Τα σωματίδια έχουν τη δυνατότητα να συμπεριφέρονται σαν κύματα σε μεγάλους αριθμούς, αλλά δεν προκύπτει λογικά ότι το καθένα ξεχωριστά επιδεικνύει αυτή τη

¹Στο πρώτο πείραμα δύο οπών με διακρινόμενα ηλεκτρόνια [24], η πηγή εξέπεμπε κατά μέσο όρο 1 ηλεκτρόνιο κάθε $10^{-3}s$ με ταχύτητα $1,5 \times 10^8 m/s$. Οπότε η μέση απόσταση μεταξύ διαδοχικών ηλεκτρονίων ήταν $150km$ ενώ ο στόχος απείχε από την πηγή μόλις $1,5m$. Ήταν πρακτικά αδύνατο για δυο διαδοχικά ηλεκτρόνια να συμπέσουν, και άρα οι ανιχνεύσεις τους μπορούν να θεωρηθούν ως στατιστικά ανεξάρτητα γεγονότα.



Σχήμα 2.5: Το σταδιακό χτίσιμο της εικόνας συμβολής στο πείραμα των δύο οπών από το πείραμα του Τονομούρα (Tonopura) [24]. Αυτές οι φωτογραφίες δείχνουν τις καταγραφές των ηλεκτρονίων στην οθόνη κατά τη διάρκεια του πειράματος των δύο οπών: α) 8 ηλεκτρόνια, β) 270 ηλεκτρόνια, γ) 2000 ηλεκτρόνια, δ) 60000 ηλεκτρόνια .

συμπεριφορά. Για την ακρίβεια δεν την επιδεικνύει ποτέ.

Ερωτήσεις

1. Η συμβολή στο πείραμα των δύο οπών για το φως φαινόταν να αποκλείει οριστικά οποιαδήποτε σωματιδιακή περιγραφή του φωτός, ήδη από το 19ο αιώνα. Γιατί δεν αποκλείει την ύπαρξη φωτονίων;
2. Το πείραμα των δύο οπών μπορεί να γίνει και με μεμονωμένα φωτόνια σε πλήρη αναλογία με το πείραμα που περιγράψαμε για ηλεκτρόνια. Για αυτό το πείραμα λέγεται συχνά ότι δείχνει "συμβολή ενός φωτονίου με τον εαυτό του". Κυριολεκτικά, αυτή η φράση δεν έχει νόημα. Τί πραγματικά σημαίνει;
3. Γιατί η φράση "στο πείραμα των δύο οπών, το ηλεκτρόνιο περνά και από τις δύο σχισμές ταυτόχρονα" είναι λάθος;
4. Κάποιος ισχυρίζεται ότι το μήκος κύματος ντε Μπρέιγ αντιστοιχεί στο τυπικό μέγεθος των μικροσκοπικών σωματιδίων. Γιατί κάνει λάθος;
5. Οι κυματικές ιδιότητες της ύλης εμφανίζονται μόνο στα στοιχειώδη υποατομικά σωματίδια, αλλά όχι στα σύνθετα. Σωστό ή λάθος;

Ασκήσεις

1. Θεωρείστε στάσιμα ηλεκτρομαγνητικά κύματα στο εσωτερικό ενός κύβου πλευράς L και δείξτε ότι υπάρχουν δύο διαφορετικοί τρόποι ταλάντωσης (οι δύο πολώσεις) σε έναν όγκο $(\pi/L)^3$ στο χώρο των κυματαριθμών. Από αυτό δείξτε ότι η πυκνότητα καταστάσεων δίνεται από τη σχέση

$$g(V, \omega) = \frac{8V\omega^2}{\pi^2 c^3}, \quad (2.27)$$

όπου $V = L^3$.

2. Δείξτε ότι το μέγιστο της κατανομής ενεργειών (2.8) επιτυγχάνεται για $\omega/T = b$ και προσδιορίστε την τιμή της σταθεράς b .

3. Αποδείξτε την Εξ. (2.11) για τη σκέδαση φωτονίου σε ηλεκτρόνιο απαιτώντας τη διατήρηση της ενέργειας και της ορμής. Θεωρείστε ότι το ηλεκτρόνιο είναι αρχικά ακίνητο και ότι ικανοποιεί τη σχετικιστική σχέση ενέργειας-ορμής $E = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2}$.
4. Ένα φορτίο q κινούμενο με επιτάχυνση a χάνει ενέργεια E με ρυθμό που δίνεται από τη σχέση του Λάρμορ

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2q^2 a^2}{3c^3}. \quad (2.28)$$

Θεωρείστε ότι το ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου κινείται σε κυκλική τροχιά ακτίνας r . Δείξτε ότι για κυκλική τροχιά η ενέργεια είναι $E = -e^2/(8\pi r)$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (2.28) δείξτε ότι η ακτίνα της κυκλικής τροχιάς ελαττώνεται σύμφωνα με τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{e^4}{3\pi c^3 m_e^2 r^2}. \quad (2.29)$$

Λύστε τη διαφορική εξίσωση για $r(0) = r_0$ και δείξτε ότι ο χρόνος τ για να καταρρεύσει το ηλεκτρόνιο στον πυρήνα ($r = 0$) είναι ίσος με

$$\tau = \frac{\pi m_e^2 c^3 r_0^3}{e^4}.$$

Υπολογίστε την τιμή του τ θεωρώντας ότι $r_0 \simeq 10^{-10} m$, της τάξης μεγέθους της πραγματικής ακτίνας του ατόμου του υδρογόνου.

5. Επιβεβαιώστε τη σχέση (2.21) για σχετικιστικό σωματίο μάζας m , για το οποίο η ενέργεια E και η ορμή \mathbf{p} είναι

$$E = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2} \quad \text{και} \quad \mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}.$$

6. Θεωρείστε το πείραμα των δύο οπών για ένα κλασικό κύμα (Σχ. 2.6). Υποθέστε κάθε οπή σχεδόν σημειακή και ότι αποτελεί ξεχωριστή πηγή κυμάτων $A_1(t, x)$ και $A_2(t, x)$. Επίσης η απόσταση d των δύο οπών είναι πολύ μικρότερη από την απόσταση L πετάσματος-οπών.

(α') Δείξτε ότι η διαφορά φάσης των δύο κυμάτων που αντιστοιχούν στις δυο οπές είναι ίση με $kd \sin \theta$, όπου k ο κυματάριθμος.

(β') Θεωρώντας ότι από κάθε οπή εκπέμπονται επίπεδα κύματα ίδιου πλάτους A , δείξτε ότι η συνολική ένταση του κύματος $I(y) = |A_1 + A_2|^2$ στο σημείο ανίχνευσης είναι ίση με

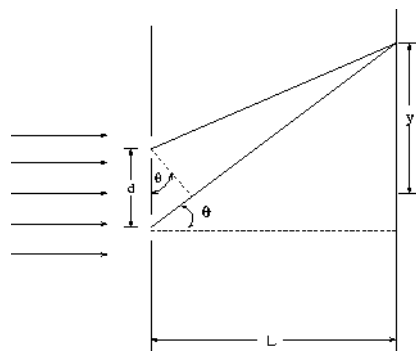
$$I(y) = 4|A|^2 \cos^2 \left(\frac{kd \sin \theta}{2} \right), \quad (2.30)$$

όπου το θ είναι συνάρτηση του y .

(γ') Εντοπίστε τα μέγιστα και ελάχιστα της έντασης στο πέτασμα και υπολογίστε την απόσταση δύο διαδοχικών μεγίστων και δύο διαδοχικών ελαχίστων όταν το σημείο παρατήρησης είναι κοντά στο ύψος των σχισμών ώστε $\sin \theta \simeq y/L$.

Βιβλιογραφία

- Για την ανάπτυξη των ιδεών της κβαντικής φυσικής, βλ. το βιβλίο του Kragh [29] και για περισσότερες τεχνικές λεπτομέρειες το κλασικό έργο του Jammer [30]. Οι πρώτες εργασίες στην κβαντική θεωρία έχουν ανατυπωθεί από τον van der Waerden [31]. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε σχέση με τα θέματα αυτού του κεφαλαίου έχουν οι διαλέξεις Νόμπελ των Μπορ [32] και ντε Μπρέιγ [20].
- Για μη-τεχνικές περιγραφές των σύγχρονων πειραμάτων των δύο οπών, βλ. δυο άρθρα στο Physics World [33, 34] καθώς και τα βίντεο από το πείραμα της Hitachi με ηλεκτρόνια (www.youtube.com/watch?v=PanqoHa_B6c) και το πείραμα της Βιέννης με μόρια (www.youtube.com/watch?v=vCiOMQIRU7I).



Σχήμα 2.6: Κλασικό πείραμα δύο οπών.

Κεφάλαιο 3

Η γέννηση της κβαντικής θεωρίας Β'

“Καμία γνωστή θεωρία δεν μπορεί να παραμορφωθεί κατά τέτοιο τρόπο ώστε να αποδώσει καν μία προσεγγιστική εξήγηση του δυϊσμού σωματιδίου-κύματος. Πρέπει να υπάρχει κάτι που αγνοούμε και του οποίου η ανακάλυψη θα φέρει επανάσταση στις απόψεις μας για τις σχέσεις μεταξύ των κυμάτων, του αιθέρα και της ύλης. Για την ώρα πρέπει να δουλεύουμε και με τις δύο θεωρίες. Δευτέρες, Τετάρτες και Παρασκευές χρησιμοποιούμε την κυματική θεωρία. Τρίτες, Πέμπτες και Σάββατα σκεφτόμαστε με όρους ιπτάμενων κβάντων ενέργειας ή σωματιδίων.”

Ο. Λ. Μπραγκ (1922) [35]

3.1 Οι πίνακες του Χάιζενμπεργκ

Οι ιδέες της κβαντικής θεωρίας που αναφέραμε νωρίτερα ήταν μεν θεμελιακές αλλά πολύ αποσπασματικές. Όπως λέει και ο Μπραγκ (William Lawrence Bragg) στο απόσπασμα που παρατίθεται παραπάνω, απουσίαζε η σύλληψη που θα τις έθετε σε μια λογική σειρά εντάσσοντας τις σε ένα συγκροτημένο πλαίσιο. Αυτή η σύλληψη ήταν το επίτευγμα του Χάιζενμπεργκ (Werner Heisenberg).

Ο Χάιζενμπεργκ ξεκίνησε από την παρατήρηση [36] ότι οι γωνιακές συχνότητες των εκπεμπόμενων φωτονίων στο άτομο του Μπορ είναι της μορφής

$$\omega_{nm} = \frac{E(n) - E(m)}{\hbar} \quad (3.1)$$

όπου n και m ακέραιοι και $E(n)$ μία συνάρτηση, η εκπεφρασμένη μορφή της οποίας δε χρειάζεται για το επιχείρημα. Ας θεωρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο το οποίο κινείται σε μία τροχιά του Μπορ με κβαντικό αριθμό n . Έστω ότι η διαδρομή αυτού του ηλεκτρονίου είναι $\mathbf{x}(n, t)$. Δεδομένου ότι η τροχιά του ηλεκτρονίου πρέπει να είναι περιοδική, η συνάρτηση $\mathbf{x}(n, t)$ αναλύεται κατά Fourier ως

$$\mathbf{x}(n, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{x}_m(n, t) e^{im\omega(n)t}, \quad (3.2)$$

όπου η θεμελιώδης γωνιακή συχνότητα $\omega(n)$ της τροχιάς n ορίζεται από την περίοδο $T(n)$ της τροχιάς με κβαντικό αριθμό n : $\omega(n) = 2\pi/T(n)$.

Η βασική παρατήρηση του Χάιζενμπεργκ είναι ότι αν οι διαδρομές $\mathbf{x}(n, t)$ είναι θεμελιώδεις ποσότητες στη θεωρία, η εκπεμπόμενη ακτινοβολία θα αντιστοιχεί σε συχνότητες της μορφής $\omega_{n,m} = m\omega(n)$ για ακέραιους m και n , όπως εμφανίζονται στην Εξ. (3.2). Αυτό ισχύει στην κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Μάξγουελ, αλλά αναμένεται να ισχύει και σε γενικότερες θεωρίες που

περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων με πεδία. Έρχεται όμως σε αντίθεση με τις παρατηρούμενες συχνότητες, όπως δίνονται από την Εξ. (3.1). Άρα οι διαδρομές $x(n, t)$ των σωματιδίων δεν μπορεί να είναι θεμελιώδεις ποσότητες στην κβαντική θεωρία.

Ο Χάιζενμπεργκ επέμεινε ότι είναι απαραίτητο να περιγραφεί η κβαντική θεωρία στη βάση ποσοτήτων που αντιστοιχούν στα δεδομένα της παρατήρησης και όχι σε φανταστικά αντικείμενα όπως οι υποτιθέμενες διαδρομές των ηλεκτρονίων. Γι' αυτό το λόγο, οι βασικές ποσότητες της θεωρίας πρέπει να είναι συμβατές με τη θεμελιώδη σχέση (3.1). Ακολουθώντας αυτό το σκεπτικό κατέληξε στα ακόλουθα συμπεράσματα.

Καταρχάς, οι θεμελιώδεις ποσότητες της κβαντικής περιγραφής δεν είναι διαδρομές σωματιδίων όπως στην κλασική φυσική, αλλά ποσότητες A_{nm} που χαρακτηρίζονται από δύο ακέραιους δείκτες m και n . Αυτές οι ποσότητες εξελίσσονται στο χρόνο με βάση τον κανόνα

$$A_{nm} \rightarrow A_{nm} e^{i\omega_{nm}t}, \quad (3.3)$$

όπου το ω_{nm} δίνεται από τη σχέση (3.1).

Οι κβαντικές ποσότητες A_{nm} έχουν ως αντίστοιχο κλασικά φυσική μεγέθη, τα οποία όπως είδαμε στο κεφ. 1 αντιστοιχούν σε συναρτήσεις στον καταστατικό χώρο. Αν υπάρχει αντιστοιχία μεταξύ μίας κλασικής ποσότητας a και μίας κβαντικής A_{nm} , τότε η κλασική ποσότητα a^2 αντιστοιχεί στην κβαντική ποσότητα

$$B_{nm} = \sum_l A_{nl} A_{lm}, \quad (3.4)$$

η οποία εξελίσσεται χρονικά επίσης με τον κανόνα (3.3). Η σχέση (3.4) είναι ο γνωστός *πολλαπλασιασμός πινάκων*. Ο Χάιζενμπεργκ δεν το γνώριζε αρχικά¹. Με αυτό το δεδομένο, οι ποσότητες A_{nm} δεν είναι κάτι άλλο από πίνακες—ενδεχομένως με άπειρη διάσταση. Γι' αυτό το λόγο και η θεωρία του Χάιζενμπεργκ αποκαλέστηκε "μηχανική πινάκων".

Αν X_{nm} η κβαντική ποσότητα που αντιστοιχεί σε μία συντεταγμένη θέσης x ενός σωματιδίου, και P_{nm} η κβαντική ποσότητα που αντιστοιχεί στην αντίστοιχη συζυγή ορμή p , ικανοποιείται η σχέση

$$\sum_l (X_{nl} P_{lm} - P_{nl} X_{lm}) = i\hbar \delta_{nm}, \quad (3.5)$$

ή γράφοντας τα X και P ως πίνακες

$$XP - PX = i\hbar I. \quad (3.6)$$

Δηλαδή οι φυσικές ποσότητες περιγράφονται από μαθηματικά αντικείμενα που *δεν μετατίθενται* ως προς τον *πολλαπλασιασμό*.

Ο Χάιζενμπεργκ κατέληξε στις παραπάνω αρχές με ένα μίγμα διαίσθησης και πολύπλοκης επιχειρηματολογίας, το οποίο δεν αναπαράγεται εύκολα. Θα δούμε στα επόμενα κεφάλαια πώς οι τρεις παραπάνω αρχές ενσωματώνονται μέσα στην ολοκληρωμένη κβαντική μηχανική, αποτελώντας βασικούς πυλώνες της.

Το σημαντικότερο χαρακτηριστικό των ιδεών του Χάιζενμπεργκ ήταν ότι απαιτούσε την πλήρη εγκατάλειψη του οικοδομήματος της κλασικής φυσικής. Τα βασικά φυσικά μεγέθη δεν θα περιγράφονταν από αριθμούς ή συναρτήσεις, αλλά από κάποια μυστηριώδη (για την εποχή) μαθηματικά αντικείμενα, χωρίς καμία αναλογία με την άμεση εμπειρία ή τις γεωμετρικές μας αντιλήψεις για την κίνηση σωματιδίων. Εμφανίστηκε ξαφνικά ένα επίπεδο της φυσικής πραγματικότητας απροσπέλαστο από την κλασική φυσική.

¹Χρειάστηκε η ανάπτυξη της κβαντικής μηχανικής ώστε η θεωρία πινάκων να αποτελέσει βασικό μέρος της εκπαίδευσης ενός φυσικού

Προφανώς, οι ιδέες του Χάιζενμπεργκ συνάντησαν έντονη δυσπιστία. Ανάμεσα στους λίγους φυσικούς που ενθουσιάστηκαν ήταν ο Μπορ, γιατί οι ιδέες του Χάιζενμπεργκ ταίριαζαν με το δικό του τρόπο αντίληψης. Επίσης, ο Μαξ Μπορν (Max Born) που μαζί με το μαθηματικό Πασκουάλε Γιόρνταν (Pascuale Jordan) έθεσαν τις ιδέες του Χάιζενμπεργκ σε στέρα μαθηματικά θεμέλια και ο Πολ Ντιράκ (Paul Dirac) ο οποίος θα έπαιζε επίσης σημαντικό ρόλο στη διαμόρφωση της νέας θεωρίας.

3.2 Η κυματομηχανική του Σρέντινγκερ

3.2.1 Η εξίσωση του Σρέντινγκερ

Λίγους μήνες μετά την παρουσίαση της μηχανικής πινάκων από τον Χάιζενμπεργκ, έγινε μια επίσης σημαντική ανακάλυψη, η οποία προήρθε από ένα εντελώς διαφορετικό σκεπτικό [37]. Υπεύθυνος ήταν ο Έρβιν Σρέντινγκερ (Erwin Schrödinger), ο οποίος αναζήτησε μια μαθηματική έκφραση των ιδεών του ντε Μπρέιγ.

Συγκεκριμένα, με βάση την ιδέα του ντε Μπρέιγ ένα ελεύθερο σωματίο σε μία διάσταση αντιστοιχεί σε ένα επίπεδο κύμα με κυματοσυνάρτηση $\psi(t, x) = e^{ikx - i\omega t}$. Με δεδομένες τις σχέσεις $E = \hbar\omega$ και $p = \hbar k$ που συνδέουν την ενέργεια E και την ορμή p του σωματιδίου με τη γωνιακή συχνότητα ω και τον κυματάριθμο k αντίστοιχα, βρίσκουμε ότι η δράση του διαφορικού τελεστή $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ στο $\psi(t, x)$ αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό του $\psi(t, x)$ με την ενέργεια E . Επίσης, η δράση του διαφορικού τελεστή $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ στο $\psi(t, x)$ αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό με την ορμή p .

Δεδομένης της σχέσης $E = \frac{p^2}{2m}$ που χαρακτηρίζει ένα (μη-σχετικιστικό) ελεύθερο σωματίο μάζας m , καταλήγουμε στην ακόλουθη εξίσωση για την κυματοσυνάρτηση $\psi(t, x)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.7)$$

Η σχέση (3.7) ισχύει για ελεύθερο σωματίο. Ποια εξίσωση ισχύει για την κίνηση ενός σωματιδίου κάτω από τη δράση ενός δυναμικού; Ο Σρέντινγκερ έκανε την εξής εκτίμηση. Δεδομένου ότι η συνάρτηση Χάμιλτον ενός σωματιδίου είναι της μορφής

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

όπου $V(x)$ ένα δυναμικό, η καλύτερη επιλογή είναι να αντικαταστήσει κανείς το διαφορικό τελεστή $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ στην Εξ. (3.7) (που αντιστοιχεί στην κινητική ενέργεια $\frac{p^2}{2m}$) με ένα διαφορικό τελεστή $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ που αντιστοιχεί στο άθροισμα κινητικής και δυναμικής ενέργειας.

Πρότεινε λοιπόν ο Σρέντινγκερ τη διαφορική εξίσωση (η οποία πλέον φέρει το όνομά του)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (3.8)$$

Τα παραπάνω αφορούν ένα σωματίο που κινείται σε μία διάσταση. Για την κίνηση σωματιδίου σε τρεις διαστάσεις, τα ίδια επιχειρήματα δίνουν

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.9)$$

Από τις λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ εστιάζουμε καταρχάς σ' αυτές που αντιστοιχούν σε κύμα σταθερής γωνιακής συχνότητας ω ή ισοδύναμα σε σωματίο σταθερής ενέργειας $E = \hbar\omega$. Θέτοντας λύση της μορφής

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.10)$$

στην Εξ. (3.9) παίρνουμε τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \phi_E(\mathbf{r}) = E\phi_E(\mathbf{r}). \quad (3.11)$$

Κατά τον ίδιο τρόπο, θέτοντας $\psi(x, t) = \phi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ στην Εξ. (3.8), παίρνουμε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ για κίνηση σε μία διάσταση

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \phi_E(x) = E\phi_E(x). \quad (3.12)$$

3.2.2 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Πρώτα θα μελετήσουμε τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ για έναν αρμονικό ταλαντωτή μάζας m και συχνότητας ω σε μία διάσταση, δηλαδή θεωρούμε την Εξ. (3.12) για δυναμικό $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right] \phi_E(x) = E\phi_E(x). \quad (3.13)$$

Στην κλασική φυσική, η τροχιά ενός αρμονικού ταλαντωτή είναι εντοπισμένη στο χώρο, δεν μπορεί το σωματίο να διαφύγει στο άπειρο. Θεωρώντας ότι το ίδιο πρέπει να ισχύει και για τον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή, πρέπει να περιοριστούμε στις λύσεις της Εξ. (3.13) που ικανοποιούν τη συνοριακή συνθήκη

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0. \quad (3.14)$$

Στην εξίσωση (3.13) εμφανίζονται οι παράμετροι m, ω και \hbar , οι οποίες συνδυάζονται για να ορίσουν μία ποσότητα με διάσταση μήκους:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (3.15)$$

Αλλάζοντας τη μεταβλητή από x σε $\xi = x/x_0$, η Εξ. (3.13) γράφεται

$$\phi_E'' + (2\epsilon - \xi^2)\phi_E = 0, \quad (3.16)$$

όπου ο τόνος συμβολίζει παραγώγιση ως προς ξ , και

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (3.17)$$

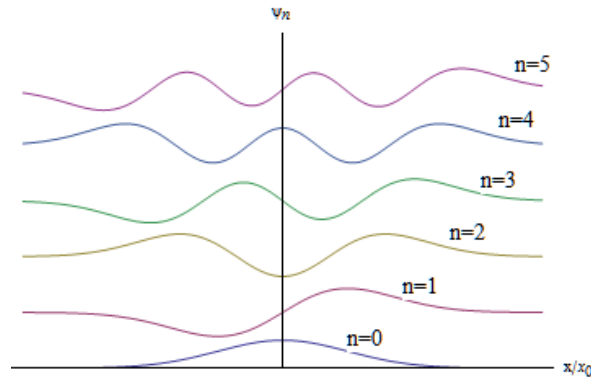
Στο όριο $\xi \gg \sqrt{\epsilon}$, η Εξ. (3.16) γίνεται

$$\phi_E'' - \xi^2\phi_E = 0. \quad (3.18)$$

Θέτοντας $s = \frac{1}{2}\xi^2$, η Εξ. (3.18) γράφεται $d^2\phi_E/ds^2 + \phi_E = 0$, η οποία επιδέχεται τις ανεξάρτητες λύσεις e^s και e^{-s} . Άρα η Εξ. (3.18) δέχεται ένα ζεύγος ανεξάρτητων λύσεων $e^{\pm\xi^2/2}$, από τις οποίες μόνο η $e^{-\xi^2/2}$ είναι συμβατή με τη συνοριακή συνθήκη (3.14).

Γράφουμε τη συνάρτηση ϕ_E της Εξ. (3.16) στη μορφή $\phi_E(\xi) = e^{-\xi^2/2}u_E(\xi)$. Η Εξ. (3.16) γίνεται

$$u_E'' - 2\xi u_E' + (2\epsilon - 1)u_E = 0. \quad (3.19)$$



Σχήμα 3.1: Γραφική παράσταση των λύσεων (3.21) της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ για $n = 0, 1, 2, \dots, 5$. Οι συναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες έτσι ώστε να ισχύει $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_n(x)|^2 = 1$.

Η Εξ. (3.19) είναι γνωστή ως εξίσωση Ερμίτ (Hermite). Όπως αποδεικνύεται στο ένθετο 3.1, η εξίσωση Ερμίτ είναι συμβατή με τη συνοριακή συνθήκη (3.14), μόνο όταν η ποσότητα ϵ ικανοποιεί τη σχέση

$$\epsilon = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

Σ' αυτήν την περίπτωση οι λύσεις της Εξ. (3.19) αντιστοιχούν σε πολυώνυμα n βαθμού που καλούνται *πολυώνυμα Ερμίτ* και συμβολίζονται ως $H_n(\xi)$. Τα πολυώνυμα Ερμίτ είναι άρτιες ή περιττές συναρτήσεις, ανάλογα με το αν ο ακέραιος n είναι άρτιος ή περιττός, αντίστοιχα. Για τις ιδιότητες των πολυωνύμων Ερμίτ, βλ. κεφ. Α1 στο παράρτημα.

Καταλήγουμε λοιπόν ότι οι λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ για αρμονικό ταλαντωτή χαρακτηρίζονται από έναν κβαντικό αριθμό $n = 0, 1, 2, \dots$ και είναι της μορφής

$$\phi_n(x) = C_n \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right] H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad (3.21)$$

όπου C_n μία σταθερά. Συνήθως η σταθερά C_n υπολογίζεται από την απαίτηση οι συναρτήσεις $\phi_n(x)$ να είναι κανονικοποιημένες στη μονάδα: $\int dx |\phi_n(x)|^2 = 1$. Χρησιμοποιώντας την ιδιότητα κανονικοποίησης των πολυωνύμων Ερμίτ (βλ. κεφ. Α.1) βρίσκουμε ότι $|C_n|^2 2^n n! \sqrt{\pi} x_0 = 1$, οπότε

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \quad (3.22)$$

Η γραφική παράσταση των συναρτήσεων $\phi_n(x)$ δίνεται στο σχήμα 3.1. Οι αντίστοιχες τιμές της ενέργειας (οι *ιδιοτιμές* της ενέργειας) δίνονται από τη σχέση

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (3.23)$$

Δηλαδή η λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ οδηγεί στη συνθήκη κβαντισμού του Πλανκ για έναν αρμονικό ταλαντωτή. Η μόνη διαφορά είναι ο σταθερός όρος $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

Ένθετο 3.1. Λύσεις της εξίσωσης Ερμίτ.

Γράφουμε τη συνάρτηση $u_E(\xi)$ ως μία σειρά γύρω από το $\xi = 0$

$$u_E(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k, \quad (3.24)$$

για κάποιους συντελεστές a_k .

Οι δύο πρώτοι παράγωγοι της u_E είναι

$$u'_E(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}(k+1)\xi^k, \quad u''_E(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+1)(k+2)\xi^k. \quad (3.25)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (3.19) βρίσκουμε

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2(k-\epsilon + \frac{1}{2})a_k \right] \xi^k = 0, \quad (3.26)$$

η οποία οδηγεί μια αναδρομική σχέση μεταξύ των συντελεστών a_k ,

$$a_{k+2} = \frac{2(k-\epsilon + \frac{1}{2})}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (3.27)$$

Στη λύση μίας διαφορική εξίσωσης δεύτερης τάξης εμφανίζονται δύο σταθερές που προσδιορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες. Καθώς η αναδρομική σχέση (3.27) έχει βήμα ίσο με 2, αρκεί να προσδιορίσουμε το a_0 και το a_1 για να βρούμε όλους τους συντελεστές a_k . Το a_0 αντιστοιχεί σε μία σειρά με άρτιους συντελεστές $\sum_{l=0}^{\infty} a_{2l}\xi^{2l}$ και το a_1 σε μία σειρά με περιττούς συντελεστές $\sum_{l=0}^{\infty} a_{2l+1}\xi^{2l+1}$.

Αν $\epsilon - \frac{1}{2} = n$, όπου $n = 0, 1, 2, \dots$, τότε $a_{n+2} = 0$ και η σειρά (3.24) τερματίζει για $k = n$, οπότε η λύση αντιστοιχεί σε ένα πολυώνυμο n βαθμού. Για $a_0 = 1$ και $a_1 = 2$ αυτά τα πολυώνυμα ταυτίζονται με τα πολυώνυμα Ερμίτ H_n , Εξ. (Α'.1). Προφανώς, η συνάρτηση $\phi_E(\xi) = e^{-\xi^2/2} u_E(\xi)$ ικανοποιεί τη συνοριακή συνθήκη (3.14).

Για άλλες τιμές του ϵ , η σειρά (3.24) διατηρεί άπειρους όρους. Στο όριο που το k πάει στο άπειρο, $a_{k+2}/a_k \sim 2/k$. Σε σύγκριση, η συνάρτηση e^{ξ^2} γράφεται ως $\sum_{l=0}^{\infty} a_{2l}\xi^{2l}$ όπου $a_{2l} = 1/l!$. Σ' αυτήν την περίπτωση $a_{2l+2}/a_{2l} \sim \frac{1}{l}$, δηλαδή $a_{k+2}/a_k \sim 2/k$, το ίδιο με τη σειρά (3.24). Άρα η συνάρτηση $u_E(\xi)$ αποκλίνει ως e^{ξ^2} για μεγάλο ξ και η συνάρτηση $\phi_E(\xi)$ αποκλίνει ως $e^{\xi^2/2}$. Η συνοριακή συνθήκη (3.14) δεν ικανοποιείται.

Καταλήγουμε λοιπόν ότι η συνθήκη (3.14) επιβάλλει τη σχέση $\epsilon - \frac{1}{2} = n$ και κατά συνέπεια τον κβαντισμό της ενέργειας σύμφωνα με τη σχέση (3.23).

3.2.3 Το άτομο του υδρογόνου

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση Σρέντινγκερ (3.11) για ένα σωματίο σε τρεις διαστάσεις που βρίσκεται εντός κεντρικού, σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού $V(r)$, όπου $r = |\mathbf{r}|$.

Χρησιμοποιούμε τις συνήθεις σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, ϕ) , όπου $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$ και $\phi \in [0, 2\pi]$. Ο τελεστής Λαπλάς σε σφαιρικές συντεταγμένες γράφεται

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}, \quad (3.28)$$

για τυχαία συνάρτηση $f(r, \theta, \phi)$ —για λεπτομέρειες βλ. Κεφ. Α.2.1 στο παράρτημα.

Δεδομένης της σφαιρικής συμμετρίας του προβλήματος κάνουμε την αντικατάσταση

$$\phi_E(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (3.29)$$

όπου $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ οι λεγόμενες σφαιρικές αρμονικές—βλ. παράρτημα Α—και $R(r)$ μία συνάρτηση που εξαρτάται μόνο από την ακτίνα. Οι δείκτες ℓ και m είναι ακέραιοι και παίρνουν τιμές $\ell = 0, 1, 2, \dots$ και $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$.

Όπως δείχνεται στο παράρτημα, οι σφαιρικές αρμονικές ικανοποιούν τη διαφορική εξίσωση

$$\begin{aligned} r^2 \nabla^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \\ &= -\ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (3.29) στην Εξ. (3.11) καταλήγουμε σε μία διαφορική εξίσωση για το $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (3.31)$$

Η Εξ. (3.31) απλοποιείται αν εκφραστεί συναρτήσει της ποσότητας $u(r) = rR(r)$ αντί της $R(r)$. Παίρνουμε

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (3.32)$$

Η Εξ. (3.31) ισχύει για όλα τα σωματίδια που κινούνται εντός σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού $V(r)$. Είναι πανομοιότυπη με τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ για σωματίο σε μία διάσταση, Εξ. (3.12), για δυναμικό

$$\tilde{V}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}. \quad (3.33)$$

Παρατηρούμε επίσης ότι η εξίσωση (3.32)—και κατά συνέπεια οι λύσεις $u(r)$ —εξαρτάται από τον ακέραιο ℓ των σφαιρικών αρμονικών, αλλά όχι από τον ακέραιο m .

Για να περιγράψουμε μία δέσμια κατάσταση του συστήματος πρέπει να επιβάλλουμε τη συνθήκη ότι το σωματίο δε διαφεύγει στο άπειρο. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να απαιτήσουμε ότι $\phi_E(r) \rightarrow 0$ για $r \rightarrow \infty$. Επίσης, θέλουμε η ϕ_E να παίρνει πεπερασμένες τιμές στο $r = 0$. Συνεπώς, η Εξ. (3.32) πρέπει να λυθεί για συνοριακές συνθήκες

$$u(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0 \quad (3.34)$$

Στη συνέχεια εξειδικεύουμε σε δυναμικό Κουλόμπ που αντιστοιχεί σε υδρογονοειδές άτομο, δηλαδή έναν πυρήνα με ένα ηλεκτρόνιο να περιστρέφεται γύρω από αυτόν. Αυτή η κατηγορία περιλαμβάνει εκτός από το άτομο του υδρογόνου και το ιόν του Ηλίου, το δις ιονισμένο λίθιο κοκ. Το δυναμικό είναι

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi r}, \quad (3.35)$$

όπου Z ο ατομικός αριθμός του πυρήνα. Επίσης η μάζα m αντιστοιχεί στην μάζα του ηλεκτρονίου m_e . (Για την ακρίβεια, αντιστοιχεί στη λεγόμενη ανηγμένη μάζα του ηλεκτρονίου, βλ. Ασκ. 2.)

Η Εξ. (3.32) για το δυναμικό (3.35) χαρακτηρίζεται από τρεις παραμέτρους \hbar , m_e και e , οι οποίες ορίζουν μία παράμετρο με διαστάσεις μάζας, την ακτίνα του Μπορ—βλ. Εξ. (2.17),

$$a_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m_e e^2} \quad (3.36)$$

Χρησιμοποιώντας την αδιάστατη μεταβλητή $\xi = Zr/a_0$ αντί της ακτίνας r , η Εξ. (3.32) γράφεται

$$u'' + \left(\epsilon + \frac{2}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) u = 0. \quad (3.37)$$

όπου ο τόνος συμβολίζει παράγωγο ως προς ξ και

$$\epsilon = \frac{2m_e E a_0^2}{\hbar^2 Z^2}. \quad (3.38)$$

Στη συνέχεια εξετάζουμε την εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών (3.34). Στο όριο $\xi \rightarrow 0$, η Εξ. (3.37) γίνεται $\xi^2 u'' = \ell(\ell + 1)u$, η οποία αποδέχεται τις ανεξάρτητες λύσεις $u = \xi^{\ell+1}$ και $u = \xi^{-\ell}$. Μόνο η πρώτη λύση ικανοποιεί τη συνοριακή συνθήκη (3.34), οπότε η δεύτερη απορρίπτεται. Στο όριο $\xi \rightarrow \infty$, η Εξ. (3.37) γίνεται $u'' + \epsilon u = 0$, η οποία δέχεται τις λύσεις $u = e^{-\sqrt{|\epsilon|}\xi}$ που μηδενίζονται στο άπειρο, μόνο αν $\epsilon < 0$.

Με οδηγό τις παραπάνω ασυμπτωτικές συμπεριφορές της συνάρτησης $u(\xi)$, γράφουμε

$$u(\xi) = \xi^{\ell+1} e^{-\sqrt{|\epsilon|}\xi} f(\xi), \quad (3.39)$$

οπότε η Εξ. (3.37) οδηγεί σε μια διαφορική εξίσωση για τη συνάρτηση f ,

$$\xi f'' + 2(\ell + 1 - \sqrt{|\epsilon|}\xi) f' + 2(1 - (\ell + 1)\sqrt{|\epsilon|}) f = 0. \quad (3.40)$$

Η Εξ. (3.40) αποδέχεται λύσεις συμβατές με τις συνοριακές συνθήκες (3.34) μόνο αν υπάρχει ακέραιος $n > \ell$ έτσι ώστε $|\epsilon| = n^{-2}$. Η απόδειξη δίνεται στο Ένθετο 3.2. Σ' αυτήν την περίπτωση οι λύσεις της Εξ. (3.40) είναι πολυώνυμα $(n - \ell - 1)$ -βαθμού. Στη βιβλιογραφία καλούνται *γενικευμένων πολυωνύμων Λαγκέρ* (Laguerre) $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}$ —βλ. Κεφ. Α.3 στο παράρτημα.

Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα, ότι οι λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ για το άτομο του υδρογόνου εξαρτώνται από τρεις (ακέραιους) κβαντικούς αριθμούς n, ℓ και m , όπου $n = 1, 2, 3, \dots, 0 \leq \ell < n$ και $-\ell \leq m \leq \ell$, και είναι της μορφής

$$\phi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = C_{n,\ell} \left(\frac{Zr}{\alpha_0} \right)^\ell e^{-\frac{Z}{n\alpha_0}r} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{Zr}{\alpha_0} \right) Y_m^\ell(\theta, \phi), \quad (3.41)$$

όπου $C_{n,\ell}$ σταθερά. Στον πίνακα 3.1, δίνονται οι λύσεις που αντιστοιχούν στις χαμηλότερες τιμές του n .

Η ενέργεια εξαρτάται μόνο από τον κβαντικό αριθμό n και οι δυνατές τιμές της ταυτίζονται με αυτές του μοντέλου του Μπορ

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \hbar^2 n^2}, \quad (3.42)$$

Παρατηρούμε ότι όλες οι λύσεις με το ίδιο n αλλά διαφορετικά ℓ και m έχουν την ίδια τιμή της ενέργειας. Δεδομένου ότι για κάθε ℓ υπάρχουν $2\ell + 1$ διαφορετικές τιμές m και για κάθε n υπάρχουν n διαφορετικές τιμές του ℓ , οπότε συνολικά έχουμε

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (3.43)$$

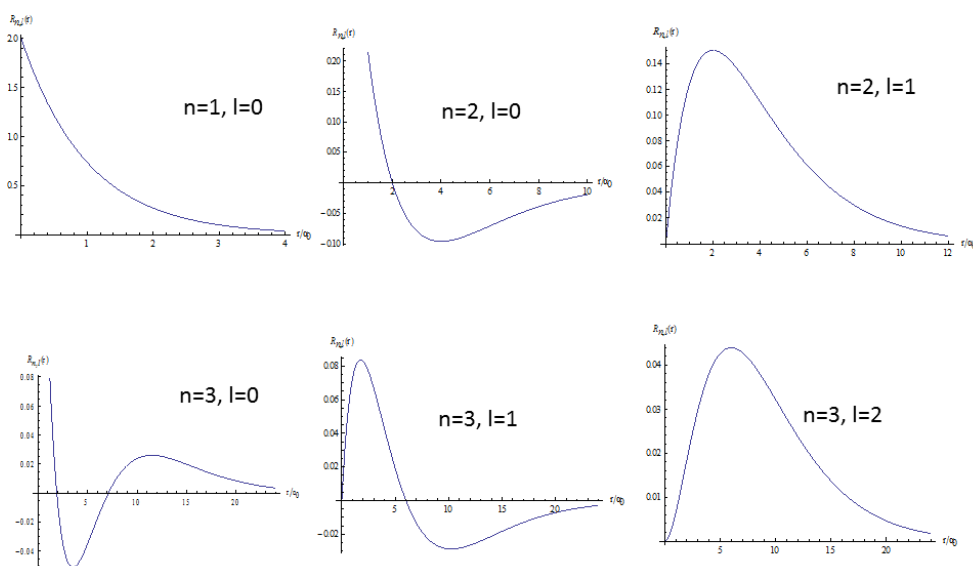
διαφορετικές λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ με την ίδια τιμή της ενέργειας E_n .

Ένθετο 3.2. Λύσεις της εξίσωσης (3.40)

Γράφουμε τη συνάρτηση $f(\xi)$ της Εξ. (3.40) ως μία σειρά γύρω από το $\xi = 0$, $f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$ για κάποιους συντελεστές a_k .

Βρίσκουμε ότι

$$\xi f''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) k \xi^k, \quad \xi f'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \xi^k, \quad f'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) \xi^k.$$



Σχήμα 3.2: Γραφική παράσταση της ακτινικής εξάρτησης $R_{n,\ell}(r)$ των λύσεων (3.41) της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ για το άτομο του υδρογόνου, για διάφορες τιμές των κβαντικών αριθμών n και ℓ .

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (3.40) παίρνουμε μια αναδρομική σχέση μεταξύ των συντελεστών a_k

$$a_{k+1} = \frac{2[\sqrt{|\epsilon|}(\ell + 1 + k) - 1]}{(k + 1)(k + 2\ell + 2)} a_k. \quad (3.44)$$

Στο όριο όπου το k τείνει στο άπειρο, η Εξ. (3.44) στο όριο μεγάλων k δίνει $a_{k+1}/a_k = 2\sqrt{|\epsilon|}/k$. Αυτή η ασυμπτωτική συμπεριφορά αντιστοιχεί στη $\exp[2\sqrt{|\epsilon|}\xi]$. Αυτό σημαίνει ότι η συνάρτηση $u(\xi)$ της Εξ. (3.39) συμπεριφέρεται ως $\xi^{\ell+1} e^{\sqrt{|\epsilon|}\xi}$ στο άπειρο και κατά συνέπεια η συνοριακή συνθήκη (3.34) παραβιάζεται.

Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να αναζητήσουμε πολυωνμικές λύσεις, για τις οποίες οι τιμές του a_k μηδενίζονται από κάποια τιμή και μετά. Παρατηρούμε ότι αν $\sqrt{|\epsilon|}(\ell + 1 + \bar{k}) = 1$ για κάποιο $\bar{k} \geq 1$, τότε συντελεστής $a_{\bar{k}+1} = 0$ και καταλήγουμε σε ένα πολυώνυμο \bar{k} βαθμού. Είναι βολικό να ορίσουμε τον ακέραιο $n = \ell + \bar{k} + 1 > \ell$, ως προς τον οποίο η συνθήκη ύπαρξης πολυωνμικής λύσης γίνεται

$$|\epsilon| = n^{-2}. \quad (3.45)$$

Το πολυώνυμο που λύνει την Εξ. (3.40) είναι βαθμού $\bar{k} = n - \ell - 1$. Στη βιβλιογραφία είναι γνωστά ως γενικευμένα πολυώνυμα Λαγκέρ $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}$, ορισμοί και ιδιότητες των οποίων δίνονται στο παράρτημα.

Η γενική έκφραση για τις λύσεις $\phi_{n\ell m}$ που ικανοποιούν τη συνθήκη κανονικοποίησης $\int r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi |\phi_{n\ell m}|^2 = 1$ είναι η εξής

$$\begin{aligned} \phi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) &= \sqrt{\left(\frac{2Z}{n\alpha_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!}} e^{-\frac{Zr}{n\alpha_0}} \\ &\times \left(\frac{2Zr}{n\alpha_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Zr}{n\alpha_0}\right) Y_{\ell m}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (3.46)$$

3.2.4 Τα όρια της κυματομηχανικής περιγραφής

Η θεωρία του Σρέντινγκερ ήταν εξαιρετικά επιτυχής. Όχι μόνο επαλήθευε τη σχέση του Πλανκ και το μοντέλο του Μπορ, αλλά προσέφερε και μία γενική μεθοδολογία για τη μελέτη γενικότερων συστημάτων, οσοδήποτε πολύπλοκων.

n	ℓ	m	$\phi_{n,\ell,m}$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} r \cos \theta$
2	1	± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} r \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \left(27 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{a_0^2}\right)$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} r \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \cos \theta$
3	1	± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} r \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} r^2 (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} r^2 \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	± 2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} r^2 \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$

Πίνακας 3.1: Λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ για το άτομο του υδρογόνου

Συγκεκριμένα, η εξίσωση Σρέντινγκερ για N σωματίδια γράφεται

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \left[- \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (3.47)$$

όπου m_i οι μάζες των σωματιδίων και $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης. Αρκεί να βρει κανείς μία συνάρτηση δυναμικού που να περιγράφει την αλληλεπίδραση σωματιδίων για να έχει ένα καλώς ορισμένο μαθηματικό πρόβλημα. Οι επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας αντιστοιχούν στις λύσεις της αντίστοιχης χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ κάτω από τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.

Όμως η φυσική ερμηνεία της θεωρίας του Σρέντινγκερ ήταν προβληματική. Ο Σρέντινγκερ αρχικά προτιμούσε μία ερμηνεία σύμφωνα με την οποία η εξίσωση του περιέγραφε πραγματικά κύματα στο χώρο και ότι τα σωματίδια δεν ήταν τίποτα περισσότερο από εντοπισμένα στο χώρο κυματοπακέτα. Ήταν ιδιαίτερα δύσπιστος για τη θεωρία των Μπορ και Χάιζενμπεργκ, και ιδιαίτερα με την έννοια των κβαντικών αλμάτων.

Για ελεύθερα σωματίδια η θεωρία του Σρέντινγκερ ήταν κατασκευασμένη σύμφωνα με τις αρχές του ντε Μπρέιγ και η ταχύτητα ομάδος του κύματος μπορούσε να ταυτιστεί με την ταχύτητα του σωματιδίου. Ο Σρέντινγκερ έδειξε ότι και στον αρμονικό ταλαντωτή υπάρχει μία αντιστοιχία: το κέντρο ενός Γκαουσιανού κυματοπακέτου κινείται σύμφωνα με τις κλασικές εξισώσεις κίνησης—βλ. Ασκ. 3. Αυτό ήταν καταρχάς ενθαρρυντικό.

Ωστόσο η ερμηνεία της εξίσωσης του Σρέντινγκερ ως περιγραφή ενός φυσικού κύματος δεν επιβιώνει καν της στοιχειώδους κριτικής. Υπήρχαν σοβαρά προβλήματα. Πρώτον, η χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Σρέντινγκερ περιέχει τη μιγαδική μονάδα i . Αυτό σημαίνει ότι οι λύσεις $\psi(x, t)$, εν γένει είναι μιγαδικοί αριθμοί. Δεν υπάρχει κάποια προφανής εξήγηση της φυσικής σημασίας μίας μιγαδικής κυματοσυνάρτησης.

Δεύτερον, στην εξίσωση του Σρέντινγκερ για N σωματίδια, η κυματοσυνάρτηση ψ εξαρτάται από τα διανύσματα θέσης και των N σωματιδίων. Δηλαδή η ψ είναι μία συνάρτηση στο θεσεογραφικό χώρο $Q = \mathbf{R}^{3N}$ του συστήματος των N σωματιδίων. Σε αντιδιαστολή, ένα φυσικό κύμα περιγράφεται από κυματοσυναρτήσεις στο φυσικό χώρο \mathbf{R}^3 .

Τρίτον, η εξίσωση του Σρέντινγκερ δεν είναι συμβατή με την αυθόρμητη εκπομπή φωτονίων από άτομα. Έστω ότι έχουμε N_0 διεγερμένα άτομα τη χρονική στιγμή $t = 0$. Είναι πολύ καλά διαπιστωμένο πειραματικά ότι η αποδιέγερση ακολουθεί ένα νόμο εκθετικής πτώσης, δηλαδή τη χρονική στιγμή t ο αριθμός των διεγερμένων ατόμων είναι $N(t) = N_0 e^{-\Gamma t}$, όπου Γ μια σταθερά. Η συνάρτηση $N(t)$ δεν είναι αντιστρέψιμη στο χρόνο, σε αντίθεση με την εξίσωση του Σρέντινγκερ: αν $\psi(\mathbf{r}, t)$ είναι μία λύση της εξίσωσης (3.9), τότε και η $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ είναι λύση της ίδιας εξίσωσης. Η εξίσωση του Σρέντινγκερ αν ιδωθεί ως εξίσωση φυσικού κύματος δεν μπορεί να περιγράψει μη-αντιστρέψιμα φαινόμενα, όπως η αυθόρμητη εκπομπή.

Ένθετο 3.3. Οι διαφωνίες για τη θεωρία του Σρέντινγκερ

Ο Χάιζενμπεργκ θυμάται [38]:

«Αυτές οι συζητήσεις έλαβαν χώρα στην Κοπεγχάγη το Σεπτέμβριο του 1926 και μου άφησαν μία έντονη εντύπωση της προσωπικότητας του Μπορ. Γιατί αν και ο Μπορ ήταν ένας ασυνήθιστα ευγενικός χαρακτήρας, ήταν ικανός σε μία συζήτηση που αφορούσε επιστημολογικά προβλήματα ζωτικής σημασίας να επιμένει φανατικά και με μία σχεδόν τρομακτική ανυποχωρητικότητα για πλήρη καθαρότητα σε όλα τα επιχειρήματα. Δε σταματούσε, ακόμα και ύστερα από ώρες αγώνα, προτού ο Σρέντινγκερ παραδεχτεί ότι η ερμηνεία του ήταν ανεπαρκής και ότι δεν μπορούσε καν να ερμηνεύσει το νόμο του Πλανκ. Κάθε προσπάθεια του Σρέντινγκερ να ξεφύγει από αυτό το πικρό συμπέρασμα καταρριπτόταν σταδιακά βήμα προς βήμα σε απείρως εξαντλητικές συζητήσεις.

Ήταν ίσως από υπερκόπωση που μετά από λίγες μέρες ο Σρέντινγκερ αρρώστησε και έπρεπε να μείνει στο κρεβάτι ως φιλοξενούμενος στο σπίτι του Μπορ. Αλλά ακόμα και εκεί ήταν δύσκολο να διώξεις τον Μπορ από το κρεβάτι του Σρέντινγκερ και η φράση «Αλλά Σρέντινγκερ, πρέπει τουλάχιστον να παραδεχθείς ότι...» ακούγονταν κάθε λίγο και λιγάκι. Κάποια στιγμή ο Σρέντινγκερ ξέσπασε σχεδόν απελπισμένος: «Αν είναι να συνεχίσουμε με αυτά τα καταραμένα κβαντικά άλματα, λυπάμαι που άρχισα ποτέ να ασχολούμαι με την κβαντική θεωρία.» Στο οποίο ο Μπορ απάντησε: «Αλλά εμείς οι υπόλοιποι είμαστε τόσο ευγνώμονες για τη δουλειά σου, γιατί έφερες την ατομική φυσική ένα σημαντικό βήμα μπροστά.» Ο Σρέντινγκερ τελικά έφυγε από την Κοπεγχάγη μάλλον αποθαρρυσμένος, ενώ εμείς στο ινστιτούτο του Μπορ αισθανθήκαμε ότι τουλάχιστον η ερμηνεία της κβαντικής θεωρίας του Σρέντινγκερ, μία ερμηνεία που συνελήφθη βιαστικά με τη χρήση των κλασικών κυματικών θεωριών σαν μοντέλα, είχε πλέον απορριφθεί, αλλά ότι ακόμα μας έλειπαν κάποιες σημαντικές ιδέες προτού καταλήξουμε σε μία πλήρη κατανόηση της κβαντικής μηχανικής.»

3.3 Πιθανότητες και αβεβαιότητα

3.3.1 Ισοδυναμία μηχανικής πινάκων και κυματομηχανικής

Με την ολοκλήρωση της θεωρίας του Σρέντινγκερ υπήρχαν δύο διαφορετικές επιτυχημένες κβαντικές θεωρίες. Φαίνονταν διαφορετικές: η θεωρία του Σρέντινγκερ βασίζεται σε μία συνεχή διαφορική εξίσωση, η θεωρία του Χάιζενμπεργκ βασίζεται σε πίνακες που είναι διακριτά αντικείμενα. Ωστόσο αυτή η διαφορά είναι επιφανειακή.

Ας εξετάσουμε την εξίσωση του Σρέντινγκερ για ένα σωματίο. Έστω ότι κάτω από τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες η αντίστοιχη χρονοανεξάρτητη εξίσωση έχει λύσεις $\phi_n(x)$ με αντίστοιχες τιμές της ενέργειας E_n . Ας θεωρήσουμε τα μαθηματικά αντικείμενα (τελεστές) \hat{X} και \hat{P} που δρουν σε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ ως

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{P}\psi(x) = -i\frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \quad (3.48)$$

Παρατηρούμε ότι ικανοποιούν τη θεμελιώδη σχέση (3.6) του Χάιζενμπεργκ. Επιπλέον ορίζουμε τους πίνακες

$$X_{mn} = \int dx \psi_m^*(x, t) x \psi_n(x, t) \quad (3.49)$$

$$P_{mn} = \int dx \psi_m^*(x, t) (-i\partial/\partial x) \psi_n(x, t). \quad (3.50)$$

Βάσει της εξίσωσης (3.10), $\phi_n(x, t) = \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$. Αυτό σημαίνει ότι οι πίνακες X_{mn} και P_{mn} εξελίσσονται στο χρόνο ως

$$X_{mn}(t) = X_{mn}(0) e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}, \quad P_{mn}(t) = P_{mn}(0) e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}, \quad (3.51)$$

σε πλήρη συμφωνία με τη βασική υπόθεση του Χάιζενμπεργκ (3.3).

Οπότε οι δύο θεωρίες, παρότι φυσικά πολύ διαφορετικές, ήταν μαθηματικά ισοδύναμες, υπό την έννοια ότι έδιναν τις ίδιες φυσικές προβλέψεις. Ωστόσο δεν μπορούσαν να ενοποιηθούν έως ότου να βρεθεί ένας τρόπος να ερμηνευτούν φυσικά οι κυματοσυναρτήσεις του Σρέντινγκερ.

3.3.2 Αρχή της αβεβαιότητας

Το επόμενο σημαντικό βήμα έγινε από τον Χάιζενμπεργκ. Ήταν η ανακάλυψη της περιβόητης *αρχής της αβεβαιότητας* [40]. Ο Χάιζενμπεργκ εξέτασε τον τρόπο με τον οποίον μπορούν να γίνουν μετρήσεις σε μικροσκοπικά σωματίδια. Για να μετρήσουμε τη θέση ενός σωματιδίου πρέπει να χρησιμοποιήσουμε κάποιο φυσικό μέσο, για παράδειγμα ΗΜ κύματα. Λόγω φαινομένων περίθλασης, ένα ΗΜ κύμα δεν μπορεί να δώσει ακριβή πληροφορία για κάτι πολύ μικρότερο από το μήκος κύματός του. Συγκεκριμένα, ένα μικροσκόπιο που λειτουργεί με ΗΜ ακτινοβολία μήκους κύματος λ μπορεί να ξεχωρίσει μέχρι αποστάσεις

$$\Delta x \geq w\lambda, \quad (3.52)$$

όπου w ένας αριθμός της τάξης της μονάδας².

Μπορούμε όμως να χρησιμοποιήσουμε το ίδιο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο για να προσδιορίσουμε την ορμή του σωματιδίου. Αν το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο ήταν συνεχές θα μπορούσαμε να προσδιορίσουμε την ορμή με όση ακρίβεια θέλουμε. Αλλά το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο αποτελείται από φωτόνια, κάθε ένα από τα οποία φέρει ορμή μέτρου $p = 2\pi\hbar/\lambda$. Είναι αδύνατο να έχουμε καλύτερη ακρίβεια στη μέτρηση της ορμής του σωματιδίου καλύτερη από την ορμή ενός φωτονίου, οπότε

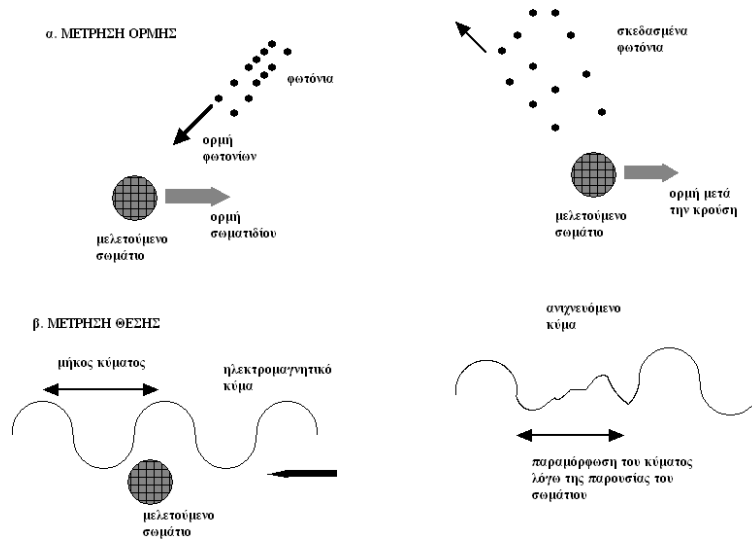
$$\Delta p \geq 2\pi \frac{\hbar}{\lambda}. \quad (3.53)$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις εξισώσεις (3.52) και (3.53) παίρνουμε τη σχέση

$$\Delta x \Delta p \geq (2\pi w)\hbar \sim \hbar. \quad (3.54)$$

Η σχέση (3.54) είναι η περιβόητη *σχέση αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ*. Στη μορφή που παρουσιάσαμε εδώ αναφέρεται στην αδυναμία ακριβούς ταυτόχρονου προσδιορισμού της θέσης και της

²Η θεωρία του μικροσκοπίου [41] δίνει ως βέλτιστη τιμή $w = 0,47/NA$ όπου NA το λεγόμενο αριθμητικό άνοιγμα (numerical aperture) του μικροσκοπίου, που αποτελεί κατασκευαστικό του στοιχείο. Το NA δεν μπορεί να ξεπεράσει ποτέ το 2—η μέγιστη εφικτή τιμή σε πραγματικά μικροσκόπια είναι 1,45. Οπότε μία τιμή $w = 0,3$ αποδίδει καλά την καλύτερη δυνατή ανάλυση που μπορεί να πετύχει ένα μικροσκόπιο. Σ' αυτήν την περίπτωση η σχέση αβεβαιότητας (3.54) γίνεται $\Delta x \Delta p > 2\hbar$.



Σχήμα 3.3: Το πρώτο σχήμα περιγράφει ένα πείραμα μέτρησης της ορμής ενός σωματιδίου προσδιορίζοντας την ενέργεια των φωτονίων που σκεδάζονται επάνω του. Δεν μπορούμε να έχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια από την ορμή ενός φωτονίου. Το δεύτερο σχήμα περιγράφει το ίδιο πείραμα, όπου χρησιμοποιούμε τις κυματικές ιδιότητες του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου για να προσδιορίσουμε τη θέση του σωματιδίου. Σε αυτήν την περίπτωση η ακρίβεια δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερη από το μήκος κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Η σχέση του ντε Μπρέιγ μεταξύ μήκους κύματος και ορμής οδηγεί στην αρχή της αβεβαιότητας.

ορμής ενός σωματιδίου. Δηλαδή οι ποσότητες Δx και Δp αντιστοιχούν σε *τυχαία σφάλματα* μίας μέτρησης σε ένα και μοναδικό σωματίο. Η σχέση (3.54) επιδέχεται και άλλες ερμηνείες [42]. Όπως θα δούμε στο Κεφ. 7, τα Δx και Δp μπορούν να αντιστοιχίζονται στην τυπική απόκλιση μετρήσεων σε στατιστικό σύνολο. Σε άλλες εκδοχές, το Δx μπορεί να αντιστοιχεί στην ακρίβεια της μέτρησης της θέσης και το Δp στη διαταραχή του συστήματος από τη μέτρηση [43]. Οι διαφορές είναι πολύ σημαντικές δεδομένου ότι ποσότητες όπως το Δx και Δp μπορούν πλέον να προσδιοριστούν επακριβώς σε πειράματα και η διαφορά του ορισμού αναφέρεται σε διαφορετικές μετρούμενες ποσότητες.

Η σχέση (3.54) έχει ως άμεση συνέπεια μία άλλη σχέση αβεβαιότητας, μεταξύ ενέργειας και χρόνου. Έστω ότι έχουμε μία μετρητική συσκευή που αποτελείται από μία οθόνη με μία οπή και ένα πέτασμα που μπορεί να κλείνει την οπή. Έστω ότι κατευθύνουμε ένα σωματίο προς αυτή τη συσκευή και ότι έχουμε έναν ανιχνευτή πίσω από την οθόνη. Αφήνουμε την οπή ανοιχτή για ένα διάστημα ίσο με Δt . Αν το σωματίο ανιχνευθεί μετά την οπή, τότε έχουμε μετρήσει το πότε πέρασε από την οπή με ακρίβεια Δt . Η αβεβαιότητα σε μια μέτρηση της ενέργειας του σωματιδίου είναι $\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p = v \Delta p$, όπου v η ταχύτητα του σωματιδίου. Δεδομένου ότι ο προσδιορισμός του χρόνου με ακρίβεια Δt αντιστοιχεί σε προσδιορισμό της θέσης με ακρίβεια $\Delta x = v \Delta t$, η Εξ. (3.54) μας οδηγεί στη σχέση

$$\Delta E \Delta t > \hbar \tag{3.55}$$

Για τον Χάιζενμπεργκ η σχέση της αβεβαιότητας αποτελούσε μία δικαίωση της θεώρησής του. Η κβαντική φυσική δεν μπορεί να δεχτεί τις τροχιές σωματιδίων ως θεμελιώδεις έννοιες, γιατί αυτές εμπεριέχουν μία ιδεατή περιγραφή φυσικών ποσοτήτων—τον ταυτόχρονο ορισμό θέσης και ορμής—που αντίκειται στη σχέση αβεβαιότητας. Βεβαίως η αρχή της αβεβαιότητας σήμανε και το τέλος της αιτιοκρατίας που χαρακτήριζε τη Νευτώνεια φυσική. Όπως έγραψε χαρακτηριστικά [44]

«Στην ισχυρή διατύπωση της αιτιοκρατίας, ότι αν γνωρίζουμε το παρόν ακριβώς μπορούμε να προβλέψουμε το μέλλον, δεν είναι το συμπέρασμα αλλά η υπόθεση που είναι λάθος. Θεμελιωδώς, δεν μπορούμε να γνωρίζουμε το παρόν σε όλες του τις λεπτομέρειες.»

Η σχέση αβεβαιότητας έγινε ένα από τα σημαντικότερα επιχειρήματα υπέρ της ριζοσπαστικής αντίληψης για την κβαντική θεωρία που προωθούσε ο Μπορ και ο Χάιζενμπεργκ. Αποδείχτηκε εξαιρετικά πειστικό στους φυσικούς που συμμετείχαν στις συζητήσεις εκείνη την εποχή. Γι' αυτόν το λόγο έγινε και σημείο τριβής όσων αντιπαραθέτονταν στην κβαντική θεωρία—επιχειρούσαν να βρουν αντιπαραδείγματα στην αρχή της αβεβαιότητας, αλλά επί ματαίω. Το σημαντικότερο τέτοιο αντιπάρδειγμα, η κατάρριψη του οποίου έκανε τη μεγαλύτερη εντύπωση στους συγχρόνους τους, είναι το λεγόμενο *κουτί του Αϊνστάιν*, το οποίο περιγράφεται στο ένθετο 3.4.

Ένθετο 3.4. Το κουτί του Αϊνστάιν

Ο Αϊνστάιν πρότεινε ένα πείραμα στο οποίο θα μπορούσε να παραβιαστεί η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας χρόνου (3.55). Έστω ένα κουτί που περιέχει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και ένα ρολόι που ελέγχει το άνοιγμα μίας μικρής 'πόρτας' που καλύπτει μία οπή σε ένα από τα τοιχώματα του δοχείου. Η πόρτα ανοίγει για χρόνο T που μπορεί να γίνει οσοδήποτε μικρός. Έστω ότι κατά τη διάρκεια του ανοίγματος, ένα φωτόνιο εξέρχεται από το κουτί. Ο Αϊνστάιν πρότεινε ότι αν το κουτί βρίσκεται σε μια ζυγαριά, η διαφορά μάζας $m_1 - m_2$, όπου m_1 είναι η μάζα του κουτιού πριν ανοίξει η πόρτα και m_2 η μάζα αφότου άνοιξε η πόρτα, μας δίνει την ενέργεια του φωτονίου ως $E = (m_1 - m_2)c^2$. Δεδομένου ότι δεν υπάρχει όριο στο πόσο ακριβής μπορεί να είναι η μέτρηση του βάρους του κουτιού, η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ενέργειας ΔE μπορεί να γίνει οσοδήποτε μικρή. Επιπλέον το ρολόι θα αποδώσει τον ακριβή χρόνο κατά τον οποίο έγινε η εκπομπή του φωτονίου με ακρίβεια Δt η οποία δεν έχει περιορισμό. Κατά συνέπεια το $\Delta E \Delta t$ μπορεί να γίνει μικρότερο από όσο προσδιορίζει η αρχή της αβεβαιότητας.

Το επιχείρημα αρχικά φαινόταν ακλόνητο. Όπως περιγράφει χαρακτηριστικά ο Ρόζενφελντ που ήταν παρών στη συζήτηση:

"Ήταν μεγάλο σοκ για τον Μπορ...δεν μπόρεσε να βρει απάντηση αμέσως. Όλο εκείνο το απόγευμα ήταν εξαιρετικά στενοχωρημένος, πήγαινε από τον έναν στον άλλο και προσπαθούσε να τους πείσει ότι δεν μπορούσε να είναι αλήθεια, ότι θα ήταν το τέλος της φυσικής αν ο Αϊνστάιν είχε δίκιο. Αλλά δεν μπορούσε να βρει κάποιο αντεπιχείρημα. Δε θα ξεχάσω ποτέ την εικόνα των δύο ανταγωνιστών να φεύγουν από το σαλόνι του ξενοδοχείου. Ο Αϊνστάιν μία ψηλή, επιβλητική φιγούρα, να περπατά αμίλητος με ένα κάπως ειρωνικό χαμόγελο, και ο Μπορ να βηματίζει δίπλα του με υπερένταση.... Το επόμενο πρωί ήρθε ο θρίαμβος για τον Μπορ.»

Η απάντηση του Μπορ ήταν πειστική, όχι μόνο γιατί έδειξε ότι το επιχείρημα του Αϊνστάιν δε δούλευε, αλλά επειδή χρησιμοποίησε μία από τις μεγάλες ιδέες του ίδιου του Αϊνστάιν, την επίδραση του βαρυτικού πεδίου στην καταγραφή του χρόνου από ρολόγια. Για να ζυγίσουμε το κουτί με ένα δυναμόμετρο, πρέπει να το τοποθετήσουμε σε ένα ελατήριο εντός ενός βαρυτικού πεδίου. Η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ενέργειας ΔE είναι ανάλογη της ακρίβειας Δm στη μέτρηση της μάζας: $\Delta E = \Delta mc^2$. Στο δυναμόμετρο μετριέται η βαρυτική δύναμη $F = mg$ και όχι η μάζα, οπότε $\Delta m = \Delta F/g$. Υπάρχει αβεβαιότητα στη μέτρηση της δύναμης ίση με την αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ορμής Δp_z του κουτιού στην κάθετη κατεύθυνση (λόγω της όλης διαδικασίας που καταλήγει στην έξοδο του φωτονίου) προς $\Delta F = \Delta p/T$, όπου T ο συνολικός χρόνος που κρατά η διαδικασία. Καταλήγουμε λοιπόν στη σχέση $\Delta E = \Delta p_z c^2 / (Tg)$.

Σύμφωνα με τη γενική θεωρία της σχετικότητας, ο χρόνος που μετρά ένα ρολόι εντός ενός βαρυτικού πεδίου εξαρτάται από το βαρυτικό δυναμικό στο σημείο που βρίσκεται το ρολόι. Δυο ρολόγια, ένα σε ύψος z και ένα σε ύψος $z + \Delta z$, χρόνους T και $T + \Delta t$ αντίστοιχα, όπου $\Delta t/T = g\Delta z/c^2 T$. Αν Δz είναι η αβεβαιότητα στη θέση του κουτιού, τότε το Δt ταυτίζεται με την αβεβαιότητα στο χρόνο εκπομπής του φωτονίου. Καταλήγουμε λοιπόν ότι

$$\Delta E \Delta t \sim \frac{\Delta p_z c^2}{Tg} \frac{g \Delta z T}{c^2} = \Delta p_z \Delta z > \hbar, \quad (3.56)$$

όπου στο τέλος χρησιμοποιήσαμε τη σχέση αβεβαιότητας θέσης-ορμής για το κουτί. Κατ' αυτόν τον τρόπο το επιχείρημα του Αϊνστάιν καταρρίπτεται.

Η περιγραφή της συζήτησης βρίσκεται στη συλλογή άρθρων του Σίλπ για τον Αϊνστάιν [45] και έχει ανατυπωθεί από τους Γουίλερ και Ζούρεκ [39]. Βλ. [46] για μια σύγχρονη κριτική παρουσίαση.

3.3.3 Πιθανοτική ερμηνεία του Μπορν

Η σχέση της αβεβαιότητας προσέφερε ένα υπόβαθρο για την εύρεση μίας συνεπούς ερμηνείας για τις κυματοσυναρτήσεις του Σρέντινγκερ. Απλουστεύοντας λίγο, η ύπαρξη αβεβαιότητας σημαίνει αναγκαιότητα περιγραφής με θεωρία πιθανοτήτων. Απαιτείται ένας κανόνας που να συνδέει τις κβαντικές ποσότητες, είτε αυτές είναι κυματοσυναρτήσεις είτε πίνακες με φυσικά μετρήσιμες πιθανότητες.

Την απάντηση την έδωσε ο Μαξ Μπορν με τη *στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης* [47]: αν $\psi(\mathbf{x}, t)$ είναι η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ τότε η ποσότητα $\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ δίνει την πυκνότητα πιθανότητας ως προς τη θέση \mathbf{x} του σωματιδίου τη χρονική στιγμή t . Δηλαδή, αν $U \subset \mathbf{R}^3$ είναι μία περιοχή του χώρου, τότε η πιθανότητα $\text{Prob}(U, t)$ να βρεθεί το σωματίο στην περιοχή U τη χρονική στιγμή t είναι

$$\text{Prob}(U, t) = \int_U d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2. \quad (3.57)$$

Για να μπορεί να λειτουργήσει η ποσότητα $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ως πυκνότητα πιθανότητας είναι απαραίτητο να είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα.

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1. \quad (3.58)$$

Η συνθήκη κανονικοποίησης (3.58) είναι όντως συμβατή με την εξίσωση Σρέντινγκερ (3.9). Εξ' ορισμού,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi \right) \\ &+ \frac{i}{\hbar} \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi^* \right) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*), \end{aligned} \quad (3.59)$$

όπου χρησιμοποίησαμε την Εξ. (3.9).

Από την (3.59) παίρνουμε τη σχέση συνέχειας

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_S = 0, \quad (3.60)$$

όπου \mathbf{J}_S είναι το ρεύμα Σρέντινγκερ

$$\mathbf{J}_S = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (3.61)$$

Ολοκληρώνοντας και τα δύο μέλη της εξίσωσης σε μία περιοχή U του χώρου βρίσκουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{Prob}(U, t) = - \oint_{\partial U} d^2\sigma \cdot \mathbf{J}_S, \quad (3.62)$$

όπου ∂U είναι το σύνορο του U . Αν πάρουμε $U = \mathbf{R}^3$ το σύνορο ∂U είναι στο άπειρο, όπου το ρεύμα Σρέντινγκερ μηδενίζεται (καθώς μηδενίζονται οι κυματοσυναρτήσεις). Οπότε παίρνουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0, \quad (3.63)$$

δηλαδή χρονική εξέλιξη σύμφωνα με την εξίσωση του Σρέντινγκερ διατηρεί την κανονικοποίηση (3.58) της κυματοσυνάρτησης.

Αργότερα θα δούμε, πώς η ερμηνεία του Μπορν γενικεύεται σε οποιοδήποτε φυσικό σύστημα (όχι μόνο σύστημα ενός σωματιδίου) και για οποιοδήποτε παρατηρήσιμο μέγεθος.

Πρέπει να τονίσουμε ότι η ποσότητα $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ είναι πυκνότητα πιθανότητας μόνο ως προς τη θέση, όχι ως προς το χρόνο t . Η συνθήκη κανονικοποίησης έχει ολοκλήρωμα μόνο ως προς το χώρο. Αυτό σημαίνει ότι οι πιθανότητες $\text{Prob}(U, t)$ δεν περιγράφουν ενδεχόμενα ως προς το χρόνο. Ο χρόνος εμφανίζεται ως *παράμετρος* των πιθανοτήτων όχι ως τυχαία μεταβλητή. Αυτό σημαίνει ότι προσδιορίζουμε μία χρονική στιγμή t και εκείνη τη στιγμή ορίζουμε ενδεχόμενα για τις διαφορετικές τιμές της θέσης, τα οποία περιγράφονται από την πυκνότητα πιθανότητας $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$.

Βλέπουμε λοιπόν ότι υπάρχει μία θεμελιώδης ασυμμετρία μεταξύ χρόνου και χώρου στην κβαντική θεωρία. Αυτή η ασυμμετρία δεν οφείλεται στην εξίσωση του Σρέντινγκερ, παρότι και εκεί ο χρόνος και ο χώρος εμφανίζονται ασύμμετρα. Στη γενίκευση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ σε σχετικιστικά συστήματα, ο χρόνος και ο χώρος είναι ισότιμες μεταβλητές. Η ασυμμετρία οφείλεται στην εισαγωγή των πιθανοτήτων στην κβαντική θεωρία μέσω του κανόνα του Μπορν.

3.4 Η μεγάλη σύνθεση

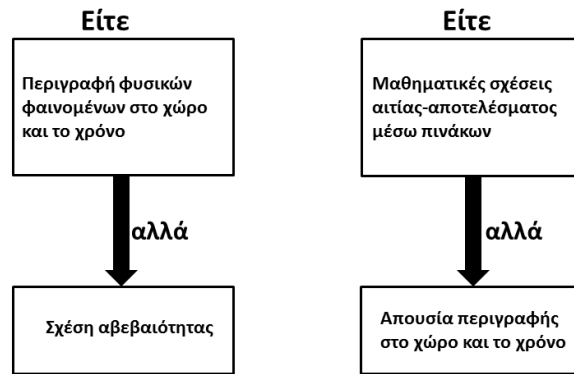
Η αρχή της αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ και η στατιστική ερμηνεία των κυματοσυναρτήσεων του Μπορν αποτέλεσαν τα τελευταία στοιχεία του παζλ για τη δημιουργία μιας ολοκληρωμένης κβαντικής θεωρίας. Ή μάλλον αυτός ήταν ο βασικός ισχυρισμός του Μπορν και της ομάδας του (της λεγόμενης *σχολής της Κοπεγχάγης*) στο 5ο συνέδριο του Σολβέυ (Solvay) στις Βρυξέλλες, τον Οκτώβριο του 1927, που παραδοσιακά θεωρείται ως το σημείο καμπής για την οριστικοποίηση της κβαντικής μηχανικής.

Στο τέλος της κοινής παρουσιάσής τους της μηχανικής πινάκων, ο Χάιζενμπεργκ και ο Μπορν ισχυρίστηκαν: «Υποστηρίζουμε ότι η κβαντική μηχανική είναι μία πλήρης θεωρία. Οι βασικές φυσικές και μαθηματικές υποθέσεις της δεν επιδέχονται άλλες μετατροπές». Αποδείχτηκε ότι είχαν δίκιο. Η σύγχρονη κβαντική θεωρία, έχει επεκτείνει και καθарίσει το μαθηματικό της φορμαλισμό, έχει περάσει από πειραματικό έλεγχο αδιανόητο για εκείνη την εποχή, αλλά επί της ουσίας θεμελιώνεται στο ίδιο πλαίσιο που παρουσιάστηκε το 1927. Με το τέλος του συνεδρίου, η μεγάλη πλειοψηφία των φυσικών είχε πλήρως υιοθετήσει την νέα θεωρία και την ερμηνεία της σχολής της Κοπεγχάγης που τη συνόδευε. Όμως αυτή η μεγάλη πλειοψηφία δεν συμπεριλάμβανε τον Αϊνστάιν, τον ντε Μπρέιγ και τον Σρέντινγκερ στις τάξεις της.

Το συνέδριο του Σολβέυ αποτέλεσε μία πλήρη δικαίωση για τον Μπορν και τη στάση που είχε διατηρήσει ως προς την κβαντική θεωρία από τότε που ξεκίνησε να σκέφτεται πάνω σε αυτή. Η επιμονή του ότι οι κανόνες της κλασικής φυσικής θα έπρεπε να εγκαταλειφθούν αποδείχτηκε ο σημαντικότερος παράγοντας στην ανάπτυξη της κβαντικής μηχανικής.

Το κεντρικό σημείο της σκέψης του Μπορν ήταν η σχέση μεταξύ της γλώσσας και πραγματικότητας. Καμία περιγραφή δεν μπορεί να εξαντλήσει το περιεχόμενο του κόσμου. Όλες οι περιγραφές είναι το πολύ μερικώς αληθείς. Το ίδιο ισχύει για το δυϊσμό κυμάτων και σωματιδίων: αποτελούν διαφορετικές απόπειρες ερμηνείας των πειραματικών δεδομένων. Τα κύματα υπογραμμίζουν τα συνεχή χωροχρονικά χαρακτηριστικά ενώ τα σωματίδια τα διακριτά και δυναμικά. Για τον Μπορν αυτές οι περιγραφές είναι *συμπληρωματικές*, δεν μπορούν να ισχύουν ταυτόχρονα. Η αρχή της αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ προσέφερε την ισχυρότερη απόδειξη του ότι δεν μπορεί να υπάρξουν ταυτόχρονα δύο συμπληρωματικές περιγραφές ενός φυσικού φαινομένου.

Η αρχή της συμπληρωματικότητας σχετίζεται με το γεγονός ότι μπορούμε να παρατηρήσουμε ένα φυσικό σύστημα μόνο αν αλληλεπιδράσουμε μαζί του. Οι νόμοι της κβαντικής θεωρίας καθιστούν αδύνατον τον ξεκάθαρο διαχωρισμό ενός ατομικού συστήματος από τη συσκευή που το μετρά. Το ίδιο σύστημα αν μετρηθεί σε διαφορετικά πειράματα θα εμφανίσει διαφορετικές ιδιότητες. Για αυτό



Σχήμα 3.4: Διαγραμματική περιγραφή της ιδέας της συμπληρωματικότητας κατά Μπορ. Προσαρμοσμένο από το βιβλίο κβαντομηχανικής του Χάιζενμπεργκ [48] .

το λόγο δεν μπορούμε να πούμε τίποτε για ένα μικροσκοπικό σύστημα αν δεν αναφερθούμε εκπεφρασμένα στην πειραματική διάταξη που χρησιμοποιείται για τη μέτρηση των ιδιοτήτων του.

Παρά τη σχεδόν καθολική αποδοχή της, η κβαντική μηχανική είχε ακόμα πολλά ανοιχτά ζητήματα, τόσο στη μαθηματική της θεμελίωση όσο και στη λογική συγκρότηση της διατύπωσής της. Τα σημαντικότερα βήματα σ' αυτήν την κατεύθυνση τα έκαναν ο Ντιράκ [49] και ο Γ. φον Νόιμαν (J. von Neumann) [50], οι οποίοι έθεσαν τη μηχανική πινάκων του Χάιζενμπεργκ και την κυματομηχανική του Σρέντινγκερ εντός ενός ενοποιημένου μαθηματικού πλαισίου. Σ' αυτό το πλαίσιο, σε κάθε φυσικό σύστημα αντιστοιχίζεται ένας διανυσματικός χώρος με εσωτερικό γινόμενο, ένας χώρος Χίλμπερτ (Hilbert) και όλες οι φυσικές αρχές της κβαντικής θεωρίας εκφράζονται βάσει μαθηματικών αντικειμένων που ορίζονται στο χώρο Χίλμπερτ.

Η μαθηματική περιγραφή με το χώρο Χίλμπερτ επιτρέπει την περιγραφή στη γλώσσα της κβαντικής θεωρίας συστημάτων πολύ πιο πολύπλοκων από αυτά με τα οποία ασχολήθηκαν οι ιδρυτές της θεωρίας. Επιτρέπει την κβαντική περιγραφή πεδίων και όχι μόνο σωματιδίων, την γενίκευση της κβαντικής θεωρίας σε ανοιχτά συστήματα, την ανάπτυξη μίας εξειδικευμένης θεωρίας κβαντικών μετρήσεων, τη δημιουργία μίας θεωρίας κβαντικής πληροφορικής και υπολογισμού. Επιπλέον επέτρεψε την όσμωση φυσικών και μαθηματικών ιδεών, η οποία οδήγησε στην περιγραφή της έννοιας της φυσικής συμμετρίας με τη γλώσσα της θεωρίας ομάδων και αναπαραστάσεων.

Στα επόμενα κεφάλαια θα παρουσιάσω τη βασική θεμελίωση της κβαντομηχανικής στο χώρο Χίλμπερτ με βάση 6 φυσικές αρχές. Αυτές οι αρχές αντιστοιχίζονται στις αρχές της κλασικής φυσικής που αναφέρθηκαν στο Κεφ. 1.5 και περιγράφονται στον πίνακα 3.2. Ωστόσο παρά τη μαθηματική απλότητα και την εσωτερική συνέπεια αυτής της θεμελίωσης, η κβαντική θεωρία δεν είναι επαρκώς ολοκληρωμένη ως φυσική θεωρία. Σε αντίθεση με οποιαδήποτε άλλη θεωρία της φυσικής, δεν είναι επακριβώς προσδιορισμένο σε τί φυσικές οντότητες αντιστοιχούν τα μαθηματικά αντικείμενα που εμπεριέχει. Υπάρχει μία ελάχιστη ερμηνεία η οποία επιτρέπει την πρόβλεψη όλων των πειραματικών δεδομένων, αλλά αν κανείς αποπειραθεί να φύγει από αυτή θα συναντήσει τεράστιες διαφωνίες και συγκρούσεις ακόμα και για το μικρότερο ερμηνευτικό ζήτημα. Υπό αυτήν την έννοια η κβαντική μηχανική δεν είναι τόσο μια κλειστή, λογικά συνεκτική θεωρία όσο ένας επιτυχημένος μαθηματικός φορμαλισμός.

Ερωτήσεις

1. Βεβαιωθείτε ότι κατανοείτε το βασικό επιχείρημα του Χάιζενμπεργκ για την εγκατάλειψη της έννοιας των σωματιδιακών τροχιών από την κβαντική θεωρία.

Φυσικό χαρακτηριστικό	Μαθηματική περιγραφή
Δυνατές καταστάσεις ενός συστήματος	Μιγαδικός χώρος Χίλμπερτ H
Παρατηρήσιμα μεγέθη	Αυτοσυζυγείς τελεστές στον H
Πιθανότητες για πειραματικά αποτελέσματα	Κανόνας του Μπορν
Χρονική εξέλιξη	Εξίσωση Σρέντινγκερ
Ενσωμάτωση πληροφορίας	Αναγωγή της κβαντικής κατάστασης
Σύζευξη υποσυστημάτων	Τανυστικό γινόμενο

Πίνακας 3.2: Βασικές αρχές της κβαντικής θεωρίας

- Εξηγήστε γιατί η κυματοσυνάρτηση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ δεν μπορεί να ερμηνευτεί ως φυσικό κύμα.
- Διατυπώστε τί ακριβώς είναι τα Δx και Δp στην αρχή της αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ.
- Περιγράψτε την ασυμμετρία χώρου-χρόνου στην κβαντική θεωρία, όπως εμφανίζεται στον κανόνα πιθανοτήτων του Μπορν.
- Τι μονάδες έχει η κυματοσυνάρτηση για ένα σωματίο που κινείται στο χώρο και τί μονάδες έχει το αντίστοιχο ρεύμα Σρέντινγκερ J_S ;

Ασκήσεις

- Στη μελέτη του ατόμου του υδρογόνου θεωρήσαμε τον πυρήνα ακίνητο. Θεωρείστε την εξίσωση του Σρέντινγκερ (3.47) για δυο σωματίια μάζας m και M με διανύσματα θέσης \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 αντίστοιχα. Δείξτε ότι αν το δυναμικό είναι της μορφής $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ παίρνουμε δύο ξεχωριστές εξισώσεις Σρέντινγκερ. Μία για το κέντρο μάζας \mathbf{r}_c που αντιστοιχεί σε κίνηση ελεύθερου σωματίου μάζας $m + M$ και μία για τη σχετική θέση $\mathbf{x} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ που αντιστοιχεί σε εξίσωση Σρέντινγκερ ενός σωματίου μάζας μ κάτω απ δυναμικό $V(\mathbf{x})$, όπου μ η ανηγμένη μάζα

$$\mu = \frac{Mm}{m + M}. \tag{3.64}$$

Αυτό σημαίνει ότι η κίνηση του πυρήνα λαμβάνεται υπόψη αν σε όλες τις εκφράσεις για το άτομο του υδρογόνου αντικαταστήσουμε τη μάζα του ηλεκτρονίου με την αντίστοιχη ανηγμένη μάζα.

- Έστω κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής μάζας m και γωνιακής συχνότητας ω σε μία διάσταση. Θεωρείστε τις Γκαουσιανές κυματοσυναρτήσεις

$$\psi(x, t) = C(t) \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} [x - q(t)]^2 + ip(t)x/\hbar \right]. \tag{3.65}$$

Δείξτε ότι οι κυματοσυναρτήσεις (3.65) ικανοποιούν τη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Σρέντινγκερ αν οι συναρτήσεις $q(t)$ και $p(t)$ ικανοποιούν τις εξισώσεις Χάμιλτον για αρμονικό ταλαντωτή.

Βιβλιογραφία

- Για την ιστορία της κβαντικής θεωρίας βλ. τη βιβλιογραφία του κεφ. 2. Επίσης βλ. τη διαδικτυακή έκθεση του American Institute of Physics για την αρχή της αβεβαιότητας [51]. Πολλές σημαντικές εργασίες από τα πρώτα χρόνια της κβαντικής θεωρίας έχουν ανατυπωθεί από τους Wheeler και Zurek [39]. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχουν οι διαλέξεις Νόμπελ των Χάιζενμπεργκ [52], Σρέντινγκερ [53] και Μπορν [54].
- Για τις ειδικές συναρτήσεις που εμφανίζονται στις λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ συνιστώ το βιβλίο του Bell [55].

- Για την πρώιμη ιστορία της αρχής της αβεβαιότητας, βλ. το εγκυκλοπαιδικό άρθρο των Hilgevoord και Uffink [56]. Για σύγχρονες περιγραφές, βλ. τη βιβλιογραφία του Κεφ. 6. Για την ερμηνεία της κβαντικής θεωρίας σύμφωνα με τη σχολή της Κοπεγχάγης, βλ. το βιβλίο του Χάιζενμπεργκ [44] και το εγκυκλοπαιδικό άρθρο του Faye [57].

Κεφάλαιο 4

Χώροι Χίλμπερτ και αρχή της επαλληλίας

Τα κβαντικά φαινόμενα δε συμβαίνουν στο χώρο Χίλμπερτ. Συμβαίνουν στο εργαστήριο.

A. Πέρες [58]

Από εδώ και στο εξής θα δουλεύουμε στο φυσικό σύστημα μονάδων όπου $\hbar = c = 1$.

4.1 Χώροι Χίλμπερτ

Η εισαγωγή του χώρου Χίλμπερτ ως βασικό μαθηματικό χώρο για την κβαντική θεωρία προέκυψε για τους παρακάτω λόγους.

Η εξίσωση Σρέντινγκερ είναι μία γραμμική διαφορική εξίσωση. Ικανοποιεί την αρχή της επαλληλίας: αν $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ και $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ είναι λύσεις της εξίσωσης τότε και η $c_1\psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\psi_2(\mathbf{r}, t)$ είναι λύση, για οποιουδήποτε μιγαδικούς αριθμούς c_1 και c_2 . Αυτό σημαίνει ότι οι λύσεις της εξίσωσης του Σρέντινγκερ ορίζουν έναν διανυσματικό χώρο. Η εμφάνιση του i στην εξίσωση του Σρέντινγκερ υποδεικνύει ότι αυτός ο διανυσματικός χώρος πρέπει να έχει μιγαδικούς συντελεστές. Η εισαγωγή ενός διανυσματικού χώρου υποδεικνύεται επίσης από τη θεωρία των πινάκων του Χάιζενμπεργκ, δεδομένου ότι οι πίνακες ορίζονται από τη δράση τους σε διανυσματικούς χώρους.

Οι εξισώσεις (3.50) σύνδεσης της κυματομηχανικής με τη μηχανική πινάκων χαρακτηρίζονται από εκφράσεις της μορφής $\int dx \psi^*(x)\phi(x)$ για διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ και $\phi(x)$. Ομοίως ο κανόνας του Μπορν οδηγεί σε ολοκληρώματα που περιέχουν το τετράγωνο $|\psi(x)|^2$ μιας κυματοσυνάρτησης. Οι εκφράσεις αυτές αντιστοιχούν σε ένα εσωτερικό γινόμενο στο διανυσματικό χώρο των κυματοσυναρτήσεων.

Συνοψίζοντας, οι αρχές της κβαντικής θεωρίας απαιτούν μία μαθηματική θεμελίωση στη βάση ενός μιγαδικού διανυσματικού χώρου με εσωτερικό γινόμενο. Αυτό ακριβώς είναι ένας χώρος Χίλμπερτ.

4.1.1 Διανυσματικοί χώροι

Ορισμός 4.1 Διανυσματικός χώρος V ως προς τους μιγαδικούς αριθμούς \mathcal{C} είναι ένα σύνολο V εφοδιασμένο

- με μια πράξη πρόσθεσης: $\phi, \chi \in V \rightarrow \phi + \chi \in V$, και
- με μια πράξη γινομένου ως προς τους μιγαδικούς: $\lambda \in \mathcal{C}, \phi \in V \rightarrow \lambda\phi \in V$,

έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι παρακάτω ιδιότητες.

1. Για κάθε $\phi, \chi, \psi \in V$ ισχύει $(\phi + \chi) + \psi = \phi + (\chi + \psi)$.
2. Για κάθε $\phi, \chi \in V$ ισχύει $\phi + \chi = \chi + \phi$.
3. Υπάρχει $0 \in V$ τέτοιο ώστε $\phi + 0 = \phi$, για κάθε $\phi \in V$.
4. Για κάθε $\phi \in V$, υπάρχει $-\phi \in V$, έτσι ώστε $\phi + (-\phi) = 0$.
5. Για κάθε $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbf{C}$, ισχύει $\lambda_1(\lambda_2\phi) = (\lambda_1\lambda_2)\phi$.
6. Για κάθε $\phi \in V$, $1\phi = \phi$.
7. Για κάθε $\lambda \in \mathbf{C}$ και $\phi, \chi \in V$ ισχύει $\lambda(\phi + \chi) = \lambda\phi + \lambda\chi$.
8. Για κάθε $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbf{C}$ ισχύει $(\lambda_1 + \lambda_2)\phi = \lambda_1\phi + \lambda_2\phi$.

Παρατήρηση. Καταχρηστικά χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο (0) και για τον αριθμό μηδέν και για το μηδενικό διάνυσμα του V .

Βάση σε ένα διανυσματικό χώρο V ονομάζεται ένα ελάχιστο υποσύνολο $B = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ του V , τέτοιο ώστε κάθε $\phi \in V$ μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των στοιχείων e_i του V , δηλαδή $\phi = \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i$, για κάποιους μιγαδικούς λ_i . Το ότι το B είναι ελάχιστο σύνολο, σημαίνει ότι αν αφαιρέσουμε ένα από τα διανύσματα του B τότε υπάρχουν $\phi \in V$ που δεν μπορούν να γραφούν ως γραμμικός συνδυασμός των υπόλοιπων διανυσμάτων του V .

Σε ένα διανυσματικό χώρο υπάρχουν πολλές διαφορετικές βάσεις. Ωστόσο όλες οι βάσεις περιέχουν το ίδιο πλήθος διανυσμάτων. Το πλήθος των στοιχείων μίας βάσης ενός διανυσματικού χώρου καλείται *διάσταση* του χώρου.

Το σημαντικότερο παράδειγμα διανυσματικού χώρου είναι ο χώρος \mathbf{C}^n , ο οποίος αποτελείται από διανύσματα στήλης με n μιγαδικά στοιχεία

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Μια προφανής βάση του \mathbf{C}^n αποτελείται από τα n διανύσματα

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots \quad e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

4.1.2 Εσωτερικό γινόμενο

Ορισμός 4.2 Εσωτερικό γινόμενο σε ένα μιγαδικό διανυσματικό χώρο V είναι μία συνάρτηση που απεικονίζει δύο διανύσματα $\phi, \psi \in V$ σε ένα μιγαδικό αριθμό (ϕ, ψ) έτσι ώστε,

- (i) για κάθε $\lambda \in \mathbf{C}$ και $\phi, \chi, \psi \in V$, $(\lambda\phi + \chi, \psi) = \lambda(\phi, \psi) + (\chi, \psi)$, (γραμμικότητα ως προς το πρώτο στοιχείο).
- (ii) για κάθε $\phi, \psi \in V$, $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$, (ερμιτιανότητα)
- (iii) για κάθε $\phi \in V$, $(\phi, \phi) \geq 0$. Επίσης $(\phi, \phi) = 0$ αν και μόνο αν $\phi = 0$. (θετικότητα)

Από τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου, προκύπτει αμέσως ότι το εσωτερικό γινόμενο είναι *αντιγραμμικό* ως προς το δεύτερο στοιχείο: $(\phi, \lambda\chi + \psi) = \lambda^*(\phi, \chi) + (\phi, \psi)$.

Με δεδομένο ότι έχουμε ορίσει το εσωτερικό γινόμενο,

- ορίζουμε το μέτρο $\|\phi\|$ ενός διανύσματος $\phi \in V$: $\|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)}$,
- ορίζουμε την απόσταση $D(\phi, \psi)$ δυο διανυσμάτων $\phi, \psi \in V$: $D(\phi, \psi) = \|\phi - \psi\|$,
- καλούμε κάθε διάνυσμα ϕ με μέτρο $\|\phi\| = 1$ μοναδιαίο ή κανονικοποιημένο,
- δύο διανύσματα ϕ και ψ που ικανοποιούν $(\phi, \psi) = 0$ καλούνται ορθογώνια, και
- δύο διανύσματα ϕ και ψ που ικανοποιούν $\phi = \lambda\psi$, για κάποιο μιγαδικό $\lambda \neq 0$ καλούνται συγγραμμικά.

4.1.3 Ορισμός του χώρου Χίλμπερτ

Ένας χώρος Χίλμπερτ είναι ένας διανυσματικός χώρος V με εσωτερικό γινόμενο. Αν ο διανυσματικός χώρος V είναι πεπερασμένων διαστάσεων, τότε δεν χρειάζεται κάτι περισσότερο για τον ορισμό. Όπως θα δούμε, ένας διανυσματικός χώρος V πεπερασμένης διάστασης ταυτίζεται με το χώρο C^n για κάποια τιμή του n .

Έστω δύο διανύσματα στήλης $\phi, \chi \in C^n$,

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix} \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \dots \\ \chi_n \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Το εσωτερικό τους γινόμενο ορίζεται ως

$$(\phi, \chi) = \sum_{i=1}^n \phi_i \chi_i^*. \quad (4.4)$$

Βέβαια, όπως είδαμε στο κεφ. 3, στην κβαντική θεωρία μας ενδιαφέρουν διανυσματικοί χώροι με διανύσματα που αντιστοιχούν σε συναρτήσεις $\psi(x)$. Τέτοιοι χώροι συναρτήσεων είναι όμως απειροδιάστατοι και σε τέτοιους χώρους χρειάζεται μία επιπλέον απαίτηση.

Ορισμός 4.3 Ένας χώρος Χίλμπερτ είναι ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος V με εσωτερικό γινόμενο, που επιπλέον είναι πλήρης.

Για ακριβή ορισμό της έννοιας της "πληρότητας", βλ. Ένθετο 4.1. Η βασική ιδέα είναι ότι ένας διανυσματικός χώρος V είναι πλήρης αν κάθε συγκλίνουσα ακολουθία διανυσμάτων ϕ_n του V έχει όριο που ανήκει στον V . Η συνθήκη της πληρότητας είναι απαραίτητη για να αποδειχθούν μερικά θεωρήματα για τους τελεστές σε χώρο Χίλμπερτ που είναι εξαιρετικά σημαντικά για τη φυσική. Εξασφαλίζει το μαθηματικό υπόβαθρο για την περιγραφή συνεχών ποσοτήτων όπως η θέση και η ορμή.

4.1.4 Παραδείγματα χώρων Χίλμπερτ

Ο χώρος ℓ^2 των τετραγωνικά αθροίσιμων ακολουθιών $\phi = \{\phi_i, i = 1, 2, \dots\}$, όπου $\sum_{i=1}^{\infty} |\phi_i|^2 < \infty$, είναι χώρος Χίλμπερτ με εσωτερικό γινόμενο $(\phi, \chi) = \sum_{i=1}^{\infty} \chi_i^* \phi_i$.

Ένα διάνυσμα του ℓ^2 συχνά αναπαρίσταται ως διάνυσμα στήλης με άπειρα στοιχεία.

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Ο χώρος $L^2(\mathbf{R}, dx)$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων $\psi(x)$ στο \mathbf{R} (συναρτήσεων που ικανοποιούν τη συνθήκη $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty$) είναι χώρος Χίλμπερτ με εσωτερικό γινόμενο

$$(\psi, \chi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) \chi^*(x). \quad (4.6)$$

Όπως είδαμε στο Κεφ. 3, στην εξίσωση του Σρέντινγκερ για σωματίο σε μία διάσταση εμφανίζεται η χρονική εξέλιξη μίας τέτοιας κυματοσυνάρτησης, οπότε στην κβαντομηχανική ο $L^2(\mathbf{R}, dx)$ αντιστοιχεί στην κίνηση σωματιδίου σε μία διάσταση.

Με παρόμοιο τρόπο ορίζονται και οι χώροι Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^n, d^n x)$ τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων σε n διαστάσεις. Ειδικότερα ο χώρος $L^2(\mathbf{R}^3, d^3 x)$ περιγράφει την κίνηση ενός σωματιδίου στο φυσικό χώρο.

Επίσης μπορούμε να ορίσουμε το χώρο Χίλμπερτ $L^2(U, d\mu(x))$ τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων για $U \subset \mathbf{R}^n$ με κάποιο μέτρο ολοκλήρωσης $d\mu(x)$. Ο $L^2(U, d\mu(x))$ εμπεριέχει όλες τις μιγαδικές συναρτήσεις $\phi(x)$ που ικανοποιούν τη συνθήκη

$$\int_U d\mu(x) |\phi(x)|^2 < \infty$$

και χαρακτηρίζονται από εσωτερικό γινόμενο

$$(\phi, \chi) = \int_U d\mu(x) \phi(x) \chi^*(x). \quad (4.7)$$

Όταν το μέτρο ολοκλήρωσης είναι προφανές, τότε δεν το γράφουμε. Οπότε χρησιμοποιούμε τον απλούστερο συμβολισμό $L^2(\mathbf{R}), L^2(\mathbf{R}^n)$, κοκ.

Χώροι Χίλμπερτ ορίζονται επίσης και με την απαίτηση συγκεκριμένων συνοριακών συνθηκών σε συναρτήσεις. Για παράδειγμα, ο χώρος Χίλμπερτ $L^2_D([0, a])$ αποτελείται από όλες τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις $\psi(x)$ στο διάστημα $[0, a]$ που ικανοποιούν συνθήκες Ντιρισλέ (Dirichlet) στα άκρα του: $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Το εσωτερικό γινόμενο είναι το (4.7) για $U = [0, a]$ και $d\mu = dx$.

Έστω V ένας χώρος Χίλμπερτ με εσωτερικό γινόμενο $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Οι συναρτήσεις $\phi : \mathbf{R} \rightarrow V$ που ικανοποιούν τη σχέση $\int dx \langle \phi(x), \phi(x) \rangle < \infty$ ορίζουν έναν γραμμικό χώρο, έστω \mathcal{H} . Ο \mathcal{H} είναι χώρος Χίλμπερτ με εσωτερικό γινόμενο

$$(\phi_1, \phi_2) = \int dx \langle \phi_1(x), \phi_2(x) \rangle. \quad (4.8)$$

και συμβολίζεται ως $L^2_V(\mathbf{R})$.

Ένθετο 4.1. Σύγκλιση στο χώρο Χίλμπερτ–Πληρότητα

Η μελέτη χώρων Χίλμπερτ άπειρης διάστασης απαιτεί ακριβή χρήση της έννοιας του ορίου. Σε ένα διανυσματικό χώρο V με εσωτερικό γινόμενο ορίζουμε τα εξής.

Ορισμός 4.4 Ισχυρό όριο μίας ακολουθίας $\{\phi_n | n = 1, 2, \dots\}$ διανυσμάτων του V είναι ένα διάνυσμα $\bar{\phi}$ του V το οποίο ικανοποιεί την εξής ιδιότητα. Για κάθε $\epsilon > 0$, υπάρχει ακέραιος N έτσι ώστε για $n > N$ να ισχύει $\|\phi_n - \bar{\phi}\| < \epsilon$.

Σύμφωνα με τον παραπάνω ορισμό, για να βρούμε αν συγκλίνει μια ακολουθία πρέπει να προσδιορίσουμε το όριο της. Ωστόσο, υπάρχει το κριτήριο σύγκλισης κατά Κωσύ (Cauchy), που δεν απαιτεί την πρότερη γνώση του ορίου.

Ορισμός 4.5 Σύγκλιση κατά Κωσύ. Μια ακολουθία $\{\phi_n | n = 1, 2, \dots\}$ διανυσμάτων του V συγκλίνει ισχυρά κατά Κωσύ αν για κάθε $\epsilon > 0$ υπάρχει ακέραιος N έτσι ώστε για $n, m > N$ να ισχύει $\|\phi_n - \phi_m\| < \epsilon$.

Εν γένει υπάρχει το ενδεχόμενο μία ακολουθία που συγκλίνει κατά Κωσύ να μην έχει όριο εντός του V . Για παράδειγμα, έστω ότι V είναι ο διανυσματικός χώρος των συνεχών συναρτήσεων πάνω στην ευθεία \mathbf{R} . Η ακολουθία $\phi_n(x) = \tanh(nx)/(1+x^2)$ έχει μέλη συναρτήσεις που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και συνεχείς, αλλά το όριο της είναι η συνάρτηση $\operatorname{sgn}(x)/(1+x^2)$ που δεν είναι συνεχής στο $x = 0$, άρα είναι έξω από το V .

Για να αποφύγουμε τέτοιου είδους παθολογικές συμπεριφορές ενσωματώνουμε στον ορισμό του χώρου Χίλμπερτ την απαίτηση της πληρότητας.

Ορισμός 4.6 Πλήρης καλείται ένας διανυσματικός χώρος V με εσωτερικό γινόμενο καλείται, αν κάθε ακολουθία διανυσμάτων $\{\phi_n \in V | n = 1, 2, \dots\}$ που συγκλίνει ισχυρά κατά Cauchy, έχει όριο $\bar{\phi} \in V$.

Σε ένα χώρο Χίλμπερτ πέρα από την έννοια της ισχυρής σύγκλισης ακολουθιών, υπάρχει και η έννοια της ασθενούς σύγκλισης, η οποία αποδεικνύεται πολύ χρήσιμη για την κβαντική περιγραφή συνεχών φυσικών μεγεθών.

Ορισμός 4.7 Ασθενές όριο μίας ακολουθίας $\{\phi_n | n = 1, 2, \dots\}$ διανυσμάτων του V είναι ένα διάνυσμα $\bar{\phi}$ του V το οποίο ικανοποιεί την εξής ιδιότητα. Για κάθε $\chi \in V$ και κάθε $\epsilon > 0$, υπάρχει ακέραιος N έτσι ώστε για $n > N$ να ισχύει $|(\phi_n, \chi) - (\bar{\phi}, \chi)| < \epsilon$.

Μία ακολουθία που συγκλίνει ισχυρά συγκλίνει και ασθενώς. Το αντίθετο δεν ισχύει. Για παράδειγμα, θεωρήστε την ακολουθία $\phi_n(x) = \sin(nx)$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2([0, 2\pi])$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμα συναρτήσεων στο διάστημα $[0, 2\pi]$ με εσωτερικό γινόμενο

$$(\phi, \chi) = \int_0^{2\pi} dx \phi(x) \chi^*(x). \quad (4.9)$$

Η ακολουθία ϕ_n δεν έχει κάποιο ισχυρό όριο στο $n \rightarrow \infty$. Ωστόσο για οποιαδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση $\chi(x)$ αποδεικνύεται ότι $\lim_{n \rightarrow \infty} (\phi_n, \chi) = 0$. Οπότε λέμε ότι η ακολουθία ϕ_n συγκλίνει ασθενώς στο 0.

4.2 Κβαντικές καταστάσεις

Ο χώρος Χίλμπερτ είναι ο θεμελιώδης χώρος της κβαντικής μηχανικής. Η σημασία του εκφράζεται από την παρακάτω αρχή.

Θεμελιώδης αρχή 1. Σε κάθε φυσικό σύστημα αντιστοιχεί ένας χώρος Χίλμπερτ και μπορούμε να αντιστοιχίζουμε καταστάσεις του συστήματος με διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ, τα καταστατικά διανύσματα.

Η παραπάνω αρχή προέκυψε ιστορικά από την εξίσωση του Σρέντινγκερ σε συνδυασμό με την αρχή του Μπορν. Ειδικότερα, η αρχή του Μπορν σημαίνει ότι μία κυματοσυνάρτηση περιέχει πληροφορία (πιθανότητες) για τα πιθανά ενδεχόμενα σε ένα φυσικό σύστημα *μία δεδομένη χρονική στιγμή*. Άρα ένα διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ αντιστοιχεί στην κατάσταση του συστήματος σε *μία δεδομένη χρονική στιγμή*.

Θα δούμε στο κεφ. 6 ότι η αρχή 1 απαιτεί τροποποίηση, δεδομένου ότι υπάρχουν καταστάσεις που δεν περιγράφονται από διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ, οι λεγόμενες *μικτές καταστάσεις*.

Στην αρχή 1, η έννοια της κατάστασης εμφανίζεται χωρίς να έχει οριστεί νωρίτερα. Είναι μία πρωτογενής έννοια της θεωρίας, υπό την εξής έννοια.

”Όταν ξεκινούμε να διατυπώσουμε μία θεωρία, ξεχωρίζουμε πρώτα μια μικρή ομάδα εκφράσεων της θεωρίας που μας φαίνονται άμεσα κατανοήσιμες. Τις εκφράσεις αυτής της ομάδας τις αποκαλούμε πρωτογενείς όρους, και τις χρησιμοποιούμε χωρίς να εξηγούμε το νόημα τους. Ταυτόχρονα

υιοθετούμε την αρχή να μη χρησιμοποιούμε καμία άλλη έκφραση της θεωρίας αν δεν έχει καθοριστεί το νόημά της σε σχέση με τους πρωτογενείς όρους....”[59]

Με άλλα λόγια η έννοια της κατάστασης δεν ορίζεται, αλλά θεωρείται ότι είναι κατανοητή εκ προοιμίου ή από τη χρήση της. Μπορεί να επιδειχθεί, ή να περιγραφεί, αλλά όχι να οριστεί.

Η έννοια του φυσικού συστήματος είναι επίσης πρωτογενής της κβαντικής θεωρίας. Δεν ορίζεται, αλλά έχουμε μία διαισθητική αντίληψη τί σημαίνει φυσικό σύστημα χωρίς επεξηγήσεις, ώστε να αισθανόμαστε ότι δε χρειαζόμαστε ακριβή ορισμό. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, το περίεργο με την έννοια της κβαντικής κατάστασης είναι ότι, παρότι είναι πρωτογενής έννοια της θεωρίας δεν είμαστε σίγουροι για την ακριβή σημασία της, δεδομένου ότι αυτή προέκυψε για να ερμηνεύσει την προϋπάρχουσα μαθηματική διατύπωση της κβαντικής θεωρίας.

Στη φυσική, η έννοια της κατάστασης πρωτοεμφανίζεται στη στατιστική μηχανική του Γκιμπς. Στην κλασική μηχανική, η *μικροκατάσταση* αντιστοιχεί σε ένα σημείο του χώρου των φάσεων, δηλαδή στον προσδιορισμό των θέσεων και των ορμών κάθε σωματιδίου που αποτελεί το σύστημα. Αυτή είναι και η πιο πλήρης γνώση που μπορούμε να έχουμε για ένα κλασικό σύστημα και επαρκεί για να λύσουμε τις εξισώσεις Χάμιλτον και να βρούμε την εξέλιξη του συστήματος στο χρόνο. Στη κβαντική θεωρία, η αρχή της αβεβαιότητας καθιστά αυτήν την έννοια της κατάστασης μη εφαρμόσιμη.

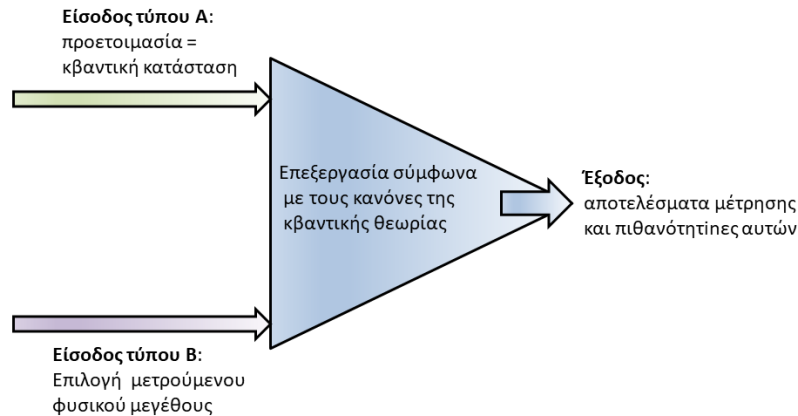
Οι κβαντικές καταστάσεις επ’ ουδενί δεν είναι ανάλογες των μικροκαταστάσεων. Οι μικροκαταστάσεις αντιστοιχούν σε αμοιβαία αποκλειόμενα ενδεχόμενα. Αν ένα σύστημα βρίσκεται στην μικροκατάσταση ξ_1 καμία μέτρηση δεν μπορεί να το βρει σε μία μικροκατάσταση ξ_2 . Σε αντίθεση, στην κβαντική θεωρία αν ένα σύστημα περιγράφεται από ένα διάνυσμα ψ_1 ενός χώρου Χίλμπερτ, υπάρχει μη μηδενική πιθανότητα να ‘βρεθεί’ σε διάνυσμα ψ_2 από μία μέτρηση (στα επόμενα κεφάλαια θα δούμε τι ακριβώς σημαίνει αυτό). Γι’ αυτό το λόγο είναι λάθος να αντιμετωπίζεται ο χώρος Χίλμπερτ ως ένας καταστατικός χώρος. Αυτή η σύγχυση μεταξύ της κλασικής και της κβαντικής έννοιας της κατάστασης υποκρύπτεται πίσω από πολλά “παράδοξα” της κβαντικής θεωρίας.

**Ο χώρος Χίλμπερτ δεν είναι καταστατικός χώρος.
Τα διανύσματά του δεν περιγράφουν μικροκαταστάσεις.**

Υπό αυτήν την έννοια δεν μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η κβαντική κατάσταση είναι ένα πλήρως αντικειμενικό χαρακτηριστικό ενός φυσικού συστήματος. Από την άλλη μεριά, σίγουρα δεν είναι μία αμιγώς υποκειμενική οντότητα: δεν περιγράφει μόνο τη γνώση που εμείς έχουμε γι’ αυτό το σύστημα. Όπως θα δούμε στο Κεφ. 9, η κβαντική κατάσταση μπορεί να αλλάζει ακόμα και όταν η γνώση μας παραμένει ίδια.

Ένας καλύτερος προσδιορισμός της έννοιας της κβαντικής κατάστασης είναι να πούμε ότι η κβαντική κατάσταση είναι το αντικείμενο που ενσωματώνει την *πληροφορία που αφορά την προετοιμασία ενός συστήματος* πάνω στο οποίο θα κάνουμε μετρήσεις, με τρόπο που είναι συμβατός με την κβαντική του φύση. Δηλαδή μία κατάσταση αντιστοιχεί σε έναν ξεχωριστό τρόπο με τον οποίο μπορούμε να προετοιμάσουμε ένα φυσικό σύστημα στο εργαστήριο ή με έναν ξεχωριστό και αναγνωρίσιμο τρόπο με τον οποίο αυτό το σύστημα εμφανίζεται στη φύση. Όταν λέμε *πληροφορία*, εννοούμε τις πιθανότητες για οποιαδήποτε μέτρηση μπορεί να γίνει στο σύστημα και άρα όλες τις φυσικές προβλέψεις.

Μπορεί κανείς να περιγράψει ένα φυσικό πείραμα ως ανάλογο μίας διαδικασίας εισόδου-εξόδου. Τα δεδομένα εισόδου είναι δύο ειδών. Η είσοδος τύπου A είναι όλες οι δράσεις που έγιναν στο φυσικό σύστημα πριν την πράξη της μέτρησης. Κωδικοποιείται με τον προσδιορισμό μίας κβαντικής κατάστασης. Η είσοδος τύπου B είναι ποια μέτρηση αποφασίσαμε να κάνουμε στο φυσικό σύστημα. Όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, η πληροφορία για τη μέτρηση κωδικοποιείται μέσω τελεστών στο χώρο Χίλμπερτ. Η έξοδος είναι όλα τα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης, μαζί πιθανότητες για αυτά όπως προβλέπονται από την κβαντική θεωρία. Η έξοδος λαμβάνεται από την επεξεργασία της



Σχήμα 4.1: Η κβαντική θεωρία ως μία διεργασία εισόδου-εξόδου.

κωδικοποιημένης εισόδου, δηλαδή από μαθηματικές δράσεις πάνω στην κβαντική κατάσταση και στους τελεστές που περιγράφουν τη μέτρηση. Η κβαντική θεωρία σου λέει πώς πρέπει να κωδικοποιήσεις την πληροφορία των δύο τύπων εισόδου και τους κανόνες με τους οποίους θα πάρεις με μοναδικό τρόπο την έξοδο εφόσον προσδιοριστεί η είσοδος¹.

Η παραπάνω είναι μια έννοια της κατάστασης ενός κβαντικού συστήματος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί ευρέως και επιτυχημένα, χωρίς να συναντήσει δυσκολίες που να την ακυρώνουν. Ως τέτοια είναι και κοινώς αποδεκτή, τουλάχιστον ως αρχική βάση συζήτησης. Οποιαδήποτε άλλη αντίληψη της έννοιας της κατάστασης πρέπει να τη συμπεριλαμβάνει, προσθέτοντας ενδεχομένως επιπλέον χαρακτηριστικά. Συνήθως όμως τα επιπλέον χαρακτηριστικά είναι από αμφισβητήσιμα ως προβληματικά. Οπότε συνίσταται στον αναγνώστη να υιοθετήσει, σε πρώτη φάση, τον παραπάνω προσδιορισμό της κβαντικής κατάστασης. Σ' αυτή τη φάση, άλλοι τρόποι σκέψης για την κβαντική κατάσταση μπορούν εύκολα να οδηγήσουν σε φυσικά ή εννοιολογικά προβλήματα. Θα επανέλθουμε στο θέμα της ερμηνείας της κβαντικής κατάστασης στο Κεφ. 7.

Στη βάση της θεμελιώδους αρχής 1, θα χρησιμοποιούμε τους όρους "κατάσταση" και "καταστατικό διάνυσμα" ως συνώνυμους. Θα αποκαλούμε έτσι συχνά καταστάσεις τα διανύσματα ενός χώρου Χίλμπερτ που περιγράφει ένα φυσικό σύστημα.

4.3 Η αρχή της επαλληλίας

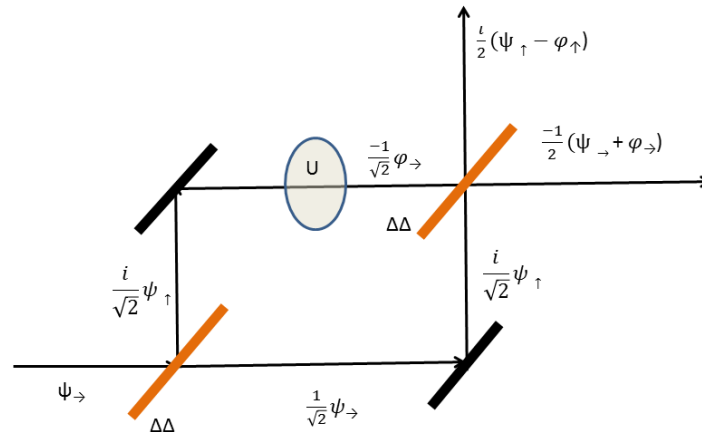
4.3.1 Διατύπωση της αρχής

Η επιλογή του χώρου Χίλμπερτ ως βασικού χώρου της κβαντικής θεωρίας ενσωματώνει την αρχή της επαλληλίας, η οποία διατυπώνεται ως εξής.

Κβαντική αρχή της επαλληλίας. Έστω ένα σύστημα που περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Αν $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ είναι διανύσματα που αντιστοιχούν σε δύο διαφορετικές καταστάσεις ενός συστήματος, τότε και το $\lambda\psi + \phi$ (για $\lambda \in \mathbb{C}$) αντιστοιχεί σε μία κατάσταση αυτού του συστήματος.

Με βάση την προηγούμενη συζήτησή μας για την ερμηνεία της κβαντικής κατάστασης ως αντιστοιχούσα στην προετοιμασία ενός συστήματος, η αρχή της επαλληλίας αποτελεί έναν πολύ σημαντικό ισχυρισμό, πολύ γενικότερο από την απλή μορφή της στην εξίσωση του Σρέντινγκερ.

¹Με τον ίδιο τρόπο, η έννοια της μέτρησης σε κλασικά συστήματα, όπως δίνεται στο Κεφ. 1.5.3, μπορεί κι αυτή να περιγραφεί ως διαδικασία εισόδου-εξόδου.



Σχήμα 4.2: Το συμβολόμετρο Μαχ-Τσέντερ αποτελείται από δύο συνήθη κάτοπτρα και δύο ημιαργυρωμένα κάτοπτρα (διασπαστές δέσμης). Εισερχόμενα φωτόνια με καταστατικό διάνυσμα ψ_{\rightarrow} εξέρχονται με καταστατικό διάνυσμα είτε ανάλογο του $\psi_{\rightarrow} + \phi_{\rightarrow}$ είτε ανάλογο του $\psi_{\uparrow} - \phi_{\uparrow}$.

Η αρχή της επαλληλίας μας λέει ότι αν μπορούμε να προετοιμάσουμε ένα σύστημα σε μία κατάσταση που αντιστοιχεί σε διάνυσμα ψ και σε μία που αντιστοιχεί σε διάνυσμα ϕ , τότε μπορούμε να το προετοιμάσουμε και σε κατάσταση που αντιστοιχεί στο διάνυσμα $\psi + \phi$. Αν οι ψ και ϕ αντιστοιχούν σε σαφή τιμή ενέργειας, τότε μπορούμε να προετοιμάσουμε καταστάσεις επαλληλίας της ενέργειας, αν οι ψ και ϕ αντιστοιχούν σε σαφή τιμή της θέσης ενός σωματιδίου, τότε μπορούμε να προετοιμάσουμε καταστάσεις επαλληλίας της θέσης, κοκ. Η κβαντική θεωρία όμως δε μας λέει πώς θα προετοιμαστεί μία συγκεκριμένη κατάσταση: αυτό επαφίεται στις εκάστοτε τεχνολογικές δυνατότητες και βεβαίως στις δεξιότητες του πειραματικού φυσικού που θα το επιχειρήσει.

Τονίζουμε ότι μία κατάσταση επαλληλίας $\psi + \phi$ δεν χαρακτηρίζεται από ιδιότητες ενδιάμεσες μεταξύ των καταστάσεων ψ και ϕ . Αν για παράδειγμα όλες οι μετρήσεις στην κατάσταση ψ δίνουν την ίδια τιμή της ενέργειας E_1 και όλες οι μετρήσεις στην κατάσταση ϕ δίνουν την ίδια τιμή της ενέργειας E_2 , αυτό επ' ουδενί δε σημαίνει ότι μετρήσεις στην κατάσταση $\psi + \phi$ θα δίνουν τιμές της ενέργειας ενδιάμεσες μεταξύ E_1 και E_2 . Τα αποτελέσματα των μετρήσεων στην κατάσταση $\psi + \phi$ θα είναι είτε E_1 είτε E_2 και η σχετική τους αναλογία θα προσδιορίζεται από μία κατανομή πιθανοτήτων.

4.3.2 Κατασκευή καταστάσεων επαλληλίας

Σε πολλά φυσικά συστήματα έχουν αναπτυχθεί ειδικές τεχνικές για την κατασκευή καταστάσεων επαλληλίας. Συχνά οι αντίστοιχες πειραματικές διατάξεις καλούνται *συμβολόμετρα*, επειδή χρησιμοποιούνται για την παρατήρηση φαινομένων συμβολής, κατά αναλογία με το πείραμα των δύο οπών. Ένα από τα πιο συχνά χρησιμοποιούμενα συμβολόμετρα σε οπτικά συστήματα είναι το συμβολόμετρο Μαχ-Τσέντερ (Mach-Zehnder), το οποίο απεικονίζεται στο σχήμα 4.2.

Το συμβολόμετρο Μαχ-Τσέντερ αποτελείται από δύο κάτοπτρα και δύο διασπαστές δέσμης (beam splitter). Ο διασπαστής δέσμης είναι ένα οπτικό σύστημα που αντανακλά ένα ποσοστό των προσπίπτοντων φωτονίων (συνήθως 50%) και αφήνει να περάσει χωρίς αλλαγή. Συνήθως ως διασπαστές δέσμης χρησιμοποιούνται ημιαργυρωμένα κάτοπτρα, δηλαδή γυάλινες πλάκες με ένα λεπτό επίστρωμα είτε μετάλλου είτε διηλεκτρικού. Επιλέγοντας κατάλληλα το είδος του επιστρώματος μπορούμε να αλλάξουμε τις βασικές ιδιότητες του διασπαστή δέσμης. Η παρουσία ενός διασπαστή δέσμης (ή ενός κατόπτρου) σε μία πειραματική διάταξη λειτουργεί ως ένας μετασχηματισμός των καταστατικών διανυσμάτων των φωτονίων. Εδώ θα θεωρήσουμε διασπαστές δέσμης και κάτοπτρα που αντιστοιχούν στις ακόλουθες δράσεις στα καταστατικά διανύσματα.

Έστω κατευθύνσεις διάδοσης ενός φωτονίου ως \rightarrow (οριζόντια) και \uparrow (κάθετη). Ένα κάτοπτρο (υπό γωνία 45°) αλλάζει την κατεύθυνση διάδοσης κατά 90° , αφού σύμφωνα με το νόμο της ανάκλασης η γωνία πρόσπτωσης είναι ίση με τη γωνία ανάκλασης. Θεωρούμε ότι επίσης αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό με μία φάση i στο καταστατικό διάνυσμα. Δηλαδή ένα κάτοπτρο αντιστοιχεί στους ακόλουθους μετασχηματισμούς

$$\psi_{\rightarrow} \rightarrow i\psi_{\uparrow}, \quad \psi_{\uparrow} \rightarrow i\psi_{\rightarrow}. \quad (4.10)$$

Ένα ημιαργυρωμένο κάτοπτρο αφήνει τα μισά σωμάτια να περάσουν χωρίς αλλαγή στο καταστατικό τους διάνυσμα, ενώ τα άλλα μισά ανακλώνται με βάση τον κανόνα (4.10). Οπότε συνολικά δρα ως

$$\psi_{\rightarrow} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(i\psi_{\uparrow} + \psi_{\rightarrow}), \quad \psi_{\uparrow} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\uparrow} + i\psi_{\rightarrow}), \quad (4.11)$$

όπου θεωρούμε ότι $(\psi_{\rightarrow}, \psi_{\rightarrow}) = (\psi_{\uparrow}, \psi_{\uparrow}) = 1$ και $(\psi_{\rightarrow}, \psi_{\uparrow}) = 0$. Ο παράγοντας $1/\sqrt{2}$ μπαίνει έτσι ώστε ο μετασχηματισμός να διατηρεί το μέτρο των διανυσμάτων.

Έστω ότι έχουμε έναν τρόπο δράσης U πάνω στο διάνυσμα ψ_{\rightarrow} που το μετατρέπει σε ένα διάνυσμα ϕ_{\rightarrow} που αντιστοιχεί σε κίνηση προς την ίδια κατεύθυνση. (Για παράδειγμα το U μπορεί να αντιστοιχεί σε στροφή του διανύσματος της πόλωσης επειδή το φωτόνιο περνάει από ένα οπτικά ενεργό υλικό.) Με βάση τους παραπάνω κανόνες, το σχήμα 4.1 επιδεικνύει ότι αν τα εισερχόμενα φωτόνια στο σύστημα χαρακτηρίζονται από καταστατικό διάνυσμα ψ_{\rightarrow} , έχουμε δύο δυνατές καταστάσεις για τα εξερχόμενα φωτόνια, την $\frac{-1}{2}(\psi_{\rightarrow} + \phi_{\rightarrow})$ και την $\frac{i}{2}(\psi_{\rightarrow} - \phi_{\rightarrow})$. Δηλαδή αν εμείς έχουμε τρόπο να επιτυγχάνουμε το μετασχηματισμό $U : \psi_{\rightarrow} \rightarrow \phi_{\rightarrow}$ μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το συμβολόμετρο Μαχ-Τσέντερ για να προετοιμάσουμε το σύστημα σε επαλληλίες των καταστάσεων ψ και ϕ .

Από την παραπάνω ανάλυση βλέπουμε ότι το πιο σημαντικό στοιχείο για τη δημιουργία καταστάσεων επαλληλίας στο εργαστήριο είναι οι διασπαστές δέσμης. Όπως είδαμε, σε οπτικά συστήματα οι διασπαστές δέσμης αντιστοιχούν σε ημιαργυρωμένα κάτοπτρα. Ειδικά κατασκευασμένοι κρύσταλλοι μπορούν να λειτουργήσουν ως διασπαστές δέσμης για νετρόνια, ενώ η δράση ενός κατάλληλου ηλεκτρικού πεδίου μπορεί να λειτουργήσει ως διασπαστής δέσμης για ηλεκτρόνια.

4.3.3 Κανόνες υπερεπιλογής.

Γνωρίζουμε ότι η αρχή της επαλληλίας έχει όρια. Η ύπαρξη συγκεκριμένων καταστάσεων επαλληλίας θα οδηγούσε σε παραβίαση νόμων της φυσικής που θεωρούμε θεμελιώδεις. Συγκεκριμένα, δεν μπορούμε να κατασκευάσουμε επαλληλίες καταστάσεων με διαφορετικές τιμές του ηλεκτρικού φορτίου. Δηλαδή δεν μπορεί να υπάρξει επαλληλία της κατάστασης $\psi_{5e} = "5 \text{ ηλεκτρόνια}"$ με την κατάσταση $\psi_{7e} = "7 \text{ ηλεκτρόνια}"$.

Ο λόγος είναι ότι αν υπάρχουν τέτοιες επαλληλίες παραβιάζεται η αρχή διατήρηση του φορτίου. Αν υπάρχει μία πηγή που παράγει σωμάτια σε κατάσταση $\psi_{5e} + \psi_{7e}$, τότε κάποιες φορές θα μετράμε φορτίο $5e$ και κάποιες φορές $7e$. Κι αυτό παρότι όλες οι συνθήκες παραγωγής των συστημάτων είναι ακριβώς οι ίδιες, ενώ οι μετρήσεις του φορτίου γίνονται χωρίς να προστεθεί ή να αφαιρεθεί φορτίο στο σύστημα. Αυτό καταρχάς φαίνεται διαισθητικά αντίθετο στη λογική της αρχής διατήρησης του φορτίου. Επίσης, πειραματικά δεν έχει παραχθεί ποτέ παρόμοια κατάσταση. Δεχόμαστε λοιπόν την απουσία επαλληλιών μεταξύ καταστάσεων με διαφορετικό συνολικό φορτίο: αυτή η θέση καλείται *κανόνας υπερεπιλογής* για το ηλεκτρικό φορτίο. Στο κεφ. 8 εξηγούμε πώς οι κανόνες υπερεπιλογής ορίζουν μία κβαντική έννοια διατηρήσιμων ποσοτήτων.

4.3.4 Καταστάσεις γάτας του Σρέντινγκερ

Ένα πολύ σημαντικό ανοικτό ερώτημα στην κβαντική θεωρία είναι κατά πόσο είναι εφικτές οι επαλληλίες καταστάσεων μια διαφορετικά μακροσκοπικά χαρακτηριστικά. Η συζήτηση πάνω σ' αυτό το θέμα ξεκινάει από ένα άρθρο του Σρέντινγκερ [60], στο οποίο ασκούσε κριτική στην κβαντική θεωρία.

“Μία γάτα κλείνεται σε ένα ατσάλινο θάλαμο μαζί με την ακόλουθη συσκευή (που πρέπει να ασφαλιστεί ώστε να μην τη χαλάσει η γάτα): σε ένα μετρητή Γκάιγκερ υπάρχει ένα μικρό κομμάτι ραδιενεργού υλικού, τόσο μικρό ώστε στη διάρκεια μιας ώρας η πιθανότητα να διασπαστεί ένα από τα άτομα είναι $\frac{1}{2}$, όση και να μη διασπαστεί κανένα. Αν διασπαστεί, η δίοδος του μετρητή εκκενώνεται ηλεκτρικά και μέσω ενός ρελέ απασφαλίζει ένα σφυρί, το οποίο σπάει ένα φιαλίδιο με υδροκυάνιο. Αν κανείς αφήσει το σύστημα μόνο του για μια ώρα, μπορεί να πει ότι η γάτα ζει αν δεν έχει διασπαστεί κανένα άτομο. Το καταστατικό διάνυσμα του συστήματος εκφράζει τα παραπάνω περιέχοντας και τη ζωντανή και την ψόφια γάτα (αν μου επιτρέπεται η έκφραση) σε μία επαλληλία ίσου βάρους.

Είναι χαρακτηριστικό σ' αυτές τις περιπτώσεις ότι η αβεβαιότητα που αρχικά περιορίζεται στον κόσμο του ατόμου μετασχηματίζεται σε μακροσκοπική αβεβαιότητα, η οποία αναλύεται από άμεση παρατήρηση...”

Δεν υπάρχει τίποτα στην κβαντική θεωρία που να απαγορεύει τη δημιουργία επαλληλιών στο μακροσκοπικό επίπεδο. Είναι τεχνικά δύσκολο καθώς το περιβάλλον (π.χ. τα μόρια του αέρα) τείνει να καταστρέφει τέτοιες επαλληλίες σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα, αλλά σε επίπεδο πρώτων αρχών η κατάσταση επαλληλίας ζωντανής και νεκρής γάτας είναι αποδεκτή. Αυτό δε σημαίνει ότι η γάτα είναι σε μια ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ ζωής και θανάτου. Είναι είτε ζωντανή είτε νεκρή και το καταστατικό διάνυσμα δίνει τις πιθανότητες για κάθε ένα από τα δύο ενδεχόμενα. Η θεώρηση μιας ενδιάμεσης κατάστασης μεταξύ ζωής και θανάτου για τη γάτα προέρχεται από τη λανθασμένη αντίληψη ότι το καταστατικό διάνυσμα περιγράφει μία μικροκατάσταση σαν αυτές τις κλασικής θεωρίας.

Δεν υπάρχει κανένα παράδοξο όσο θεωρούμε ότι το καταστατικό διάνυσμα απλά περιέχει πληροφορία για τα αποτελέσματα των μετρήσεων σε ένα φυσικό σύστημα και δεν επιχειρούμε να το δούμε ως ένα αντικειμενικό χαρακτηριστικό του φυσικού συστήματος. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η κβαντική κατάσταση περιέχει τις πιθανότητες για το αν η γάτα μέσα στο κουτί είναι ζωντανή ή νεκρή και τίποτα παραπάνω.

Αν όμως θεωρήσουμε ότι το καταστατικό διάνυσμα αντιστοιχεί σε κάτι πραγματικό και αντικειμενικό, η δυνατότητα ύπαρξης της γάτας του Σρέντινγκερ δημιουργεί παράδοξα. Ανάλογα με το αν παρατηρήσουμε τη γάτα ζωντανή ή νεκρή θα έχουμε άλλη αντίδραση, οπότε θα δημιουργηθεί μία κατάσταση επαλληλίας και στις σκέψεις ή τα συναισθήματά μας. Αυτή η συναισθηματική κατάσταση επηρεάζει και τις επόμενες δράσεις μας, για παράδειγμα το αν θα αποφύγουμε ή όχι ένα ατύχημα με το αυτοκίνητο.

Το θέμα είναι ότι δεν υπάρχει τρόπος να περιοριστεί αυτή η επαλληλία διαφορετικών μακροσκοπικών καταστάσεων, αντίθετα θα διαδίδεται σε ολοένα και περισσότερα ενδεχόμενα. Δε φαίνεται να υπάρχει όριο σ' αυτή τη δημιουργία επαλληλιών. Στο τέλος θα αναγκαστούμε να μιλήσουμε για τις επαλληλίες που εμφανίζονται στο καταστατικό διάνυσμα του όλου σύμπαντος. Αυτό όμως θα είναι τόσο γεμάτο επαλληλιών από μακροσκοπικά διακριτές καταστάσεις, πού τίθεται το ερώτημα πώς μπορεί να συμβιβαστεί με την καθημερινότητα, όπου τέτοιες επαλληλίες δεν τις βλέπουμε σε μακροσκοπικό επίπεδο. Απαιτείται δηλαδή μια εξήγηση του πώς μπορεί και εμφανίζεται η κλασική συμπεριφορά που παρατηρούμε, ενώ η κβαντική θεωρία μας λέει ότι οι περιεργες επαλληλίες είναι ο κανόνας και όχι η εξαίρεση.

Εναλλακτικά μπορεί κανείς να θεωρήσει ότι υπάρχει κάποιο όριο στην ισχύ της αρχής της επαλληλίας. Όπως θα δούμε στο Κεφ. 9, αν κανείς θεωρήσει το καταστατικό διάνυσμα ως αντικειμενικό

χαρακτηριστικό ενός συστήματος, τότε η συνεπής περιγραφή της διαδικασίας της μέτρησης απαιτεί την παραβίαση της αρχής της επαλληλίας, ενδεχομένως στο επίπεδο των μακροσκοπικών μετρητικών συσκευών. Αυτό για πολλούς σημαίνει ότι ίσως υπάρχει μία (άγνωστη) φυσική συνθήκη που απαγορεύει τις επαλληλίες καταστάσεων με διαφορετικές μακροσκοπικές ιδιότητες, από ένα βαθμό "μακροσκοπικότητας" και πέρα².

Αυτή η θέση καλείται *μακρορεαλισμός* και έρχεται σε αντίθεση με τη συνήθη μορφή της κβαντικής θεωρίας που δεν ξεχωρίζει τις μακροσκοπικές από τις μικροσκοπικές επαλληλίες ως ουσιωδώς διαφορετικές. Τυχόν επιβεβαίωση του μακρορεαλισμού θα σηματοδοτούσε την πρώτη πειραματική διαπίστωση παραβίασης της κβαντικής θεωρίας. Γι' αυτό το λόγο η κατασκευή καταστάσεων γάτας³ στο εργαστήριο αποτελεί ένα σημαντικό ζήτημα της σύγχρονης έρευνας: οδηγεί στον έλεγχο της κβαντικής θεωρίας σε ένα ανεξερεύνητο σύνορο της. Μερικά σημαντικά πειράματα σχηματισμού καταστάσεων γάτας παρουσιάζονται στο Ένθετο 4.2.

Συνοψίζοντας, δεν είναι δεδομένο ότι κάθε διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ αντιστοιχεί σε μία φυσικά πραγματοποιήσιμη κατάσταση. Επίσης ξέρουμε ότι το αντίστροφο δεν ισχύει: υπάρχουν καταστάσεις (προετοιμασίες του συστήματος) που δεν περιγράφονται από καταστατικά διανύσματα, αλλά από γενικότερα μαθηματικά αντικείμενα, τις *μήτρες πυκνότητας*. Θα αναφερθούμε σ' αυτές διεξοδικά στο Κεφ. 7.

Ένθετο 4.2. Καταστάσεις γάτας του Σρέντινγκερ στο εργαστήριο.

Παρουσιάζουμε μερικά σημαντικά πειράματα δημιουργίας καταστάσεων επαλληλίας στο εργαστήριο.

1. Το 1996, η ομάδα του Σ. Αρός (S. Haroche) στο Παρίσι [61] σχημάτισαν μία επαλληλία διαφορετικών καταστάσεων του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου $\psi = c_1\alpha + c_2\beta$, όπου α και β αντιστοιχούν στο πλάτος ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος μέσα σε μία κοιλότητα. Οι καταστάσεις α και β διαφέρουν μεταξύ τους κατά 5-10 φωτόνια.
2. Πάλι το 1996, η ομάδα του Ντ. Ουάινλαντ (D. J. Wineland) στο Κολοράντο των ΗΠΑ [62] κατασκεύασε μία κατάσταση επαλληλίας ενός ιόντος Be^+ της μορφής $\psi(\mathbf{x}) = [\psi_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) + \psi_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)]/\sqrt{2}$, όπου ψ_σ είναι ένα κυματοπακέτο εύρους σ με κέντρο γύρω από το $\mathbf{x} = 0$. Στο συγκεκριμένο πείραμα η απόσταση των κέντρων των δύο κυματοπακέτων ήταν $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| \simeq 80nm$, πολύ μεγαλύτερη τόσο από το εύρος του κάθε κυματοπακέτου $\sigma \simeq 7nm$, όσο και από το μέγεθος του ιόντος (περίπου 0, 1nm). Αυτή η περίπτωση αντιστοιχεί σε μία μεσοσκοπική γάτα του Σρέντινγκερ.
3. Το 2000 και το 2002 δύο ομάδες, μία στο Ντελφτ της Ολλανδίας [63] και μία στο Στόνι Μπρουκ των ΗΠΑ [64] κατασκεύασαν καταστάσεις που αντιστοιχούν σε επαλληλία καταστάσεων με διαφορετικές τιμές του ηλεκτρικού ρεύματος σε ένα κύκλωμα υπεραγωγού. Συγκεκριμένα η μία κατάσταση αντιστοιχεί σε ένα ρεύμα μερικών μA προς μία κατεύθυνση και η άλλη με το ίδιο ρεύμα προς αντίθετη κατεύθυνση. Η αρχική εκτίμηση ήταν ότι σε κάθε κατάσταση ρεύματος συνεισφέρουν περίπου 10^{10} ηλεκτρόνια, ωστόσο υπάρχουν επιχειρήματα ότι ο πραγματικός αριθμός των ηλεκτρονίων είναι της τάξης των 10^3 [65].

²Το πώς ακριβώς ορίζεται ή έννοια "μακροσκοπικό" είναι από μόνο του θέμα συζήτησης. Ένα φυσικό σύστημα μπορούμε να το πούμε "μακροσκοπικό" ως προς τη συνολική του μάζα, ή ως προς την τυπική του διάσταση ή από τον αριθμό N στοιχειωδών σωματιδίων από το οποίο αποτελείται. Σε κάθε περίπτωση, μήκη μεγαλύτερα από την τάξη μεγέθους του μικρόμετρου, μάζες μεγαλύτερες από τη μάζα ενός μικρού κυττάρου ($10^{-15}kg$) ή σώματα που περιέχουν περισσότερο από 10^{12} *amu* συνήθως θεωρούνται μακροσκοπικά.

³Ο όρος "κατάσταση γάτας του Σρέντινγκερ" ή απλούστερα "κατάσταση γάτας" έχει επικρατήσει του ακριβέστερου αλλά πιο κουραστικού "επαλληλία καταστάσεων με διαφορετικές μακροσκοπικές ιδιότητες" και συχνά χρησιμοποιείται καταχρηστικά ακόμα και για καταστάσεις επαλληλίας που δε διαφέρουν μακροσκοπικά, όπως αυτές που περιγράφονται στο Ένθετο 4.2.

4.4 Μαθηματικές ιδιότητες

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τις σημαντικότερες μαθηματικές ιδιότητες των διανυσμάτων σε χώρους Χίλμπερτ, καθώς και του ορισμούς σημαντικών εννοιών: της ορθοκανονικής βάσης, του ευθέος αθροίσματος, των γραμμικών υπόχωρων και του δυϊκού χώρου Χίλμπερτ.

4.4.1 Ταυτότητες και ανισότητες

Οι παρακάτω προτάσεις ισχύουν για οποιαδήποτε διανύσματα ϕ, ψ ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} .

Πρόταση 4.8 Πυθαγόρειο θεώρημα. Αν $(\phi, \psi) = 0$, τότε

$$\|\phi + \psi\|^2 = \|\phi\|^2 + \|\psi\|^2. \quad (4.12)$$

Απόδειξη. $\|\phi + \psi\|^2 = (\phi + \psi, \phi + \psi) = (\phi, \phi) + (\psi, \psi) + (\phi, \psi) + (\psi, \phi) = \|\phi\|^2 + \|\psi\|^2$.

Πρόταση 4.9 Ανισότητα Κωσύ-Σβάρτς (*Cauchy-Schwarz*): $|(\phi, \psi)| \leq \|\phi\| \|\psi\|$. Η ισότητα ισχύει μόνο αν $\phi = \lambda\psi$, για κάποιο $\lambda \in \mathbb{C}$.

Απόδειξη. Αν $\psi = 0$, τα παραπάνω ισχύουν ταυτοτικά. Έστω $\psi \neq 0$. Ορίζουμε το διάνυσμα

$$\chi := \phi - \frac{(\phi, \psi)}{(\psi, \psi)}\psi.$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι $(\chi, \psi) = (\phi, \psi) - (\phi, \psi)(\psi, \psi)/(\psi, \psi) = 0$, οπότε από το Πυθαγόρειο θεώρημα,

$$\|\phi\|^2 = \left| \frac{(\phi, \psi)}{(\psi, \psi)} \right|^2 (\psi, \psi) + \|\chi\|^2 = \frac{|(\phi, \psi)|^2}{\|\psi\|^2} + \|\chi\|^2 \geq \frac{|(\phi, \psi)|^2}{\|\psi\|^2}.$$

Άρα καταλήγουμε στη σχέση $\|\phi\|^2 \|\psi\|^2 \geq |(\phi, \psi)|^2$ από την οποία προκύπτει η ανισότητα Κωσύ-Σβάρτς. Η ισότητα ισχύει όταν $\chi = 0$, που σημαίνει ότι $\phi = \lambda\psi$ για $\lambda = (\phi, \psi)/(\psi, \psi) \in \mathbb{C}$.

Πρόταση 4.10 Τριγωνική ανισότητα: $\|\|\phi\| - \|\psi\|\| \leq \|\phi + \psi\| \leq \|\phi\| + \|\psi\|$.

Απόδειξη. $(\|\phi\| + \|\psi\|)^2 - \|\phi + \psi\|^2 = \|\phi\|^2 + \|\psi\|^2 + 2\|\phi\| \cdot \|\psi\| - \|\phi\|^2 - \|\psi\|^2 - (\phi, \psi) - (\psi, \phi) = 2\|\phi\| \cdot \|\psi\| \left(1 - \frac{\operatorname{Re}(\phi, \psi)}{\|\phi\| \cdot \|\psi\|}\right) \geq 2\|\phi\| \cdot \|\psi\| \left(1 - \frac{|(\phi, \psi)|}{\|\phi\| \cdot \|\psi\|}\right) \geq 0$, όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ανισότητα Κωσύ-Σβάρτς. Καταλήγουμε ότι $\|\phi + \psi\| \leq \|\phi\| + \|\psi\|$. Το άλλο σκέλος της τριγωνικής ανισότητας αποδεικνύεται με παρόμοιο τρόπο.

Πρόταση 4.11 Ταυτότητα πόλωσης: (Αν γνωρίζουμε τον ορισμό του μέτρου σε ένα χώρο Χίλμπερτ μπορούμε να ανακτήσουμε τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου.)

$$(\phi, \psi) = \frac{1}{4} (\|\phi + \psi\|^2 - \|\phi - \psi\|^2 + i\|\phi + i\psi\|^2 - i\|\phi - i\psi\|^2). \quad (4.13)$$

Απόδειξη. Η ταυτότητα επαληθεύεται ξεκινώντας από το δεξί μέλος.

4.4.2 Ορθοκανονικές βάσεις

Ορισμός 4.12 Ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων καλείται ένα σύνολο διανυσμάτων $\{e_i\}$ που ικανοποιεί τη συνθήκη $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$.

Το δέλτα του Κρόνεκερ δ_{ij} ορίστηκε στην Εξ. (1.9).

Ορισμός 4.13 Ορθοκανονική βάση $\{e_i\}$ του χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι ένα ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων που ορίζει βάση του διανυσματικού χώρου.

Σε ένα χώρο Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης (C^n), ο αριθμός των διανυσμάτων μίας ορθοκανονικής βάσης είναι ίσος με τη διάσταση του χώρου Χίλμπερτ. Σε χώρους Χίλμπερτ άπειρης διάστασης κάθε βάση έχει άπειρα στοιχεία.

Ορισμός 4.14 Διαχωρίσιμος καλείται ένα χώρος Χίλμπερτ αν αποδέχεται τουλάχιστον μία βάση με αριθμήσιμο αριθμό στοιχείων.

Χώροι Χίλμπερτ που δεν είναι διαχωρίσιμοι είναι στην ουσία πολύ "μεγάλοι" και οι υπολογισμοί σ' αυτούς πολύπλοκότεροι από ότι σε διαχωρίσιμους χώρους Χίλμπερτ. Ευτυχώς σε όλα τα γνωστά φυσικά συστήματα οι χώροι Χίλμπερτ είναι διαχωρίσιμοι. Λέω "ευτυχώς" γιατί δεν υπάρχει κανένας φυσικός λόγος να απαιτηθεί η συνθήκη της διαχωρισιμότητας και η κβαντική θεωρία εφαρμόζεται και σε συστήματα με άπειρους βαθμούς ελευθερίας όπως τα πεδία, των οποίων η περιγραφή θα μπορούσε να απαιτεί μη διαχωρίσιμους χώρους Χίλμπερτ.

Από δω και στο εξής θα θεωρούμε όλους του χώρους Χίλμπερτ που συναντάμε ως διαχωρίσιμους⁴. Με αυτό το δεδομένο, οι δείκτες i που χαρακτηρίζουν τα στοιχεία ενός ορθοκανονικού συνόλου $\{e_i\}$ είναι πάντα ακέραιοι. Είτε παίρνουν πεπερασμένο αριθμό τιμών ($i \in \{1, 2, \dots, n\}$) είτε άπειρο ($i \in \{1, 2, \dots\}$). Εκτός αν υπάρχει λόγος να κάνουμε τη διάκριση, δε θα προσδιορίζουμε τον αριθμό των στοιχείων. Θα γράφουμε \sum_i είτε για το πεπερασμένο άθροισμα $\sum_{i=1}^n$ είτε για τη σειρά $\sum_{i=1}^{\infty}$. Από μαθηματική άποψη αυτά τα δύο αντικείμενα είναι τελείως διαφορετικά, αφού ως γνωστόν, μία σειρά δεν είναι ένα άθροισμα άπειρων όρων, αλλά ο όριο μιας ακολουθίας που ορίζεται από διαδοχικές αθροίσεις. Σε κάθε περίπτωση, οι σειρές που εμφανίζονται σε χώρους Χίλμπερτ είναι συνήθως επαρκώς "εξημερωμένες", ώστε αυτή η πρακτική μας να μην οδηγήσει σε προβλήματα.

Το εσωτερικό γινόμενο μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τους συντελεστές του αναπτύγματος ενός διανύσματος ως προς οποιαδήποτε βάση. Έστω $\{e_i\}$ ορθοκανονική βάση σε χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Οποιοδήποτε διάνυσμα $\phi \in \mathcal{H}$ γράφεται ως $\phi = \sum_i c_i e_i$, για κάποιες μιγαδικές σταθερές c_i . Παίρνουμε το εσωτερικό γινόμενο και των δύο μελών της εξίσωσης $\phi = \sum_i c_i e_i$ με ένα διάνυσμα e_j . Οπότε, $(\phi, e_j) = \sum_i c_i (e_i, e_j) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$.

Οπότε μπορούμε να γράψουμε το λεγόμενο *ανάπτυγμα της μονάδας*

$$\phi = \sum_i (\phi, e_i) e_i, \tag{4.14}$$

που αποτελεί μία από τις σημαντικότερες ταυτότητας που χαρακτηρίζουν διανύσματα στο χώρο Χίλμπερτ.

Πρόταση 4.15 Ταυτότητα του Πάρσεβαλ. Για κάθε ορθοκανονική βάση $\{e_i\}$ σε χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} και $\phi \in \mathcal{H}$, ισχύει ότι $\|\phi\|^2 = \sum_i |(e_i, \phi)|^2$.

Απόδειξη. Γράφουμε $\phi = \sum_i c_i e_i$, οπότε

$$\|\phi\|^2 = (\phi, \phi) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j (e_i, e_j) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2 = \sum_i |(e_i, \phi)|^2.$$

Παράδειγμα 4.1. Θέλουμε να κατασκευάσουμε μία ορθοκανονική βάση $\psi_\ell(x)$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2([-1, 1])$, όπου $\ell = 0, 1, 2, \dots$ έτσι ώστε το $\psi_\ell(x)$ να είναι πολυώνυμο βαθμού ℓ . Γι' αυτό το πρόβλημα υπάρχει η σύμβαση να επιλέγουμε διανύσματα που είναι μεν ορθογώνια, αλλά μη κανονικοποιημένα, τα λεγόμενα πολυώνυμα Λεζάντρ (Legendre) $P_\ell(x)$. Η κλίμακα τους προσδιορίζεται από την απαίτηση $P_\ell(1) = 1$.

⁴Σε πολλά βιβλία η συνθήκη της διαχωρισιμότητας είναι μέρος του ορισμού του χώρου Χίλμπερτ.

Για να τα κατασκευάσουμε, ξεκινάμε από το σταθερό πολυώνυμο $P_0(x) = 1$. Το $P_1(x)$ θα είναι της μορφής $ax + b$ και θα ικανοποιεί δύο εξισώσεις: $P_1(1) = 1$ και $\int_{-1}^1 dx P_0 P_1 = 0$, οι οποίες προσδιορίζουν τις δυο σταθερές a και b . Οι δύο εξισώσεις δίνουν $a + b = 1$ και $2b = 0$, οπότε $P_1(x) = x$. Ομοίως το $P_2(x)$ θα είναι της μορφής $ax^2 + bx + c$, με εξισώσεις $P_2(1) = 1$, $\int_{-1}^1 dx P_0 P_2 = 0$ και $\int_{-1}^1 dx P_1 P_2 = 0$. Αυτές δίνουν $a + b + c = 1$, $\frac{2}{3}a + 2c = 0$, $b = 0$, αντίστοιχα, με λύση $a = \frac{3}{2}$, $b = 0$, $c = -\frac{1}{2}$. Οπότε $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$.

Επαναλαμβάνοντας αυτή τη διαδικασία μπορούμε να κατασκευάσουμε οποιοδήποτε πολυώνυμο Λεζάντρ. Από τον τρόπο κατασκευής διαπιστώνουμε ότι τα πολυώνυμα Λεζάντρ έχουν την αρτιότητα του ℓ , δηλαδή ικανοποιούν

$$P_\ell(-x) = (-1)^\ell P_\ell(x). \quad (4.15)$$

Μία κλειστή έκφραση για τα πολυώνυμα Λεζάντρ είναι ο τύπος του Ροντρίγκεζ (Rodriguez)

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell, \quad (4.16)$$

από τον οποίο προκύπτει η σχέση κανονικοποίησης

$$\int_{-1}^1 dx P_\ell(x) P_{\ell'}(x) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}. \quad (4.17)$$

4.4.3 Ισομετρικοί χώροι

Έστω ότι επιλέγουμε μία ορθοκανονική βάση $\{e_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n$ σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} πεπερασμένης διάστασης n . Τότε μπορούμε να αντιστοιχίσουμε σε κάθε $\phi \in \mathcal{H}$ ένα διάνυσμα στήλης,

χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα του ϕ ως προς τη βάση $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^n$, όπου $c_i = (\phi, e_i)$. Επιπλέον

το εσωτερικό γινόμενο στον \mathcal{H} αντιστοιχίζεται πλήρως στο εσωτερικό γινόμενο του \mathbf{C}^n , αφού για $\phi = \sum_{i=1}^n c_i e_i$ και $\psi = \sum_{i=1}^n d_i e_i$ παίρνουμε

$$(\phi, \psi) = \sum_{i=1}^n c_i d_i^*. \quad (4.18)$$

Αυτό σημαίνει ότι όλοι οι χώροι Χίλμπερτ διάστασης n ταυτίζονται πλήρως με το \mathbf{C}^n , μαθηματικά λέμε ότι είναι *ισομετρικοί* χώροι.

Ομοίως σε ένα χώρο Χίλμπερτ άπειρης διάστασης, η ύπαρξη μιας ορθοκανονικής βάσης $\{e_i\}$, $i = 1, 2, \dots$ επιτρέπει την αντιστοίχιση κάθε $\phi \in \mathcal{H}$ με την ακολουθία $\{c_1, c_2, \dots\} \in \ell^2$, όπου $c_i = (\phi, e_i)$. Πάλι το εσωτερικό γινόμενο στον \mathcal{H} αντιστοιχίζεται πλήρως στο εσωτερικό γινόμενο του ℓ^2 , αφού για $\phi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i e_i$ και $\psi = \sum_{i=1}^{\infty} d_i e_i$ παίρνουμε

$$(\phi, \psi) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i d_i^*. \quad (4.19)$$

Άρα όλοι οι χώροι Χίλμπερτ άπειρης διάστασης είναι *ισομετρικοί* με τον ℓ^2 .

Το ότι όλοι οι χώροι Χίλμπερτ άπειρης διάστασης είναι ίδιοι δε σημαίνει ότι περιγράφουν την ίδια φυσική. Η φυσική προσδιορίζεται από τις φυσικές ποσότητες που ορίζονται σε αυτούς τους χώρους και όπως θα δούμε αυτές διαφέρουν από σύστημα σε σύστημα.

4.4.4 Ευθύ άθροισμα

Έστω δύο χώροι Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 , με διανύσματα της μορφής

$$\phi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} \in \mathcal{H}_1 \quad \psi = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \dots \\ d_m \end{pmatrix} \in \mathcal{H}_2. \quad (4.20)$$

Ορίζουμε ως ευθύ άθροισμα $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ το χώρο Χίλμπερτ που αποτελείται από όλα τα διανύσματα της μορφής

$$\phi \oplus \psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_n \\ d_1 \\ \dots \\ d_m \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Η παραπάνω περιγραφή είναι επαρκής για χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης.

Αν $\{e_i\}$ ορθοκανονική βάση στον \mathcal{H}_1 και $\{o_j\}$ ορθοκανονική βάση στον \mathcal{H}_2 , τότε το σύνολο διανυσμάτων $\{e_i \oplus 0, 0 \oplus o_j\}$ αποτελούν βάση στον $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$. Έστω $\mathcal{H}_1 = \mathcal{C}^n$ και $\mathcal{H}_2 = \mathcal{C}^m$. Η βάση $\{e_i\}$ αποτελείται από n διανύσματα και η βάση $\{o_j\}$ από m διανύσματα, οπότε η βάση $\{e_i \oplus 0, 0 \oplus o_j\}$ αποτελείται από $n + m$ διανύσματα. Αυτό σημαίνει ότι

$$\mathcal{C}^n \oplus \mathcal{C}^m = \mathcal{C}^{n+m}. \quad (4.22)$$

Για τη γενική περίπτωση που τουλάχιστον ένας από τους χώρους Χίλμπερτ στο ευθύ άθροισμα είναι απειροδιάστατος, απαιτείται ένας ακριβέστερος ορισμός του ευθέος αθροίσματος.

Ορισμός 4.16 Ευθύ άθροισμα $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ δύο χώρων Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 είναι ο χώρος Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$, με στοιχεία διατεταγμένα ζεύγη $\phi \oplus \psi$, όπου $\phi \in \mathcal{H}_1$ και $\psi \in \mathcal{H}_2$. Οι πράξεις στον $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ ορίζονται ως $\lambda(\phi_1 \oplus \psi_1) + (\phi_2 \oplus \psi_2) = (\lambda\phi_1 + \phi_2) \oplus (\lambda\psi_1 + \psi_2)$ και το εσωτερικό γινόμενο ως $(\phi_1 \oplus \psi_1, \phi_2 \oplus \psi_2) = (\phi_1, \phi_2) + (\psi_1, \psi_2)$.

Από τον ορισμό αποδεικνύεται εύκολα ότι ο $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ ικανοποιεί όλα τα αξιώματα ενός χώρου Χίλμπερτ.

4.4.5 Κλειστοί γραμμικοί υπόχωροι

Ορισμός 4.17 Γραμμικός υπόχωρος V ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι ένα υποσύνολο του \mathcal{H} το οποίο είναι κλειστό ως προς την πρόσθεση και το βαθμωτό πολλαπλασιασμό. Δηλαδή για κάθε $\phi, \psi \in V$ και $\lambda \in \mathcal{C}$, $\lambda\phi + \psi \in V$.

Συνήθως ενδιαφερόμαστε για κλειστούς υπόχωρους ενός χώρου Χίλμπερτ. Σε έναν κλειστό υπόχωρο V , αν μία ακολουθία διανυσμάτων $\phi_n \in V$ συγκλίνει, τότε και το όριο της ανήκει στον υπόχωρο V . Αυτό σημαίνει ότι ο V ικανοποιεί την ιδιότητα της πληρότητας και άρα είναι χώρος Χίλμπερτ.

Αν ο υπόχωρος V είναι πεπερασμένης διάστασης τότε είναι και κλειστός, μόνο απειροδιάστατοι υπόχωροι μπορεί να μην είναι κλειστοί. Οι αποδείξεις που θα δώσουμε στη συνέχεια ισχύουν για

υπόχωρους πεπερασμένης διάστασης αλλά γενικεύονται εύκολα και σε απειροδιάστατους. Από εδώ και στο εξής, όταν λέμε "υπόχωρος" θα εννοούμε "κλειστός γραμμικός υπόχωρος".

Έστω n διανύσματα ϕ_1, \dots, ϕ_n του χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} . Το σύνολο όλων των δυνατών γραμμικών συνδυασμών $\sum_{i=1}^n c_i \phi_i$ είναι ένας υπόχωρος V του \mathcal{H} . Αν τα διανύσματα ϕ_i ορίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο, αποτελούν βάση του V , άρα ο V έχει διάσταση n . Αλλιώς η διάσταση του V είναι μικρότερη του n .

Ο συμπληρωματικός υπόχωρος V^\perp ενός υπόχωρου V αποτελείται από όλα τα κάθετα διανύσματα στο V , δηλαδή από όλα τα διανύσματα $\phi \in \mathcal{H}$ που ικανοποιούν τη σχέση $(\phi, \psi) = 0$ για κάθε $\psi \in V$. Προφανώς το μόνο διάνυσμα που ανήκει και στο V και στο V^\perp είναι το μηδενικό διάνυσμα. Εξ' ορισμού, ο συμπληρωματικός υπόχωρος ενός συμπληρωματικού υπόχωρου είναι ο αρχικός: $V^{\perp\perp} = V$.

Έστω μία ορθοκανονική βάση $\{e_i\}$ στον υπόχωρο V διάστασης m . Για κάθε διάνυσμα $\phi \in \mathcal{H}$, ορίζουμε την προβολή του $\phi_V \in V$ ως

$$\phi_V = \sum_{i=1}^m (\phi, e_i) e_i. \quad (4.23)$$

Από κατασκευής, το διάνυσμα $\phi - \phi_V$ είναι κάθετο σε όλα τα διανύσματα βάσης e_i , και άρα ανήκει στον συμπληρωματικό υπόχωρο V^\perp , οπότε το συμβολίζουμε ως ϕ_{V^\perp} . Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι κάθε διάνυσμα $\phi \in \mathcal{H}$ μπορεί να γραφτεί ως $\phi = \phi_V + \phi_{V^\perp}$, όπου $\phi_V \in V$ και $\phi_{V^\perp} \in V^\perp$. Αυτό σημαίνει ότι $\mathcal{H} = V \oplus V^\perp$.

Παρότι ο ορισμός (4.23) εξαρτάται από τη βάση $\{e_i\}$, το ϕ_V είναι ανεξάρτητο από την επιλογή βάσης. Έστω ότι υπάρχουν και άλλα διανύσματα $\phi'_V \in V$ και $\phi'_{V^\perp} \in V^\perp$ που ικανοποιούν τη σχέση $\phi = \phi'_V + \phi'_{V^\perp}$. Τότε $\phi_V - \phi'_V = \phi_{V^\perp} - \phi'_{V^\perp}$. Το αριστερό σκέλος της ισότητας ανήκει στο V και το δεξί στο V^\perp , άρα $\phi_V - \phi'_V = \phi_{V^\perp} - \phi'_{V^\perp} = 0$.

Παράδειγμα 4.2. Θεωρούμε το χώρο Χίλμπερτ $L^2([-1, 1])$ και ορίζουμε τον υπόχωρο V που περιέχει όλα τα πολυώνυμα βαθμού μέχρι 2ης τάξης. Μια ορθοκανονική βάση ψ_i σ' αυτόν τον υπόχωρο ορίζεται από τα τρία πρώτα πολυώνυμα Λεζάντρ, κανονικοποιημένα σύμφωνα με την Εξ. (4.17): $\psi_0 := \frac{1}{\sqrt{2}}P_0$, $\psi_1 := \sqrt{\frac{3}{2}}P_1$, και $\psi_2 := \sqrt{\frac{5}{2}}P_2$.

Έστω ότι θέλουμε να προβάλουμε τη συνάρτηση $f(x) = e^{i\pi x}$ στο V . Υπολογίζουμε

$$(\psi_0, f) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 dx e^{i\pi x} = 0$$

$$(\psi_1, f) = \sqrt{\frac{3}{2}} \int_{-1}^1 dx x e^{i\pi x} = \frac{\sqrt{6}}{\pi} i \quad (4.24)$$

$$(\psi_2, f) = \sqrt{\frac{5}{2}} \int_{-1}^1 dx (e^{i\pi x} \frac{1}{2}(3x^2 - 1)) = -\frac{3\sqrt{10}}{\pi^2}. \quad (4.25)$$

Άρα η προβολή f_V της f είναι

$$f_V(x) = \sum_{i=0}^2 (\psi_i, f) \psi_i(x) = 3iP_1(x) - \frac{15}{2\pi^2}P_2(x) = -\frac{45}{2\pi^2}x^2 + \frac{3i}{\pi}x + \frac{15}{2\pi^2}. \quad (4.26)$$

4.4.6 Δυϊκός χώρος Χίλμπερτ

Η έννοια του δυϊκού χώρου Χίλμπερτ είναι διαισθητικά προφανής σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένων διαστάσεων. Έστω ένας χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} με στοιχεία διανύσματα στήλης

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix} \in \mathcal{H}, \quad (4.27)$$

και εσωτερικό γινόμενο της μορφής (4.4).

Ο δυϊκός χώρος \mathcal{H}^* του \mathcal{H} αποτελείται από τα διανύσματα γραμμής

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (4.28)$$

Το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ δυο διανυσμάτων α και β είναι

$$(\alpha, \beta)_{\mathcal{H}^*} = \sum_i \alpha_i \beta_i^*. \quad (4.29)$$

Παρατηρούμε ότι κάθε διάνυσμα $\alpha \in \mathcal{H}^*$ ορίζει μία και μοναδική γραμμική συνάρτηση $\alpha : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, όπου για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$, $\alpha(\phi) = \sum_i \alpha_i \phi_i \in \mathbb{C}$. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να ορίσουμε το χώρο \mathcal{H}^* ως το σύνολο των γραμμικών συναρτήσεων πάνω στο \mathcal{H} .

Επίσης, για κάθε διάνυσμα στήλης $\phi \in \mathcal{H}$ όπως στην Εξ. (4.27) υπάρχει ένα και μοναδικό διάνυσμα γραμμής $\alpha_\phi = (\phi_1^*, \phi_2^*, \dots, \phi_n^*) \in \mathcal{H}^*$. Η αντιστοίχιση $\phi \rightarrow \alpha_\phi$ ορίζει μία απεικόνιση ένα προς ένα και επί μεταξύ του \mathcal{H} και \mathcal{H}^* . Επίσης ικανοποιεί την ιδιότητα

$$(\alpha_\phi, \alpha_\psi)_{\mathcal{H}^*} = (\psi, \phi)_{\mathcal{H}}, \quad (4.30)$$

για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Αυτή η πρόταση είναι γνωστή στη βιβλιογραφία ως *θεώρημα του Ρις* (Riesz).

Η παραπάνω περιγραφή ισχύει για χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης. Σε χώρους Χίλμπερτ άπειρης διάστασης οι ορισμοί και οι αποδείξεις είναι λίγο πιο τεχνικοί—βλ. Ένθετο 4.3, αλλά τα βασικά συμπεράσματα είναι τα ίδια.

Ένθετο 4.3. Δυϊκός χώρος Χίλμπερτ

Ορισμός 4.18 Δυϊκός χώρος \mathcal{H}^* ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι ο χώρος Χίλμπερτ που αποτελείται από όλες τις συνεχείς γραμμικές συναρτήσεις στον \mathcal{H} , δηλαδή από όλες τις συναρτήσεις $\alpha : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, που ικανοποιούν την ιδιότητα

$$\alpha(\lambda\phi + \psi) = \lambda\alpha(\phi) + \alpha(\psi),$$

για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ και $\lambda \in \mathbb{C}$.

Οι πράξεις στον \mathcal{H}^* ορίζονται ως

$$(\lambda\alpha_1 + \alpha_2)(\phi) = \lambda\alpha_1(\phi) + \alpha_2(\phi)$$

για κάθε $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathcal{H}^*$, $\phi \in \mathcal{H}$ και $\lambda \in \mathbb{C}$. Το μέτρο μιας γραμμικής συνάρτησης α ορίζεται ως

$$\|\alpha\| = \sup_{\phi \in \mathcal{H}} \frac{|\alpha(\phi)|}{\sqrt{(\phi, \phi)}}.$$

Εφόσον έχουμε προσδιορίσει το μέτρο μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ταυτότητα πόλωσης για να ορίσουμε το εσωτερικό γινόμενο στον \mathcal{H}^* . Σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης, το μέτρο είναι πάντα πεπερασμένο. Σε χώρους Χίλμπερτ άπειρης διάστασης, η απαίτηση συνέχειας στις γραμμικές συναρτήσεις σημαίνει ότι έχουν πεπερασμένο μέτρο.

Θεώρημα 4.19 Θεώρημα του Ρις. Για κάθε $\alpha \in \mathcal{H}^*$, υπάρχει ένα και μοναδικό διάνυσμα $\psi_\alpha \in \mathcal{H}$ ώστε $\alpha(\phi) = (\phi, \psi_\alpha)$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$.

Απόδειξη. Έστω $\{e_i\}$ μια ορθοκανονική βάση στο \mathcal{H} . Ορίζουμε $\gamma_i = \alpha(e_i)$ για κάθε i , και το διάνυσμα $\psi_\alpha = \sum_i \gamma_i^* e_i$. Οπότε για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$, $(\phi, \psi_\alpha) = \sum_i \gamma_i (\phi, e_i) = \sum_i \alpha(e_i) (\phi, e_i) = \alpha(\sum_i (\phi, e_i) e_i) = \alpha(\phi)$. Το διάνυσμα ψ_α δεν εξαρτάται από την επιλογή της βάσης. Αν υπήρχε και δεύτερο διάνυσμα ψ'_α που να ικανοποιεί τη σχέση $\alpha(\phi) = (\phi, \psi'_\alpha)$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$, τότε θα είχαμε $(\phi, \psi_\alpha - \psi'_\alpha) = 0$, για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$. Θέτοντας $\phi = \psi_\alpha - \psi'_\alpha$, παίρνουμε $\|\psi_\alpha - \psi'_\alpha\| = 0$, οπότε, $\psi_\alpha = \psi'_\alpha$.

4.5 Φορμαλισμός Ντιράκ

Το θεώρημα του Ρις αποτελεί τη μαθηματική αιτιολόγηση του φορμαλισμού του Ντιράκ, ο οποίος είναι ιδιαίτερα χρήσιμος σε προβλήματα κβαντικής μηχανικής.

Σύμφωνα με το φορμαλισμό Ντιράκ, ένα διάνυσμα $\psi \in \mathcal{H}$ αναπαρίσταται από ένα **κετ** (ket) $|\psi\rangle$. Εντός του κετ μπαίνει οποιοσδήποτε τρόπος χαρακτηρισμού του διανύσματος, π.χ. αριθμός, σύμβολο, ή φράση. Για παράδειγμα, οι εκφράσεις

$$|\text{κατάσταση 4 ηλεκτρονίων}\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\text{γάτα ζωντανή}\rangle + |\text{γάτα νεκρή}\rangle)$$

ορίζουν δόκιμα κετ. Ομοίως δόκιμο είναι το κετ $\frac{1}{\sqrt{2}}|\odot\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\ominus\rangle$ για έναν άνθρωπο που παρατηρεί τη γάτα του να γίνεται γάτα του Σρέντινγκερ.

Ένα διάνυσμα του \mathcal{H}^* αναπαρίσταται από ένα **μπρα** (bra) $\langle \cdot |$. Χάρη στο θεώρημα του Ρις, οι δυνατοί δείκτες για ένα μπρα ταυτίζονται με τους δυνατούς δείκτες για ένα κετ. Οπότε μπορούμε να γράφουμε $\langle \psi |$ εννοώντας το στοιχείο του \mathcal{H}^* που αντιστοιχεί στο κετ $|\psi\rangle$.

Χάρη στο θεώρημα του Ρις είναι δόκιμο να αναπαραστήσουμε το εσωτερικό γινόμενο στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} ως ένα **μπράκετ** (bracket): $\langle \phi | \psi \rangle$. Ένα **κετμπρα** αντιστοιχεί σε έναν τελεστή. $(|\phi\rangle \langle \chi|) |\psi\rangle = \langle \chi | \psi \rangle |\phi\rangle$.

Δηλαδή έχουμε τις εξής αντιστοιχίσεις.

- κετ = διάνυσμα στήλης = πίνακας $n \times 1$.
- μπρα = διάνυσμα γραμμής = πίνακας $1 \times n$.
- μπράκετ = (πίνακας $1 \times n$) επί (πίνακας $n \times 1$) = πίνακας 1×1 = αριθμός.
- κέτμπρα = (πίνακας $n \times 1$) επί (πίνακας $1 \times n$) = πίνακας $n \times n$ = τελεστής.

Σε ζητήματα που απαιτούν τη θεώρηση πολλών διαφορετικών χώρων Χίλμπερτ, ο χώρος Χίλμπερτ στον οποίο γίνεται αναφορά προσδιορίζεται ως δείκτης στα μπρα και τα κετ. Για παράδειγμα, μπορεί να γράφουμε $|\psi\rangle_{\mathcal{H}}$ ή ${}_{\mathcal{H}}\langle \phi |$.

Επίσης, ένα ορθοκανονικό σύνολο $\{e_n\}$ συμβολίζεται ως $|n\rangle$, $n = 1, 2, \dots$. Αν το ορθοκανονικό σύνολο αριθμείται από πολλούς ακέραιους, τότε μπαίνουν όλοι οι ακέραιοι στο κετ. Για παράδειγμα, οι λύσεις (3.41) της εξίσωσης του Σρέντινγκερ για το άτομο του υδρογόνου συμβολίζονται ως $|n, \ell, m\rangle$.

Το ανάπτυγμα ενός διανύσματος $|\psi\rangle$ ως προς μία ορθοκανονική βάση $|n\rangle$ γράφεται ως $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle$. Ισοδύναμα γράφουμε την **ανάλυση της μονάδας**

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n|. \tag{4.31}$$

Προσοχή!! Το εσωτερικό γινόμενο που γράφεται ως (ϕ, ψ) στο συνηθισμένο φορμαλισμό γράφεται ως $\langle \psi | \phi \rangle$ στο φορμαλισμό Ντιράκ, δηλαδή η σειρά των διανυσμάτων πάει αντίστροφα.

Στη συνέχεια θα εξακολουθήσουμε να χρησιμοποιούμε τον ίδιο φορμαλισμό που χρησιμοποιούμε τώρα, ως το κεφάλαιο 5.6 που θα εισαχθεί το φασματικό θεώρημα. Ο λόγος είναι ότι κάποιες αποδείξεις στη θεωρία τελεστών είναι άβολες με το φορμαλισμό Ντιράκ, για την ακρίβεια ο φορμαλισμός Ντιράκ φτιάχτηκε θεωρώντας κάποιες ιδιότητες τελεστών ως ήδη δεδομένες. Από το κεφάλαιο 5.5 και μετά θα χρησιμοποιούμε σχεδόν αποκλειστικά το φορμαλισμό Ντιράκ.

Ερωτήσεις

1. Σε τί διαφέρει η κβαντική έννοια της κατάστασης από την αντίστοιχη κλασική;
2. Αλλάξτε μόνο μία λέξη και κάντε σωστή την παράλογη φράση "η γάτα του Σρέντινγκερ είναι και ζωντανή και νεκρή".
3. Η ακόλουθη περιγραφή της έννοιας της επαλληλίας προέρχεται από ένα εκλαϊκευτικό άρθρο [66].
"Κάθε σωματίο ή ομάδα σωματιδίων στο σύμπαν είναι επίσης ένα κύμα—ακόμα και μεγάλα σωματίια, ακόμα και βακτήρια, ακόμα και οι άνθρωποι, ακόμα και οι πλανήτες και οι αστέρες. Και τα κύματα καταλαμβάνουν πολλαπλές θέσεις στο χώρο την ίδια στιγμή. Οπότε κάθε κομμάτι ύλης μπορεί να καταλαμβάνει δύο θέσεις ταυτόχρονα. Οι φυσικοί καλούν αυτό το φαινόμενο "κβαντική επαλληλία" και για δεκαετίες το επιδεικνύουν χρησιμοποιώντας μικρά σωματίια." Σχολιάστε.
4. Ποιες από τις παρακάτω συναρτήσεις είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες στο \mathbf{R} ; (i) e^{-x^2} , (ii) $1/\sqrt{x^2+1}$, (iii) e^{-x} , (iv) $1/x$.
5. Διατυπώστε εκπεφρασμένα το επιχείρημα πώς η μέθοδος κατασκευής των πολυωνύμων Λεζάντρ οδηγεί στην Εξ. (4.15).
6. Μπορεί ένας χώρος Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης να έχει απειροδιάστατο υπόχωρο; Μπορεί ένας χώρος Χίλμπερτ άπειρης διάστασης να έχει υπόχωρο πεπερασμένης διάστασης;

Ασκήσεις

1. Αποδείξτε ότι οι συναρτήσεις $\frac{\sin x}{x}$, $\frac{1-\cos x}{x}$, $\frac{x}{\sinh x}$, $\frac{1}{|x|^{1/4}(x^2+1)}$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες στο \mathbf{R} .
2. Αποδείξτε ότι οι συναρτήσεις x^{-2} και $\frac{1}{\sqrt{|x|+1}}$, δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες στο \mathbf{R} .
3. Εξηγήστε γιατί σε ένα χώρο Χίλμπερτ η ισχύς του Πυθαγορείου θεωρήματος για δύο διανύσματα ϕ και ψ δε σημαίνει απαραίτητα ότι τα διανύσματα είναι ορθογώνια. Δώστε ένα παράδειγμα.
4. Έστω $\phi = (z_1, z_2) \in \mathbf{C}^2$. Μπορεί το μέτρο $\|\phi\| = |z_1| + |z_2|$ να οριστεί μέσω ενός εσωτερικού γινομένου στο \mathbf{C}^2 ;
5. Έστω ϕ, ψ διανύσματα ενός χώρου Χίλμπερτ V . Δείξτε ότι οι ακόλουθες προτάσεις είναι ισοδύναμες.
 (α') $(\phi, \psi) = 0$.
 (β') $\|\phi\| \leq \|\phi + \lambda\psi\|$, για κάθε $\lambda \in \mathbf{C}$.
 (γ') $\|\phi + \lambda\psi\| = \|\phi - \lambda\psi\|$, για κάθε $\lambda \in \mathbf{C}$.
6. Δείξτε ότι στο χώρο Χίλμπερτ $L_D^2([0, 1])$ ισχύει η ανισότητα $\|\phi\| \leq \|\phi'\|$, όπου ϕ' η παράγωγος του ϕ .
7. Δείξτε ότι η απόσταση μεταξύ δύο διανυσμάτων μοναδιαίου μέτρου ϕ και ψ παίρνει τιμές μεταξύ 0 και 2. Αν μεταβάλλουμε ελεύθερα τη φάση των ϕ και ψ ($\phi \rightarrow e^{i\theta}\phi$) ποια είναι η ελάχιστη τιμή της απόστασης $D(\phi, \psi)$ που μπορούμε να επιτύχουμε για δεδομένα ϕ και ψ ;
8. (α) Αποδείξτε την Εξ. (4.17) από τον τύπο του Ροντρίγκεζ (4.16). (β) Χρησιμοποιήστε αυτό το αποτέλεσμα για να αποδείξετε τον τύπο του Ροντρίγκεζ.

9. Το σκεπτικό που εφαρμόζεται στον ορισμό των πολυωνύμων Λεζάντρ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να οριστούν ορθοκανονικές πολυωνυμικές βάσεις και σε άλλους χώρους Χίλμπερτ. (α) Βρείτε τα πρώτα 5 διανύσματα της πολυωνυμικής βάσης στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, e^{-x^2} dx)$. Αυτά είναι τα πολυώνυμα Ερμίτ που συναντήσαμε στον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή του Κεφ. 3. (β) Βρείτε τα πρώτα 3 διανύσματα της πολυωνυμικής βάσης στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^+, e^{-x} dx)$. Αυτά είναι τα πολυώνυμα Λαγκέρ, μία παραλλαγή των οποίων συναντήσαμε στην περιγραφή του ατόμου του υδρογόνου στο Κεφ. 3. (γ) Διαλέξτε έναν κατάλληλο χώρο Χίλμπερτ και κατασκευάστε μία δική σας πολυωνυμική βάση.
10. Έστω V ο υπόχωρος του C^4 που σαρώνεται από τα διανύσματα $\phi_1 = (0, 1, 2, 2)$ και $\phi_2 = (3, 4, 0, 0)$. Υπολογίστε την προβολή του διανύσματος $\psi = (1, 0, 0, 0)$ στο V .
11. Έστω ο χώρος Χίλμπερτ $L^2([0, 1], dx)$ και V ο υπόχωρος που ορίζεται από όλες τις πολυωνυμικές συναρτήσεις μέχρι 2ου βαθμού. Δείξτε ότι η συνάρτηση $f(x) = \log x$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο $[0, 1]$ και υπολογίστε την προβολή της στο V .

Βιβλιογραφία

- Για εισαγωγή σε διανυσματικούς χώρους, βλ. το βιβλίο του Axler [67]. Για μαθηματική εισαγωγή στη δομή του χώρου Χίλμπερτ προτείνω τα κεφ. 1-6 από το βιβλίο του Young [68] και τα κεφ. 1-4 από το βιβλίο του Cohen [69]. Για το χώρο Χίλμπερτ στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας, βλ. το κεφ. 2 του Isham [10] και το κεφ. 3 του Peres [58].
- Για μία στοιχειώδη εισαγωγή στην κβαντική συμβολομετρία, βλ. το βιβλίο του Scarani [70]. Επίσης, βλ. [71] για πειράματα θεμελιώδους κβαντομηχανικής με το συμβολόμετρο Mach-Zehnder.
- Για την κατασκευή καταστάσεων μακροσκοπικής επαλληλίας και τη σημασία τους, βλ. το άρθρο του Leggett [72] και των Arndt και Horberger [73]. Επίσης ενδιαφέρουσες είναι οι διαλέξεις Νόμπελ του Wineland [74] και του Haroche [75].

Κεφάλαιο 5

Τελεστές: Ι. Γενική θεωρία

Η χρήση των τελεστών συχνά επιφέρει μεγάλες απλοποιήσεις και αποφυγή περίπλοκων υπολογισμών ολοκληρωμάτων. Αλλά τότε η αυστηρή λογική της μεθόδου δεν είναι προφανής! Και τί έγινε; Πρέπει να σταματήσω να τρώω επειδή δεν καταλαβαίνω πλήρως τη διαδικασία της πέψης;

Ο. Χεβισάιντ [76]

5.1 Βασικές έννοιες

5.1.1 Ορισμοί

Με δεδομένη την περιγραφή της κατάστασης ενός κβαντικού συστήματος από ένα διάνυσμα σε ένα χώρο Χίλμπερτ, οι πίνακες του Χάιζενμπεργκ που αντιπροσωπεύουν τα φυσικά μεγέθη αντιστοιχίζονται στους γραμμικούς τελεστές του χώρου Χίλμπερτ. Ένας γραμμικός τελεστής (ή απλά τελεστής) είναι μία γραμμική απεικόνιση ενός χώρου Χίλμπερτ στον εαυτό του.

Ορισμός 5.1 Τελεστής \hat{A} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι μία συνάρτηση $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, η οποία σε κάθε διάνυσμα $\phi \in \mathcal{H}$ απεικονίζει ένα διάνυσμα $\hat{A}\phi \in \mathcal{H}$, έτσι ώστε $\hat{A}(\lambda\phi + \psi) = \lambda\hat{A}\phi + \hat{A}\psi$, για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ και $\lambda \in \mathbb{C}$.

Στη φυσική έχει επικρατήσει η σύμβαση να τίθεται ένα καπελάκι πάνω από τους τελεστές για να τους ξεχωρίζει από αντίστοιχα κλασικά μεγέθη, μια σύμβαση που θα ακολουθήσουμε και εδώ.

Στους τελεστές ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} ορίζονται οι ακόλουθες πράξεις.

- (i) Άθροιση. $(\hat{A} + \hat{B})\phi := \hat{A}\phi + \hat{B}\phi$, για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$.
- (ii) Βαθμωτό γινόμενο. $(\lambda\hat{A})\phi := \lambda\hat{A}\phi$, για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$ και $\phi \in \mathcal{H}$.
- (iii) Γινόμενο τελεστών. $(\hat{A}\hat{B})\phi := \hat{A}(\hat{B}\phi)$, για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$.

Οι παραπάνω πράξεις με τελεστές έχουν τις ακόλουθες ιδιότητες.

- (i) Η άθροιση και το βαθμωτό γινόμενο τελεστών ικανοποιούν τις συνθήκες του ορισμού 4.1. Άρα οι τελεστές ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} ορίζουν ένα διανυσματικό χώρο.
- (ii) Προσεταιριστικότητα. Για κάθε τελεστή \hat{A}, \hat{B} και \hat{C} , ισχύει ότι $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$.

(iii) *Διγραμμικότητα.* Για κάθε τελεστή \hat{A}, \hat{B} και \hat{C} και για κάθε $\lambda \in \mathcal{C}$, ισχύει ότι

$$\hat{A}(\lambda\hat{B} + \hat{C}) = \lambda\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}, \quad \text{και} \quad (\lambda\hat{B} + \hat{C})\hat{A} = \lambda\hat{B}\hat{A} + \hat{C}\hat{A}.$$

(iv) *Υπαρξη μονάδας.* Ο τελεστής \hat{I} που ορίζεται ως $\hat{I}\phi = \phi$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$, ικανοποιεί τη σχέση $\hat{I}\hat{A} = \hat{A}\hat{I} = \hat{A}$ για κάθε τελεστή \hat{A} .

(v) *Υπαρξη μηδενός.* Ο τελεστής $\hat{0}$ που ορίζεται ως $\hat{0}\phi = 0$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$, ικανοποιεί τις σχέσεις $\hat{0}\hat{A} = \hat{A}\hat{0} = \hat{0}$ και $\hat{A} + \hat{0} = \hat{A}$, για κάθε τελεστή \hat{A} .

Οι παραπάνω ιδιότητες σημαίνουν ότι οι τελεστές σε ένα χώρο Χίλμπερτ ορίζουν μία μαθηματική δομή που καλείται *προσεταιριστική άλγεβρα*.

Ορίζουμε τη n -στη δύναμη ενός τελεστή \hat{A} ως τον τελεστή

$$\hat{A}^n = \underbrace{\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}}_{n \text{ φορές}}.$$

Για κάθε πολυώνυμο n βαθμού $h_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k$ με μιγαδικούς συντελεστές c_k , ορίζουμε την αντίστοιχη πολυωνυμική συνάρτηση ενός τελεστή \hat{A} ως

$$h_n(\hat{A}) = \sum_{k=0}^n c_k \hat{A}^k$$

Αντίστροφος τελεστής. Αν υπάρχει τελεστής \hat{B} , ο οποίος ικανοποιεί τις σχέσεις $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = \hat{I}$ για κάποιον τελεστή \hat{A} , τότε ο \hat{B} καλείται *αντίστροφος* του \hat{A} και συμβολίζεται ως \hat{A}^{-1} .

Αν δύο τελεστές \hat{A} και \hat{B} έχουν αντίστροφο, τότε και το γινόμενό τους $\hat{A}\hat{B}$ έχει αντίστροφο, και μάλιστα ισχύει ότι

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}. \quad (5.1)$$

Η απόδειξη της Εξ. (5.1) προκύπτει άμεσα από τον ορισμό: $(\hat{A}\hat{B})\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} = \hat{A}(\hat{B}\hat{B}^{-1})\hat{A}^{-1} = \hat{A}\hat{I}\hat{A}^{-1} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I}$.

Συζυγία τελεστών. Συζυγής ενός τελεστή \hat{A} καλείται ένας τελεστής \hat{A}^\dagger που ικανοποιεί τη σχέση

$$(\hat{A}\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}^\dagger\psi), \quad (5.2)$$

για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$.

Άμεσες συνέπειες του ορισμού είναι οι ακόλουθες ταυτότητες.

(i) $(c\hat{A} + \hat{B})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$, για κάθε τελεστή \hat{A} και \hat{B} και κάθε $c \in \mathcal{C}$.

(ii) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.

(iii) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

Απόδειξη. $(\phi, (\hat{A}\hat{B})^\dagger\psi) = (\hat{A}\hat{B}\phi, \psi) = (\hat{B}\phi, \hat{A}^\dagger\psi) = (\phi, \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\psi)$, για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$.

Οι τελεστές ως πίνακες. Σε κάθε τελεστή \hat{A} μπορούμε να αντιστοιχίσουμε τον πίνακα $A_{mn} = (\hat{A}e_n, e_m)$, όπου $\{e_n\}$ μια ορθοκανονική βάση στον \mathcal{H} . Για κάθε διάνυσμα $\phi = \sum_n c_n e_n$,

$$\hat{A}\phi = \sum_n c_n \hat{A}e_n = \sum_{n,m} c_n (\hat{A}e_n, e_m) e_m = \sum_m \left(\sum_n A_{mn} c_n \right) e_m, \quad (5.3)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ανάλυση της μονάδας. Αυτό σημαίνει ότι η απεικόνιση $\phi \rightarrow \hat{A}\phi$ αντιστοιχεί στο μετασχηματισμό $c_m \rightarrow c'_m = \sum_n A_{mn}c_n$ στους συντελεστές του διάνυσματος ϕ ως προς την ορθοκανονική βάση $\{e_n\}$. Δεδομένου ότι οι συντελεστές c_n εκφράζουν ένα διάνυσμα στήλης, η δράση του τελεστή στο διάνυσμα ϕ τελεστή είναι μαθηματικά ταυτόσημη με τη δράση του πίνακα A_{mn} σε διάνυσματα στήλης.

Σε φορμαλισμό Ντιράκ γράφουμε $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$. Επίσης θεωρούμε πάντα ότι ο τελεστής που γράφουμε δρα πάνω στο κετ, οπότε μετατρέπουμε τη δράση ενός τελεστή σε ένα μπρα στη δράση του συζυγούς του στο κετ. Για παράδειγμα, η ποσότητα $(\hat{A}\phi, \hat{B}\hat{C}\psi)$ γράφεται πρώτα $(\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}\phi, \psi)$ το οποίο αντιστοιχεί στο μπράκετ $\langle\psi|\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}|\phi\rangle$.

Παράδειγμα 5.1. Στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$ που, όπως αναφέραμε στο Κεφ. 4, περιγράφει την κίνηση σωματιδίου σε μία διάσταση ορίζουμε τους τελεστές θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} ως

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad (5.4)$$

$$\hat{p}\psi(x) = -i\frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \quad (5.5)$$

Η χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Σρέντινγκερ (3.8) γράφεται ως

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi, \quad (5.6)$$

όπου

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x}) \quad (5.7)$$

είναι γραμμικός τελεστής στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$ που καλείται τελεστής Χάμιλτον.

Ένθετο 5.1. Σχέση μεταξύ τελεστών και πινάκων

Η ακριβής σχέση μεταξύ τελεστών και πινάκων—ειδικά των πινάκων που είχε προτείνει ο Χάιζενμπεργκ—αποτυπώνεται επακριβώς από τον Ντιράκ στο ακόλουθο κείμενο [77]. Οι “κβαριθμοί” (q-numbers) στους οποίους αναφέρεται ο Ντιράκ είναι στην ουσία τελεστές.

“Από την πρώτη στιγμή, όταν είδα την αρχική εργασία του Χάιζενμπεργκ, θεώρησα ότι η πιο σημαντική ιδέα είναι ότι έχουμε δυναμικές μεταβλητές που ικανοποιούν μια μη μεταθετική άλγεβρα. Εισηγήγαγα ένα νέο όνομα γι’ αυτές τις δυναμικές μεταβλητές. Τις αποκάλεσα κβαριθμούς, ενώ τους συνηθισμένους αριθμούς των μαθηματικών, αν ήθελα να τους ξεχωρίσω, τους αποκάλεσα κλασικούς αριθμούς. Οι κβαριθμοί έγιναν μία νέα έννοια την οποία έπρεπε να συνηθίσουν οι φυσικοί. [...] Στην αρχή, μου φαίνονταν τελείως μυστηριώδεις. Έκανα διάφορες υποθέσεις γι’ αυτούς, μόνο και μόνο για να μπορέσω να αναπτύξω μια θεωρία και να την εφαρμόσω σε παραδείγματα και αυτές οι υποθέσεις ήταν συχνά λάθος. [...]

Αλλά ήταν ξεκάθαρο από τη σύνδεση με το φορμαλισμό του Χάιζενμπεργκ ότι κάποιες φορές μπορούσαμε να αντικαταστήσουμε τους κβαριθμούς με πίνακες. Εν τέλει, αποδείχτηκε ότι οι κβαριθμοί πάντα μπορούν να αντικατασταθούν από πίνακες, μπορούν να αναπαρασταθούν από πίνακες όπως λέμε σήμερα. Αλλά η αναπαράσταση μπορεί να γίνει με πολλούς διαφορετικούς τρόπους. Ο πίνακας θα πρέπει να γίνεται αντιληπτός σαν ένα σύνολο συντεταγμένων για τον κβαριθμό, ακριβώς όπως οι συντεταγμένες ενός διάνυσματος. Μπορεί κανείς να σκέφτεται ένα διάνυσμα ως ανεξάρτητο από κάθε σύστημα συντεταγμένων, και με τον ίδιο τρόπο μπορεί κανείς να θεωρεί ότι ο τελεστής υπάρχει ανεξάρτητα από κάθε αναπαράστασή του με πίνακες.”

5.1.2 Ιδιοτιμές και ιδιοδιάνυσματα

Έστω τελεστής \hat{A} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Κάθε διάνυσμα $\psi \in \mathcal{H}$ πλην του μηδενικού που ικανοποιεί τη σχέση $\hat{A}\psi = a\psi$, για κάποιο $a \in \mathbf{C}$, καλείται *ιδιοδιάνυσμα* του \hat{A} και η αντίστοιχη τιμή a *ιδιοτιμή* του \hat{A} .

Αν ϕ και ψ είναι δύο ιδιοδιανύσματα του τελεστή \hat{A} με την ίδια ιδιοτιμή, τότε και οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός $c_1\phi + c_2\psi$, όπου $c_1, c_2 \in \mathbf{C}$ είναι ιδιοδιάνυσμα του \hat{A} με την ίδια ιδιοτιμή. Αυτό σημαίνει ότι όλα τα ιδιοδιανύσματα ενός τελεστή με την ίδια ιδιοτιμή a ορίζουν έναν υπόχωρο V_a του χώρου Χίλμπερτ, ο οποίος καλείται *ιδιόχωρος* της ιδιοτιμής a .

Αν ένας τελεστής \hat{A} έχει την ίδια ιδιοτιμή a για δύο μη συγγραμμικά ιδιοδιανύσματα, τότε η ιδιοτιμή καλείται *εκφυλισμένη*. Σ' αυτήν την περίπτωση, ο ιδιόχωρος V_a έχει διάσταση μεγαλύτερη της μονάδας. Η διάσταση του V_a καλείται *βαθμός εκφυλισμού* ή απλά *εκφυλισμός* της ιδιοτιμής a .

Έστω ότι ο τελεστής \hat{A} ικανοποιεί την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\psi = a\psi$. Τότε ισχύουν τα ακόλουθα.

(i) $\hat{A}^n\psi = a^n\psi$, όπου $n = 1, 2, 3, \dots$

Απόδειξη. Για $n = 2$, $\hat{A}^2\psi = \hat{A}(a\psi) = a\hat{A}\psi = a^2\psi$. Με επαγωγή αποδεικνύεται για όλα τα n .

(ii) Για κάθε πολυώνυμο $f(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k$, ισχύει ότι $f(\hat{A})\psi = f(a)\psi$.

(iii) Αν ο \hat{A} έχει αντίστροφο, τότε $a \neq 0$.

Απόδειξη. Αν $\hat{A}\psi = 0$, τότε $\hat{A}^{-1}\hat{A}\psi = 0$, οπότε $\psi = 0$.

(iv) Εφόσον ο \hat{A}^{-1} υπάρχει, $\hat{A}^{-1}|\psi\rangle = a^{-1}|\psi\rangle$.

Παρατήρηση. Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ, Εξ. (3.12), δεν είναι παρά η εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή \hat{H} , Εξ. (5.7).

5.1.3 Μέτρα τελεστών

Ορισμός 5.2 Το μέτρο $\|\hat{A}\|$ ενός τελεστή \hat{A} ορίζεται ως

$$\|\hat{A}\| = \sup_{\psi \in \mathcal{H}} \frac{\|\hat{A}\psi\|}{\|\psi\|}. \quad (5.8)$$

Αν δεν υπάρχει άνω φράγμα (*supremum*) στην Εξ. (5.8) τότε το μέτρο του τελεστή είναι άπειρο.

Προσοχή, χρησιμοποιείται το ίδιο σύμβολο ($\|\cdot\|$) για το μέτρο διανύσματος και για το μέτρο τελεστή. Η διάκριση γίνεται από το περιεχόμενο της έκφρασης.

Ένας τελεστής με πεπερασμένο μέτρο καλείται *φραγμένος*. Ένας τελεστής με άπειρο μέτρο καλείται *μη φραγμένος*. Το σύνολο των φραγμένων τελεστών σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} συμβολίζεται ως $B(\mathcal{H})$.

Για όλους τους φραγμένους τελεστές \hat{A} και \hat{B} στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} , ισχύουν τα ακόλουθα.

(i) Αν $\|\hat{A}\| = 0$, τότε $\hat{A} = 0$.

(ii) $\|\lambda\hat{A}\| = |\lambda|\|\hat{A}\|$, για κάθε $\lambda \in \mathbf{C}$.

(iii) $\|\hat{A}\psi\| \leq \|\hat{A}\| \cdot \|\psi\|$, για κάθε $\psi \in \mathcal{H}$.

(iv) $\|\hat{A} + \hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| + \|\hat{B}\|$.

Απόδειξη. Για κάθε $\psi \in \mathcal{H}$ ισχύει ότι $\|(\hat{A} + \hat{B})\psi\| = \|\hat{A}\psi + \hat{B}\psi\| \leq \|\hat{A}\psi\| + \|\hat{B}\psi\| \leq (\|\hat{A}\| + \|\hat{B}\|)\|\psi\|$. Οπότε από τη σχέση (5.8) προκύπτει το ζητούμενο.

(v) (Ανισότητα Κωσύ-Σβαρτς για τελεστές.) $\|\hat{A}\hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| \cdot \|\hat{B}\|$.

Απόδειξη. $\|\hat{A}\hat{B}\psi\| \leq \|\hat{A}\|\|\hat{B}\psi\| \leq \|\hat{A}\|\|\hat{B}\|\|\psi\|$, για κάθε $\psi \in \mathcal{H}$. Από τη σχέση (5.8) προκύπτει το ζητούμενο.

Σε χώρο Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης ($\mathcal{H} = \mathbf{C}^n$), ένας τελεστής είναι απλά ένας μιγαδικός πίνακας διάστασης $n \times n$. Το μέτρο ενός πίνακα $n \times n$ είναι πάντα μικρότερο από την μεγαλύτερη απόλυτη τιμή ενός στοιχείου του επί n , δηλαδή είναι πεπερασμένο. Άρα όλοι οι τελεστές στο \mathbf{C}^n είναι φραγμένοι.

Σε άπειρες διαστάσεις υπάρχουν και μη-φραγμένοι τελεστές. Για παράδειγμα, ο τελεστής θέσης $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$ είναι μη-φραγμένος. Για να το αποδείξουμε θεωρούμε μία Γκαουσιανή συνάρτηση $\phi_0(x) = e^{-x^2/2} \in L^2(\mathbf{R})$. Ορίζουμε τις συναρτήσεις $\phi_a(x) = \phi_0(x - a)$ οι οποίες είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες για κάθε τιμή του a . Ο λόγος

$$\frac{\|\hat{x}\phi_a\|}{\|\phi_a\|} = \sqrt{a^2 + \frac{1}{2}}$$

μπορεί να γίνει οσοδήποτε μεγάλος θέλουμε, για επαρκώς μεγάλη τιμή του a . Άρα ο τελεστής \hat{x} δεν έχει πεπερασμένο μέτρο.

Οι μη-φραγμένοι τελεστές επιφέρουν συχνά επιπλοκές στην ανάλυση. Ο λόγος είναι ότι δεν ορίζεται η δράση τους σε όλα τα διανύσματα ενός χώρου Χίλμπερτ. Για παράδειγμα, η δράση του τελεστή θέσης \hat{x} στην τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση $\psi_0(x) = 1/\sqrt{x^2 + 1}$ δίνει τη συνάρτηση $x/\sqrt{x^2 + 1}$, η οποία δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

Το πεδίο ορισμού $D_{\hat{A}}$ ενός μη-φραγμένου τελεστή \hat{A} είναι το σύνολο των διανυσμάτων του χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} στα οποία ο \hat{A} ορίζεται καλά. Για να είναι χρήσιμος ένας τελεστής \hat{A} πρέπει το πεδίο ορισμού του να είναι ‘πυκνά’ καταμεμημένο μέσα στο χώρο Χίλμπερτ. Αυτό σημαίνει ότι για κάθε διάνυσμα ϕ εκτός του $D_{\hat{A}}$ μπορούμε να βρούμε γειτονικά διανύσματα μέσω των οποίων να προσδιορίζουμε με όσο καλή προσέγγιση θέλουμε τα στοιχεία πίνακα $(\hat{A}\phi, \psi)$, για όλα τα $\psi \in D_{\hat{A}}$.

Στο παράδειγμα που δώσαμε παραπάνω, όπου η δράση του \hat{x} δεν ορίζεται καλώς στη συνάρτηση $\psi_0(x) = 1/\sqrt{x^2 + 1}$, παρατηρούμε ότι δεν υπάρχει πρόβλημα με τη δράση του \hat{x} στις συναρτήσεις $\psi_\epsilon = e^{-\epsilon x^2}/\sqrt{x^2 + 1}$, για κάθε $\epsilon > 0$. Οπότε μπορούμε να ορίσουμε οποιοδήποτε στοιχείο πίνακα $(\hat{x}\psi_0, \phi)$ ως το όριο $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\hat{x}\psi_\epsilon, \phi)$.

Σ’ αυτό το βιβλίο, συνήθως θα αγνοούμε τις επιπλοκές σχετικά με το πεδίο ορισμού των μη-φραγμένων τελεστών. Όχι επειδή αυτές οι επιπλοκές δεν είναι σημαντικές, αλλά επειδή στα περισσότερα θέματα που θα μελετήσουμε ξέρουμε ότι τα προβλήματα που δημιουργούν είναι αντιμετωπίσιμα. Οπότε θυσιάζουμε τη μαθηματική ακρίβεια—η οποία είναι συχνά αρκετά χρονοβόρα—προκειμένου να εστιάσουμε στη φυσική σημασία των αποτελεσμάτων καθώς και στην ανάπτυξη πρακτικών εργαλείων για υπολογισμούς. Η λογική που θα ακολουθήσουμε είναι ότι θα δεχόμαστε ένα “τεκμήριο αθωότητας” για κάθε τελεστή που γράφεται εκπεφρασμένα: θα τον θεωρούμε καλώς ορισμένο μέχρι αποδείξεως του εναντίου. Βεβαίως, η ορθή μαθηματική πρακτική δουλεύει με τεκμήριο ενοχής: κανείς τελεστής δεν είναι καλά ορισμένος αν δεν το αποδείξει.

5.2 Είδη τελεστών

5.2.1 Κανονικοί τελεστές

Ορισμός 5.3 Κανονικός (*normal*) καλείται ένας τελεστής \hat{A} , ο οποίος ικανοποιεί $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A}$.

Αν ο \hat{A} είναι κανονικός τελεστής, και $\hat{A}\psi = a\psi$, τότε ισχύουν τα ακόλουθα.

- (i) Ο \hat{A}^\dagger έχει τα ίδια ιδιοδιανύσματα με τον \hat{A} με τις μιγαδικά συζυγείς ιδιοτιμές: $\hat{A}^\dagger\psi = a^*\psi$
Απόδειξη. $\|(\hat{A}^\dagger - a^*\hat{I})\psi\|^2 = ((\hat{A}^\dagger - a^*\hat{I})\psi, (\hat{A}^\dagger - a^*\hat{I})\psi) = ((\hat{A} - a\hat{I})(\hat{A}^\dagger - a^*\hat{I})\psi, \psi) = ((\hat{A}^\dagger - a^*\hat{I})(\hat{A} - a\hat{I})\psi, \psi) = 0$, αφού εξ ορισμού $(\hat{A} - a\hat{I})\psi = 0$. Οπότε καταλήγουμε ότι $\hat{A}^\dagger\psi = a^*\psi$.

(ii) $\hat{A}^\dagger \hat{A}\psi = |a|^2\psi$.

(iii) $\|\hat{A}\| = \sup_a |a|$, όπου το μέγιστο είναι ως προς όλες τις ιδιοτιμές a του \hat{A} .

Απόδειξη. Εφόσον $\|\hat{A}\psi\|^2 = (\hat{A}^\dagger \hat{A}\psi, \psi)$, το μέτρο του \hat{A} αντιστοιχεί στη μέγιστη ιδιοτιμή του τελεστή $\hat{A}^\dagger \hat{A}$, δηλαδή στη μέγιστη τιμή του $|a|^2$ ως προς όλες τις ιδιοτιμές a του \hat{A} .

Οι κανονικοί τελεστές είναι οι πλέον χρήσιμοι. Στη συνέχεια θα μελετήσουμε ειδικές περιπτώσεις κανονικών τελεστών, που έχουν σημαντικό ρόλο στην κβαντική μηχανική.

5.2.2 Αυτοσυζυγείς τελεστές

Ορισμός 5.4 Αυτοσυζυγής λέγεται ένας τελεστής \hat{A} που ικανοποιεί $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

Οι αυτοσυζυγείς τελεστές είναι προφανώς κανονικοί και έχουν δύο ιδιότητες που είναι εξαιρετικά χρήσιμες στην κβαντική θεωρία.

Πρόταση 5.5 Οι ιδιοτιμές ενός αυτοσυζυγούς τελεστή \hat{A} είναι πραγματικοί αριθμοί.

Απόδειξη. Εφόσον $\hat{A}\psi = a\psi$, ισχύει ότι $(\hat{A}\psi, \psi) = a(\psi, \psi)$ και $(\psi, \hat{A}\psi) = a^*(\psi, \psi)$. Από τον ορισμό του αυτοσυζυγή τελεστή $(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi)$, και άρα καταλήγουμε ότι $a = a^*$.

Πρόταση 5.6 Διανύσματα από διαφορετικούς ιδιόχωρους του \hat{A} είναι κάθετα μεταξύ τους. Δηλαδή αν $\hat{A}\psi = a\psi$ και $\hat{A}\phi = a'\phi$, με $a \neq a'$, τότε $(\phi, \psi) = 0$.

Απόδειξη. Από τις υποθέσεις παίρνουμε ότι $(\hat{A}\psi, \phi) = a(\psi, \phi)$ και $(\hat{A}\phi, \psi) = a'(\phi, \psi)$. Η δεύτερη σχέση γράφεται $(\phi, \hat{A}\psi) = a'(\phi, \psi)$ και εφόσον a' είναι πραγματικός, καταλήγουμε ότι $(a - a')(\phi, \psi) = 0$. Αφού από υπόθεση $a \neq a'$, καταλήγουμε στο ζητούμενο.

Σε κάθε ιδιόχωρο V_a του τελεστή \hat{A} μπορούμε να επιλέξουμε μία ορθοκανονική βάση, που αποτελείται έστω από τα διανύσματα $e_{a,1}, e_{a,2}, \dots, e_{a,g_a}$, όπου g_a ο εκφυλισμός της a . Το σύνολο όλων των διανυσμάτων $e_{a,i}$ για όλα τα a και όλα τα i ορίζει ένα ορθοκανονικό σύνολο από ιδιοδιανύσματα του \hat{A} .

Σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης, κάθε τέτοιο ορθοκανονικό σύνολο ορίζει βάση. Στο C^n , οι ιδιοτιμές ενός πίνακα A προκύπτουν από τη λύση της χαρακτηριστικής εξίσωσης $\det(\hat{A} - a\hat{I}) = 0$ ως προς a . Η χαρακτηριστική εξίσωση είναι πολυώνυμο n βαθμού, άρα έχει n λύσεις. Άρα κάθε ορθοκανονικό σύνολο ιδιοδιανυσμάτων το ορθοκανονικό σύνολο που κατασκευάζουμε έχει n διανύσματα. Άρα ορίζει βάση στο C^n . Αυτή η ιδιότητα δεν ισχύει απαραίτητα σε απειροδιάστατο χώρο Χίλμπερτ.

Παράδειγμα 5.2. Ο τελεστής $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$ είναι αυτοσυζυγής:

$$\begin{aligned} (\hat{p}\phi, \psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) i\phi'(x) = \psi^*(x)\phi(x)|_{-\infty}^{\infty} - i \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi^*)'(x)\phi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (i\psi^*)'(x)\phi(x) = (\phi, \hat{p}\psi). \end{aligned}$$

Χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις ϕ, ψ μηδενίζονται στο $\pm\infty$.

Παράδειγμα 5.3. Ο τελεστής Λεζάντρ \hat{L} στο χώρο Χίλμπερτ $L^2([-1, 1])$ ορίζεται ως

$$\hat{L}\psi(x) = -\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\psi(x)}{dx} \right]. \tag{5.9}$$

Εξετάζουμε κατά πόσο ο $\hat{\Lambda}$ δέχεται πολυωνυμικές λύσεις $\psi_\ell(x) = \sum_{n=0}^{\ell} c_n x^n$ βαθμού ℓ . Αντικαθιστώντας στην εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{\Lambda}\psi = \lambda\psi$ παίρνουμε

$$\sum_{n=0}^{\ell} [(n(n+1) - \lambda)c_n - (n+1)(n+2)c_{n+2}] x^n = 0. \quad (5.10)$$

Η Εξ. (5.10) δίνει μια αναδρομική σχέση για το c_{n+2} συναρτήσει του c_n . Για να είναι πολυωνυμική λύση πρέπει ο συντελεστής του c_ℓ να μηδενίζεται, που σημαίνει ότι $\lambda = \ell(\ell + 1)$. Άρα ο $\hat{\Lambda}$ δέχεται πολυώνυμα τάξης ℓ ως ιδιοδιανύσματα, για κάθε τιμή του $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Δεδομένου ότι ο $\hat{\Lambda}$ είναι αυτοσυζυγής, τα ιδιοδιανύσματα του ορίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο. Αλλά το μοναδικό τέτοιο σύνολο στο $L^2([-1, 1])$ αντιστοιχεί στα πολυώνυμα Λεζάντρ—προφανώς δεν είναι σύμπτωση το όνομα του $\hat{\Lambda}$. Καταλήγουμε ότι

$$\hat{\Lambda}P_\ell(x) = \ell(\ell + 1)P_\ell(x). \quad (5.11)$$

Δεδομένου ότι τα πολυώνυμα Λεζάντρ αντιστοιχούν σε μία ορθοκανονική βάση, δεν περιμένουμε να υπάρχουν άλλες τετραγωνικά ολοκληρώσιμες λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών.

5.2.3 Μοναδιαίοι τελεστές

Ορισμός 5.7 Μοναδιαίος (*unitary*) λέγεται κάθε τελεστής \hat{U} που ικανοποιεί τη σχέση $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Κάθε μοναδιαίος τελεστής \hat{U} είναι κανονικός, αφού εξ ορισμού $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$.

Παρατηρούμε ότι η σχέση $\hat{U}\psi = \lambda\psi$ συνεπάγεται ότι $\lambda^{-1}\psi = \hat{U}^{-1}\psi$. Εφόσον $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ το λ^{-1} είναι ιδιοτιμή του \hat{U}^\dagger με ιδιοδιάνυσμα ψ . Αλλά αφού ο \hat{U} είναι κανονικός, η ιδιοτιμή του \hat{U}^\dagger για το ιδιοδιάνυσμα ψ είναι η λ^* . Άρα οι ιδιοτιμές του \hat{U} ικανοποιούν $\lambda^* = \lambda^{-1}$ και άρα $|\lambda| = 1$, δηλαδή αντιστοιχούν σε σημεία του μοναδιαίου κύκλου στο μιγαδικό επίπεδο. Αυτό βεβαίως σημαίνει ότι $\|\hat{U}\| = 1$.

Μια σημαντική ιδιότητα των μοναδιαίων τελεστών είναι ότι αντιστοιχούν σε αλλαγή βάσης σε ένα χώρο Χίλμπερτ. Αυτό εκφράζεται από το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 5.8 Έστω δύο ορθοκανονικές βάσεις $\{e_i\}$ και $\{e'_i\}$. Υπάρχει ένας και μοναδικός μοναδιαίος τελεστής \hat{U} ώστε $e'_i = \hat{U}e_i$, για κάθε i .

Απόδειξη. Ορίζουμε τον τελεστή \hat{U} ως

$$\hat{U}\psi = \sum (\psi, e_i)e'_i$$

για κάθε διάνυσμα ψ . Ο \hat{U} είναι μοναδιαίος, γιατί για κάθε ζεύγος διανυσμάτων ϕ και ψ ,

$$(\hat{U}^\dagger\hat{U}\psi, \phi) = (\hat{U}\psi, \hat{U}\phi) = \sum_{i,j} (\psi, e_i)(\phi, e_j)^*(e'_i, e'_j) = \sum_{i,j} (\psi, e_i)(e_j, \phi)\delta_{ij} = \sum_i (\psi, e_i)(e_i, \phi) = (\psi, \phi)$$

και άρα $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$. Ομοίως δείχνεται ότι $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$.

Μια άλλη σημαντική ιδιότητα των μοναδιαίων τελεστών είναι ότι ορίζουν μετασχηματισμούς που διατηρούν τις ιδιοτιμές ενός τελεστή. Έστω $\hat{A}\psi = a\psi$. Ορίζουμε $\psi' = \hat{U}^\dagger\psi$. Τότε $\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\psi' = \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\psi = \hat{U}^\dagger\hat{A}\psi = a\hat{U}^\dagger\psi = a\psi'$, δηλαδή το ψ' είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}$ με ιδιοτιμή a . Άρα οι τελεστές $\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}$ και \hat{A} έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές.

Τέλος, παρατηρούμε ότι το γινόμενο δύο μοναδιαίων τελεστών είναι μοναδιαίος τελεστής. Αν \hat{U}_1 και \hat{U}_2 είναι μοναδιαίοι, τότε $\hat{U}_1\hat{U}_2(\hat{U}_1\hat{U}_2)^\dagger = \hat{U}_1\hat{U}_2\hat{U}_2^\dagger\hat{U}_1^\dagger = \hat{U}_1\hat{U}_1^\dagger = \hat{I}$.

Οπότε, το σύνολο $U(\mathcal{H})$ όλων των μοναδιαίων τελεστών σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι κλειστό ως προς τον πολλαπλασιασμό και ορίζει μία ομάδα, που καλείται *μοναδιαία ομάδα* του \mathcal{H} (για τον ορισμό της ομάδας, βλ. κεφ. 12).

Ένθετο 5.2. Επιπλοκές στον ορισμό αυτοσυζυγών τελεστών

Στο κεφάλαιο 5.1 ορίσαμε το συζυγή ενός τελεστή \hat{A} ενός τελεστή \hat{A} από την απαίτηση να ισχύει $(\hat{A}\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}^\dagger\psi)$ για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Αυτός ο ορισμός είναι εντάξει αν ο \hat{A} είναι φραγμένος. Αλλά για ένα μη φραγμένο τελεστή, το ϕ ανήκει στο πεδίο ορισμού $D_{\hat{A}}$ του \hat{A} και το ψ στο πεδίο ορισμού $D_{\hat{A}^\dagger}$ του \hat{A}^\dagger , τα οποία δεν ταυτίζονται απαραίτητα. Ακόμα και αν το $D_{\hat{A}}$ είναι ένα πυκνό σύνολο, δεν υπάρχει καμία εγγύηση ότι το $D_{\hat{A}^\dagger}$ θα είναι πυκνό.

Ο ορισμός ενός αυτοσυζυγή τελεστή, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ περιλαμβάνει και την ισότητα μεταξύ των αντιστοίχων πεδίων ορισμού, $D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^\dagger}$. Αυτό είναι μία μη τετριμμένη υπόθεση. Θα το διαπιστώσουμε εξετάζοντας τον τελεστή $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ ο οποίος ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = L^2([0, a])$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στο διάστημα $[0, a]$. Το πεδίο ορισμού του \hat{p} είναι πυκνό στο \mathcal{H} . Ωστόσο το πεδίο ορισμού του \hat{p}^\dagger , ο οποίος επίσης γράφεται $-i\frac{\partial}{\partial x}$ δεν είναι. Για να το δούμε, υπολογίζουμε

$$(\hat{p}\phi, \psi) - (\phi, \hat{p}^\dagger\psi) = -i \int_0^a dx (\psi^* \phi' + \psi'^* \phi) = -i \int_0^a (\psi^* \phi)'' = -i[\psi^*(a)\phi(a) - \psi^*(0)\phi(0)]. \quad (5.12)$$

Δεν υπάρχει περιορισμός στις τιμές $\phi(0), \phi(a)$, άρα ο μόνος τρόπος να δίνει μηδέν η Εξ. (5.12) είναι αν $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Δηλαδή το πεδίο ορισμού του \hat{p}^\dagger (στο οποίο ανήκει η ψ) είναι υποσύνολο του πεδίου ορισμού του \hat{p} , $D_{\hat{p}^\dagger} \subset D_{\hat{p}}$.

Από την άλλη, αν εξετάσουμε την Εξ. (5.12) βάζοντας στη θέση του \hat{p} τον \hat{p}^\dagger , βλέπουμε ότι δεν υπάρχει περιορισμός για τις τιμές $\psi(0)$ και $\psi(a)$, οπότε $D_{\hat{p}^\dagger} = D_{\hat{p}}$.

Ένας τελεστής \hat{A} καλείται *συμμετρικός* αν ικανοποιεί τη σχέση $(\hat{A}\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}^\dagger\psi)$, το πεδίο ορισμού του είναι πυκνό και ισχύει $D_{\hat{A}} \subseteq D_{\hat{A}^\dagger}$. Είναι προφανές ότι ο \hat{p}^\dagger είναι συμμετρικός, ενώ ο \hat{p} δεν είναι.

Ένας αυτοσυζυγής τελεστής είναι πάντα συμμετρικός, αλλά το αντίστροφο δεν ισχύει. Το πεδίο ορισμού ενός συμμετρικού τελεστή μπορεί να επεκταθεί ώστε να οριστεί ένας αυτοσυζυγής τελεστής, αλλά αυτό μπορεί να μη γίνεται με μοναδικό τρόπο.

Ως παράδειγμα, θεωρούμε τους τελεστές $\hat{p}_\theta = -i\frac{\partial}{\partial x}$ με πεδίο ορισμού όλες τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις ϕ στο $[0, a]$ που ικανοποιούν

$$\phi(a) = e^{i\theta}\phi(0). \quad (5.13)$$

Για να μηδενίζεται η Εξ. (5.12), πρέπει να ισχύει $\psi^*(a)e^{i\theta} = \psi^*(0)$, ή $\psi(a) = e^{i\theta}\psi(0)$, άρα $D_{\hat{p}_\theta} = D_{\hat{p}_\theta^\dagger}$. Άρα ο τελεστής \hat{p}_θ είναι αυτοσυζυγής εφόσον ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_θ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων που ικανοποιούν τη συνθήκη (5.13). Το ενδιαφέρον είναι ότι για διαφορετικές τιμές του θ παίρνουμε τελεστές \hat{p}_θ με ξένο μεταξύ τους πεδίο ορισμού. Στην κβαντική θεωρία, οι διαφορετικές επεκτάσεις αντιστοιχούν σε διαφορετικό χώρο Χίλμπερτ και άρα περιγράφουν διαφορετικό φυσικό σύστημα.

Συμπεραίνουμε ότι η απόδειξη ότι ένας μη-φραγμένος τελεστής \hat{A} είναι αυτοσυζυγής μπορεί να είναι εξαιρετικά δύσκολη. Είναι ευκολότερο να ορίσει κανείς φραγμένους τελεστές, γι' αυτό συχνά κανείς πρώτα εστιάζει στο ορισμό μοναδιαίων τελεστών της μορφής $\hat{U}_s = e^{is\hat{A}}$ για $s \in \mathbf{R}$. Σύμφωνα με το *θεώρημα του Στόουν* [78, 79, 80] αν υπάρχει μία οικογένεια μοναδιαίων τελεστών \hat{U}_s , η οποιοι ικανοποιούν την εξίσωση $\hat{U}_s\hat{U}_{s'} = \hat{U}_{s+s'}$ για κάθε $s, s' \in \mathbf{R}$ και είναι συνεχείς ως προς το s , τότε $\hat{U}_s = e^{is\hat{A}}$ για κάποιον αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} . Έτσι, αντί να ορίσει κανείς τον \hat{A} απευθείας, επιχειρεί να ορίσει μια οικογένεια μοναδιαίων τελεστών \hat{U}_s με τις παραπάνω ιδιότητες και μετά παίρνει τον \hat{A} ως $-i(\frac{d}{ds}\hat{U}_s)_{s=0}$.

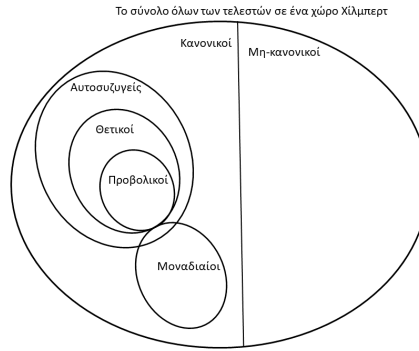
5.2.4 Θετικοί τελεστές

Ορισμός 5.9 Αν $(\hat{A}\psi, \psi) \geq 0$ για κάθε $\psi \in \mathcal{H}$ ο \hat{A} καλείται *θετικός* και γράφουμε $\hat{A} \geq 0$.

Ένας θετικός τελεστής είναι ένας αυτοσυζυγής τελεστής με μη-αρνητικές ιδιοτιμές. Αν $\hat{A}\psi = a\psi$ για $a < 0$, τότε θα ίσχυε $(\hat{A}\psi, \psi) = a(\psi, \psi) < 0$.

Παρατηρούμε ότι αν $\lambda > 0$ και $\hat{A} \geq 0, \hat{B} \geq 0$, τότε $\lambda\hat{A} + \hat{B} \geq 0$. Επίσης, $\hat{A}^\dagger\hat{A} \geq 0$ για κάθε τελεστή \hat{A} , αφού $(\hat{A}^\dagger\hat{A}\phi, \phi) = (\hat{A}\phi, \hat{A}\phi) = \|\hat{A}\phi\|^2 \geq 0$ για κάθε διάνυσμα ϕ .

Τέλος, ορίζουμε την έννοια της *ανισότητας* μεταξύ δύο αυτοσυζυγών τελεστών \hat{A} και \hat{B} : $\hat{A} \geq \hat{B}$, αν $\hat{A} - \hat{B} \geq 0$.



Σχήμα 5.1: Το σύνολο όλων των τελεστών σε ένα χώρο Χίλμπερτ και τα σημαντικότερα υπόσύνολά του.

5.2.5 Προβολικοί τελεστές

Ορισμός 5.10 Προβολικός λέγεται κάθε αυτοσυζυγής τελεστής \hat{P} που ικανοποιεί τη σχέση $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

Προκύπτει αμέσως ότι ιδιοτιμές ενός προβολικού τελεστή είναι 0 και 1. Αν $\hat{P}\psi = a\psi$, τότε $\hat{P}^2\psi = a^2\psi$. Αλλά καθώς $\hat{P}^2 = \hat{P}$, $a^2 = a$, οπότε $a = 0$ ή $a = 1$. Κάθε προβολικός τελεστής είναι θετικός.

Αν ψ είναι μοναδιαίο διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} , τότε ο τελεστής \hat{P}_ψ που ορίζεται από τη δράση $\hat{P}_\psi\phi = (\phi, \psi)\psi$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$ είναι προβολικός. Στο φορμαλισμό Ντιράκ γράφουμε $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$. Ο τελεστής \hat{P}_ψ καλείται μονοδιάστατος προβολικός τελεστής.

Ο παραπάνω ορισμός επεκτείνεται για κάθε ορθοκανονικό σύνολο $S = \{e_1, \dots, e_n\}$ με n διανύσματα. Ορίζουμε $\hat{P}_S\phi = \sum_{i=1}^n (\phi, e_i)e_i$ για κάθε $\phi \in \mathcal{H}$. Εύκολα δείχνεται ότι ο \hat{P}_S είναι προβολικός τελεστής. Στο φορμαλισμό Ντιράκ γράφεται ως $\hat{P}_S = \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i|$.

Σε κάθε υπόχωρο V του χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} αντιστοιχεί ο προβολικός τελεστής $\hat{P}_V\phi = \phi_V$, όπου ϕ_V είναι η προβολή του διανύσματος $\phi \in \mathcal{H}$ στον υπόχωρο V , όπως δίνεται από την Εξ. (4.23). Στο συμπληρωματικό υπόχωρο V^\perp αντιστοιχεί ο προβολικός τελεστής $\hat{P}_{V^\perp} = \hat{I} - \hat{P}_V$. Αντίστροφα, σε κάθε προβολικό τελεστή \hat{P} αντιστοιχεί ο ιδιόχωρος V_1 της ιδιοτιμής 1 του \hat{P} . Συμπεραίνουμε ότι υπάρχει μία μοναδική αντιστοίχιση προβολικών τελεστών και υπόχωρων σε κάθε χώρο Χίλμπερτ.

Για κάθε τελεστή \hat{A} , το γινόμενο $\hat{P}_V\hat{A}\hat{P}_V$ ορίζει έναν τελεστή στον υπόχωρο V , ο οποίος καλείται η προβολή του \hat{A} στον V .

5.3 Συναρτήσεις τελεστών

Είδαμε νωρίτερα πώς ορίζεται μια πολυωνυμική συνάρτηση ενός τελεστή. Βεβαίως όλες οι συναρτήσεις δεν είναι πολυωνυμικές, αλλά πολλές συναρτήσεις προσεγγίζονται αρκετά καλά από πολυώνυμα, οπότε χρησιμοποιώντας την έννοια του ορίου μπορούμε να ορίσουμε γενικότερες συναρτήσεις, τουλάχιστον για αυτοσυζυγείς τελεστές.

Γνωρίζουμε ότι οι αναλυτικές συναρτήσεις στο \mathbf{R} μπορούν να οριστούν σαν όρια πολυωνύμων, χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα τους κατά Τέιλορ. Για παράδειγμα, η εκθετική συνάρτηση $f(x) = e^x$ γράφεται ως όριο των πολυωνύμων $h_n(x) = \sum_{k=1}^n x^k/k!$, για $n \rightarrow \infty$. Αποδεικνύεται ότι μπορούμε να επεκτείνουμε τον ορισμό συναρτήσεων τελεστών $f(\hat{A})$ για όλες τις αναλυτικές συναρτήσεις $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$ και αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} .

Αλλά μπορούμε να θεωρήσουμε και όρια ακολουθιών αναλυτικών συναρτήσεων. Για παράδειγμα, η ακολουθία συναρτήσεων $f_n(x) = \frac{1}{2}(1 + \tanh(nx))$ συγκλίνει στο όριο $n \rightarrow \infty$ στη συνάρτηση βή-

ματος

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} . \quad (5.14)$$

Ομοίως, η ακολουθία συναρτήσεων

$$g_n(x) = f_n(x - a)f_n(b - x) \quad (5.15)$$

συγκλίνει στη χαρακτηριστική συνάρτηση $\chi_{[a,b]}(x)$ του διαστήματος $[a, b] \subset \mathbf{R}$.

Οπότε παίρνοντας τα κατάλληλα όρια στον ορισμό των συναρτήσεων μπορούμε να ορίσουμε το $f(\hat{A})$ για συναρτήσεις f που δεν είναι αναλυτικές και που έχουν σημεία ασυνέχειας. Οι γενικότερες συναρτήσεις για τις οποίες μπορεί να οριστεί συνάρτηση αυτοσυζυγών τελεστών καλούνται στα μαθηματικά *μετρήσιμες*. Σ' αυτό το βιβλίο, όταν μιλάμε για συναρτήσεις $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$ υπονοούμε πάντα ότι είναι μετρήσιμες. Γι αυτές τις συναρτήσεις η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\psi = a\psi$ συνεπάγεται ότι $f(\hat{A})\psi = f(a)\psi$. Γενικά, οποιαδήποτε αλγεβρική ιδιότητα χαρακτηρίζει μία συνάρτηση $f(x)$, θα χαρακτηρίζει και τους τελεστές $f(\hat{A})$.

Μια από τις πλέον χρήσιμες συναρτήσεις τελεστών είναι η *εκθετική* $e^{\hat{A}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n$. Για εκθετικά με φανταστικό όρισμα ισχύει η ταυτότητα $e^{ix}e^{-ix} = 1$ και άρα $e^{i\hat{A}}e^{-i\hat{A}} = \hat{I}$ για κάθε αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} . Λόγω της αυτοσυζυγίας, $(e^{i\hat{A}})^\dagger = e^{-i\hat{A}}$, οπότε $e^{i\hat{A}}(e^{i\hat{A}})^\dagger = \hat{I}$. Καταλήγουμε ότι οι τελεστές της μορφής $e^{i\hat{A}}$ για αυτοσυζυγείς \hat{A} είναι μοναδιαίοι.

Επίσης πολύ χρήσιμη είναι η *χαρακτηριστική συνάρτηση* χ_U ενός υποσυνόλου U του \mathbf{R} . Δεδομένου ότι μια χαρακτηριστική συνάρτηση χ_U παίρνει μόνο τιμές 0 και 1 ισχύει ότι $\chi_U^2 = \chi_U$. Οπότε για κάθε αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} , ισχύει ότι $\chi_U(\hat{A}) = \chi_U(\hat{A})^2$. Καταλήγουμε ότι οι τελεστές της μορφής $\chi_U(\hat{A})$ για αυτοσυζυγείς \hat{A} είναι προβολικοί.

Άλλες χρήσιμες συναρτήσεις τελεστών είναι η n -στη ρίζα θετικών τελεστών \hat{A} : $\sqrt[n]{\hat{A}}$, μέσω της οποίας ορίζεται και η *απόλυτη τιμή* ενός τελεστή ως $|\hat{A}| := \sqrt{\hat{A}^\dagger \hat{A}}$.

Τέλος, αναφέρουμε ότι η ταυτότητα $(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots$ της γεωμετρικής σειράς για $|x| < 1$, έχει την αντίστοιχη της για αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} με $\|\hat{A}\| < 1$,

$$(1 - \hat{A})^{-1} = 1 + \hat{A} + \hat{A}^2 + \hat{A}^3 + \dots, \quad (5.16)$$

η οποία όπως θα δούμε έχει πολλές εφαρμογές.

5.4 Μεταθέτες τελεστών

5.4.1 Ορισμός και ιδιότητες

Ορισμός 5.11 *Μεταθέτης* δυο τελεστών \hat{A} και \hat{B} καλείται ο τελεστής $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Παρατηρούμε ότι αν \hat{A} και \hat{B} είναι αυτοσυζυγείς τελεστές, τότε και ο τελεστής $\hat{C} = i[\hat{A}, \hat{B}]$ είναι αυτοσυζυγής. Όντως, $\hat{C}^\dagger = -i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = -i(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = -i[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{C}$.

Αν δύο τελεστές \hat{A} και \hat{B} ικανοποιούν τη σχέση $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, τότε λέμε ότι οι \hat{A} και \hat{B} *μετατίθενται*.

Οι παρακάτω ιδιότητες των μεταθετών αποδεικνύονται με κατευθείαν χρήση του ορισμού.

1. $[\hat{A}, \hat{I}] = 0$.
2. $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.
3. $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$.

4. $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.
 5. $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$. ταυτότητα Γιακόμπι (Jacobi).

Η ιδιότητα 4 παραπάνω σημαίνει ότι αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, τότε και $[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} = 0$. Επαγωγικά βρίσκουμε αμέσως ότι για κάθε ακέραιο n , $[\hat{A}^n, \hat{B}] = 0$. Άρα και για κάθε συνάρτηση f που μπορεί να προσδιοριστεί από διαδοχικά όρια συναρτήσεων ξεκινώντας από πολυώνυμο θα ισχύει ότι $[f(\hat{A}), \hat{B}] = 0$.

Έστω δύο αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} και \hat{B} , όπου $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Αν $\hat{A}\phi = a\phi$, τότε $\hat{A}\hat{B}\phi = \hat{B}\hat{A}\phi = a\hat{B}\phi$, δηλαδή το διάνυσμα $\hat{B}\phi$ είναι ιδιοδιάνυσμα του \hat{A} . Αν η ιδιοτιμή a δεν είναι εκφυλισμένη, τότε $\hat{B}\phi = b\phi$ για κάποια σταθερά b . Αν η ιδιοτιμή a είναι εκφυλισμένη, μπορούμε πάντα να βρούμε ένα ιδιοδιάνυσμα ϕ του \hat{A} που να ικανοποιεί $\hat{B}\phi = b\phi$. Η απόδειξη έχει ως εξής.

Έστω V_a ο αντίστοιχος ιδιόχωρος, και e_i μια ορθοκανονική βάση στο V_a . Κατασκευάζουμε τον πίνακα $B_{ij} = (\hat{B}e_i, e_j)$. Κάθε ιδιοδιάνυσμα c_i του πίνακα B_{ij}^T , ικανοποιεί τη σχέση $\sum_i B_{ij}c_i = bc_j$ για μια σταθερά b . Θέτοντας $\phi = \sum_i c_i e_i$

$$\hat{B}\phi = \sum_j (\hat{B}\phi, e_j)e_j = \sum_{i,j} c_i (\hat{B}e_i, e_j)e_j = \sum_{i,j} c_i B_{ij}e_j = b \sum_j c_j e_j = b\phi. \quad (5.17)$$

Καταλήγουμε ότι υπάρχουν διανύσματα $\phi_{a,b}$ τα οποία ικανοποιούν $\hat{A}\phi_{a,b} = a\phi_{a,b}$ και $\hat{B}\phi_{a,b} = b\phi_{a,b}$ για κάθε ιδιοτιμή a του \hat{A} και b του \hat{B} . Άρα για κάθε ζεύγος τιμών (a, b) υπάρχει ένας υπόχωρος $\hat{V}_{a,b}$, που είναι κοινός ιδιόχωρος των \hat{A} και \hat{B} .

5.4.2 Σημαντικές ταυτότητες

Ιδιαίτερα χρήσιμη είναι η σχέση των μεταθετών με τις εκθετικές συναρτήσεις τελεστών, η οποία αποτυπώνεται στα δύο ακόλουθα θεωρήματα.

Θεώρημα 5.12 Ταυτότητα BCH (Baker–Campbell–Hausdorff).

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = \exp \left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{12}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \right).$$

Σκιαγράφημα της απόδειξης. Έστω $\hat{C} = \log[e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}]$. Γράφουμε $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = (1 + \hat{A} + \frac{1}{2}\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\hat{A}^3 \dots)(1 + \hat{B} + \frac{1}{2}\hat{B}^2 + \frac{1}{3!}\hat{B}^3 + \dots) = 1 + (\hat{A} + \hat{B}) + \frac{1}{2}(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + 2\hat{A}\hat{B}) + \frac{1}{6}(\hat{A}^3 + 3\hat{A}^2\hat{B} + 3\hat{A}\hat{B}^2 + \hat{B}^3) + \dots$ Αντικαθιστούμε στη σειρά για το λογάριθμο $\log(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 + \dots$ προκειμένου να υπολογίσουμε το \hat{C} . Κρατώντας μέχρι τρίτης τάξης όρους ως προς \hat{A} και \hat{B} επαληθεύεται το ανάπτυγμα μέχρι αυτήν την τάξη. Για υψηλότερες τάξεις απαιτούνται περισσότεροι όροι ήδη από το ανάπτυγμα του εκθετικού¹.

Θεώρημα 5.13 Ταυτότητα του Χάνταμαρ (Hadamard)

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

Απόδειξη. Θεωρούμε τον τελεστή $\hat{C}(s) = e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}}$ και παίρνουμε ανάπτυγμα Τέιλορ γύρω από το $s = 0$. Στο τέλος θέτουμε $s = 1$. Ο πρώτος όρος στο ανάπτυγμα Τέιλορ είναι $\hat{C}(0) = \hat{B}$. Βρίσκουμε $\frac{d}{ds}\hat{C}(s) = \hat{A}e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} - e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}}\hat{A} = \hat{A}\hat{C}(s) - \hat{C}(s)\hat{A}$, οπότε ο δεύτερος όρος στο ανάπτυγμα Τέιλορ είναι $\hat{C}'(0) = [\hat{A}, \hat{C}(0)] = [\hat{A}, \hat{B}]$. Ομοίως, στον υπολογισμό του τρίτου όρου βρίσκουμε $\hat{C}''(0) = [\hat{A}, \hat{C}'(0)]$, και γενικά ο όρος n -στης παραγώγου $\hat{C}^{(n)}(0) = [\hat{A}, \hat{C}^{(n-1)}(0)]$. Αθροίζοντας τους όρους του αναπτύγματος Τέιλορ καταλήγουμε στο ζητούμενο.

Άμεση συνέπεια της ταυτότητας BCH είναι ο τύπος γινομένου του Τρότερ (Trotter) [83].

¹Για περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα, βλ. το σχετικό άρθρο της wikipedia [81], ενώ για υπολογισμό της σειράς βλ. το πρόγραμμα στο mathworld [82].

Πρόταση 5.14 Για κάθε τελεστή \hat{A} και \hat{B} , $e^{\hat{A}+\hat{B}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\hat{A}/n} e^{\hat{B}/n} \right)^n$.

Απόδειξη. Η ταυτότητα BCH μας δίνει ότι $e^{\hat{A}/n} e^{\hat{B}/n} = \exp[\hat{A}/n + \hat{B}/n + O(n^{-2})]$. Οπότε στο όριο μεγάλου n , $e^{\hat{A}/n} e^{\hat{B}/n} = \hat{I} + \frac{1}{n}(\hat{A} + \hat{B}) + O(n^{-2})$, και άρα $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\hat{A}/n} e^{\hat{B}/n} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\hat{I} + \frac{1}{n}(\hat{A} + \hat{B}) \right)^n = e^{\hat{A}+\hat{B}}$.

5.4.3 Ο μεταθέτης του Χάιζενμπεργκ

Ιδιαίτερα σημαντική είναι η περίπτωση των μεταθετών τελεστών θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} που ικανοποιούν τη σχέση του Χάιζενμπεργκ (3.6), $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hat{I}$. Σ' αυτήν την περίπτωση βρίσκουμε

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = in\hat{x}^{n-1}. \quad (5.18)$$

Ο όρος στο δεξί μέλος είναι η παράγωγος της x^n . Οπότε για κάθε συνάρτηση $f(x)$ (που μπορεί να οριστεί από όρια πολυωνύμων) παίρνουμε

$$[f(\hat{x}), \hat{p}] = if'(\hat{x}). \quad (5.19)$$

Κατά τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε ότι $[\hat{x}, f(\hat{p})] = if'(\hat{p})$.

Οι μοναδιαίοι τελεστές

$$\hat{V}(a, b) = \exp(ia\hat{x} - ib\hat{p}), \quad (5.20)$$

όπου a και b πραγματικοί αριθμοί καλούνται *τελεστές του Βάουλ (Weyl)*.

Το γινόμενο δυο τελεστών Βάουλ $\hat{V}(a_1, b_1)$ και $\hat{V}(a_2, b_2)$ υπολογίζεται με την ταυτότητα BCH. Βρίσκουμε ότι $[ia_1\hat{x} - ib_1\hat{p}, ia_2\hat{x} - ib_2\hat{p}] = i(a_1b_2 - a_2b_1)\hat{I}$. Αλλά αφού ο πρώτος μεταθέτης στο ανάπτυγμα είναι ανάλογος της μονάδας, οι όροι που περιέχουν πάνω από δυο μεταθέτες στην ταυτότητα BCH μηδενίζονται, οπότε παίρνουμε την απλή έκφραση

$$\hat{V}(a_1, b_1)\hat{V}(a_2, b_2) = \hat{V}(a_1 + a_2, b_1 + b_2)e^{\frac{i}{2}(a_2b_1 - a_1b_2)}. \quad (5.21)$$

Για να δούμε τη σημασία των τελεστών Βάουλ, υπολογίζουμε

$$\hat{V}^{-1}(a, b)\hat{x}\hat{V}(a, b) = \hat{x} + b\hat{I} \quad \hat{V}^{-1}(a, b)\hat{p}\hat{V}(a, b) = \hat{p} + a\hat{I} \quad (5.22)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα του Χάνταμαρ. Βλέπουμε ότι ο τελεστής $\hat{V}(a, b)$ μετατοπίζει τη θέση κατά b και την ορμή κατά a .

Αυτή η ιδιότητα του τελεστή Βάουλ επιβεβαιώνεται από τη δράση του σε κυματοσυναρτήσεις. Η Εξ. (5.21) για $a_1 = a, a_2 = 0, b_1 = 0$ και $b_2 = -b$ δίνει $\hat{V}(a, -b) = e^{\frac{i}{2}ab}\hat{V}(a, 0)\hat{V}(0, -b)$, ή ισοδύναμα,

$$e^{ia\hat{x}+ib\hat{p}} = e^{\frac{i}{2}ab}e^{ia\hat{x}}e^{ib\hat{p}}. \quad (5.23)$$

Η δράση του $e^{ib\hat{p}}$ σε μία κυματοσυνάρτηση ψ βρίσκεται ως

$$e^{ib\hat{p}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ib)^n}{n!} \hat{p}^n \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b^n}{n!} \frac{d^n \psi(x)}{dx^n} = \psi(x + b), \quad (5.24)$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την έκφραση του αναπτύγματος Τέιλор. Βλέπουμε ότι η κυματοσυνάρτηση μετατοπίζεται κατά b από τη δράση του $e^{ib\hat{p}}$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (5.23) καταλήγουμε ότι

$$e^{ia\hat{x}+ib\hat{p}}\psi(x) = e^{\frac{i}{2}ab+ibx}\psi(x + b). \quad (5.25)$$

Από εδώ και στο εξής θα χρησιμοποιούμε το φορμαλισμό Ντιράκ.

5.5 Το φασματικό θεώρημα σε πεπερασμένες διαστάσεις

Με το φασματικό θεώρημα μεταβαίνουμε στο φορμαλισμό Ντιράκ. Ο φορμαλισμός Ντιράκ είναι άβολος για τις αποδείξεις των ως τώρα αποτελεσμάτων, αλλά στο φασματικό θεώρημα τονίζονται τα δυνατά του σημεία. Άλλωστε το κίνητρο ανάπτυξής του ήταν ακριβώς η μελέτη του φάσματος τελεστών.

Η σημασία του φασματικού θεωρήματος πηγάζει από τη θέση του Χάιζενμπεργκ, ότι τα φυσικά μεγέθη στην κβαντική θεωρία είναι τελεστές (πίνακες). Ωστόσο οι μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων καταλήγουν πάντα σε απλούς αριθμούς ως τιμές των φυσικών ποσοτήτων. Ο μοναδικός τρόπος να πάρει κανείς με φυσικό τρόπο αριθμούς από πίνακες είναι προσδιορίζοντας τις ιδιοτιμές τους, ή γενικότερα, το φάσμα τους.

Θα εξετάσουμε πρώτα την περίπτωση του φασματικού θεωρήματος σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης. Εδώ το βασικά αποτελέσματα είναι ήδη γνωστά από τη θεωρία πινάκων και αρκεί να τα βάλουμε στην κατάλληλη λογική σειρά.

5.5.1 Απόδειξη του φασματικού θεωρήματος

Έστω αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} στο χώρο C^N . Θα εξετάσουμε πρώτα την περίπτωση που δεν υπάρχει εκφυλισμός, δηλαδή ο \hat{A} έχει διαφορετικές ιδιοτιμές a_n , για $n = 1, 2, \dots, N$. Σε κάθε ιδιοτιμή αντιστοιχεί μία κανονικοποιημένη ιδιοκατάσταση $|n\rangle$, που είναι μοναδική εκτός από αλλαγές φάσης $|n\rangle \rightarrow e^{i\theta}|n\rangle$.

Το σύνολο των N ιδιοκαταστάσεων $|n\rangle$ ορίζει μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ C^N , οπότε έχουμε την ανάλυση της μονάδας $\hat{I} = \sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n|$. Για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$,

$$\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A} \sum_{n=1}^N \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_{n=1}^N \langle n|\psi\rangle \hat{A}|n\rangle = \sum_{n=1}^N a_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle. \quad (5.26)$$

Καταλήγουμε ότι

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^N a_n |n\rangle\langle n|. \quad (5.27)$$

Θεωρούμε τώρα τη γενικότερη περίπτωση όπου ο αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} στο χώρο C^N έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές. Τότε υπάρχουν K διαφορετικές ιδιοτιμές, όπου $K < N$. Σε κάθε ιδιοτιμή a_n , $n = 1, 2, \dots, K$ αντιστοιχεί ένας ιδιόχωρος V_n , 'διάστασης D_n , έτσι ώστε $\sum_{n=1}^K D_n = N$.

Ορίζουμε μία ορθοκανονική βάση σε κάθε υπόχωρο V_n . Συμβολίζουμε τα αντίστοιχα διανύσματα ως $|n, i_n\rangle$, $i_n = 1, 2, \dots, D_n$. Εξ ορισμού $\langle n, i_n | n, j_n \rangle = \delta_{i_n j_n}$. Ο προβολικός τελεστής που αντιστοιχεί στο V_n είναι

$$\hat{P}_n = \sum_{i_n} |n, i_n\rangle\langle n, i_n|. \quad (5.28)$$

Θα αποκαλούμε τους τελεστές \hat{P}_n φασματικούς προβολείς του \hat{A} .

Τα διανύσματα $|n, i_n\rangle$ είναι ιδιοδιανύσματα του \hat{A} . Δύο διανύσματα $|n, i_n\rangle$ και $|m, i_m\rangle$ με $n \neq m$ ανήκουν σε διαφορετικούς υπόχωρους, άρα είναι μεταξύ τους κάθετα, $\langle n, i_n | m, j_m \rangle = 0$. Αυτό σημαίνει ότι $\hat{P}_n \hat{P}_m = 0$, αν $n \neq m$. Ισχύει βεβαίως ότι $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$, άρα καταλήγουμε στην ιδιότητα αμοιβαίου αποκλεισμού

$$\hat{P}_n \hat{P}_m = \hat{P}_n \delta_{nm} \quad (5.29)$$

Το σύνολο των διανυσμάτων $|n, i_n\rangle$ για όλα τα n ορίζει μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^N , αφού περιέχει $\sum_{n=1}^K D_n = N$ κανονικοποιημένα και αμοιβαίως ορθογώνια διανύσματα. Από την ανάλυση της μονάδας

$$\sum_{n=1}^K \sum_{i_n=1}^{D_n} |n, i_n\rangle \langle n, i_n| = \hat{I}, \quad (5.30)$$

και από την Εξ. (5.28) παίρνουμε καταλήγουμε στην ιδιότητα εξάντλησης

$$\sum_{n=1}^K \hat{P}_n = 1. \quad (5.31)$$

Οι όροι "ιδιότητα εξάντλησης" και "ιδιότητα αμοιβαίου αποκλεισμού" προϋποθέτουν την ερμηνεία των φασματικών προβολών ως ενδεχόμενα, την οποία θα αναπτύξουμε στο κεφ. 5.8. Σημαίνουν ότι ένα ενδεχόμενο θα πραγματοποιηθεί οπωσδήποτε (εξάντληση άλλων εναλλακτικών) και ότι αν πραγματοποιηθεί ένα από αυτά αποκλείεται να πραγματοποιηθεί κάποιο άλλο.

Αν δράσουμε τον \hat{A} πάνω σε ένα διάνυσμα $|\psi\rangle$ και χρησιμοποιήσουμε την ανάλυση της μονάδας (5.30) παίρνουμε

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^K a_n \hat{P}_n, \quad (5.32)$$

της οποίας η Εξ. (5.27) είναι ειδική περίπτωση.

Από το γεγονός ότι οι ιδιοτιμές του $f(\hat{A})$ είναι $f(a)$ συμπεραίνουμε ότι

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=1}^K f(a_n) \hat{P}_n. \quad (5.33)$$

Καταλήξαμε λοιπόν στο ακόλουθο αποτέλεσμα.

Θεώρημα 5.15 Φασματικό θεώρημα σε χώρο Χίλμπερτ πεπερασμένων διαστάσεων. Κάθε αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} χαρακτηρίζεται από ένα σύνολο ιδιοτιμών a_n και ένα σύνολο φασματικών προβολών \hat{P}_n , όπου $n = 1, 2, \dots, K$. Οι φασματικοί προβολείς ικανοποιούν τις ιδιότητες αμοιβαίου αποκλεισμού ($\hat{P}_n \hat{P}_m = \hat{P}_n \delta_{nm}$) και εξάντλησης $\sum_{n=1}^K \hat{P}_n = 1$. Για κάθε συνάρτηση $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$ ισχύει ότι $f(\hat{A}) = \sum_{n=1}^K f(a_n) \hat{P}_n$.

Σε ότι ακολουθεί, όταν γράφουμε έναν αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} ως $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$, θα υπονοείται ότι a_n είναι οι ιδιοτιμές του και \hat{P}_n οι αντίστοιχοι φασματικοί προβολείς.

Παράδειγμα 5.4. Στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^3 θεωρούμε τον τελεστή/πίνακα

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3i \\ 0 & -3i & 1 \end{pmatrix}.$$

Η χαρακτηριστική εξίσωση $\det(\hat{A} - \lambda \hat{I}) = 0$, οδηγεί στην πολυωνυμική εξίσωση

$$(\lambda + 2)(\lambda^2 - 2\lambda - 8) = 0,$$

με μία διπλά εκφυλισμένη λύση $\lambda = -2$ και μία απλή λύση $\lambda = 4$. Το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda = 4$ είναι το

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$$

Στην ιδιοτιμή $\lambda = -2$ αντιστοιχούν όλα τα ιδιοδιανύσματα της μορφής

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ic_2 \end{pmatrix},$$

όπου $c_1, c_2 \in \mathbf{C}$, τα οποία ορίζουν έναν δισδιάστατο ιδιόχωρο V_{-2} . Διαλέγουμε μία ορθοκανονική βάση στο V_{-2} με τα διανύσματα

$$|-2, a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-2, b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

Ο φασματικός προβολέας που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda = 4$ είναι

$$\hat{P}_4 = |4\rangle\langle 4| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} (0 \quad -i \quad 1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}.$$

Ο φασματικός προβολέας που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda = -2$ είναι

$$\begin{aligned} \hat{P}_{-2} &= |-2, a\rangle\langle -2, a| + |-2, b\rangle\langle -2, b| \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \quad 0 \quad 0) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} (0 \quad 1 \quad -i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Οπότε η φασματική ανάλυση του \hat{A} δίνει

$$\hat{A} = (-2) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + (4) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}.$$

Υπολογίζουμε τον τελεστή $e^{i\hat{A}x}$

$$e^{i\hat{A}x} = e^{-2ix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + e^{4ix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}.$$

5.5.2 Διάταξη των ιδιοτιμών

Υπάρχει ένα σημαντικό θεώρημα που οφείλεται στον Βάουλ, σύμφωνα με το οποίο η ανισότητα μεταξύ τελεστών επάγει ανισότητα μεταξύ των αντίστοιχων ιδιοτιμών.

Έστω \hat{A} αυτοσυζυγής τελεστής στο \mathbf{C}^N . Ορίζουμε την *αύξουσα διάταξη* των ιδιοτιμών του \hat{A} , ως την ακολουθία πραγματικών αριθμών a_n , για $n = 1, 2, \dots, N$, στην οποία κάθε ιδιοτιμή του \hat{A} με εκφυλισμό D εμφανίζεται D διαδοχικές φορές, και

$$a_n \leq a_m \quad \text{για κάθε } n < m.$$

Θεώρημα 5.16 (Θεώρημα διάταξης του Βάυλ.) Αν \hat{A} και \hat{B} αυτοσυζυγείς τελεστές στο \mathcal{C}^N , με αύξουσες ακολουθίες ιδιοτιμών a_n και b_n αντίστοιχα, και $\hat{A} \geq \hat{B}$, τότε $a_n \geq b_n$ για κάθε $n = 1, 2, \dots, N$.

Δηλαδή, η μικρότερη ιδιοτιμή του \hat{A} είναι μεγαλύτερη από τη μικρότερη ιδιοτιμή του \hat{B} , η δεύτερη μικρότερη ιδιοτιμή του \hat{A} είναι μεγαλύτερη από τη δεύτερη μικρότερη ιδιοτιμή του \hat{B} , κ.ο.κ.

Η απόδειξη του θεωρήματος δίνεται στο ένθετο 5.2. Γενικεύεται για αυτοσυζυγείς τελεστές σε απειροδιάστατο χώρο Χίλμπερτ [84]. Η σημασία του θεωρήματος έγκειται στο ότι μας επιτρέπει να χρησιμοποιούμε ανισότητες τελεστών, προκειμένου να βρούμε ιδιότητες των ιδιοτιμών ενός τελεστή ακόμα κι αν δεν τις έχουμε υπολογίσει εκπεφρασμένα.

Ένθετο 5.3. Το θεώρημα max-min και το θεώρημα διάταξης του Βάυλ

Σε ότι ακολουθεί, θα συμβολίσουμε την αύξουσα ακολουθία ιδιοτιμών ενός τελεστή \hat{A} ως $\mu_n(\hat{A})$ ($n = 1, 2, \dots, N$).

Έστω μία ορθοκανονική βάση $|n\rangle$ από ιδιοδιανύσματα του τελεστή \hat{A} στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^N και κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle$ με $\sum_{n=1}^N |c_n|^2 = 1$. Δεδομένου ότι $\mu_1(\hat{A}) \leq \mu_n(\hat{A})$ για κάθε n ,

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 \mu_n(\hat{A}) \geq \mu_1(\hat{A}) \sum_{n=1}^N |c_n|^2 = \mu_1(\hat{A}),$$

και άρα $\mu_1(\hat{A}) = \min_{\|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

Περιοριζόμαστε σε διανύσματα $|\psi\rangle$ κάθετα στο $|1\rangle$, $|\psi\rangle = \sum_{n=2}^N c_n |n\rangle$. Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε ότι $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \geq \mu_2(\hat{A})$ και άρα

$$\mu_2(\hat{A}) = \min_{\|\psi\|=1, \langle 1 | \psi \rangle = 0} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (5.34)$$

Επαγωγικά βρίσκουμε για κάθε n

$$\mu_n(\hat{A}) = \min_{\|\psi\|=1, \langle 1 | \psi \rangle = 0, \dots, \langle n-1 | \psi \rangle = 0} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Ας εξετάσουμε το ελάχιστο της ποσότητας $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ για $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle$ κάθετο σε ένα τυχαίο διάνυσμα $|\phi\rangle = \sum_{n=1}^N d_n |n\rangle$, δηλαδή $\sum_{n=1}^N c_n d_n^* = 0$. Το ελάχιστο βρίσκεται με τη μέθοδο των πολλαπλασιαστών του Λαγκράνζ, δηλαδή ορίζουμε τη συνάρτηση

$$I(c_n) = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 \mu_n(\hat{A}) - \lambda \sum_{n=1}^N c_n d_n^* = 0,$$

όπου λ σταθερά, και βρίσκουμε το ελάχιστό της. Απαιτώντας $\partial I / \partial c_n = c_n^* \mu_n(\hat{A}) - \lambda d_n^*$, βρίσκουμε ότι $c_n^* = \lambda d_n^* / \mu_n(\hat{A})$. Η τιμή της σταθεράς λ , βρίσκεται από την απαίτηση $\sum_{n=1}^N |c_n|^2 = 1$, που δίνει $\lambda^2 = \left(\sum_{n=1}^N |d_n|^2 / \mu_n(\hat{A})^2 \right)^{-1}$. Η συνθήκη καθετότητας $\langle \phi | \psi \rangle = 0$ δεν αλλάζει αν επιλέξουμε τα d_n να ικανοποιούν τη συνθήκη $\sum_{n=1}^N |d_n|^2 / \mu_n(\hat{A})^2 = 1$, έτσι ώστε $\lambda = 1$. Έτσι παίρνουμε

$$\min_{\|\psi\|=1, \langle \phi | \psi \rangle = 0} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{n=1}^N \frac{|d_n|^2}{\mu_n(\hat{A})}. \quad (5.35)$$

Ας θεωρήσουμε ότι τα d_n είναι μεταβλητές. Παρατηρούμε ότι η ποσότητα (5.35) μεγιστοποιείται όταν όλα τα d_n είναι 0 εκτός από το d_1 που παίρνει τιμή $\mu_n(\hat{A})$. Αυτό σημαίνει ότι $|\phi\rangle \sim |1\rangle$, οπότε ισχύει η Εξ. (5.34). Δείξαμε λοιπόν ότι

$$\mu_2(\hat{A}) = \max_{|\phi\rangle} \min_{\|\psi\|=1, \langle \phi | \psi \rangle = 0} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Ισοδύναμα, δεδομένου ότι το διάνυσμα $|\phi\rangle$ ορίζει ένα μονοδιάστατο υπόχωρο V ,

$$\mu_2(\hat{A}) = \max_{V, \dim V=1} \min_{|\psi\rangle \in V^\perp, \|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Η παραπάνω σχέση γενικεύεται άμεσα για κάθε n , και μας δίνει το λεγόμενο *θεώρημα max-min*, γνωστό και ως *θεώρημα Κουράν-Φίσερ* (Courant-Fischer)

Θεώρημα 5.17 Για κάθε $n = 1, 2, \dots, N$,

$$\mu_n(\hat{A}) = \max_{V, \dim V=n-1} \min_{|\psi\rangle \in V^\perp, \|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Πλέον μπορούμε να αποδείξουμε το *θεώρημα διάταξης του Βάουλ*. Έστω δύο αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{C} και \hat{D} στο \mathcal{C}^N . Το *θεώρημα max-min* σημαίνει ότι

$$\begin{aligned} \mu_n(\hat{C} + \hat{D}) &= \max_{V, \dim V=n-1} \min_{|\psi\rangle \in V^\perp, \|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle + \max_{V, \dim V=n-1} \min_{|\psi\rangle \in V^\perp, \|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle \\ &\geq \max_{V, \dim V=n-1} \min_{|\psi\rangle \in V^\perp, \|\psi\|=1} \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle + \mu_1(\hat{D}) = \mu_n(\hat{C}) + \mu_1(\hat{D}). \end{aligned}$$

Αν $\hat{D} \geq 0$, τότε $\mu_1(\hat{D}) \geq 0$, οπότε η παραπάνω ανισότητα δίνει

$$\mu_n(\hat{C} + \hat{D}) \geq \mu_n(\hat{C}) \tag{5.36}$$

Θέτοντας $\hat{C} = \hat{A}$ και $\hat{D} = \hat{A} - \hat{B}$, για δύο αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} και \hat{B} , με $\hat{A} \geq \hat{B}$, η Εξ. (5.36) οδηγεί στο ζητούμενο.

5.6 Το γενικό φασματικό θεώρημα

5.6.1 Γενικευμένες ιδιοτιμές

Σε χώρους Χίλμπερτ άπειρης διάστασης πρέπει να επανεξεταστεί ο ορισμός της ιδιοτιμής και του ιδιοδιανύσματος γιατί δεν είναι επαρκής να αποδώσει αυτό που διαισθητικά θέλουμε σε μία φυσική περιγραφή, δηλαδή τις ιδιοτιμές να αντιστοιχούν στις μετρήσιμες τιμές ενός φυσικού μεγέθους.

Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα τον τελεστή της ορμής $\hat{p} = -i\partial/\partial x$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$. Οι συναρτήσεις $\phi_p(x) = e^{ipx}$ ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{p}\phi_p = p\phi_p$, αλλά δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, οπότε δεν ανήκουν στο χώρο Χίλμπερτ. Οπότε υπό αυτήν την έννοια ο τελεστής της ορμής δεν έχει ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις. Βεβαίως, αυτό είναι απαράδεκτο, δεν μπορεί μία θεμελιώδη φυσική ποσότητα να μην έχει μετρήσιμες τιμές. Ο Ντιράκ πρότεινε ότι με κάποιο τρόπο θα μπορούσαμε να ορίσουμε *ket* $|p\rangle$ που να ικανοποιούν τη σχέση $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$, έτσι ώστε να μπορούμε να μιλάμε για *γενικευμένες ιδιοτιμές* τις ορμής και να λέμε ότι ο τελεστής της ορμής να έχει *συνεχές φάσμα*.

Το ζήτημα είναι πώς πρέπει να οριστούν αυτά τα *ket*, με τρόπο που να είναι μαθηματικά ορθός. Υπάρχουν δύο επιλογές. Η πρώτη είναι να γενικεύσουμε την έννοια της ιδιοτιμής. Ορίζουμε το *φάσμα* $\sigma(\hat{A})$ ενός τελεστή \hat{A} ως ένα σύνολο που περιέχει τις ιδιοτιμές του \hat{A} (το διακριτό φάσμα) καθώς και άλλα στοιχεία τα οποία αντιστοιχούν σε συνεχείς ποσότητες (το συνεχές φάσμα)—βλ. Ένθετο 5.3. Σ' αυτήν την περίπτωση τα *ket* τύπου $|p\rangle$ δεν αντιστοιχούν σε αυτόνομα μαθηματικά αντικείμενα, αλλά αποτελούν συντομογραφία εκφράσεων που περιλαμβάνουν όρια ακολουθιών. Η δεύτερη επιλογή είναι να επεκτείνουμε το χώρο Χίλμπερτ σε ένα μεγαλύτερο διανυσματικό χώρο, ο οποίος να δέχεται τα *ket* του Ντιράκ ως στοιχεία. Η μέθοδος αυτή περιγράφεται στο Ένθετο 5.4.

Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε την πρώτη μέθοδο, αλλά αντί να μπούμε στη λογική των αυστηρών αποδείξεων, θα εξετάσουμε μια χαρακτηριστική περίπτωση, τον τελεστή της ορμής.

Ένθετο 5.4. Γενικός ορισμός φάσματος τελεστή

Ορισμός 5.18 *Φάσμα* $\sigma(\hat{A})$ ενός τελεστή \hat{A} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι το σύνολο όλων των μιγαδικών αριθμών λ για τους οποίους ο τελεστής $\hat{A} - \lambda\hat{I}$ δεν έχει φραγμένο αντίστροφο.

Παραδείγματα.

1. Κάθε ιδιοτιμή λ του \hat{A} ανήκει στο $\sigma(\hat{A})$, αφού ο τελεστής $\hat{A} - \lambda\hat{I}$ έχει μια μηδενική ιδιοτιμή, άρα δεν έχει αντίστροφο.
2. Έστω ο τελεστής \hat{x} στο $L^2(\mathbf{R}, dx)$. Ο τελεστής $\hat{x} - \lambda\hat{I}$ δρα πολλαπλασιαστικά σε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις $\psi(x)$. Ο αντίστροφος του αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό μίας συνάρτησης $\psi(x)$ με $(x - \lambda)^{-1}$. Γράφοντας $\lambda = \lambda_R + i\lambda_I$, υπολογίζουμε

$$\|(\hat{x} - \lambda)^{-1}\psi\|^2 = \int dx \frac{|\psi(x)|^2}{(x - \lambda_R)^2 + \lambda_I^2} \leq \frac{1}{|\lambda_I|^2} \int dx |\psi(x)|^2 = \frac{\|\psi\|^2}{|\lambda_I|^2}, \quad (5.37)$$

οπότε ο τελεστής $(\hat{x} - \lambda)^{-1}$ είναι φραγμένος για $\lambda_I \neq 0$. Για $\lambda_I = 0$, το $\|(\hat{x} - \lambda)^{-1}\psi\|^2$ αποκλίνει για κάθε ψ που δε μηδενίζεται στο $x = \lambda_R$. Άρα ο $(\hat{x} - \lambda)^{-1}$ δεν είναι φραγμένος αν $\lambda_I = 0$, οπότε $\sigma(\hat{x}) = \mathbf{R}$.

3. Έστω ο τελεστής $\hat{H} = -\partial_x^2$ στο $L^2(\mathbf{R}, dx)$. Έστω $\psi(p)$ ο μετασχηματισμός Φουριέ της συνάρτησης $\psi(x)$. Τότε $\hat{H}\psi(x) = \int dp e^{-ipx} p^2 \psi(p)$, οπότε $(\hat{H} - \lambda\hat{I})^{-1}\psi(x) = \int dp e^{-ipx} (p^2 - \lambda)^{-1} \psi(p)$. Υπάρχουν τιμές του p για τις οποίες μηδενίζεται ο παρονομαστής μόνο αν $\lambda \geq 0$. Άρα, ο τελεστής $(\hat{H} - \lambda\hat{I})^{-1}$ είναι μη-φραγμένος για $\lambda \geq 0$, οπότε $\sigma(\hat{H}) = \mathbf{R}^+$.

Τύποι φάσματος

Οι ιδιοτιμές του τελεστή \hat{A} ορίζουν το υποσύνολο $\sigma_p(\hat{A})$ του $\sigma(\hat{A})$, που καλείται *διακριτό φάσμα* ή *σημειακό φάσμα* του τελεστή. Αν $\lambda \in \sigma_p(\hat{A})$, τότε το διάνυσμα $(\hat{A} - \lambda\hat{I})^{-1}\psi$ δεν ορίζεται για κανένα διάνυσμα $\psi \in V_\lambda$, όπου V_λ ο αντίστοιχος ιδιόχωρος του \hat{A} .

Το *συνεχές φάσμα* (absolutely continuous spectrum) $\sigma_c(\hat{A})$ του τελεστή \hat{A} αποτελείται από όλα τα σημεία του φάσματος $\sigma(\hat{A})$ για τα οποία το πεδίο τιμών του τελεστή $(\hat{A} - \lambda\hat{I})$ καλύπτει πυκνά όλο το χώρο Χίλμπερτ. Ισοδύναμα $\lambda \in \sigma_c(\hat{A})$ αν το πεδίο ορισμού του τελεστή $(\hat{A} - \lambda\hat{I})^{-1}$ καλύπτει πυκνά όλο το χώρο Χίλμπερτ.

Αυτό σημαίνει καταρχάς ότι δεν μπορούμε να βρούμε κάποιον υπόχωρο V του \mathcal{H} έτσι ώστε το $(\hat{A} - \lambda\hat{I})^{-1}\psi$ να μην ορίζεται για κάθε $\psi \in V$. Αυτή είναι και η βασική διαφορά από την περίπτωση του σημειακού φάσματος.

Στο παράδειγμα 2 παραπάνω, το διάνυσμα $(x - \lambda)^{-1}\psi(x)$ για $\lambda \in \mathbf{R}$ δεν ορίζεται για όσες συναρτήσεις ικανοποιούν $\psi(\lambda) \neq 0$. Δεδομένου ότι αυτή η συνθήκη αφορά μόνο ένα σημείο, μπορούμε για κάθε συνάρτηση $\psi(x)$ να βρούμε μία συνάρτηση $\psi_\epsilon(x)$, η οποία να ταυτίζεται με την $\psi(x)$ παντού εκτός από μία περιοχή εύρους ϵ γύρω από το λ , όπου η ψ_ϵ μηδενίζεται. Τότε το διάνυσμα $(x - \lambda)^{-1}\psi_\epsilon(x)$ είναι καλώς ορισμένο. Μπορούμε να προσεγγίσουμε το $(x - \lambda)^{-1}\psi(x)$ με όση ακρίβεια θέλουμε παίρνοντας επαρκώς μικρό ϵ . Άρα ο τελεστής $(x - \lambda)^{-1}$ είναι πυκνά ορισμένος στο χώρο Χίλμπερτ, οπότε το φάσμα του \hat{x} είναι συνεχές.

Το *ανώμαλο φάσμα* (singular spectrum) $\sigma_s(\hat{A})$ αντιστοιχεί σε ‘περίεργα’ υποσύνολα της ευθείας των πραγματικών, όπως το σύνολο του Καντόρ ή τα λεγόμενα φράκταλ. Στις φυσικές εφαρμογές, πολύ σπάνια εμφανίζονται τελεστές με ανώμαλο φάσμα.

Το συνολικό φάσμα ενός τελεστή \hat{A} είναι η ένωση των επιμέρους υποσυνόλων του, $\sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A}) \cup \sigma_s(\hat{A})$. Ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} σπάει σε τρεις υπόχωρους ως $\mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_c \oplus \mathcal{H}_s$.

5.6.2 Η συνάρτηση δέλτα

Έστω ο τελεστής της ορμής $\hat{p} = -i\partial_x$ στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}, dx)$. Θεωρούμε την οικογένεια συναρτήσεων

$$f_{p,\epsilon}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx - \frac{1}{2}\epsilon x^2}, \quad (5.38)$$

για σταθερή τιμή p της ορμής και $\epsilon > 0$. Αυτές οι συναρτήσεις είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, άρα αντιστοιχούν σε ένα κερ $|p, \epsilon\rangle$. Ορίζουμε το κερ $|p\rangle$ από τη σχέση

$$\langle p|\psi\rangle := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle p, \epsilon|\psi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx - \frac{1}{2}\epsilon x^2} \psi(x) \quad (5.39)$$

για κάθε $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Εφόσον το όριο μπορεί να περάσει μέσα στο ολοκλήρωμα, το μπράκετ $\langle p|\psi\rangle$ ταυτίζεται με το μετασχηματισμό Φουριέ της συνάρτησης ψ : $\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ipx} \psi(x)$. Άρα το όριο (5.39) ορίζεται καλώς.

Επίσης βρίσκουμε ότι $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (-i\partial_x f_{p,\epsilon} - p f_{p,\epsilon}) = 0$. Αυτό σημαίνει ότι

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \psi | (\hat{p} - p\hat{I}) | p, \epsilon \rangle = 0, \quad (5.40)$$

για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$.

Γράφουμε τη σχέση (5.40) ως

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle. \quad (5.41)$$

Η Εξ. (5.41) είναι η γενικευμένη εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή της ορμής. Τονίζουμε ότι είναι συντομογραφία της Εξ. (5.40). Τα κερ $|p\rangle$ δεν είναι πραγματικά διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ, αλλά μαθηματικά αντικείμενα που ορίζονται ως όρια μέσω της Εξ. (5.39).

Το εσωτερικό γινόμενο $\langle p, \epsilon | p', \epsilon \rangle$ ισούται με $\delta_\epsilon(p - p')$, όπου

$$\delta_\epsilon(\xi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon}} e^{-\frac{\xi^2}{4\epsilon}}. \quad (5.42)$$

Η συνάρτηση $\delta_\epsilon(\xi)$ παίρνει θετικές τιμές, είναι άρτια και επίσης ικανοποιεί τα ακόλουθα.

- (i) $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(\xi) = 0$ για $\xi \neq 0$.
- (ii) $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(0) = \infty$.
- (iii) $\int d\xi \delta_\epsilon(\xi) = 1$.
- (iv) $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d\xi \xi^n \delta_\epsilon(\xi) = 0$, για κάθε θετικό ακέραιο n .

Οι ιδιότητες (iii) και (iv) παραπάνω σημαίνουν ότι για οποιαδήποτε αναλυτική συνάρτηση $f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k$, $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d\xi f(\xi) \delta_\epsilon(\xi) = c_0 = f(0)$.

Το όριο των συναρτήσεων $\delta_\epsilon(\xi)$ για $\epsilon \rightarrow 0$, συμβολίζεται ως $\delta(\xi)$ και καλείται *συνάρτηση δέλτα του Ντιράκ*. Η συνάρτηση δέλτα δεν είναι κυριολεκτικά συνάρτηση, αλλά ένα μαθηματικό αντικείμενο που καλείται *κατανομή*, το οποίο ικανοποιεί πολλές αλγεβρικές και αναλυτικές ιδιότητες των συνηθισμένων συναρτήσεων.

Οι κατανομές ορίζονται συνήθως από τη δράση τους σε συνηθισμένες συναρτήσεις μέσω ολοκληρωμάτων. Δηλαδή ορίζουμε μία κατανομή ω ως ένα κανόνα που σε κάθε λεία και τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση f αντιστοιχεί έναν αριθμό $\omega(f)$, έτσι ώστε να ισχύει η συνθήκη γραμμικότητας $\omega(af + g) = a\omega(f) + \omega(g)$. Επειδή η γραμμικότητα σημαίνει άθροιση ή ολοκλήρωση, συχνά γράφουμε $\omega(f) = \int dx \rho(x) f(x)$, για κάποια συνάρτηση $\rho(x)$.

Το θέμα είναι ότι η τιμή $\omega(f)$ μπορεί να οριστεί και ως όριο. Έστω ότι εμείς έχουμε μία ακολουθία συναρτήσεων $\rho_n(x)$, η οποία δε συγκλίνει σε κάποια συνάρτηση $\rho(x)$ για $n \rightarrow \infty$. Ένα παράδειγμα είναι μία ακολουθία συναρτήσεων $\delta_{\epsilon_n}(x)$ σύμφωνα με την Εξ. (5.42) όπου η ακολουθία ϵ_n ικανοποιεί $\lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n = 0$. Αν το όριο $\lim_{n \rightarrow \infty} \int dx \rho_n(x) f(x)$ υπάρχει για όλες τις αναλυτικές συναρτήσεις f , τότε ορίζει μία κατανομή $\omega(f)$. Καταχρηστικά γράφουμε αυτή την κατανομή ως $\omega(f) = \int dx \rho(x) f(x)$, δηλαδή εμφανίζουμε μία ποσότητα $\rho(x)$, την οποία μεταχειριζόμαστε συμβολικά ως συνάρτηση, παρότι στην πραγματικότητα δεν είναι. Με αυτόν τον καταχρηστικό τρόπο χρησιμοποιούμε το όνομα "κατανομή" και για το $\rho(x)$.

Η παραπάνω λογική αντανακλάται στον ορισμό της συνάρτησης δέλτα που ακολουθεί.

Ορισμός 5.19 Συνάρτηση δέλτα είναι μία κατανομή $\delta(x)$, η οποία ικανοποιεί την ιδιότητα

$$\int dx f(x)\delta(x) = f(0) \tag{5.43}$$

για κάθε αναλυτική συνάρτηση f που μηδενίζεται για $x \rightarrow \pm\infty$.

Η σχέση (5.43) εννοεί ότι η συνάρτηση δέλτα προκύπτει ως όριο συναρτήσεων όπως η δ_ϵ της Εξ. (5.42). Αλλά η μορφή (5.42) δεν είναι περιοριστική, πολλές διαφορετικές συναρτήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να ορίσουν συναρτήσεις δ . Για παράδειγμα, μία Λορεντζιανή κατανομή στο όριο μηδενικού εύρους γ ορίζει μία συνάρτηση δ ,

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + x^2)} = \delta(x). \tag{5.44}$$

Οι ιδιότητες της συνάρτησης δέλτα δεν εξαρτώνται από τον τρόπο με τον οποίο η συνάρτηση δέλτα προσδιορίζεται ως όριο, αλλά προκύπτουν από τη βασική σχέση (5.43). Για παράδειγμα, για να αποδείξουμε ότι η συνάρτηση δέλτα είναι άρτια, αντικαθιστούμε το $\delta(x)$ με $\delta(-x)$ στο ολοκλήρωμα (5.43). Παίρνουμε, $\int dx \delta(-x)f(x) = \int dy \delta(y)f(-y) = \delta(0) = \int dx \delta(x)f(x)$. Δεδομένου ότι αυτή η ισότητα ισχύει για κάθε αναλυτική συνάρτηση f , καταλήγουμε ότι

$$\delta(x) = \delta(-x). \tag{5.45}$$

Με την ίδια λογική, αποδεικνύουμε το ακόλουθο θεώρημα, για τον υπολογισμό της συνάρτησης δέλτα όταν το όρισμα της είναι μια παραγωγίσιμη συνάρτηση g του x .

Θεώρημα 5.20 $\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}$, όπου x_i είναι οι λύσεις της εξίσωσης $g(x_i) = 0$ και $g'(x_i) \neq 0$.

Απόδειξη. Εφόσον η συνάρτηση δέλτα μηδενίζεται παντού εκτός από το 0 μας ενδιαφέρει, η συμπεριφορά της g πολύ μόνο κοντά στις ρίζες της. Σε μία μικρή περιοχή U_i γύρω από τη ρίζα x_i , η συνάρτηση $y = g(x)$ είναι 1-1. Περιορίζοντας το πεδίο τιμών της g στο $V_i = g(U_i)$, μπορεί να οριστεί η αντίστροφή της $g^{-1} : V_i \rightarrow U_i$, η οποία ικανοποιεί $g^{-1}(0) = x_i$. Οπότε,

$$\int_{U_i} dx \delta(g(x))f(x) = \int_{V_i} dy \delta(y) \frac{f(g^{-1}(y))}{|g'(g^{-1}(y))|} = \frac{f(g^{-1}(0))}{|g'(g^{-1}(0))|} = \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|} = \frac{1}{|g'(x_i)|} \int_{U_i} dx \delta(x - x_1)f(x).$$

όπου στο πρώτο βήμα αλλάξαμε τη μεταβλητή της ολοκλήρωσης σε $y = g(x)$.

Άρα

$$\int dx \delta[g(x)]f(x) = \sum_i \int_{U_i} dx \delta(g(x))f(x) \sum_i |g'(x_i)|^{-1} \int dx \delta(x - x_i)f(x)$$

για κάθε f , απ' όπου προκύπτει το ζητούμενο.

Ειδικά για $g(x) = ax$, το θεώρημα 5.20 δίνει $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$.

Παράδειγμα 5.5. Θεωρούμε ως $g(x) = \sin x$. Η εξίσωση $\sin x = 0$ έχει λύσεις $x_n = n\pi$, για $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Καθώς $(\sin x)' = \cos x$, $g'(x_n) = \cos(n\pi) = (-1)^n$. Το θεώρημα (5.18) δίνει $\delta(\sin x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n\pi)$.

Στη συνέχεια αποδεικνύουμε δύο σημαντικές ταυτότητες με τη συνάρτηση δέλτα.

(i) $\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx} = 2\pi\delta(x)$.

Απόδειξη. Ισχύει ότι $\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx - \frac{1}{2}\epsilon x^2} = \sqrt{\pi/\epsilon} e^{-\frac{p^2}{4\epsilon}} = 2\pi\delta_\epsilon(x)$, όπου η δ_ϵ δίνεται από την Εξ. (5.42). Το ζητούμενο προκύπτει στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$.

(ii) Έστω $\theta(x)$ η συνάρτηση βήματος: $\theta(x) = 0$ για $x < 0$ και $\theta(x) = 1$ για $x \geq 0$. Ισχύει ότι $\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x)$.

Απόδειξη. Θεωρούμε μία αναλυτική συνάρτηση $f(x)$, με $f(\pm\infty) = 0$. Ισχύει ότι $\int_{-\infty}^{\infty} dx\theta'(x)f(x) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\theta(x)f'(x) = -\int_0^{\infty} f'(x)dx = -[f(\infty) - f(0)] = f(0)$. Από τον ορισμό της συνάρτησης δέλτα καταλήγουμε στο ζητούμενο.

Ο ορισμός της συνάρτησης δέλτα μας επιτρέπει να γράψουμε το εσωτερικό γινόμενο $\langle p, \epsilon | p', \epsilon \rangle$ στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$, ως

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p'). \quad (5.46)$$

Ένθετο 5.5. Τροποποιημένος χώρος Χίλμπερτ

Είδαμε στο κεφ. 4.4 ότι ο δυϊκός χώρος \mathcal{H}^* ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι ο χώρος των γραμμικών συναρτήσεων από το \mathcal{H} στο \mathcal{C} . Είδαμε ότι το θεώρημα του Ρις δηλώνει την 1-1 και επί αντιστοιχία μεταξύ ενός χώρου Χίλμπερτ και του δυϊκού του.

Η έννοια του δυϊκού χώρου Χίλμπερτ ορίζεται σε γενικό γραμμικό χώρο, αλλά στη γενική περίπτωση δεν υπάρχει αντίστοιχο του θεωρήματος του Ρις. Ισχύει μάλιστα η εξής ιδιότητα. Αν Φ είναι ένα υποσύνολο ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} που αποτελεί διανυσματικό χώρο, τότε οι αντίστοιχοι δυϊκοί χώροι ικανοποιούν τη σχέση $\mathcal{H}^* \subset \Phi^*$. Δεδομένου ότι βάσει του θεωρήματος του Ρις, ο \mathcal{H} μπορεί να ταυτιστεί με το δυϊκό του \mathcal{H}^* καταλήγουμε ότι

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^*. \quad (5.47)$$

Η παραπάνω σχέση μας επιτρέπει να ορίζουμε γενικευμένα ιδιοδιανύσματα $|p\rangle$ ως στοιχεία του χώρου Φ^* . Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$ και ως Φ το σύνολο των λείων συναρτήσεων, που μηδενίζονται στο άπειρο πιο γρήγορα από $|x|^{-a}$ για κάποιο $a > 0$. Τότε η συνάρτηση δέλτα $\delta(x)$ ανήκει στο δυϊκό χώρο Φ^* , γιατί η απεικόνιση

$$f \in \Phi \rightarrow \int dx\delta(x)f(x) = f(0), \quad (5.48)$$

ορίζει μία γραμμική απεικόνιση από το Φ στο \mathcal{C} . Κατ' αυτόν τον τρόπο όλα τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα με φυσικό ενδιαφέρον μπορούν να εκφραστούν ως στοιχεία του χώρου Φ^* .

Η τριπλέτα $(\Phi, \mathcal{H}, \Phi^*)$ που κάνει εφικτό τον ορισμό των γενικευμένων ιδιοδιανυσμάτων καλείται *τροποποιημένος χώρος Χίλμπερτ* (rigged Hilbert space).

5.6.3 Φασματικό θεώρημα για τον τελεστή της ορμής

Το βασικό αποτέλεσμα για το φάσμα του τελεστή της ορμής είναι το ακόλουθο.

Θεώρημα 5.21 Για κάθε συνάρτηση $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$,

$$f(\hat{p}) = \int dp f(p) |p\rangle \langle p|, \quad (5.49)$$

όπου τα $\text{ket } |p\rangle$ ορίζονται από την Εξ. (5.39).

Απόδειξη. Αρκεί να αποδείξουμε την Εξ. (5.49) για $f(p) = p^n$, για $n = 0, 1, 2, \dots$. Η Εξ. (5.49) θα ισχύει για πολυώνυμα και για όλες τις συναρτήσεις που μπορούν να κατασκευαστούν με διαδοχικά όρια πολυωνύμων.

Από την Εξ. (5.39) $\langle p | \psi \rangle = (2\pi)^{-1/2} \int dx e^{-ipx} \psi(x)$. Έστω $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in L^2(\mathbf{R})$. Ορίζουμε

$$\begin{aligned} I &= \int dp p^n \langle \phi | p \rangle \langle p | \psi \rangle = \int dp dx dx' p^n \phi^*(x') e^{ip(x'-x)} \psi(x) \\ &= \int \frac{dp}{2\pi} dx dx' p^n e^{ip(x'-x)} \phi^*(x') \psi(x). \end{aligned}$$

Καθώς $\int \frac{dp}{2\pi} p^n e^{ipx} = (-i\partial_x)^n \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipx} = (-i\partial_x)^n \delta(x)$, παίρνουμε $I = \int dx dx' (-i\partial_{x'})^n \delta(x'-x) \phi^*(x') \psi(x)$. Ολοκληρώνοντας κατά παράγοντες,

$$\begin{aligned} I &= \int dx dx' \delta(x-x') (-i\partial_{x'})^n \phi^*(x') \psi(x) = \int dx (-i\partial_x)^n \phi^*(x) \psi(x) \\ &= \int dx \phi^*(x) (-i\partial_x)^n \psi(x) = \langle \phi | \hat{p}^n | \psi \rangle, \end{aligned}$$

όπου όλοι οι συνοριακοί όροι που υπολογίζονται στο $x = \pm\infty$ μηδενίζονται για τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις. Αποδείξαμε το ζητούμενο δεδομένου ότι η παραπάνω σχέση ισχύει για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$.

Η αντιστοιχία με το φασματικό θεώρημα σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένων διαστάσεων είναι προφανής. Υπάρχουν βέβαια διαφορές: εδώ αντί για άθροιση έχουμε ολοκλήρωση και η ποσότητα $|p\rangle\langle p|$ δεν είναι πραγματικός τελεστής, αλλά εννοείται ως όριο. Παρατηρούμε ότι για $f(p) = 1$, η Εξ. (5.49) δίνει την ανάλυση της μονάδας $\int dp |p\rangle\langle p| = \hat{I}$, ενώ για $f(p) = p$ δίνει $\int dp p |p\rangle\langle p| = \hat{p}$.

Για κάθε υποσύνολο U του \mathbf{R} , ορίζουμε τον προβολικό τελεστή

$$\hat{P}_U = \chi_U(\hat{p}) = \int_U dp |p\rangle\langle p|, \quad (5.50)$$

ο οποίος όπως θα δούμε αντιστοιχεί στο ενδεχόμενο η μέτρηση της ορμής να δώσει τιμή μέσα στο U . Οι τελεστές \hat{P}_U καλούνται φασματικοί προβολείς της ορμής.

5.6.4 Γενική διατύπωση του φασματικού θεωρήματος

Η περίπτωση της ορμής είναι ενδεικτική για τελεστές με συνεχές φάσμα. Ωστόσο στη γενική περίπτωση ένας αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} έχει και συνεχές και διακριτό (σημειακό) φάσμα. Ευτυχώς αυτά διαχωρίζονται: ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} μπορεί να γραφεί ως $\mathcal{H}_c \oplus \mathcal{H}_d$, όπου οι υπόχωροι \mathcal{H}_c και \mathcal{H}_d αντιστοιχούν στο συνεχές και στο διακριτό φάσμα του τελεστή.

Το διακριτό φάσμα του τελεστή \hat{A} αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές του τελεστή και συνήθως η περιγραφή του δε διαφέρει από αυτήν για χώρο Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης, εκτός από το ότι ο αριθμός των ιδιοτιμών μπορεί να είναι άπειρος. Σημειώνουμε ότι αν δεν υπάρχει συνεχές φάσμα, το ορθοκανονικό σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων του τελεστή ορίζει ορθοκανονική βάση στο \mathcal{H} .

Το συνεχές φάσμα όμως μπορεί να είναι αρκετά πιο πολύπλοκο από αυτό του τελεστή της ορμής, που εξετάσαμε προηγουμένως. Μπορεί, για παράδειγμα, να υπάρχει εκφυλισμός στις γενικευμένες ιδιοτιμές ενός τελεστή. Ωστόσο, το κοινό σημείο είναι η ύπαρξη των φασματικών προβολέων.

Έστω $\sigma_c(\hat{A}) \subset \mathbf{R}$ το συνεχές φάσμα του \hat{A} , δηλαδή το σύνολο των γενικευμένων ιδιοτιμών του \hat{A} . Για κάθε υποσύνολο U του $\sigma_c(\hat{A})$ υπάρχει ένας φασματικός προβολέας $\hat{P}_U = \chi_U(\hat{A})$, όπως και στην περίπτωση της ορμής. Η διαφορά από την περίπτωση της ορμής είναι ότι εν γένει η μορφή του \hat{P}_U είναι πιο πολύπλοκη από την Εξ. (5.50).

Αν έχουν οριστεί οι φασματικοί προβολείς για έναν αυτοσυζυγή τελεστή, μπορούμε να ορίσουμε τον 'τελεστή' \hat{P}_λ , που προβάλλει στο σημείο λ του φάσματος, ως

$$\hat{P}_\lambda \delta\lambda = \hat{P}_{[\lambda, \lambda+\delta\lambda]} \quad (5.51)$$

στο όριο όπου $\delta\lambda \rightarrow 0$. Ο \hat{P}_λ δεν είναι καλώς ορισμένος τελεστής, είναι το αντίστοιχο του $|p\rangle\langle p|$ για τον τελεστή της ορμής, ορίζεται μόνο ως όριο. Χρησιμοποιώντας τον \hat{P}_λ μπορούμε πάντα να γράψουμε το φασματικό θεώρημα για γενικό τελεστή \hat{A} με συνεχές φάσμα, ως

$$f(\hat{A}) = \int f(\lambda) \hat{P}_\lambda d\lambda. \quad (5.52)$$

5.6.5 Ο τελεστής της θέσης

Ο τελεστής της θέσης \hat{x} στο $L^2(\mathbf{R}, dx)$ γράφεται ως

$$\hat{x} = \int dx x |x\rangle \langle x|, \quad (5.53)$$

όπου τα κets $|x\rangle$ ικανοποιούν τη σχέση

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \quad (5.54)$$

Θα ορίσουμε τα κets $|x\rangle$ ως όρια κανονικών διανυσμάτων του χώρου Χίλμπερτ. Θεωρούμε τις συναρτήσεις

$$f_\epsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon^2}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\epsilon^2}\right], \quad (5.55)$$

οι οποίες ικανοποιούν τη σχέση $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{x} f_\epsilon(x - x_0) = x_0 f_\epsilon(x - x_0)$. Άρα θα ταυτίσουμε το όριο της συνάρτησης $f_\epsilon(\cdot - x_0)$ όταν $\epsilon \rightarrow 0$ με το ket $|x_0\rangle$. Δεδομένου ότι στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$ οι συναρτήσεις $f_\epsilon(\cdot)$ γίνονται συναρτήσεις δέλτα, ταυτίζουμε το ket $|x_0\rangle$ με τη συνάρτηση $\delta(x - x_0)$.

Μ' αυτόν τον ορισμό παίρνουμε

$$\langle x_0|\psi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx f_\epsilon(x - x_0) \psi(x) = \int dx \delta(x - x_0) \psi(x) = \psi(x_0), \quad (5.56)$$

δηλαδή οι τιμές $\psi(x)$ μίας συνάρτησης ψ γράφονται για κάθε x ως $\langle x|\psi\rangle$. Εδώ πρέπει κανείς να προσέξει, όταν λέμε ότι η κυματοσυνάρτηση ψ ταυτίζεται με το ket $|\psi\rangle$ εννοούμε την όλη συνάρτηση και όχι τις τιμές της $\psi(x)$. Ο συνηθισμένος αλλά καταχρηστικός συμβολισμός του να γράφουμε μία συνάρτηση ψ ως $\psi(x)$ για να δείξουμε ποιο είναι το όρισμά της δημιουργεί σύγχυση.

Δεδομένου ότι ένα γενικευμένο ιδιοδιάνυσμα $|p\rangle$ της ορμής αντιστοιχεί στη συνάρτηση $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}$, παίρνουμε μία πολύ σημαντική εξίσωση που συνδέει τα κets της θέσης και της ορμής

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}. \quad (5.57)$$

Η ταύτιση της ορμής με τον τελεστή $-i\frac{\partial}{\partial x}$ σημαίνει ότι

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle. \quad (5.58)$$

Τα παραπάνω γενικεύονται άμεσα στις τρεις διαστάσεις. Στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^3, dx_1 dx_2 dx_3)$ έχουμε τις γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις $|x_1, x_2, x_3\rangle$, έτσι ώστε οι κυματοσυναρτήσεις να γράφονται

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \langle x_1, x_2, x_3|\psi\rangle. \quad (5.59)$$

Ισχύει ότι $\langle x_1, x_2, x_3|x'_1, x'_2, x'_3\rangle = \delta(x_1 - x'_1)\delta(x_2 - x'_2)\delta(x_3 - x'_3)$.

Οι τελεστές που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες θέσης γράφονται ως

$$\hat{x}_i = \int d^3x x_i |x_1, x_2, x_3\rangle \langle x_1, x_2, x_3|. \quad (5.60)$$

Οι τελεστές \hat{P}_{x_1} που αντιστοιχούν στο \hat{x}_1 ορίζονται ως

$$\hat{P}_{x_1} = \int dx_2 dx_3 |x_1, x_2, x_3\rangle \langle x_1, x_2, x_3|. \quad (5.61)$$

Αντίστοιχες εκφράσεις ισχύουν για τους τελεστές \hat{P}_{x_2} και \hat{P}_{x_3} .

Χρησιμοποιούμε τον εξής συνοπτικό συμβολισμό. Γράφουμε τον τελεστή-διάνυσμα $\hat{\mathbf{r}}$ για τους τρεις τελεστές θέσεις, οπότε η εξίσωση ιδιοτιμών γράφεται $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$, όπου $\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

5.6.6 Διαφορετικές αναπαραστάσεις ενός τελεστή

Παρατηρούμε ότι το ίδιο κενό $|\psi\rangle$ μπορεί να αναπαρασταθεί είτε ως τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση της θέσης μέσω της σχέσης $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, είτε ως τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση της ορμής $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Στην πρώτη περίπτωση, ο τελεστής της ορμής \hat{p} δρα διαφορικά στο $\psi(x)$: $\hat{p}\psi(x) = -i\frac{\partial\psi}{\partial x}$, ενώ στη δεύτερη περίπτωση έχουμε τη σχέση

$$\hat{p}|\psi\rangle = \int dp p \langle p|\psi\rangle |p\rangle = \int dp p \tilde{\psi}(p) |p\rangle, \quad (5.62)$$

η οποία καταδεικνύει ότι η δράση του \hat{p} στην κυματοσυνάρτηση ορμής $\tilde{\psi}(p)$ είναι πολλαπλασιαστική: $\hat{p}\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p)$.

Ισχύει ότι

$$\tilde{\psi}(p) = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ipx} \psi(x), \quad (5.63)$$

δηλαδή η συνάρτηση $\tilde{\psi}$ είναι ο μετασχηματισμός Φουριέ της συνάρτησης ψ ως προς τη θέση.

Τονίζουμε ότι υπάρχει καμία φυσική και καμία μαθηματική αναγκαιότητα να χρησιμοποιούμε κυματοσυναρτήσεις ως προς τη θέση για την περιγραφή σωματιδίων. Μπορούμε κάλλιστα να χρησιμοποιούμε κυματοσυναρτήσεις ως προς την ορμή ή ως οποιασδήποτε άλλη φυσική ποσότητα.

Οι κυματοσυναρτήσεις θέσης στην κβαντική θεωρία δεν αναφέρονται σε φυσικά κύματα στο χώρο, αλλά αποτελούν έναν τρόπο περιγραφής των καταστατικών διανυσμάτων που σε κάποιες περιπτώσεις είναι βολικός, αλλά σε άλλες όχι.

5.7 Ίχνος

Ορισμός 5.22 Ίχνος ενός τελεστή \hat{A} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι ο μιγαδικός αριθμός

$$Tr \hat{A} = \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle, \quad (5.64)$$

όπου $|n\rangle$ μια ορθοκανονική βάση στον \mathcal{H} .

Παρότι ο παραπάνω ορισμός την αυθαίρετη επιλογή μιας βάσης, το ίχνος δεν εξαρτάται από αυτήν την επιλογή. Έστω άλλη βάση $|n'\rangle$. Το ίχνος Tr' ως προς αυτή είναι

$$\begin{aligned} Tr' \hat{A} &= \sum_{n'} \langle n'|\hat{A}|n'\rangle = \sum_{n'} \sum_{m,n} \langle n'|n\rangle \langle n|\hat{A}|m\rangle \langle m|n'\rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle m|n\rangle \langle n|\hat{A}|m\rangle = \sum_n \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle = Tr \hat{A}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Από τον ορισμό, προκύπτει άμεσα ότι το ίχνος είναι μία γραμμική συνάρτηση, $Tr(\lambda\hat{A} + \hat{B}) = \lambda Tr \hat{A} + Tr \hat{B}$, για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$. Άλλες ιδιότητες του ίχνους είναι οι ακόλουθες.

(i) $Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A})$.

Απόδειξη. $Tr(\hat{A}\hat{B}) = \sum_n \langle n|\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \sum_n \sum_m \langle n|\hat{A}|m\rangle \langle m|\hat{B}|n\rangle = \sum_m \langle m|\hat{B}\hat{A}|m\rangle = Tr(\hat{B}\hat{A})$.

(ii) $Tr(|\psi\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\psi\rangle$.

Απόδειξη. $Tr(|\psi\rangle\langle\phi|) = \sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\phi|n\rangle = \langle\phi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$.

(iii) Αν \hat{P} προβολικός τελεστής σε N -διαστατο υπόχωρο, τότε $Tr\hat{P} = N$.

Απόδειξη. Ο \hat{P} γράφεται ως $\sum_{i=1}^N |i\rangle\langle i|$, όπου τα $|i\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στον αντίστοιχο υπόχωρο. $Tr\hat{P} = \sum_{i=1}^N \langle i|i\rangle = N$.

(iv) Αν $Tr(\hat{A}^\dagger\hat{A}) < \infty$ και $Tr(\hat{B}^\dagger\hat{B}) < \infty$ τότε

$$|Tr(\hat{A}\hat{B}^\dagger)|^2 \leq Tr(\hat{A}^\dagger\hat{A})Tr(\hat{B}^\dagger\hat{B}). \quad (5.66)$$

Απόδειξη. Χρησιμοποιούμε το ίχνος για να ορίσουμε ένα εσωτερικό γινόμενο μεταξύ δύο τελεστών \hat{A}, \hat{B} ως $\langle\hat{A}, \hat{B}^\dagger\rangle = Tr(\hat{A}\hat{B}^\dagger)$. Δεδομένου ότι οι τελεστές ορίζουν διανυσματικό χώρο, όσοι τελεστές \hat{A} έχουν πεπερασμένο μέτρο $Tr(\hat{A}^\dagger\hat{A}) < \infty$ ορίζουν ένα νέο χώρο Χίλμπερτ ως προς αυτό το εσωτερικό γινόμενο. Η Εξ. (5.66) είναι απλά η ανισότητα Κωσού Σβαρτς για αυτό το εσωτερικό γινόμενο.

Σε χώρους Χίλμπερτ πεπερασμένης διάστασης υπάρχει μία χρήσιμη σχέση μεταξύ ίχνους και οριζουσας τελεστών. Η οριζουσα ενός τελεστή \hat{A} ισούται με το γινόμενο των ιδιοτιμών a_i του \hat{A} , ενώ το ίχνος με το άθροισμά τους.

$$\det \hat{A} = \prod_i a_i = \prod_i e^{\log a_i} = e^{\sum_i \log a_i} = e^{Tr \log \hat{A}} \quad (5.67)$$

Τέλος, παρατηρούμε ότι το ίχνος είναι άπειρο σε τελεστές με συνεχές φάσμα. Για παράδειγμα, ο φασματικός προβολέας της ορμής $\hat{P}_U = \int_U dp |p\rangle\langle p|$ ικανοποιεί

$$Tr\hat{P}_U = \int_U dp \langle p|p\rangle = \int_U dp \delta(0) = \infty.$$

5.8 Η φυσική ερμηνεία των τελεστών

5.8.1 Τελεστές και μετρήσεις

Για να εξηγήσουμε το ρόλο που παίζουν οι τελεστές στην κβαντική θεωρία, πρέπει να θυμηθούμε την περιγραφή των κλασικών μετρήσεων, στο κεφ. 1.5.

Μία μέτρηση σε ένα κλασικό σύστημα αντιστοιχεί σε μία κατάτμηση του καταστατικού χώρου Γ σε αμοιβαίως αποκλειόμενα και εξαντλητικά υποσύνολα C_λ , κάθε ένα εκ των οποίων αντιστοιχεί σε διαφορετικό αποτέλεσμα της μέτρησης. Χρησιμοποιώντας τις χαρακτηριστικές συναρτήσεις $\chi_\lambda := \chi_{C_\lambda}$ των συνόλων C_λ γράφουμε την κλασική σχέση "ανάλυσης της μονάδας"

$$\sum_\lambda \chi_\lambda = 1. \quad (5.68)$$

Όλη η πληροφορία για τα ενδεχόμενα της μέτρησης ενσωματώνεται στον ορισμό της συνάρτησης $f : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$,

$$f(x) = \sum_\lambda \lambda \chi_\lambda(x). \quad x \in \Gamma. \quad (5.69)$$

Είναι προφανής η αναλογία των σχέσεων (5.68) και (5.69) με αυτές του φασματικού θεωρήματος για τελεστές. Συγκεκριμένα, υπάρχει η εξής αντιστοίχιση.

$$\begin{aligned}
 \text{Αυτοσυζυγής τελεστής } \hat{A} \text{ στο } \mathcal{H} &\iff \text{ συνάρτηση } f : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}. \\
 \text{Φάσμα του } \hat{A} &\iff \text{ πεδίο τιμών της } f. \\
 \text{Φασματικοί προβολείς του } \hat{A} &\iff \text{ χαρακτηριστικές συναρτήσεις } \chi_{C_\lambda}. \\
 \text{Υπόχωροι του χώρου Χίλμπερτ } \mathcal{H} &\iff \text{ υποσύνολα του καταστατικού χώρου } \Gamma.
 \end{aligned}$$

Στην παραπάνω αντιστοίχιση βασίζεται και η ακόλουθη θεμελιώδης αρχή της κβαντομηχανικής.

Θεμελιώδης αρχή 2. Ένας αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} αντιστοιχεί σε μία μετρούμενη ποσότητα σε ένα φυσικό σύστημα. Συγκεκριμένα, τα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης αντιστοιχούν στο φάσμα του \hat{A} , και σε κάθε δυνατό αποτέλεσμα αντιστοιχεί ένας φασματικός προβολέας του \hat{A} .

Αν μία μέτρηση αντιστοιχεί σε μονοδιάστατους φασματικούς προβολείς, τότε καλείται *λεπτομερής*. Δηλαδή, μία λεπτομερής μέτρηση αντιστοιχεί σε μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ που περιγράφει το σύστημα. Οποιαδήποτε μη λεπτομερής μέτρηση καλείται *αδρομερής*.

Έστω ένας αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A}_1 με διακριτό φάσμα και τουλάχιστον μία εκφυλισμένη ιδιοτιμή. Οι μετρήσεις της αντίστοιχης φυσικής ποσότητας είναι αδρομερείς. Αυτό σημαίνει ότι έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές. Μπορούμε να καταστήσουμε τις μετρήσεις λεπτομερείς, αν επιπλέον μετρήσουμε και άλλες ποσότητες που αντιστοιχούν σε τελεστές $\hat{A}_2, \hat{A}_3, \dots, \hat{A}_N$, οι οποίοι μετατίθενται μεταξύ τους ($[\hat{A}_a, \hat{A}_b] = 0$, για κάθε $a, b = 0, 1, 2, \dots, N$), έτσι ώστε να υπάρχει μια και μοναδική ορθοκανονική βάση $|n\rangle$ που να ικανοποιεί τη σχέση

$$\hat{A}_a |n\rangle = \lambda_{a,n} |n\rangle. \quad (5.70)$$

Κατά αυτόν τον τρόπο σε κάθε διάνυσμα $|n\rangle$ αντιστοιχεί μία και μοναδική N -άδα ιδιοτιμών

$$(\lambda_{1,n}, \lambda_{2,n}, \dots, \lambda_{N,n}).$$

Ένα τέτοιο σύνολο αυτοσυζυγών τελεστών λέμε ότι αντιστοιχεί σε ένα *πλήρες σύστημα μετρήσεων*.

5.8.2 Μετρήσεις σε συνεχές φάσμα

Σε τελεστές με συνεχές φάσμα όπως η θέση και η ορμή δεν υπάρχουν μονοδιάστατοι προβολικοί τελεστές, οπότε όλες οι μετρήσεις είναι αδρομερείς. Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορεί να υπάρξει απόλυτη ακρίβεια στη μέτρηση της αντίστοιχης φυσικής ποσότητας. Σ' αυτήν την περίπτωση, μπορεί κανείς να διαχωρίσει το φάσμα των τελεστών σε τμήματα πεπερασμένου μήκους και να ορίσει από αυτά ένα σύνολο εξαντλητικών και αμοιβαία αποκλειόμενων ενδεχομένων. Για παράδειγμα, για τον τελεστή της θέσης \hat{x} στο $L^2(\mathbf{R}, dx)$, όπου $\sigma(\hat{x}) = \mathbf{R}$, σπάμε την πραγματική ευθεία σε τμήματα Δ_n μήκους δ ως εξής,

$$\Delta_n = [(n - \frac{1}{2})\delta, (n + \frac{1}{2})\delta], \quad (5.71)$$

όπου $n \in \mathbf{Z}$. Το διάστημα Δ_n είναι επικεντρωμένο γύρω από την τιμή $\bar{x}_n = n\delta$. Η ποσότητα δ αντιστοιχεί στην ανάλυση της μετρητικής συσκευής. Οι προβολικοί τελεστές

$$\hat{P}_n = \int_{\Delta_n} dx |x\rangle \langle x| \quad (5.72)$$

ικανοποιούν τόσο τη συνθήκη εξάντλησης

$$\sum_n \hat{P}_n = \int_{\Delta_n} dx |x\rangle \langle x| = \int_{\cup_n \Delta_n} dx |x\rangle \langle x| = \int_{\mathbf{R}} dx |x\rangle \langle x| = \hat{I}, \quad (5.73)$$

όσο και τη συνθήκη αμοιβαίου αποκλεισμού $\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{mn} \hat{P}_n$.

5.8.3 Σχόλια

Μπορεί κανείς να αναρωτηθεί κατά πόσο η Θεμελιώδης αρχή 2 αποδίδει μία πλήρη αντιστοίχιση μεταξύ μετρήσεων και αυτοσυζυγών τελεστών. Η απάντηση είναι όχι. Καταρχάς, όπως θα δούμε σε αργότερα κεφάλαια, υπάρχουν μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων που δεν μπορούν να περιγραφούν από την αντιστοίχιση με αυτοσυζυγείς τελεστές.

Αντιστρόφως, ένας αυτοσυζυγής τελεστής αντιστοιχεί σε μια φυσικά πραγματοποιήσιμη μέτρηση, εφόσον κάνει σεβαστούς τους κανόνες υπερεπιλογής. Για τελεστή $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$, οι φασματικοί προβολείς \hat{P}_n δεν πρέπει να προβάλλουν σε υπόχωρους που περιέχουν επαλληλίες καταστάσεων που δεν επιτρέπονται από τους κανόνες υπερεπιλογής. Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα που χαρακτηρίζεται από κανόνες υπερεπιλογής για το ηλεκτρικό φορτίο που αντιστοιχεί σε έναν τελεστή \hat{Q} , με ιδιοσυναρτήσεις $|q\rangle$. Κανένας φασματικός προβολέας \hat{P}_n δεν μπορεί να προβάλλει σε υπόχωρο που περιέχει διανύσματα της μορφής $|q\rangle + |q'\rangle$ για $q \neq q'$. Αυτό σημαίνει ότι $[\hat{Q}, \hat{P}_n] = 0$ και άρα $[\hat{Q}, \hat{A}] = 0$. Δηλαδή μόνο οι τελεστές που μετατίθενται με το \hat{Q} αντιστοιχούν σε φυσικά πραγματοποιήσιμες μετρήσεις.

Με βάση τα παραπάνω τίθεται άμεσα το ερώτημα. "Γιατί σώνει και καλά να ερμηνεύσουμε τους φασματικούς προβολείς ως αντιστοιχούντες σε μετρήσεις;" Γιατί να μην τους ερμηνεύσουμε ως αντιστοιχούντες σε ιδιότητες ενός φυσικού συστήματος ανεξάρτητα από το αν έγιναν μετρήσεις σ' αυτό ή όχι; Στην κλασική θεωρία, μια τέτοια στάση όχι απλά είναι εύλογη αλλά και πολύ συνηθισμένη. Συνήθως όταν εξετάζουμε ένα ενδεχόμενο και του αποδίδουμε μία πιθανότητα, δεν χρειάζεται να προσδιορίσουμε τον τρόπο με τον οποίον θα διαπιστώσουμε αν το ενδεχόμενο ισχύει ή όχι: θεωρούμε ότι ο τρόπος διαπίστωσης είναι αδιάφορος δεδομένου ότι οι προβλέψεις μας αφορούν ενδογενείς ιδιότητες ενός συστήματος.

Αυτό δεν ισχύει στην κβαντική θεωρία. Δεν υπάρχει τρόπος να αποδώσουμε στα κβαντικά ενδεχόμενα πιθανότητες χωρίς εκπεφρασμένη αναφορά στον τρόπο με τον οποίον θα διαπιστώσουμε αν αυτά τα ενδεχόμενα πραγματοποιούνται ή όχι. Όπως θα δούμε εκπεφρασμένα αργότερα, δεν μπορεί κανείς να αποδώσει ιδιότητες στα κβαντικά συστήματα χωρίς αναφορά στον τρόπο προσδιορισμού τους. Η έννοια της ιδιότητας στην κβαντική θεωρία δεν αναφέρεται μόνο στο μικροσκοπικό σύστημα, αλλά στο σύμπλεγμα του μικροσκοπικού συστήματος με τις μακροσκοπικές συσκευές παρατήρησης.

Ερωτήσεις

1. Ποιοι από τους παρακάτω τελεστές στο $L^2(\mathbf{R})$ είναι φραγμένοι; (i) \hat{x} , (ii) \hat{p} , (iii) $e^{i\hat{p}a}$, (iv) $\hat{x}^{25}(\hat{x}^{26} + \hat{I})^{-1}$.
2. Δώστε ένα παράδειγμα τελεστή που είναι και αυτοσυζυγής και μοναδιαίος (εκτός από τη μονάδα). Υπάρχουν τελεστές που είναι και θετικοί και μοναδιαίοι;
3. Αν ο τελεστής \hat{A} δεν έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές, τότε και οποιοσδήποτε τελεστής $f(\hat{A})$ δεν έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές. Σωστό ή λάθος; Αν λάθος, τί περιορισμό πρέπει να θέσουμε στην f ώστε να γίνει η πρόταση αληθής;
4. Αναπτύξτε το επιχειρήμα γιατί ισχύει το εξής: αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, τότε $[f(\hat{A}), \hat{B}] = 0$.
5. Με τί ισούνται οι παρακάτω εκφράσεις; (i) $\delta(\cosh x)$, (ii) $\delta(3x^2 + 1)$, (iii) $\delta(x^3 + 1)$ και (iv) $\delta(x^4 - 1)$;

6. Με τι ισούται η έκφραση $\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(x)P_{\ell}(x')$, όπου P_{ℓ} τα πολυώνυμα Λεζάντρ;
7. Έστω ότι \hat{A} και \hat{B} είναι αυτοσυζυγείς τελεστές. Ποιοι από τους παρακάτω τελεστές είναι αυτοσυζυγείς; (i) $[\hat{A}, \hat{B}]$, (ii) $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, (iii) $\hat{B}\hat{A}\hat{B}$, (iv) $\hat{B}\hat{A}\hat{B}\hat{A}$.

Ασκήσεις

1. Υπολογίστε το συζυγή του τελεστή $\hat{D}_s \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{s}} \psi(x/s)$ στο $L^2(\mathbf{R})$.
2. Δείξτε ότι για κάθε πίνακα $n \times n$ A , $\|A\| < n \max_{i,j} |A_{ij}|$.
3. Δείξτε ότι αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ και ο τελεστής \hat{A} έχει μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές, τότε ο \hat{B} είναι συνάρτηση του \hat{A} .
4. Δείξτε ότι αν δύο αυτοσυζυγείς τελεστές μετατίθενται, τότε μετατίθενται και οι φασματικοί τους προβολείς.
5. Δείξτε ότι αν δύο θετικοί τελεστές \hat{A} και \hat{B} μετατίθενται, τότε και ο $\hat{A}\hat{B}$ είναι θετικός τελεστής.
6. Έστω a_{max} η μέγιστη και a_{min} η ελάχιστη ιδιοτιμή του $\hat{A} \geq 0$. Δείξτε ότι $a_{max}\hat{I} \geq \hat{A}$ και ότι $a_{min}\hat{A} \leq \hat{A}^2$.
7. Έστω \hat{P}_1 και \hat{P}_2 προβολικοί τελεστές με αντίστοιχους υπόχωρους V_1 και V_2 , πεπερασμένης διάστασης. (α) Δείξτε ότι αν $[\hat{P}_1, \hat{P}_2] = 0$, τότε ο $\hat{P}_1\hat{P}_2$ είναι προβολικός τελεστής, που προβάλλει στην τομή των V_1 και V_2 . (β) Δείξτε ότι αν $\hat{P}_1\hat{P}_2 = 0$, τότε ο $\hat{P}_1 + \hat{P}_2$ είναι προβολικός τελεστής, που προβάλλει στο $V_1 \oplus V_2$. (γ) Δείξτε ότι αν $\hat{P}_1\hat{P}_2 = \hat{P}_1$, τότε $V_1 \subset V_2$. (δ) Τι αλλάζει αν τουλάχιστον ένας από τους δύο υπόχωρους V_1 και V_2 είναι απειροδιάστατος;
8. Υπολογίστε τους μεταθέτες $[\hat{x}^3\hat{p}, \hat{x}\hat{p}]$ και $[x^2, [\hat{p}^2, \hat{x}^3]]$.
9. Δείξτε ότι κάθε αυτοσυζυγής τελεστής μπορεί να γραφεί σαν άθροισμα δύο μοναδιαίων τελεστών επί μία σταθερά.
10. (α) Δείξτε ότι ο τελεστής Λεζάντρ \hat{L} είναι αυτοσυζυγής. (β) Δείξτε ότι οι μη πολυωνυμικές λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών του \hat{L} δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.
11. Έστω απειροδιάστατος χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} με ορθοκανονική βάση $|n\rangle$, για $n = 0, 1, 2, \dots$. Ορίζουμε τον τελεστή \hat{S} , ως $\hat{S}|n\rangle = |n+1\rangle$. Βρείτε το συζυγή του. Είναι ο \hat{S} μοναδιαίος;
12. Έστω \hat{X}_h τελεστής στο $L^2(\mathbf{R})$, που ορίζεται ως $\hat{X}_h \psi(x) = h(x)\psi(x)$ για κάποια μιγαδική συνάρτηση $h(x)$. (α) Δείξτε ότι ο \hat{X}_h είναι κανονικός. (β) Δείξτε ότι αν η $h(x)$ είναι πραγματική, τότε ο \hat{X}_h είναι αυτοσυζυγής και ότι αν $|h(x)| = 1$, ο \hat{X}_h είναι μοναδιαίος. (γ) Δείξτε ότι αν η $h(x)$ έχει σταθερή τιμή a σε ένα διάστημα (c, d) , τότε η a είναι ιδιοτιμή του \hat{X}_h με άπειρο εκφυλισμό.
13. (α) Δείξτε ότι σε πεπερασμένες διαστάσεις ένας κανονικός τελεστής με μόνο πραγματικές ιδιοτιμές είναι αυτοσυζυγής. (β) Βρείτε ένα αντιπαράδειγμα αυτής της πρότασης σε απειροδιάστατους χώρους Χίλμπερτ. (Υπόδειξη: Εξετάστε τελεστές \hat{X}_h της προηγούμενης άσκησης.)
14. Δίνεται ο τελεστής $\hat{H} = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, όπου $\lambda > 0$. (α) Βρείτε τους φασματικούς προβολείς του. (β) Υπολογίστε τους τελεστές $e^{-i\hat{H}t}$ και $\chi_U(\hat{H})$ για $U = [0, \lambda]$.
15. Έστω ο χώρος Χίλμπερτ $L^2([0, 2\pi])$ και f μια συνάρτηση με περίοδο 2π . Ορίζουμε τον τελεστή $\hat{F}\psi(x) = \int_0^{2\pi} dx' f(x-x')\psi(x')$ για κάθε $\psi \in L^2([0, 2\pi])$. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές του \hat{F} .
16. Θεωρείστε τον τελεστή \hat{V} στο χώρο Χίλμπερτ $L^2([0, 1])$ που ορίζεται ως $\hat{V}\psi(x) = \int_x^1 dy \psi(y)$. (α) Δείξτε ότι ο \hat{V} δεν έχει ιδιοτιμές. (β) Δείξτε ότι ο συζυγής \hat{V}^\dagger ικανοποιεί $\hat{V}^\dagger \psi(x) = \int_x^1 dy \psi(y)$. (γ) Βρείτε τις ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{V}^\dagger \hat{V}$ και δείξτε ότι είναι όλες μικρότερες του $\frac{4}{\pi^2}$.

17. Για κάθε κατανομή ω στο \mathbf{R} , ορίζουμε την παράγωγο ω' ως $\omega'(f) = -\omega(f')$, για κάθε λεία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση f . (α) Δείξτε ότι αν η κατανομή αντιστοιχεί σε συνήθη συνάρτηση, αυτός ο ορισμός ταυτίζεται με τον καθιερωμένο. (β) Γράψτε τις εξισώσεις ορισμού της πρώτης και της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης δέλτα. (γ) Υπολογίστε τις ποσότητες $\delta'(x^2 - 1)$ και $\delta''(x^2 - 1)$.

18. Έστω $|p\rangle$ και $|x\rangle$ τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα των τελεστών ορμής \hat{p} και θέσης \hat{x} αντίστοιχα. Δείξτε ότι

$$(\alpha') \langle p|\hat{p}|x\rangle = \frac{p}{\sqrt{2\pi}}e^{-ipx}.$$

$$(\beta') \langle p_1|\hat{x}|p_2\rangle = i\delta'(p_1 - p_2), \text{ όπου ο τόνος δηλώνει παράγωγο.}$$

$$(\gamma') \langle p|\hat{x}\hat{p}|x\rangle = \frac{px+i}{\sqrt{2\pi}}e^{-ipx}.$$

19. Ορίζουμε το μέτρο ίχνους ενός τελεστή \hat{A} ως $\|\hat{A}\|_{tr} = Tr|\hat{A}|$, όπου $|\hat{A}| = \sqrt{\hat{A}^\dagger\hat{A}}$ ο τελεστής απόλυτης τιμής. Δείξτε ότι (α) για έναν αυτοσυζυγή τελεστή το μέτρο ίχνους είναι το άθροισμα των απόλυτων τιμών των ιδιοτιμών του επί το βαθμό εκφυλισμού της καθεμίας, (β) $Tr|\hat{A}| \geq \|\hat{A}\|$ όπου $\|\hat{A}\|$ το σύνηθες μέτρο τελεστή, και (γ) $Tr|\hat{A}\hat{B}| \leq \|\hat{A}\|Tr|\hat{B}|$.

Βιβλιογραφία

- Για μαθηματική εισαγωγή στη θεωρία πινάκων και το φασματικό θεώρημα βλ. το βιβλίο του Axler [67] και σε πιο προχωρημένο επίπεδο το βιβλίο του Roman [85]. Για εισαγωγή στη θεωρία τελεστών στο χώρο Χίλμπερτ συνιστώ τα κεφ. 7-8 του Young [68] και το βιβλίο των Akhiezer και Glazman [86]. Το κλασικό βιβλίο του Jordan [87] περιγράφει τη θεωρία τελεστών με έμφαση στις εφαρμογές στην κβαντομηχανική. Για την ερμηνεία των τελεστών στο χώρο Χίλμπερτ στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας, βλ. τα κεφ. 3 και 7 του Isham [10] και το κεφ 4 του Peres [58].

Κεφάλαιο 6

Τελεστές: II. Εφαρμογές

6.1 Τελεστές σε κιούμπιτ

6.1.1 Συστήματα δύο επιπέδων

Τα απλούστερα κβαντικά συστήματα περιγράφονται από το μικρότερο δυνατό μη-τετριμμένο χώρο Χίλμπερτ, τον C^2 . Καλούνται *συστήματα δύο επιπέδων*. Υπάρχουν κάποια φυσικά μεγέθη, όπως η πόλωση ενός φωτονίου ή το σπιν του ηλεκτρονίου που από τη φύση τους αντιστοιχούν σε ένα χώρο Χίλμπερτ C^2 . Συνήθως όμως η περιγραφή των δύο επιπέδων είναι μία προσέγγιση που χρησιμοποιούνται όταν οι τρόποι με τους οποίους μπορούμε να αντλήσουμε πληροφορία από το σύστημα αντιστοιχούν σε δύο ενδεχόμενα.

Για παράδειγμα, έστω ένα άτομο που χαρακτηρίζεται από μία κατάσταση ελάχιστης ενέργειας, $|0\rangle$. Μπορούμε δρώντας με ένα λέιζερ κατάλληλης συχνότητας να διεγείρουμε το άτομο, το οποίο θα βρεθεί σε μία συγκεκριμένη κατάσταση, έστω $|1\rangle$. Πάλι με τη δράση ενός λέιζερ μπορούμε να δημιουργήσουμε καταστάσεις επαλληλίας των $|0\rangle, |1\rangle$. Το σύνολο όλων αυτών των καταστάσεων που παράγονται με αυτόν τον τρόπο ορίζουν ένα διδιάστατο χώρο Χίλμπερτ.

Ένα κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων επίσης καλείται κιούμπιτ (qubit), δηλαδή κβαντικό μπιτ, δεδομένου ότι αποτελεί το κβαντικό ανάλογο της έννοιας του μπιτ της θεωρίας πληροφορίας. Ο όρος qubit πρωτοχρησιμοποιήθηκε από τον Σουμάχερ (B. Schumacher) [88], όπως λέει ο ίδιος ως αστείο. Η λέξη ακούγεται το ίδιο με την υφιστάμενη λέξη cubit που παναπεί κύβιτον (πήχυς) και αποτελεί την αρχαιότερη καταγεγραμμένη μονάδα μήκους και ίσως την πιο κοινή στους αρχαίους χρόνους. Σ' αυτές τις σημειώσεις θα χρησιμοποιούμε το όνομα κιούμπιτ για τα συστήματα των δύο επιπέδων¹.

6.1.2 Μήτρες του Πάουλι

Εξ ορισμού, ο γενικότερος αυτοσυζυγής τελεστής στο C^2 είναι της μορφής

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} x_1 & z \\ z^* & x_2 \end{pmatrix}, \quad \text{όπου } x_1, x_2 \in \mathbf{R}, \text{ και } z \in \mathbf{C}. \quad (6.1)$$

Αυτός γράφεται ως

$$\hat{A} = a_0 \hat{I} + \sum_{i=1}^3 a_i \hat{\sigma}_i, \quad (6.2)$$

¹Ο Ελληνικός Οργανισμός Τυποποίησης προτείνει το όνομα *κβαντικό δυφίο* ή *κβαντοδυφίο* για απόδοση του qubit, αλλά το βρίσκω μάλλον άστοχο, δεδομένου ότι η συντομία της λέξης στην αγγλική λειτουργεί ενισχυτικά της σημασίας της. Στο βιβλίο κάνω ηχητική απόδοση του όρου στα ελληνικά.

όπου σ_i για $i = 1, 2, 3$ είναι οι μήτρες του Πάουλι (Pauli),

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

και $a_0, a_i \in \mathbf{R}$.

Εύκολα δείχνεται ότι οι μήτρες του Πάουλι ικανοποιούν τις ακόλουθες ταυτότητες

- (i) $(\hat{\sigma}_i)^2 = \hat{I}$.
- (ii) $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = i\sigma_3, \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = -i\sigma_3$.
- (iii) $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 = i\sigma_1, \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 = -i\sigma_1$.
- (iv) $\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1 = i\sigma_2, \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3 = -i\sigma_2$.

Οι παραπάνω σχέσεις γράφονται συνοπτικά

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \hat{I}\delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \quad (6.4)$$

όπου ϵ_{ijk} είναι το πλήρως αντισυμμετρικό σύμβολο

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{αν } (i, j, k) = (1, 2, 3), (3, 1, 2), (2, 3, 1) \\ -1 & \text{αν } (i, j, k) = (2, 1, 3), (3, 2, 1), (1, 3, 2) \\ 0 & \text{αν δύο δείκτες από τους } i, j, k \text{ ταυτίζονται.} \end{cases} \quad (6.5)$$

Από τον ορισμό είναι προφανές ότι αν μεταθέσουμε δύο δείκτες, το σύμβολο πολλαπλασιάζεται με το -1 : $\epsilon_{ijk} = -\epsilon{jik} = -\epsilon{kji} = -\epsilon{ikj}$.

Σε ερχόμενα κεφάλαια θα χρησιμοποιήσουμε συχνά την ακόλουθη ιδιότητα του πλήρως αντισυμμετρικού συμβόλου,

$$\sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}, \quad (6.6)$$

η οποία είναι πλήρως ισοδύναμη με τη γνωστή διανυσματική ταυτότητα

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})^2 = \mathbf{A}^2\mathbf{B}^2 - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^2 \quad (6.7)$$

για δυο διανύσματα \mathbf{A} και \mathbf{B} . Ο αριστερός όρος της Εξ. (6.7) είναι $\sum_{ijklm} \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} A_j B_k A_l B_m$, ενώ ο δεξιός γράφεται ως $\sum_{jklm} (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}) A_j B_k A_l B_m$. Δεδομένου ότι αυτή η σχέση ισχύει για όλα τα A_i και B_i , προκύπτει η Εξ. (6.5).

Συμβολίζουμε $\boldsymbol{\sigma} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$, έτσι ώστε ο τελεστής (6.2) να γράφεται ως

$$\hat{A} = a_0\hat{I} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (6.8)$$

Επίσης, από την ταυτότητα (6.4) παίρνουμε

$$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}\hat{I} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (6.9)$$

δεδομένου ότι

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^3 a_i b_i \quad (6.10)$$

και

$$\begin{aligned} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_k &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ijk} a_i b_j \\ &= (a_2 b_3 - a_3 b_2, a_3 b_1 - a_1 b_3, a_1 b_2 - a_2 b_1). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Η Εξ. (6.9) σημαίνει ότι

$$[\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = 2i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (6.12)$$

Επίσης σημαντική είναι η ιδιότητα πληρότητας των μητρών του Πάουλι,

$$\hat{\sigma}_{ab} \cdot \hat{\sigma}_{cd} := \sum_{i=1}^3 (\hat{\sigma}_i)_{ab} (\hat{\sigma}_i)_{cd} = 2\delta_{ad}\delta_{bc} - \delta_{ab}\delta_{cd}, \quad (6.13)$$

όπου οι δείκτες $a, b, c, d = 1, 2$ αναφέρονται στα στοιχεία των μητρών του Πάουλι. Για να αποδείξουμε την Εξ. (6.13), παίρνουμε το ίχνος της Εξ. (6.8), οπότε βρίσκουμε $a_0 = \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{A}$. Επίσης πολλαπλασιάζουμε τα δύο μέλη της Εξ. (6.8) με $\hat{\sigma}_k$ και παίρνουμε το ίχνος. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (6.4) βρίσκουμε ότι $\mathbf{a} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{A}\hat{\boldsymbol{\sigma}})$. Οπότε η Εξ. (6.8) γράφεται ταυτοτικά ως

$$\hat{A} = \frac{1}{2} (\text{Tr} \hat{A}) \hat{I} + \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{A}\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (6.14)$$

Γράφοντας $\text{Tr} \hat{A} = \sum_{cd} \delta_{cd} \hat{A}_{cd}$ και $\text{Tr}(\hat{A}\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \sum_{cd} \hat{A}_{cd} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{cd}$, η Εξ. 6.14) δίνει

$$\sum_{cd} \hat{A}_{cd} \left(\delta_{ac}\delta_{bd} - \frac{1}{2}\delta_{ab}\delta_{cd} - \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ab}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{cd} \right), \quad (6.15)$$

από την οποία προκύπτει η Εξ. (6.13).

6.1.3 Ιδιοτιμές αυτοσυζυγούς τελεστή

Ο πίνακας (6.2) γράφεται

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Οι δύο ιδιοτιμές του υπολογίζονται: $a_+ = a_0 + |\mathbf{a}|$ και $a_- = a_0 - |\mathbf{a}|$, όπου $|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$. Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι

$$\begin{aligned} |a_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{a}|(|\mathbf{a}| - a_3)}} \begin{pmatrix} a_1 - ia_2 \\ |\mathbf{a}| - a_3 \end{pmatrix}, \\ |a_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{a}|(|\mathbf{a}| - a_3)}} \begin{pmatrix} -|\mathbf{a}| + a_3 \\ a_1 - ia_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Υπολογίζουμε τους αντίστοιχους φασματικούς προβολείς

$$\hat{P}_{\pm} = |a_{\pm}\rangle \langle a_{\pm}| = \frac{1}{2} (1 \pm \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (6.18)$$

όπου

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \quad (6.19)$$

είναι μοναδιαίο διάνυσμα στο R^3 .

Οι φασματικοί προβολείς εξαρτώνται μόνο από το μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{n} , και ως εκ τούτου το \mathbf{n} είναι αυτό που ξεχωρίζει τις διαφορετικές δυνατές μετρήσεις σε ένα κιούμπιτ. Χωρίς απώλεια γενικότητας μπορούμε να επιλέξουμε $a_0 = 0$ και $|\mathbf{a}| = 1$. Άλλες τιμές του a_0 και του $|\mathbf{a}|$ απλά αλλάζουν τις ιδιοτιμές κατά μια γραμμική συνάρτηση $f(x) = |\mathbf{a}|x + a_0$. Γι' αυτό το λόγο όταν αναφερόμαστε σε μετρήσεις που γίνονται σε κιούμπιτ θα περιοριζόμαστε σε αυτοσυζυγείς τελεστές της μορφής $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, με μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{n} .

6.1.4 Αυξητικός και μειωτικός τελεστής

Συνήθως σε ένα κιούμπιτ, ξεχωρίζουμε τα διανύσματα βάσης

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.20)$$

ως αναφερόμενα σε κάποιο ξεχωριστό φυσικό μέγεθος (συνήθως ενέργεια). Τα συμβολίζουμε είτε ως $|0\rangle$ και $|1\rangle$ αντίστοιχα, είτε ως $|-\rangle$ και $|+\rangle$. Ο συμβολισμός με 0 και 1 είναι καλύτερος όταν κανείς εξετάζει άτομα (0 βασική κατάσταση και 1 η διεγερμένη) ή αφηρημένα κιούμπιτ, ενώ ο συμβολισμός με \pm είναι καλύτερος όταν περιγράφουμε σωματίο με σπιν $\frac{1}{2}$ ή πόλωση φωτονίων. Σε ότι ακολουθεί θα χρησιμοποιούμε το συμβολισμό με 0 και 1.

Σημαντικοί είναι επίσης και οι τελεστές $\hat{\sigma}_+$ και $\hat{\sigma}_-$, οι οποίοι ορίζονται ως

$$\hat{\sigma}_+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_- = (\hat{\sigma}_+)^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.21)$$

Οι τελεστές αυτοί δρουν στα διανύσματα βάσης $|0\rangle$ και $|1\rangle$ ως εξής

$$\hat{\sigma}_+|0\rangle = |1\rangle \quad \hat{\sigma}_+|1\rangle = 0 \quad (6.22)$$

$$\hat{\sigma}_-|0\rangle = 0 \quad \hat{\sigma}_-|1\rangle = |0\rangle. \quad (6.23)$$

Ο $\hat{\sigma}_+$ καλείται *αυξητικός τελεστής* εφόσον πετυχαίνει τη μετάβαση $0 \rightarrow 1$ ενώ ο $\hat{\sigma}_-$ καλείται *μειωτικός τελεστής* εφόσον πετυχαίνει τη μετάβαση $1 \rightarrow 0$.

Οι τελεστές $\hat{\sigma}_\pm$ ικανοποιούν τις ακόλουθες ιδιότητες.

- (i) $(\hat{\sigma}_\pm)^2 = 0$.
- (ii) $\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+ = \hat{I}$.
- (iii) $[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-] = \hat{\sigma}_3$.
- (iv) $[\hat{\sigma}_3, \hat{\sigma}_\pm] = \pm 2\hat{\sigma}_\pm$.

6.2 Αρμονικός ταλαντωτής

Στο κεφ. 3.2.2 βρήκαμε τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ για δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή. Εδώ θα δείξουμε πώς η εύρεση των ιδιοτιμών της

χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Σρέντινγκερ γίνεται καθαρά με θεωρία τελεστών, χωρίς την επίλυση διαφορικής εξίσωσης.

Πρώτα επαναδιατυπώνουμε το αποτέλεσμα του κεφ. 3.2.2 στη γλώσσα των χώρων Χίλμπερτ. Ο τελεστής Χάμιλτον για τον αρμονικό ταλαντωτή ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$ ως

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (6.24)$$

όπου \hat{x} και \hat{p} οι συνήθεις τελεστές της θέσης και ορμής αντίστοιχα. Ο τελεστής \hat{H} έχει διακριτό φάσμα που αντιστοιχεί σε μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές $E_n = (n + \frac{1}{2})\omega$, όπου $n = 0, 1, 2, \dots$

6.2.1 Αυξητικός και μειωτικός τελεστής

Ορίζουμε τον *μειωτικό τελεστή*

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}\hat{p}, \quad (6.25)$$

ο συζυγής \hat{a}^\dagger του οποίου καλείται *αυξητικός τελεστής*. Το λόγο αυτής της ονομασίας θα τον δούμε σε λίγο.

Από τον ορισμό (6.25) βρίσκουμε ότι

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I} \quad (6.26)$$

$$\hat{H} = \omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}). \quad (6.27)$$

Η Εξ. (6.26) σημαίνει ότι οι τελεστές \hat{a} και \hat{a}^\dagger δεν είναι κανονικοί. Η Εξ. (6.27) σημαίνει ότι η Χαμιλτονιανή \hat{H} είναι γραμμική συνάρτηση του τελεστή $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, άρα οι τελεστές \hat{H} και \hat{N} έχουν τα ίδια ιδιοδιανύσματα.

Ο τελεστής \hat{N} είναι θετικός, καθώς για οποιοδήποτε διάνυσμα $|\psi\rangle$,

$$\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = \|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 \geq 0.$$

Αμέσως υπολογίζουμε τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a}, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger. \quad (6.28)$$

Έστω $\hat{N}|n\rangle = \nu_n|n\rangle$ η εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή \hat{N} . Το n για την ώρα είναι τυχαίος ακέραιος που διατάσσει τις ιδιοτιμές. Δρώντας τις σχέσεις (6.28) σε ένα ιδιοδιάνυσμα $|n\rangle$ παίρνουμε τις σχέσεις

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (\nu_n - 1)\hat{a}|n\rangle \quad (6.29)$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (\nu_n + 1)\hat{a}^\dagger|n\rangle. \quad (6.30)$$

Αυτό σημαίνει ότι τα διανύσματα $\hat{a}|n\rangle$ και $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του \hat{N} με ιδιοτιμή αντίστοιχα μειωμένη και αυξημένη κατά 1 σε σχέση με την $|n\rangle$. Σ' αυτήν την ιδιότητα οφείλονται τα ονόματα των \hat{a} και \hat{a}^\dagger .

Από τη σχέση (6.29) βλέπουμε ότι οι ιδιοτιμές ν_n πρέπει να είναι ακέραιοι, αλλιώς η επανειλημμένη δράση του \hat{a} σε μία ιδιοσυνάρτηση θα οδηγούσε σε αρνητική ιδιοτιμή του \hat{N} . Αριθμούμε τα ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$ έτσι ώστε $\nu_n = 0$ για $n = 0$. Οπότε η κατάσταση $|0\rangle$ ικανοποιεί τη σχέση $\hat{a}|0\rangle = 0$. Απαιτούμε να μην υπάρχει εκφυλισμός της κατάστασης χαμηλότερης ενέργειας, οπότε το διάνυσμα

$|0\rangle$ είναι μοναδικό. Έτσι, η εξίσωση ιδιοτιμών του \hat{N} γίνεται $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, για $n = 0, 1, 2, \dots$, δηλαδή $\nu_n = n$.

Τα κανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$ προέρχονται από διαδοχικές δράσεις του \hat{a}^\dagger στο $|0\rangle$. Για να τις υπολογίσουμε παρατηρούμε ότι $\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{I} + \hat{N}|n\rangle = (n+1)$. Αυτό σημαίνει ότι

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (6.31)$$

οπότε

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{\sqrt{n(n-1)}}|n-2\rangle = \dots = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (6.32)$$

Επίσης από τη σχέση $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n$ παίρνουμε τη σχέση

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (6.33)$$

Έχουμε βρει έτσι τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή \hat{N} (και κατά συνέπεια της Χαμιλτονιανής του αρμονικού ταλαντωτή) χωρίς να λύσουμε κάποια διαφορική εξίσωση. Σ' αυτόν τον υπολογισμό, η μόνη απαίτηση που δεν προέρχεται από καθαρά αλγεβρικά επιχειρήματα είναι να μην είναι εκφυλισμένη η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας. Αυτή η απαίτηση είναι απολύτως δικαιολογημένη για έναν αρμονικό ταλαντωτή σε μία διάσταση. Για την ακρίβεια, σύμφωνα με το θεώρημα 6.2. επιβάλλεται.

Ωστόσο η παραπάνω ανάλυση προσαρμόζεται και σε συστήματα με εκφυλισμένη θεμελιώδη κατάσταση. Έστω ότι η μηδενική ιδιοτιμή του \hat{N} αντιστοιχεί σε D -διάστατο ιδιόχωρο V_0 . Διαλέγουμε μια ορθοκανονική βάση στο V_0 , έστω $|0, j\rangle$, $j = 1, 2, \dots, D$. Τότε η επαναληπτική δράση των \hat{a}^\dagger στα $|0, j\rangle$ επιτρέπει το χτίσιμο D 'πύργων' ιδιοδιανυσμάτων του \hat{N} ,

$$|n, j\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0, j\rangle, \quad (6.34)$$

έναν για κάθε τιμή του j . Κάθε ιδιοτιμή του \hat{N} έχει D -πλό εκφυλισμό, καθώς $\hat{N}|n, j\rangle = n|n, j\rangle$, για κάθε $j = 1, 2, \dots, D$.

Παράδειγμα 6.1 Συχνά χρειάζεται να υπολογίσουμε ποσότητες της μορφής $\langle n|F(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)|n\rangle$, όπου F κάποια συνάρτηση των \hat{a} και \hat{a}^\dagger . Σε τέτοιους υπολογισμούς ακολουθούμε την εξής διαδικασία. Πρώτον, αγνοούμε όσους αθροιστικούς όρους στο F δεν περιέχουν ίσο αριθμό \hat{a} και \hat{a}^\dagger , γιατί η συνεισφορά τους μηδενίζεται. Δεύτερον, χρησιμοποιούμε σχέσεις μετάθεσης για να γράψουμε το F ως συνάρτηση του \hat{N} και του \hat{I} . Συγκεκριμένα, αντικαθιστούμε $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$ και $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + \hat{I}$.

Ενδεικτικά, υπολογίζουμε την ποσότητα $\langle n|\hat{x}^4|n\rangle$. Εξ ορισμού, $\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, οπότε

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}^4|n\rangle &= \frac{1}{4m^2\omega^2}\langle n|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^4|n\rangle = \frac{1}{4m^2\omega^2}\langle n|(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle \\ &= \frac{1}{4m^2\omega^2}\langle n|(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{N} + \hat{I})^2|n\rangle = \frac{1}{4m^2\omega^2}\langle n|\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2 + (2\hat{N} + \hat{I})^2|n\rangle, \end{aligned} \quad (6.35)$$

όπου στο τελευταίο βήμα κρατήσαμε μόνο τους όρους με ίσο αριθμό \hat{a} και \hat{a}^\dagger . Χρησιμοποιώντας σχέσεις μετάθεσης παίρνουμε

$$\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger 2} = \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger = (\hat{N} + \hat{I})^2 + \hat{N} + \hat{I}, \quad \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2 = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}^2 - \hat{N}.$$

Οπότε

$$\langle n|\hat{x}^4|n\rangle = \frac{1}{4m^2\omega^2}\langle n|6\hat{N}^2 + 6\hat{N} + 3\hat{I}|n\rangle = \frac{3}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) \quad (6.36)$$

6.2.2 Σύμφωνες καταστάσεις

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε το φάσμα των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής. Οι δύο τελεστές δεν είναι κανονικοί, και γι' αυτό τα αποτελέσματα είναι πολύ διαφορετικά από όσα έχουμε δει ως τώρα.

Για να λύσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{a}^\dagger|w\rangle = w|w\rangle$ για τον τελεστή δημιουργίας \hat{a}^\dagger , θέτουμε $|w\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle$ οπότε παίρνουμε $\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}c_n|n+1\rangle = w \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle$. Αλλάζοντας το δείκτη άθροισης του αριστερού όρου από n σε $n-1$, παίρνουμε

$$\sum_{n=1}^{\infty} (wc_n - \sqrt{n}c_{n-1})|n\rangle + wc_0|0\rangle = 0, \quad (6.37)$$

και άρα $c_0 = 0$ και $c_n = c_{n-1}\sqrt{n}/w$. Αυτό σημαίνει ότι $c_0 = c_1 = c_2 = \dots = 0$, δηλαδή $|w\rangle = 0$. Συμπεραίνουμε ότι ο αυξητικός τελεστής \hat{a}^\dagger δεν έχει ιδιοδιανύσματα.

Εξετάζουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$ για το μειωτικό τελεστή \hat{a} . Θέτουμε $|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle$, οπότε η εξίσωση ιδιοτιμών γίνεται $\sum_{n=0}^{\infty} (\sqrt{n+1}c_{n+1} - zc_n)|n\rangle = 0$, και άρα

$$c_{n+1} = \frac{c_n z}{\sqrt{n+1}}. \quad (6.38)$$

Η Εξ. (6.38) δίνει $c_n = c_0 z^n / \sqrt{n!}$. Η σταθερά c_0 προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$1 = \langle z|z\rangle = c_0^2 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{*m} z^n}{\sqrt{n!m!}} \langle m|n\rangle = c_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} = c_0^2 \exp(|z|^2), \quad (6.39)$$

απ' όπου $c_0 = \exp(-\frac{1}{2}|z|^2)$.

Στις παραπάνω σχέσεις δεν υπάρχει κανένας περιορισμός για την ιδιοτιμή z , άρα μπορεί να είναι οποιοσδήποτε μιγαδικός αριθμός. Καταλήγουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα $|z\rangle$ του μειωτικού τελεστή είναι

$$\begin{aligned} |z\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n (\hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Τα διανύσματα $|z\rangle$ καλούνται *σύμφωνες καταστάσεις*. Από τον ορισμό τους προκύπτει άμεσα ότι $\langle z|\hat{a}^{\dagger m}\hat{a}^n|z\rangle = (z^*)^m z^n$ για κάθε $m, n = 0, 1, 2, \dots$, καθώς και ότι $\langle n|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} z^n / \sqrt{n!}$.

Καθώς ο μειωτικός τελεστής δεν είναι αυτοσυζυγής, σύμφωνες καταστάσεις με διαφορετικές τιμές του z δεν είναι μεταξύ τους ορθογώνιες. Βρίσκουμε ότι

$$\langle z|z'\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^{*m} z'^n}{\sqrt{n!m!}} \langle m|n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^* z')^n}{n!} = e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2 + z^* z'}. \quad (6.41)$$

Συμπεραίνουμε ότι

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = e^{-|z-z'|^2}. \quad (6.42)$$

Δύο σύμφωνες καταστάσεις δεν είναι ποτέ ακριβώς ορθογώνιες, αλλά αν η απόσταση $|z - z'|$ των ορισμάτων τους είναι πολύ μεγαλύτερη της μονάδας, μπορούν να θεωρηθούν ορθογώνιες με πολύ καλή προσέγγιση.

Παρατηρούμε ότι κάθε τελεστής $a\hat{x} - b\hat{p}$ γράφεται ως $\frac{1}{i}(w\hat{a}^\dagger - w^*\hat{a})$ για κάποιο $w \in \mathbf{C}$. Οπότε οι τελεστές Βάουλ της Εξ. (5.20) γράφονται ως

$$\hat{V}(w) = \exp[w\hat{a}^\dagger - w^*\hat{a}]. \quad (6.43)$$

Χρησιμοποιούμε την ταυτότητα BCH για να πάρουμε το αντίστοιχο της Εξ. (5.21)

$$\hat{V}(w_1)\hat{V}(w_2) = \hat{V}(w_1 + w_2)e^{\frac{1}{2}(w_2^*w_1 - w_1^*w_2)}, \quad (6.44)$$

καθώς και την ταυτότητα

$$\hat{V}(w) = e^{-\frac{|w|^2}{2}} e^{w\hat{a}^\dagger} e^{-w^*\hat{a}}. \quad (6.45)$$

Καθώς $e^{-w^*\hat{a}}|0\rangle = |0\rangle$, παίρνουμε

$$\hat{V}(w)|0\rangle = e^{-\frac{|w|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^n (\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = |w\rangle. \quad (6.46)$$

Οι σύμφωνες καταστάσεις προκύπτουν από τη δράση του τελεστή Βάουλ στην κατάσταση $|0\rangle$. Δηλαδή αντιστοιχούν στην κατάσταση ελάχιστης ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή όπου τόσο η θέση όσο και η ορμή έχουν μετατοπιστεί κατά μια σταθερή ποσότητα.

Άμεσα προκύπτει και η ακόλουθη ταυτότητα

$$\hat{V}(w)|z\rangle = \hat{V}(w)\hat{V}(z)|0\rangle = e^{\frac{1}{2}(z^*w - w^*z)} \hat{V}(z+w)|0\rangle = e^{\frac{1}{2}(z^*w - w^*z)} |z+w\rangle. \quad (6.47)$$

Μια πολύ σημαντική ιδιότητα των σύμφωνων καταστάσεων είναι η *υπερπληρότητά* τους:

$$\int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z| = \hat{I}, \quad (6.48)$$

όπου $d^2z = dx dy$ για $z = x + iy$, με $x, y \in \mathbf{R}$.

Απόδειξη. Υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα

$$I_{mn} := \int \frac{d^2z}{\pi} \langle n|z\rangle\langle z|m\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi\sqrt{n!m!}} z^{*n} z^m e^{-|z|^2}. \quad (6.49)$$

Θέτοντας $z = re^{i\theta}$ για $r \geq 0$ και $\theta \in [0, 2\pi]$,

$$I_{mn} = \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n)\theta} \int_0^\infty \frac{r dr}{\pi\sqrt{n!m!}} r^{m+n} e^{-r^2}.$$

Το ολοκλήρωμα ως προς θ μηδενίζεται εκτός αν $m = n$, οπότε δίνει 2π . Τότε, $I_{nn} = \int_0^\infty \frac{ds}{n!} s^n e^{-s} = 1$, όπου θέσαμε $s = r^2$. Καταλήγουμε ότι $I_{mn} = \delta_{mn}$ που είναι το ζητούμενο.

Η ιδιότητα υπερπληρότητας είναι μία γενίκευση της σχέσης ανάλυσης της μονάδας για τις σύμφωνες καταστάσεις. Σημαίνει ότι υπάρχουν αρκετές σύμφωνες καταστάσεις στο χώρο Χίλμπερτ—πολύ περισσότερες από όσους περιέχει μια γενικευμένη βάση όπως της ορμής, εξ' ου και ο χαρακτηρισμός υπερπληρότητα— που μας επιτρέπουν να αναλύσουμε οποιαδήποτε κατάσταση σε σύμφωνες καταστάσεις

$$|\psi\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z|\psi\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi} \psi(z)|z\rangle, \quad (6.50)$$

όπου $\psi(z) = \langle z|\psi\rangle$.

Η δράση ενός τελεστή \hat{A} στις σύμφωνες καταστάσεις, αρκεί για να προσδιοριστεί η δράση του σε κάθε διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ, καθώς

$$\hat{A}|\psi\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi} \psi(z) \hat{A}|z\rangle. \quad (6.51)$$

Τέλος, για να υπολογίσουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi_z(x) = \langle x|z\rangle$ που αντιστοιχεί στη σύμφωνη κατάσταση $|z\rangle$, γράφουμε $z = \sqrt{m\omega/2\bar{q}} + i/\sqrt{2m\omega\bar{p}}$, για κάποιες πραγματικές παραμέτρους \bar{q} και \bar{p} . Θα δούμε αργότερα ότι αντιστοιχούν στην αναμενόμενη τιμή της θέσης και την αναμενόμενη τιμή της ορμής, αντίστοιχα.

Η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$ γράφεται

$$\frac{d\psi_z}{dx} = -m\omega(x - \bar{q}) + i\bar{p}, \quad (6.52)$$

με λύση

$$\psi_z(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega(x - \bar{q})^2}{2} + i\bar{p}x\right]. \quad (6.53)$$

Συγκρίνοντας με την Εξ. (3.21) βλέπουμε ότι η σύμφωνη κατάσταση αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή με μετατοπισμένο το κέντρο κατά \bar{q} και φάση $e^{i\bar{p}x}$.

6.3 Ο μονοδιάστατος τελεστής Σρέντινγκερ

6.3.1 Γενικές ιδιότητες

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Σρέντινγκερ (3.12) στη μία διάσταση είναι εξίσωση ιδιοτιμών για τον λεγόμενο μονοδιάστατο τελεστή Σρέντινγκερ για σωματίο μάζας m

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (6.54)$$

ο οποίος ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$. Σε ότι ακολουθεί θα εξετάσουμε τις πιο σημαντικές ιδιότητες του τελεστή (6.54) για γενικά δυναμικά $V(x)$.

Προηγουμένως είχαμε αποκαλέσει τον τελεστή (6.54) Χαμιλτονιανή του συστήματος. Όπως θα δούμε στο Κεφ. 8, η έννοια της Χαμιλτονιανής είναι ευρύτερη και αναφέρεται στο ρόλο του τελεστή στη φυσική περιγραφή όχι σε μία συγκεκριμένη μαθηματική έκφραση. Σε πολλά συστήματα, η Χαμιλτονιανή δεν είναι της μορφής (6.54). Ο όρος "τελεστής Σρέντινγκερ" είναι πιο κατάλληλος όταν μιλάμε για τελεστές με την συγκεκριμένη μαθηματική έκφραση (6.54), δηλαδή που ορίζονται ως άθροισμα ενός όρου κινητικής ενέργειας και ενός όρου δυναμικού. Σε κάθε περίπτωση, αναφερόμαστε στις ιδιοτιμές του τελεστή (6.54) ως ιδιοτιμές της ενέργειας του συστήματος.

Η εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή Σρέντινγκερ γράφεται ως

$$\psi'' + 2m[E - V(x)]\psi = 0. \quad (6.55)$$

Οι λύσεις της Εξ. (6.55) είναι οι *ιδιοσυναρτήσεις* του \hat{H} . Οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις ορίζουν το διακριτό φάσμα του \hat{H} , καθώς είναι διανύσματα του $L^2(\mathbf{R})$. Καλούνται *δέσμιες*

καταστάσεις, επειδή αντιστοιχούν σε σωματίο που παγιδεύεται από το δυναμικό. Οι μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις αντιστοιχούν σε γενικευμένα ιδιοδιανύσματα και ορίζουν το συνεχές φάσμα του \hat{H} . Καλούνται *καταστάσεις σκέδασης*, επειδή αντιστοιχούν σε σωματίο που σκεδάζεται από το δυναμικό και φεύγει μακριά.

Παρατηρούμε ότι στην Εξ. (6.54) δεν εμφανίζεται η μιγαδική μονάδα. Αυτό σημαίνει ότι αν ψ είναι μία μιγαδική λύση της Εξ. (6.54), τόσο το πραγματικό της μέρος όσο και το φανταστικό είναι επίσης λύσεις της Εξ. (6.54). Άρα μπορούμε πάντα να διαλέξουμε τις ιδιοσυναρτήσεις του \hat{H} να είναι πραγματικές.

Αξιοσημείωτη είναι η ειδική περίπτωση που το δυναμικό $V(x)$ είναι συμμετρικό, $V(x) = V(-x)$. Αν η ψ είναι λύση της Εξ. (6.55), τότε και η $\psi_-(x) := \psi(-x)$ είναι λύση με ίδια ιδιοτιμή E . Αυτό είναι προφανές αν η ψ είναι άρτια ή περιττή. Αν η ψ δεν είναι άρτια ή περιττή μπορούμε να ορίσουμε μία άρτια ιδιοσυνάρτηση $\psi + \psi_-$ του \hat{H} και μία περιττή ιδιοσυνάρτηση $\psi - \psi_-$ του \hat{H} . Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι σε ένα συμμετρικό δυναμικό, μπορούμε να επιλέξουμε τις ιδιοσυναρτήσεις του \hat{H} να έχουν συγκεκριμένη αρτιότητα.

Έστω δύο διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις ψ_1 και ψ_2 του \hat{H} με ιδιοτιμές E_1 και E_2 αντίστοιχα,

$$-\psi_1'' = 2m[E_1 - V(x)]\psi_1 \quad -\psi_2'' = 2m[E_2 - V(x)]\psi_2.$$

Πολλαπλασιάζοντας τα δύο σκέλη της πρώτης εξίσωσης με ψ_2 , της δεύτερης με ψ_1 και αφαιρώντας τα αποτελέσματα κατά μέλη παίρνουμε ότι $\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'' = (E_2 - E_1)\psi_1\psi_2$, δηλαδή,

$$(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')' = (E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 \quad (6.56)$$

Η συνάρτηση $W = \psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2'$ καλείται Ρονσκιανή (Wronskian) των συναρτήσεων ψ_1, ψ_2 .

Αν $E_2 = E_1$, η Εξ. (6.56) δίνει

$$\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = C \quad (6.57)$$

για κάποια σταθερά C .

Ένα χρήσιμο συμπέρασμα προκύπτει αν εφαρμόσουμε τη συνθήκη (6.56) για $E_1 = E$ και $E_2 = E + \delta E$ και πάρουμε τελικά το όριο $\delta E \rightarrow 0$. Γράφουμε $\psi_1 = \psi_E$, $\psi_2 = \psi_{E+\delta E}$ και ολοκληρώνουμε την Εξ. (6.56), από το $-\infty$ ως x ,

$$\psi_{E+\delta E}\psi_E' - \psi_E\psi_{E+\delta E}' = \int_{-\infty}^x dx' \psi_E(x')\psi_{E+\delta E}(x'). \quad (6.58)$$

Διαιρώντας και τα δύο μέλη με $\psi_E(x)\psi_{E+\delta E}(x)$ παίρνουμε

$$\frac{1}{\delta E}[b_{E+\delta E}(x) - b_E(x)] = -\frac{1}{\psi_E(x)\psi_{E+\delta E}(x)} \int_{-\infty}^x dx' \psi_E(x')\psi_{E+\delta E}(x'), \quad (6.59)$$

όπου $b_E(x) := \frac{d \ln \psi_E(x)}{dx}$ η *λογαριθμική παράγωγος* της κυματοσυνάρτησης στο x .

Παίρνουμε το όριο $\delta E \rightarrow 0$, οπότε βρίσκουμε ότι

$$\frac{db_E(x)}{dE} = -\frac{1}{\psi_E(x)^2} \int_{-\infty}^x dx' \psi_E(x')^2, \quad (6.60)$$

δηλαδή η λογαριθμική παράγωγος μιας πραγματικής ιδιοσυνάρτησης του τελεστή Σρέντινγκερ είναι φθίνουσα συνάρτηση της ενέργειας για κάθε x .

6.3.2 Διακριτό φάσμα

Παρουσιάζουμε μερικά σημαντικά αποτελέσματα για το διακριτό φάσμα του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ.

Θεώρημα 6.1 *Ο τελεστής \hat{H} , Εξ. (6.54), δεν έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές.*

Απόδειξη. Δεδομένου ότι θεωρούμε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις, οι οποίες μηδενίζονται στο άπειρο, η σταθερά C της Εξ. (6.57) είναι μηδέν, ο αριστερός όρος της εξίσωσης μηδενίζεται στο άπειρο. Οπότε $\psi_1'/\psi_1 = \psi_2'/\psi_2$ ή $\frac{d}{dx} \log(\psi_1/\psi_2) = 0$, οπότε $\psi_1 = a\psi_2$ για κάποια σταθερά a . Άρα η ιδιοτιμή E δεν είναι εκφυλισμένη.

Εφόσον δεν υπάρχουν εκφυλισμένες ιδιοτιμές, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα δείκτη $n = 0, 1, 2, \dots$, για να αριθμήσουμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις, έτσι ώστε $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$. Έτσι, η $\psi_0(x)$ είναι η ιδιοσυνάρτηση χαμηλότερης ενέργειας και η $\psi_n(x)$ η n -στή διεγερμένη.

Αποκαλούμε **κόμβο** μίας κυματοσυνάρτησης ψ κάθε σημείο $x_0 \in \mathbf{R}$ για το οποίο $\psi(x_0) = 0$. Ένα πολύ σημαντικό αποτέλεσμα για τους κόμβους των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή Σρέντινγκερ είναι το **θεώρημα σύγκρισης του Στουρμ (Sturm)**.

Θεώρημα 6.2 (Θεώρημα σύγκρισης.) *Η n -στή διεγερμένη ιδιοσυνάρτηση του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ έχει n κόμβους.*

Το θεώρημα σύγκρισης είναι πολύ ισχυρό. Μας λέει οι n -στες ιδιοσυναρτήσεις οποιουδήποτε δυναμικού έχουν παρόμοιο σχήμα, ίδιο αριθμό κόμβων και κατά συνέπεια ίδιο αριθμό μεγίστων και ελαχίστων. Ο αναγνώστης καλείται να επιστρέψει στο Κεφ. 3.2 και να το επιβεβαιώσει για την περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή.

Ένθετο 6.1 Απόδειξη του θεωρήματος σύγκρισης

Καταρχάς ορίζουμε ως **σημεία μηδενισμού** μιας κυματοσυνάρτησης ψ τους κόμβους της μαζί με τα όρια $\pm\infty$, δεδομένου ότι μία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση μηδενίζεται στο άπειρο.

Για να αποδειχθεί το θεώρημα σύγκρισης χρειάζεται το ακόλουθο αποτέλεσμα.

Πρόταση 6.3 *Έστω x_0 και x_1 δύο διαδοχικά σημεία μηδενισμού της ιδιοσυνάρτησης ψ_n του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ. Τότε η ιδιοσυνάρτηση ψ_k με $k > n$ έχει ένα σημείο μηδενισμού x' μεταξύ του x_0 και του x_1 .*

Απόδειξη. Έστω δύο ιδιοσυναρτήσεις ψ_n και ψ_k του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ με $E_k > E_n$. Η Εξ. (6.56) γράφεται

$$\frac{d}{dx}(\psi_k \psi_n' - \psi_n \psi_k') = 2m(E_k - E_n)\psi_k \psi_n. \quad (6.61)$$

Έστω x_0 και x_1 δύο διαδοχικά σημεία μηδενισμού της ψ_n . Ολοκληρώνουμε τα δύο σκέλη της Εξ. (6.61) στο διάστημα $[x_0, x_1]$. Δεδομένου ότι $\psi_n(x_0) = \psi_n(x_1) = 0$, παίρνουμε

$$\psi_k(x_1)\psi_n'(x_1) - \psi_k(x_0)\psi_n'(x_0) = 2m(E_k - E_n) \int_{x_0}^{x_1} dx \psi_k \psi_n. \quad (6.62)$$

Εφόσον τα x_0 και x_1 είναι διαδοχικά σημεία μηδενισμού της ψ_n , η ψ_n δεν αλλάζει πρόσημο στο (x_0, x_1) , είναι παντού θετική ή παντού αρνητική. Στην πρώτη περίπτωση, $\psi_n'(x_0) > 0$ και $\psi_n'(x_1) < 0$, εφόσον η συνάρτηση αυξάνει από το μηδέν σε κάτι θετικό στο x_0 και ελαττώνεται από κάτι θετικό σε μηδέν στο x_1 . Ομοίως, στη δεύτερη περίπτωση $\psi_n'(x_0) < 0$ και $\psi_n'(x_1) > 0$.

Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση ψ_k δε μηδενίζεται στο (x_0, x_1) και θα δείξουμε ότι αυτό οδηγεί σε άτομο. Μ' αυτήν την υπόθεση, η ψ_k δεν αλλάζει πρόσημο, άρα είναι πάντα θετική ή πάντα αρνητική στο $[x_0, x_1]$. Όλα τα δυνατά ενδεχόμενα προσήμων συνοψίζονται στο ακόλουθο πίνακα.

ψ_n	ψ_k	$\psi'_n(x_0)$	$\psi'_n(x_1)$	ΑΣ	ΔΣ
+	+	+	-	-	+
+	-	+	-	+	-
-	+	-	+	+	-
-	-	-	+	-	+

Βλέπουμε ότι όταν το αριστερό σκέλος (ΑΣ) της Εξ. (6.62) είναι θετικό, το δεξί σκέλος (ΔΣ) είναι αρνητικό και αντίστροφα. Άρα η ισότητα δεν μπορεί να ισχύει, έχουμε άτοπο. Καταλήγουμε ότι η συνάρτηση ψ_k μηδενίζεται τουλάχιστον μία φορά στο (x_0, x_1) .

Δεδομένου ότι κάθε ιδιοσυνάρτηση μηδενίζεται στο $\pm\infty$, η πρόταση 6.3 σημαίνει ότι όσο μεγαλώνει ο δείκτης n τόσα περισσότερους κόμβους θα έχει μία ιδιοσυνάρτηση. Για παράδειγμα, έστω μία ιδιοσυνάρτηση $\psi(x)$ του \hat{H} με δύο κόμβους στο x_1 και στο $x_2 > x_1$. Η $\psi(x)$ έχει τέσσερα σημεία μηδενισμού, τα $-\infty, x_1, x_2, \infty$. Οποιαδήποτε ιδιοσυνάρτηση υψηλότερης ενέργειας θα έχει τουλάχιστον έναν κόμβο στο $(-\infty, x_1)$, έναν στο (x_1, x_2) , έναν στο (x_2, ∞) , δηλαδή τουλάχιστον τρεις κόμβους.

Τους ελάχιστους κόμβους (κανέναν) θα τους έχει η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας ψ_0 . Δηλαδή η ψ_0 έχει δύο σημεία μηδενισμού, στο $\pm\infty$. Η ψ_1 δεν μπορεί παρά να έχει έναν κόμβο (αν είχε δύο θα έπρεπε να υπάρχει μία ιδιοσυνάρτηση με λιγότερη ενέργεια από E_1 , πέρα από την ψ_0 .) Ακολουθώντας αυτό το σκεπτικό βρίσκουμε ότι η ψ_n θα έχει n κόμβους, όπως δηλώνει το θεώρημα σύγκρισης.

6.3.3 Ειδικές περιπτώσεις

Δυναμικά που απειρίζονται στο άπειρο: $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = \infty$. Για μεγάλες τιμές του x , η Εξ. (6.55) γράφεται ως $\psi'' - k^2(x)\psi = 0$ όπου $k(x) = \sqrt{2m[V(x) - E]} > 0$. Γράφουμε $\psi(x) = e^{S(x)}$, και παρατηρούμε ότι η εξίσωση ιδιοτιμών ικανοποιείται προσεγγιστικά για $S(x) = \pm \int^x k(x')dx'$, εφόσον $k'(x) \ll k^2(x)$. Η συνθήκη αυτή ισχύει πάντα για $|x| \rightarrow \infty$.

Για να το αποδείξουμε, παρατηρούμε ότι για μεγάλο $|x|$, $k(x) = \sqrt{2mV(x)}$, οπότε η παραπάνω συνθήκη γράφεται $\frac{V'}{\sqrt{V}} < 2\sqrt{2m\epsilon}$, όπου $\epsilon \ll 1$. Για $x \rightarrow \infty$, $V' > 0$, οπότε μπορούμε να ολοκληρώσουμε τα δύο σκέλη της ανισότητας και να πάρουμε $c - \frac{1}{2\sqrt{V}} < 2\sqrt{2m\epsilon}$, όπου c σταθερά. Η τελευταία ανισότητα ισχύει για x επαρκώς μεγάλο, αφού το V τείνει στο άπειρο. Αναλόγως αποδεικνύεται το ίδιο και στο όριο $x \rightarrow -\infty$.

Άρα για $|x| \rightarrow \infty$, οι λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών είναι της μορφής $\exp[\pm \int^x k(x')dx']$. Δεν υπάρχουν λύσεις με ταλαντωτική συμπεριφορά στο άπειρο, άρα δεν υπάρχουν γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις. Αποκλείοντας τις λύσεις που αποκλίνουν στο άπειρο, έχουμε μία ασυμπτωτική συμπεριφορά $\exp[-\int^x k(x')dx']$ για $x \rightarrow \infty$ και $\exp[\int^x k(x')dx']$ για $x \rightarrow -\infty$. Δηλαδή οι κυματοσυναρτήσεις μηδενίζονται αρκετά γρήγορα στο άπειρο, άρα είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Εφόσον δεν υπάρχει συνεχές φάσμα, οι ιδιοσυναρτήσεις ορίζουν βάση στο χώρο Χίλμπερτ και άρα είναι άπειρες αφού ο χώρος Χίλμπερτ είναι απειροδιάστατος. Καταλήγουμε λοιπόν στο ακόλουθο αποτέλεσμα.

Θεώρημα 6.4 Αν $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = \infty$, ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει άπειρα ιδιοδιανύσματα.

Το θεώρημα σημαίνει ότι δυναμικά που κλασικά δεν θα επέτρεπαν ποτέ σε ένα σωματίο να διαφύγει όση ενέργεια κι αν είχε, εξακολουθούν να κάνουν το ίδιο και στην κβαντική θεωρία.

Δυναμικά μη-φραγμένα από κάτω στο άπειρο: $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = -\infty$. Σ' αυτήν την περίπτωση, η εξίσωση ιδιοτιμών για μεγάλα $|x|$ γίνεται $\psi'' + \lambda^2(x)\psi = 0$ όπου $\lambda(x) = \sqrt{2m(E + |V(x)|)} > 0$. Οι λύσεις της είναι ταλαντωτικές στο άπειρο, ανεξάρτητα της τιμής του E , άρα αντιστοιχούν σε γενικευμένα ιδιοδιανύσματα. Το φάσμα είναι λοιπόν συνεχές και το E παίρνει όλες τις δυνατές πραγματικές τιμές. Το φάσμα έχει διπλό εκφυλισμό, γιατί για κάθε E υπάρχουν δύο λύσεις με ασυμπτωτική συμπεριφορά $e^{i \int^x dx' \lambda(x')}$ και $e^{-i \int^x dx' \lambda(x')}$.

Γ' αυτά τα δυναμικά, το φάσμα της Χαμιλτονιανής δεν έχει κάτω φράγμα. Στο Κεφ. 8, θα δούμε ότι αυτή η ιδιότητα δεν είναι φυσικά αποδεκτή.

Δυναμικά που μηδενίζονται στο άπειρο: $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$. Για αυτά τα δυναμικά, η εξίσωση ιδιοτιμών στο άπειρο παίρνει τη μορφή $\psi'' + 2mE\psi = 0$. Αν $E > 0$, η λύση είναι ταλαντωτική, άρα έχουμε γενικευμένο ιδιοδιάνυσμα και άρα συνεχές φάσμα. Αν $E < 0$, έχουμε λύσεις που μηδενίζονται ως $e^{-|E|x}$ στο άπειρο, και άρα είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Έχουμε λοιπόν διακριτό φάσμα.

Το συνεχές φάσμα είναι δεδομένο αφού ο όρος της κινητικής ενέργειας μπορεί να πάρει οσοδήποτε μεγάλες τιμές σε περιοχή που το V είναι αμελητέο, και άρα η ενέργεια να είναι απροσδιόριστα μεγάλη. Για να υπάρχει διακριτό φάσμα, πρέπει να υπάρχουν αρνητικές ιδιοτιμές, οι οποίες γενικά δεν είναι δεδομένες. Ειδικότερα, αν $V(x) > 0$, δηλαδή το δυναμικό είναι παντού απωστικό, τότε η Χαμιλτονιανή \hat{H} είναι άθροισμα δύο θετικών τελεστών, άρα είναι θετικός τελεστής, δεν έχει αρνητικές ιδιοτιμές.

Στη συνέχεια εξετάζουμε ελκτικά δυναμικά, δηλαδή δυναμικά που παίρνουν κυρίως αρνητικές τιμές, έτσι ώστε

$$v := \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) < 0. \quad (6.63)$$

Ο τελεστής Σρέντινγκερ \hat{H} έχει διακριτό φάσμα αν δεν είναι θετικός. Για να το αποδείξουμε, αρκεί να βρούμε ένα διάνυσμα $|\psi\rangle$, έτσι ώστε $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle < 0$. Θεωρούμε την (μη κανονικοποιημένη) Γκαουσιανή συνάρτηση $\psi(x) = e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$. Βρίσκουμε αμέσως ότι $\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma^{-1}$. Επίσης $\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$. Στο όριο που το σ είναι πολύ μεγάλο, $\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle \rightarrow v$. Στο ίδιο όριο, ο όρος $\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma^{-1}$ γίνεται αμελητέος και άρα $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \rightarrow v < 0$. Άρα για επαρκώς μεγάλο σ , $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle < 0$. Καταλήξαμε στο ακόλουθο αποτέλεσμα.

Θεώρημα 6.5 Αν $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$ και $\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) < 0$, ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει τουλάχιστον ένα ιδιοδιάνυσμα με αρνητική ενέργεια.

Παρατηρούμε ότι ακόμα και ένα εξαιρετικά ασθενές ελκτικό δυναμικό μπορεί να παγιδεύσει ένα σωματίο. Θα δούμε στο Κεφ. 13, ότι αυτό δεν ισχύει για τον τελεστή Σρέντινγκερ στις τρεις διαστάσεις.

Αριθμός δέσμιων καταστάσεων. Μια καλή εκτίμηση του αριθμού των δέσμιων καταστάσεων N_- δίνεται από την ακόλουθη ανισότητα που οφείλεται στον Μπάργκμαν (Bargmann)².

Θεώρημα 6.6 Αν $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$,

$$N_- < 1 + 2m \int_{-\infty}^{\infty} dx |x| V_-(x), \quad (6.64)$$

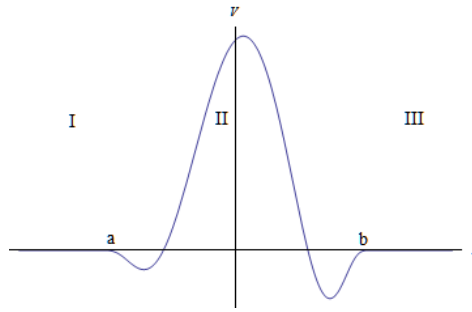
όπου V_- το αρνητικό μέρος του δυναμικού $V_-(x) := \max\{0, -V(x)\}$.

Παρατηρούμε ότι ο δεξιός όρος στην Εξ. (6.64) απειρίζεται αν το $V_-(x)$ μηδενίζεται στο άπειρο πιο αργά από $|x|^{-2}$.

6.3.4 Καταστάσεις σκέδασης

Συνεχίζουμε τη μελέτη του τελεστή Σρέντινγκερ για δυναμικά τα οποία μηδενίζονται στο άπειρο, αλλά πλέον επικεντρωνόμαστε στο συνεχές φάσμα. Για ευκολία, θεωρούμε δυναμικά που είναι διάφορα του μηδενός μόνο σε ένα πεπερασμένο διάστημα $C = [a, b]$. Έξω από το C , ο τελεστής Σρέντινγκερ ταυτίζεται με τον τελεστή της κινητικής ενέργειας $\hat{T} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, ο οποίος έχει θετικές γενικευμένες ιδιοτιμές της ενέργειας (αφού είναι ανάλογος του θετικού τελεστή \hat{p}^2). Οι ιδιοτιμές του \hat{T}

²Η αρχική ανισότητα του Μπάργκμαν [89, 90] αφορά τον τελεστή Σρέντινγκερ στις τρεις διαστάσεις, και θα τη συνατήσουμε στο Κεφ. 13. Η εκδοχή της για τον τελεστή Σρέντινγκερ σε μία διάσταση βρίσκεται στο [92].



Σχήμα 6.1: Δυναμικό που παίρνει μη μηδενικές τιμές μόνο στο διάστημα $[a, b]$.

έχουν διπλό εκφυλισμό, δηλαδή υπάρχουν δύο διαφορετικές γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις e^{ikx} και e^{-ikx} για κάθε γενικευμένη ιδιοτιμή $E = \frac{k^2}{2m}$. Το συμπέρασμα αυτό γενικεύεται και σε δυναμικά που μηδενίζονται ασυμπτωτικά στο άπειρο [93].

Θεώρημα 6.7 Αν το δυναμικό $V(x)$ μηδενίζεται στο $\pm\infty$, κάθε $E \in [0, \infty)$ αποτελεί διπλά εκφυλισμένη γενικευμένη ιδιοτιμή του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ \hat{H} .

Έστω λοιπόν ένα δυναμικό όπως στο σχήμα 6.1 που παίρνει μη μηδενικές τιμές μόνο στο διάστημα $[a, b]$. Στις περιοχές I ($x < a$) και III ($x > b$), η εξίσωση ιδιοτιμών είναι $-\psi'' = 2mE\psi$, με γενική λύση $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, όπου $k = \sqrt{2mE}$.

Για κάθε τιμή της ενέργειας E ξεχωρίζουμε δύο γενικευμένα ιδιοδιανύσματα του \hat{H} με βάση τη συμπεριφορά τους στις περιοχές I και III .

$$\begin{aligned}
 f_{k+}(x) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(e^{ikx} + R_k e^{-ikx}), & x < a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}T_k e^{ikx} & x > b \end{cases} \\
 f_{k-}(x) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\bar{T}_k e^{-ikx}, & x < a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(e^{-ikx} + \bar{R}_k e^{ikx}) & x > b \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6.65}$$

Οι λύσεις f_{k+} αντιστοιχούν σε εξερχόμενα κύματα στην περιοχή III (απομακρύνονται από τη II και διαδίδονται προς το $+\infty$), ενώ οι λύσεις f_{k-} αντιστοιχούν σε εξερχόμενα κύματα στην περιοχή I (απομακρύνονται από τη II και διαδίδονται προς το $-\infty$). Σε μία κλασική κυματική εικόνα, οι λύσεις f_{k+} αντιστοιχούν σε κυματοπακέτα που έρχονται από το $-\infty$, μέρος τους σκεδάζεται στο δυναμικό και επιστρέφει πίσω και μέρος τους περνά στην περιοχή III και διαδίδεται προς το $+\infty$. Το αντίστοιχο ισχύει και για τις λύσεις f_{k-} , με αντίθετη κατεύθυνση διάδοσης.

Οι παραπάνω λύσεις καλούνται καταστάσεις σκέδασης, οι συντελεστές R_k, \bar{R}_k πλάτη ανάκλασης και οι συντελεστές T_k, \bar{T}_k πλάτη μετάδοσης. Σε κλασικά κύματα, η ποσότητα $|T_k|^2$ αντιστοιχεί στο κλάσμα της ενέργειας του κύματος που περνά στην περιοχή III . Όπως θα δείξουμε σε επόμενο κεφάλαιο (8.3.4), η ποσότητα $|T_k|^2$ είναι ανάλογη της πιθανότητας για ένα σωματίο ενέργειας E που έρχεται από το $-\infty$ να βρεθεί στην περιοχή III , γι' αυτό καλείται πιθανότητα μετάδοσης.

Οι παραπάνω συντελεστές δεν είναι μεταξύ τους ανεξάρτητοι. Για οποιοδήποτε ζεύγος από τις τέσσερις συναρτήσεις f_{k+}, f_{k-}, f_{k+}^* και f_{k-}^* ισχύει η Εξ. (6.57) δεδομένου ότι και οι τέσσερις αποτε-

λούν λύσεις της εξίσωσης ιδιοτιμών για ίδια τιμή του E . Υπολογίζουμε

$$f_{k+}f_{k+}^{*'} - f_{k+}^*f_{k+}' = \begin{cases} -\frac{ik(1-|R_k|^2)}{\pi} & x < a \\ -\frac{ik|T_k|^2}{\pi} & x > b \end{cases} \quad (6.66)$$

$$f_{k-}f_{k-}^{*'} - f_{k-}^*f_{k-}' = \begin{cases} \frac{ik|\bar{T}_k|^2}{\pi} & x < a \\ \frac{ik(1-|\bar{R}_k|^2)}{\pi} & x > b \end{cases} \quad (6.67)$$

$$f_{k+}f_{k-}' - f_{k-}f_{k+}' = \begin{cases} -\frac{ik\bar{T}_k}{\pi} & x < a \\ -\frac{ikT_k}{\pi} & x > b \end{cases} \quad (6.68)$$

$$f_{k+}f_{k-}^{*'} - f_{k-}^*f_{k+}' = \begin{cases} \frac{ik\bar{T}_k^*R_k}{\pi} & x < a \\ -\frac{ikT_k\bar{R}_k^*}{\pi} & x > b \end{cases} \quad (6.69)$$

Εφόσον οι παραπάνω υπολογισμένες ποσότητες πρέπει να παίρνουν την ίδια τιμή στις περιοχές I και III , οδηγούμαστε στις ακόλουθες τέσσερις ταυτότητες

$$|T_k|^2 + |R_k|^2 = 1, \quad |\bar{T}_k|^2 + |\bar{R}_k|^2 = 1, \quad T_k = \bar{T}_k, \quad \bar{T}_k^*R_k + T_k\bar{R}_k^* = 0. \quad (6.70)$$

Βλέπουμε ότι τα τέσσερα μιγαδικά πλάτη εκφράζονται συναρτήσει μόνο τριών ανεξάρτητων μεταβλητών, τις οποίες μπορούμε να επιλέξουμε ως το μέτρο $|T_k|$ του πλάτους μετάδοσης και τις φάσεις $e^{i\phi_k} := R_k/|R_k|$ και $e^{i\bar{\phi}_k} := \bar{R}_k/|\bar{R}_k|$ των πλατών ανάκλασης. Από τις εξισώσεις (6.70) βλέπουμε ότι $|R_k|^2 = |\bar{R}_k|^2 = 1 - |T_k|^2$ και ότι η φάση του συντελεστή διάδοσης, $e^{i\theta_k} := T_k/|T_k|$ γράφεται ως συνάρτηση των ϕ_k και $\bar{\phi}_k$,

$$2\theta_k = \pi + \phi_k + \bar{\phi}_k \quad (6.71)$$

Αξιοσημείωτη είναι η περίπτωση που το δυναμικό είναι συμμετρικό. Τότε, οι συναρτήσεις $f_{k+}(-x)$ είναι επίσης ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Σρέντινγκερ, και έχουν την ίδια μορφή με τις $f_{k-}(x)$ στις περιοχές I και III , οπότε ταυτίζονται μαζί τους. Αυτό σημαίνει ότι σε συμμετρικό δυναμικό, $R_k = \bar{R}_k$, οπότε $\phi_k = \bar{\phi}_k$ και $\theta_k = \phi_k + \frac{\pi}{2}$.

Θα αναπαραστήσουμε τις συναρτήσεις f_{k+} και f_{k-} με τα κερ $|k, +\rangle$ και $|k, -\rangle$ αντίστοιχα. Δεδομένου ότι μιλάμε για ιδιοδιανύσματα, έστω και γενικευμένα, ενός αυτοσυζυγούς τελεστή, το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ κερ με διαφορετικό k θα μηδενίζεται, οπότε θα ισχύει ότι

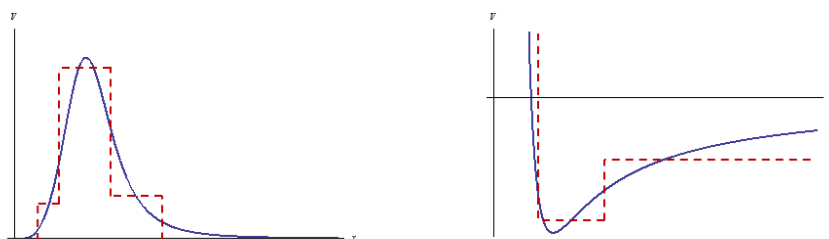
$$\langle k, +|k', +\rangle = w_1(k)\delta(k - k'), \quad \langle k, -|k', -\rangle = w_2(k)\delta(k - k'), \quad \langle k, +|k', -\rangle = w_3(k)\delta(k - k'),$$

για κάποιες συναρτήσεις $w_i(k)$, $i = 1, 2, 3$. Στην άσκηση 6.9, δείχνεται ότι $w_1 = w_2 = 1$ και $w_3 = 0$, οπότε καταλήγουμε ότι

$$\langle k, +|k', +\rangle = \delta(k - k'), \quad \langle k, -|k', -\rangle = \delta(k - k'), \quad \langle k, +|k', -\rangle = 0. \quad (6.72)$$

Παράδειγμα 6.2. Έστω δυναμικό $V(x) = ax^2 + \frac{b}{x^2+1}$, για σταθερές a και b . Με βάση την ως τώρα ανάλυση, το φάσμα του τελεστή Σρέντινγκερ με τους αντίστοιχους εκφυλισμούς g είναι το εξής.

Παράμετροι	Διακριτό φάσμα	Συνεχές φάσμα
$a > 0$	$E > 0, g = 1$	δεν υπάρχει
$a = 0, b > 0$	δεν υπάρχει	$E > 0, g = 2$
$a = 0, b < 0$	$E < 0, g = 1$	$E > 0, g = 2$
$a < 0$	δεν υπάρχει	$E \in \mathbf{R}, g = 2$



Σχήμα 6.2: Παραδείγματα προσέγγισης συνεχών δυναμικών (μπλε συνεχής γραμμή) από τμηματικά σταθερά δυναμικά (κόκκινη διακεκομμένη γραμμή).

6.4 Ο τελεστής Σρέντινγκερ με τμηματικά σταθερά δυναμικά

6.4.1 Βασικά χαρακτηριστικά

Είναι πολύ λίγα τα δυναμικά για τα οποία μπορούμε να έχουμε αναλυτικές εκφράσεις για τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή Σρέντινγκερ. Ωστόσο σε πολλά προβλήματα δε χρειαζόμαστε κάτι περισσότερο από μία μοντελοποίηση του δυναμικού, η οποία να πιάνει τα βασικά φυσικά χαρακτηριστικά του. Σ' αυτήν την περίπτωση μπορούμε να περιγράψουμε ένα δυναμικό ως τμηματικά σταθερό, δηλαδή να παίρνει σταθερές τιμές παντού εκτός από πεπερασμένα σημεία ασυνέχειας—βλ. Σχήμα 6.2.

Σε περιοχές που δεν περιέχουν τα σημεία ασυνέχειας ενός τμηματικά σταθερού δυναμικού, η εξίσωση ιδιοτιμών γράφεται ως $\psi'' + 2m(E - V)\psi = 0$, όπου το V είναι σταθερά. Για $E > V$, οι λύσεις είναι της μορφής $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, όπου $k = \sqrt{2m(E - V)}$ και A και B σταθερές. Για $E < V$, οι λύσεις είναι της μορφής $\psi = Ce^{-\lambda x} + De^{\lambda x}$, όπου $\lambda = \sqrt{2m(V - E)}$ και C και D σταθερές. Για $E = V$, οι λύσεις είναι της μορφής $\psi = Fx + G$, όπου F και G σταθερές.

Η δυσκολία έγκειται στο ότι πρέπει να συνδυάσουμε τις λύσεις από τις περιοχές που έχουν διαφορετικές τιμές του V , οπότε πρέπει να βρούμε πώς συμπεριφέρονται οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi(x)$ του τελεστή Σρέντινγκερ στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού. Έστω ότι το $x = x_0$ είναι ένα σημείο ασυνέχειας του δυναμικού. Η προφανής απαίτηση είναι η ιδιοσυνάρτηση να είναι συνεχής στο x_0 . Επιπλέον, αν ολοκληρώσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\psi'' + 2m[E - V(x)]\psi = 0$ σε ένα διάστημα $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ όπου το $\epsilon > 0$ πολύ μικρό, παίρνουμε

$$\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon) = -2m \int_{-x_0+\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx [E - V(x)]\psi(x). \quad (6.73)$$

Στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$, το ολοκλήρωμα στο δεξιό σκέλος της Εξ. (6.73) μηδενίζεται, εφόσον η $\psi(x)$ είναι συνεχής, οπότε παίρνουμε $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon)] = 0$, δηλαδή η πρώτη παράγωγος της ψ είναι συνεχής στο $x = x_0$. Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού απαιτούμε τη συνέχεια της $\psi(x)$ και της πρώτης παραγώγου της.

6.4.2 Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

Θα εξετάσουμε πρώτα τον τελεστή Σρέντινγκερ σε ένα τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, όπου

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.74)$$

όπου $V_0 > 0$ το βάθος του πηγαδιού και a το εύρος του.

Εστιάζουμε στο διακριτό φάσμα του τελεστή Σρέντινγκερ, που αντιστοιχεί σε αρνητικές ενέργειες. Παρατηρούμε ότι για $-V_0 < E < 0$, οι λύσεις στην περιοχή όπου $|x| > a/2$ είναι γραμμικοί συνδυασμοί του $e^{\lambda x}$ και $e^{-\lambda x}$, όπου $\lambda = \sqrt{|E|}$. Δεδομένου ότι μία τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση πρέπει να μηδενίζεται για $x \rightarrow \pm\infty$, οι μοναδικές αποδεκτές λύσεις για $|x| > a/2$ είναι ανάλογες του $e^{-\lambda|x|}$.

Αφού το δυναμικό είναι συμμετρικό, επιλέγουμε ιδιοσυναρτήσεις με καθορισμένη αρτιότητα: άρτιες συναρτήσεις ψ_+ και περιττές συναρτήσεις ψ_- . Είναι της μορφής

$$\psi_+(x) = \begin{cases} A_+ e^{\lambda x} & x < -\frac{a}{2} \\ B \cos kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ A_+ e^{-\lambda x} & x > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad \psi_-(x) = \begin{cases} -A_- e^{\lambda x} & x < -\frac{a}{2} \\ C \sin kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ A_- e^{-\lambda x} & x > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.75)$$

όπου $k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$.

Η απαίτηση συνέχειας των ιδιοσυναρτήσεων και των πρώτων παραγώγων τους στα σημεία $x = \pm \frac{a}{2}$ δίνει 4 εξισώσεις για κάθε ιδιοσυνάρτηση. Ωστόσο λόγω συμμετρίας, οι συνθήκες που προκύπτουν στο $x = \frac{a}{2}$ είναι ίδιες με αυτές που προκύπτουν στο $x = -\frac{a}{2}$, οπότε καταλήγουμε με μόνο δύο εξισώσεις για κάθε συνάρτηση.

- για τις ψ_+ : $A_+ e^{-\lambda a/2} = B \cos ka/2$ και $\lambda A_+ e^{-\lambda a/2} = kB \sin(ka/2)$.
- για τις ψ_- : $A_- e^{-\lambda a/2} = C \sin(ka/2)$ και $-\lambda A_- e^{-\lambda a/2} = kC \cos ka/2$.

Διαιρώντας κατά μέλη τις δύο εξισώσεις για κάθε συνάρτηση ψ_+ και ψ_- παίρνουμε τις σχέσεις

$$\tan(ka/2) = \lambda/k \quad \text{για την } \psi_+, \quad \cot(ka/2) = -\lambda/k \quad \text{για την } \psi_-. \quad (6.76)$$

Γράφουμε τις Εξ. (6.76) χρησιμοποιώντας τις αδιάστατες μεταβλητές $x = |E|/V_0 \in [0, 1]$ και $b = \sqrt{mV_0 a^2/2}$,

$$\sqrt{x} = \sqrt{1-x} \tan(b\sqrt{1-x}) \quad \text{για την } \psi_+, \quad (6.77)$$

$$\sqrt{x} = -\sqrt{1-x} \cot(b\sqrt{1-x}) \quad \text{για την } \psi_-. \quad (6.78)$$

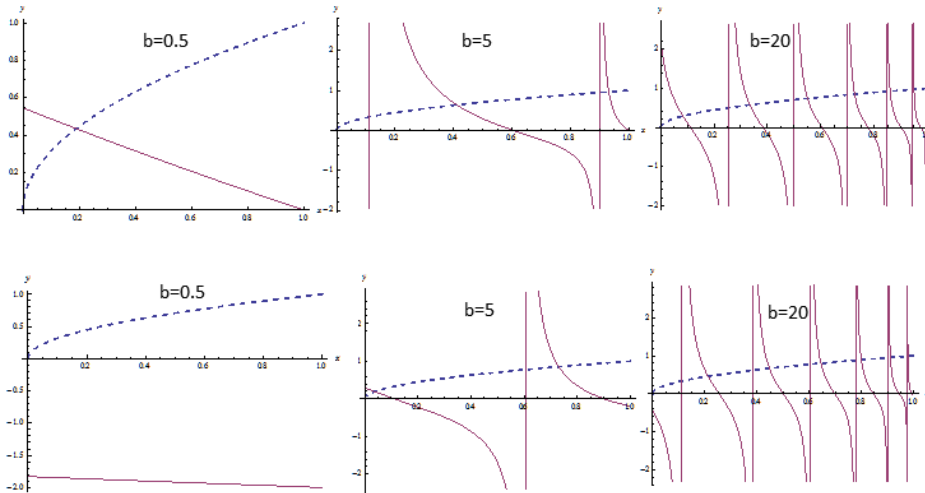
Οι εξισώσεις (6.77) και (6.78) επιδέχονται μία ή και περισσότερες λύσεις ανάλογα με την τιμή της παραμέτρου b . Για $b \ll 1$, κρατάμε μόνο τον πρώτο όρο από το ανάπτυγμα της εφαπτομένης, οπότε η Εξ. (6.77) γίνεται $\sqrt{x} = b(1-x)$, η οποία έχει μία αποδεκτή λύση $x \simeq b$. Όσο μεγαλώνει το b και η εφαπτομένη παίρνει περιοδικά τιμές από $-\infty$ στο ∞ τόσο περισσότερες λύσεις έχει η Εξ. (6.77). Το ίδιο ισχύει και για τις λύσεις της Εξ. (6.78), με μία μόνο διαφορά. Στο όριο $b \ll 1$, η Εξ. (6.78) γίνεται $b\sqrt{x} = -1$, η οποία δεν έχει αποδεκτή λύση. Άρα για $b \ll 1$ υπάρχει μόνο μία άρτια ιδιοσυνάρτηση. Αυτή η συμπεριφορά επιδεικνύεται στο Σχ. 6.3.

Καταλήγουμε ότι ο αριθμός N_- των ιδιοδιανυσμάτων του τελεστή Σρέντινγκερ αυξάνει τόσο με το βάθος V_0 όσο και με το εύρος a του δυναμικού. Αυτό το συμπέρασμα είναι αναμενόμενο από το θεώρημα του Μπάργκμαν, καθώς η Εξ. (6.64) προβλέπει ότι $N_- < 1 + b$.

6.4.3 Τετραγωνικό φράγμα δυναμικού

Στη συνέχεια, εξετάζουμε τον τελεστή Σρέντινγκερ σε ένα τετραγωνικό φράγμα δυναμικού, όπου

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.79)$$



Σχήμα 6.3: Γραφική εύρεση λύσεων των Εξ. (6.77) και (6.78). Στην πάνω γραμμή, προσδιορίζονται τα σημεία τομής των γραφημάτων για τις συναρτήσεις $y_1 = \sqrt{x}$ (διακεκομμένη γραμμή) και $y_2 = \sqrt{1-x} \tan(b\sqrt{1-x})$ για διαφορετικές τιμές του b . Στην κάτω γραμμή, προσδιορίζονται τα σημεία τομής των γραφημάτων για τις συναρτήσεις $y_1 = \sqrt{x}$ (διακεκομμένη γραμμή) και $y_2 = -\sqrt{1-x} \cot(b\sqrt{1-x})$ για διαφορετικές τιμές του b . Και στις δύο περιπτώσεις, όσο μεγαλώνει το b , τόσο περισσότερες ταλαντώσεις κάνει η y_2 στο διάστημα $[0, 1]$, και άρα αυξάνει ο αριθμός λύσεων των Εξ. (6.77) ή (6.78).

όπου $V_0 > 0$ το ύψος του φράγματος και a το εύρος του.

Ο τελεστής Σρέντινγκερ γι' αυτό το δυναμικό είναι θετικός, άρα έχει μόνο συνεχές φάσμα, με ιδιοσυναρτήσεις f_{k+} και f_{k-} όπως στην Εξ. (6.65). Δεδομένου ότι το δυναμικό είναι συμμετρικό, αρκεί να βρούμε τις λύσεις f_{k+} , αφού $f_{k-}(x) = f_{k+}(-x)$. Περιοριζόμαστε σε τιμές $E < V_0$, οι οποίες μας επιτρέπουν να τονίσουμε μια σημαντική διαφορά μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής. Κλασικά ένα σωματίο με ενέργεια $E < V_0$ που έρχεται από τα αριστερά, δεν μπορεί να περάσει στα δεξιά του πηγαδιού.

Για $E < V_0$,

$$f_{k+}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(e^{ikx} + R_k e^{-ikx}), & x < -\frac{a}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(C e^{\lambda x} + D e^{-\lambda x}) & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} T_k e^{ikx} & x > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.80)$$

$$(6.81)$$

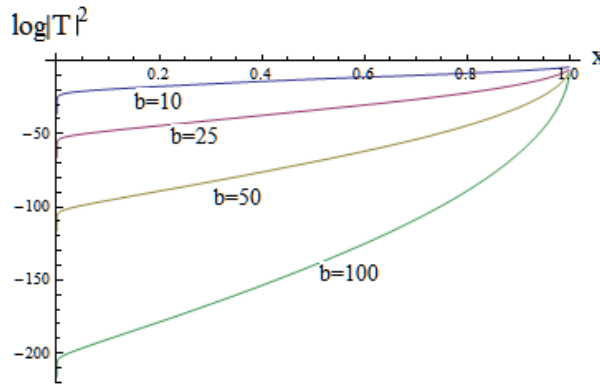
όπου $k = \sqrt{2mE}$, $\lambda = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ και C, D σταθερές.

Η συνέχεια της f_{k+} και της πρώτης της παραγώγου στο $x = \frac{a}{2}$ δίνει τις εξισώσεις, $C e^{\lambda a/2} + D e^{-\lambda a/2} = T_k e^{ika/2}$ και $C e^{\lambda a/2} - D e^{-\lambda a/2} = (ik/\lambda) T_k e^{ika/2}$, οι οποίες επιτρέπουν τον προσδιορισμό των C και D συναρτήσει του T_k ,

$$C = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k}{\lambda}\right) e^{-\lambda a/2} e^{ika/2} T_k, \quad D = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k}{\lambda}\right) e^{\lambda a/2} e^{ika/2} T_k. \quad (6.82)$$

Η συνέχεια της f_{k+} και της πρώτης της παραγώγου στο $x = -\frac{a}{2}$ δίνει τις εξισώσεις $C e^{-\lambda a/2} + D e^{\lambda a/2} = e^{-ika/2} + R_k e^{ika/2}$ και $(-i\lambda/k)(C e^{-\lambda a/2} - D e^{\lambda a/2}) = e^{-ika/2} - R_k e^{ika/2}$. Προσθέτοντάς τις κατά μέλη βρίσκουμε ότι $e^{-ika/2} = (1 - \frac{i\lambda}{k}) e^{-\lambda a/2} C + e^{-ika/2} = (1 + \frac{i\lambda}{k}) e^{\lambda a/2} D$. Αντικαθιστώντας τις τιμές των C και D από την Εξ. (6.82), υπολογίζουμε το πλάτος μετάδοσης

$$T_k = \frac{e^{-ika}}{\left[1 + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{\lambda} - \frac{\lambda}{k}\right) e^{\lambda a} + \left[1 - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{\lambda} - \frac{\lambda}{k}\right)\right] e^{-\lambda a}\right)}. \quad (6.83)$$



Σχήμα 6.4: Ο λογάριθμος του $|T_k|^2$ της Εξ. (6.85) ως συνάρτηση του $x = E/V_0 \in [0, 1]$, για διαφορετικές τιμές του $b = \sqrt{2mV_0}a$.

Στο όριο *αδιαφανούς φράγματος*, όπου $\lambda a \gg 1$, κυριαρχεί στον παρονομαστή της Εξ. (6.83) ο όρος ανάλογος του $e^{\lambda a}$, οπότε

$$T_k = \frac{e^{-ika} e^{-\lambda a}}{1 + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{\lambda} - \frac{\lambda}{k} \right)}, \quad (6.84)$$

όπου είναι σαφές ότι το πλάτος μετάδοσης πέφτει εκθετικά με το εύρος του φράγματος.

Παρόλα αυτά το πλάτος μετάδοσης είναι μη μηδενικό, κάτι που σημαίνει ότι ένα σωματίο έχει μη μηδενική πιθανότητα να περάσει το φράγμα, ακόμα και αν η ενέργεια του είναι μικρότερη του ύψους του φράγματος. Αυτό είναι ένα χαρακτηριστικό κβαντικό φαινόμενο, που είναι γνωστό ως *φαινόμενο σήραγγας*.

Από την Εξ. (6.83), υπολογίζουμε το μέτρο του πλάτους μετάδοσης,

$$|T_k|^2 = \frac{1}{\cosh^2(\lambda a) + \left(\frac{k}{\lambda} - \frac{\lambda}{k} \right)^2 \sinh^2(\lambda a)} = \frac{1}{\cosh^2(b\sqrt{1-x}) + \frac{(2x-1)^2}{x(1-x)} \sinh^2(b\sqrt{1-x})}, \quad (6.85)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις αδιάστατες μεταβλητές $x = E/V_0$ και $b = \sqrt{2mV_0}a$. Στο Σχ. 6.4 δίνεται το γράφημα του λογαρίθμου του $|T_k|^2$ ως συνάρτηση του $x = E/V_0$, για διαφορετικές τιμές του b . Η πιθανότητα μετάδοσης αυξάνει με το x για σταθερό b και ελαττώνεται με το b για σταθερό x .

6.5 Δυναμικό συνάρτησης δέλτα

Στο όριο που το ύψος (ή το βάθος) V_0 του τετραγωνικού δυναμικού πάει στο άπειρο και το εύρος του a τείνει στο μηδέν, με το γινόμενο $\eta = V_0 a$ να παραμένει σταθερό, το δυναμικό είναι ανάλογο μίας συνάρτησης δέλτα,

$$V(x) = \eta \delta(x). \quad (6.86)$$

Μπορούμε να λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών για δυναμικά συνάρτησης δέλτα, παίρνοντας τα αντίστοιχα όρια των εκφράσεων για τις ποσότητες που υπολογίσαμε για το πηγάδι και το φράγμα δυναμικού. Ωστόσο είναι πιο χρήσιμο, να διατυπώσουμε μία συνθήκη σύζευξης για τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi(x)$ του τελεστή Σρέντινγκερ γύρω από σημεία x_0 που το δυναμικό έχει συμπεριφορά συνάρτησης δέλτα. Καταρχάς απαιτούμε τη συνέχεια της συνάρτησης στο x_0 . Επιπλέον, θέτοντας $V(x) = \eta \delta(x - x_0)$ στην Εξ. (6.73) παίρνουμε

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon)] = 2m\eta\psi(x_0), \quad (6.87)$$

δηλαδή έχουμε μία ασυνέχεια στην πρώτη παράγωγο.

6.5.1 Μονό πηγάδι δέλτα

Ας εξετάσουμε την περίπτωση ένα ελκτικό δυναμικό δέλτα, $V(x) = -\eta\delta(x)$, όπου $\eta > 0$. Οι ιδιοκαταστάσεις αρνητικής ενέργειας είναι της μορφής,

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{-\lambda x} & x > 0 \\ A_- e^{\lambda x} & x < 0 \end{cases} \quad (6.88)$$

όπου $A_{+, -}$ σταθερές και $\lambda = \sqrt{2m|E|}$. Η απαίτηση συνέχειας στο $x = 0$ σημαίνει ότι $A_+ = A_-$, ενώ η Εξ. (6.87) δίνει $\lambda = m\eta$. Άρα υπάρχει μόνο μία αρνητική ιδιοτιμή της ενέργειας,

$$E = -\frac{m\eta^2}{2}, \quad (6.89)$$

με αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση

$$\psi_0(x) = \sqrt{m\eta} e^{-m\eta|x|}. \quad (6.90)$$

Για το συνεχές φάσμα αρκεί να εξετάσουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $f_{k+}(x)$, αφού το δυναμικό είναι συμμετρικό.

$$f_{k+}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(e^{ikx} + R_k e^{-ikx}), & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}T_k e^{ikx} & x > 0 \end{cases}. \quad (6.91)$$

Η συνθήκη συνέχειας στο $x = 0$ δίνει $1 + R_k = T_k$, ενώ η Εξ. (6.87) δίνει $ik(1 - R_k - T_k) = -2m\eta T_k$. Λύνοντας το σύστημα των εξισώσεων βρίσκουμε ότι

$$T_k = \frac{1}{1 + i\frac{m\eta}{k}}, \quad R_k = -\frac{1}{1 - i\frac{k}{m\eta}}. \quad (6.92)$$

Οι παραπάνω εκφράσεις για το T_k και R_k ισχύουν για δυναμικό $V(x) = -\eta\delta(x)$, είτε το η είναι θετικό είτε αρνητικό. Σε αντίθεση, η θεμελιώδης κατάσταση (6.90) υπάρχει μόνο για θετικό η .

6.5.2 Διπλό πηγάδι δέλτα

Θεωρούμε ένα δυναμικό $V(x) = -\eta[\delta(x - \frac{a}{2}) + \delta(x + \frac{a}{2})]$, που αποτελεί μία ιδεατή μοντελοποίηση για ένα δυναμικό με δύο συμμετρικά πηγάδια σε απόσταση a . Το δυναμικό είναι συμμετρικό, οπότε οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Σρέντινγκερ είναι είτε άρτιες είτε περιττές.

Οι άρτιες ιδιοσυναρτήσεις είναι της μορφής

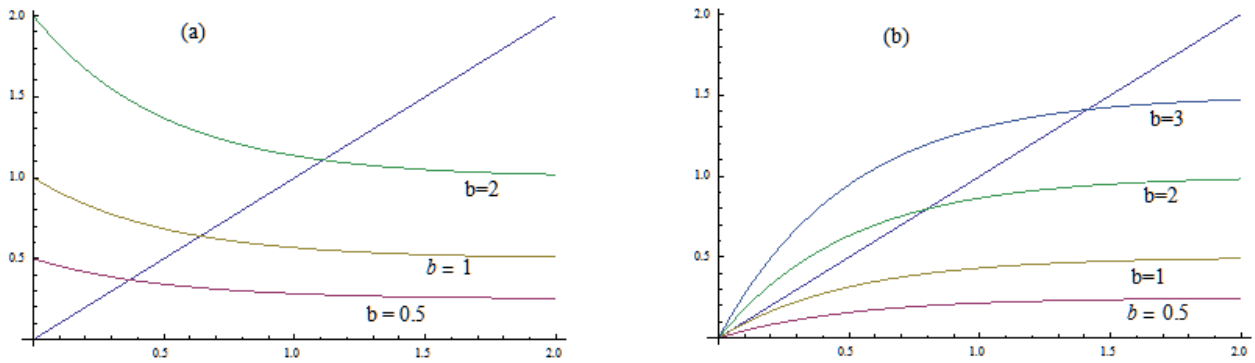
$$\psi_+(x) = \begin{cases} A_+ e^{\lambda x} & x < -\frac{a}{2} \\ B_+ \cosh \lambda x & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ A_+ e^{-\lambda x} & x > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.93)$$

για κάποιες σταθερές A_+, B_+ και $\lambda = \sqrt{2m|E|}$.

Οι περιττές ιδιοσυναρτήσεις είναι της μορφής

$$\psi_-(x) = \begin{cases} -A_- e^{\lambda x} & x < -\frac{a}{2} \\ B_- \sinh \lambda x & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ A_- e^{-\lambda x} & x > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (6.94)$$

για σταθερές A_-, B_- .



Σχήμα 6.5: (α) Γραφική λύση της Εξ. (6.97) για διαφορετικές τιμές του b . (β) Γραφική λύση της Εξ. (6.98) για διαφορετικές τιμές του b . Παρατηρούμε ότι λύση υπάρχει μόνο για $b > 1$.

Οι συνθήκες σύζευξης για τις ψ_+ είναι

$$A_+ e^{\lambda a/2} = B_+ \sinh(\lambda a/2), \quad (1 - 2m\eta/\lambda)A_+ e^{\lambda a/2} = -B_+ \sinh(\lambda a/2), \quad (6.95)$$

και για τις ψ_-

$$A_- e^{\lambda a/2} = B_- \sinh(\lambda a/2), \quad (1 - 2m\eta/\lambda)A_- e^{\lambda a/2} = -B_- \sinh(\lambda a/2). \quad (6.96)$$

Είναι βολικό να ορίσουμε τις ποσότητες $x := \lambda a/2$ και $b := ma\eta$. Τότε οι συνθήκες σύζευξης για τις ψ_+ δίνουν

$$x = \frac{b}{1 + \tanh x}. \quad (6.97)$$

Η συνάρτηση του x στο δεξί σκέλος της Εξ. (6.97) είναι φθίνουσα στο $[0, \infty)$ με τιμή b για $x = 0$ και $b/2$ για $x \rightarrow \infty$. Άρα το γράφημα της $y = \frac{b}{1 + \tanh x}$ τέμνεται μόνο μία φορά από το γράφημα της $y = x$, οπότε η Εξ. (6.97) έχει μόνο μία λύση, έστω $x_+(b)$ (βλ. Σχ. 6.5.a). Για $b \ll 1$, η Εξ. (6.97) γίνεται $x \simeq b(1 - x)$, οπότε $x_+(b) = b/(1 + b) \simeq b - b^2$. Για b αρκετά μεγαλύτερο της μονάδας, η Εξ. (6.97) γίνεται $x = \frac{b}{2}$ οπότε $x_+(b) = b/2$.

Οι συνθήκες σύζευξης για τις ψ_- δίνουν

$$x = \frac{b}{1 + \coth x}. \quad (6.98)$$

Η συνάρτηση στο δεξί σκέλος της Εξ. (6.98) είναι αύξουσα στο $[0, \infty)$ με τιμή 0 για $x = 0$ και $b/2$ για $x \rightarrow \infty$. Η Εξ. (6.98) έχει μία λύση $x = 0$, που είναι μη αποδεκτή, αφού οδηγεί σε $\lambda = 0$ και άρα σε μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμη $\psi_-(x)$. Έχει θετική λύση, μόνο αν η $y = \frac{b}{1 + \coth x}$ αυξάνει πιο γρήγορα από την $y = x$ κοντά στο μηδέν. Κοντά στο μηδέν $\coth x \simeq x^{-1}$, οπότε $\frac{b}{1 + \coth x} \simeq bx$. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει θετική λύση μόνο αν $b > 1$ και δεν υπάρχει για $b < 1$ (βλ. Σχ. 6.5.b). Θα συμβολίζουμε τις λύσεις της Εξ. (6.98) ως $x_-(b)$.

Καθώς $(1 + \tanh x)^{-1} = \cosh x / (\sinh x + \cosh x) > \sinh x / (\sinh x + \cosh x) = (1 + \coth x)^{-1}$, για κάθε b θα ισχύει ότι $x_+(b) > x_-(b)$. Άρα η χαμηλότερη ιδιοτιμή της ενέργειας θα αντιστοιχεί πάντα στη συμμετρική ιδιοκατάσταση.

Συνοψίζοντας,

- για $ma\eta \leq 1$, υπάρχει μόνο μία ιδιοσυνάρτηση του τελεστή Σρέντινγκερ με ιδιοτιμή ενέργειας $E = -\frac{2}{ma^2} [x_+(ma\eta)]^2$.

- για $ma\eta > 1$, υπάρχουν δύο ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Σρέντινγκερ, μία άρτια με τη χαμηλότερη ιδιοτιμή ενέργειας $E_+ = -\frac{2}{ma^2}[x_+(ma\eta)]^2$, και μία περιττή με μεγαλύτερη ιδιοτιμή ενέργειας $E_- = -\frac{2}{ma^2}[x_-(ma\eta)]^2$.

Είναι αξιοσημείωτο ότι δεν υπάρχει εκφυλισμός στη χαμηλότερη τιμή της ενέργειας. Στο αντίστοιχο κλασικό σύστημα, υπάρχουν δύο καταστάσεις ελάχιστης ενέργειας, μία στην οποία το σωματίο είναι ακίνητο στο $x = \frac{a}{2}$ και μία στην οποία το σωματίο είναι ακίνητο στο $x = -\frac{a}{2}$. Η κβαντική κατάσταση ελάχιστης ενέργειας είναι ουσιαστικά επαλληλία των καταστάσεων που το σωματίο είναι εντοπισμένο σε ένα από τα δύο πηγάδια.

6.6 Ο ρόλος των συνοριακών συνθηκών

Μέχρι στιγμής έχουμε μελετήσει αρκετούς τελεστές που ορίζονται στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$, όπως ο τελεστής της θέσης \hat{x} , ο τελεστής της ορμής \hat{p} και ο τελεστής Σρέντινγκερ \hat{H} . Ο χώρος $L^2(\mathbf{R})$ αντιστοιχεί σε σημειακό σωματίο που κινείται σε μία διάσταση, και που η θέση του μπορεί εν δυνάμει να πάρει οποιαδήποτε τιμή. Ωστόσο υπάρχουν πολλά μονοδιάστατα συστήματα στα οποία υπάρχουν εγγενείς ή εξωτερικοί περιορισμοί στις δυνατές τιμές της θέσης, ή που αντιστοιχούν σε κίνηση σωματιδίου σε διαφορετική γεωμετρία (π.χ. σε έναν κύκλο). Όλες αυτές οι περιπτώσεις μπορούν να μελετηθούν με την επιβολή συνοριακών συνθηκών στις κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$, που πλέον ορίζουν ένα διαφορετικό χώρο Χίλμπερτ.

6.6.1 Σωματίο σε ημιευθεία

Εξετάζουμε πρώτα την περίπτωση κατά την οποία οι δυνατές τιμές της θέσης x περιορίζονται στην ημιευθεία $\mathbf{R}^+ = [0, \infty)$. Αυτό μπορεί να οφείλεται είτε στο ότι υπάρχει ένας εξωτερικό τοίχωμα στο $x = 0$ στο οποίο ένα σωματίο ανακλάται ελαστικά, είτε στο ότι η εξετάζουμε μία θεσεογραφική μεταβλητή που είναι φύσει περιορισμένη στην ημιευθεία, όπως η ακτινική μεταβλητή r στο άτομο του υδρογόνου (κεφ. 3.2.3).

Σε κάθε περίπτωση απαιτούμε ότι η κυματοσυνάρτηση ψ μηδενίζεται στο συνοριακό σημείο $x = 0$: $\psi(0) = 0$. Οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις που ικανοποιούν αυτή τη συνθήκη ορίζουν το χώρο Χίλμπερτ $L_D^2(\mathbf{R}^+)$, όπου το D σημαίνει Ντιρισλέ (Dirichlet), όπως καλείται στη θεωρία διαφορικών εξισώσεων η συνθήκη ότι μία συνάρτηση μηδενίζεται στα σύνορα του χώρου.

Γνωρίζουμε ότι μία συνάρτηση $\psi(x)$ στο \mathbf{R}^+ μπορεί να αναπτυχθεί κατά Φουριέ ως

$$\psi(x) = \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} [a(k) \cos kx + b(k) \sin kx]. \quad (6.99)$$

Η συνοριακή συνθήκη $\psi(0) = 0$ σημαίνει ότι $a(k) = 0$. Οπότε μια συνάρτηση που ανήκει στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$ είναι της μορφής $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk b(k) \sin kx$. Οι συναρτήσεις $f_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kx$ δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, αλλά ορίζουν μία γενικευμένη βάση στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$, την οποία θα συμβολίζουμε με το κετ $|k\rangle$. Για να υπολογίσουμε το εσωτερικό γινόμενο $\langle k|k'\rangle$, ακολουθούμε τη λογική που περιγράψαμε στο Κεφ. 5.6. Δηλαδή εξετάζουμε τις συναρτήσεις $f_{k,\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kx e^{-\frac{1}{2}\epsilon x^2}$, και ορίζουμε

$$\langle k|k'\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dx f_{k,\epsilon}^*(x) f_{k',\epsilon}(x). \quad (6.100)$$

Υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty dx f_{k,\epsilon}^*(x) f_{k',\epsilon}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sin kx \sin k'x e^{-\epsilon x^2} = \delta_\epsilon(k - k') - \delta_\epsilon(k + k')$, όπου η συνάρτηση δ_ϵ δίνεται από την Εξ. (5.42). Στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$, $\delta_\epsilon(k + k') = 0$, αφού $k + k' \neq 0$, οπότε η Εξ. (6.100) δίνει

$$\langle k|k' \rangle = \delta(k - k'). \quad (6.101)$$

Τα κερ $|k\rangle$ δεν είναι ιδιοδιανύσματα του τελεστή της ορμής γιατί ο τελεστής $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ δεν ορίζεται στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$. Η παράγωγος του $\sin kx$ είναι το $k \cos kx$, που δε μηδενίζεται στο $x = 0$. Ωστόσο, η δεύτερη παράγωγος του $\sin kx$ είναι $-k^2 \sin kx$ που μηδενίζεται στο $x = 0$, οπότε ο τελεστής $\hat{p}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ είναι καλώς ορισμένος στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$, και τα κερ k αποτελούν γενικευμένες ιδιοτιμές του

$$\hat{p}^2|k\rangle = k^2|k\rangle. \quad (6.102)$$

Προσοχή, στις παραπάνω εκφράσεις το καπελάκι είναι πάνω στο p^2 , που σημαίνει ότι είναι ο τελεστής που αντιστοιχεί στην κλασική συνάρτηση p^2 . Ο τελεστής $\hat{p}^2 = \hat{p}\hat{p}$ δεν ορίζεται αφού ο \hat{p} δεν ορίζεται.

Εφόσον ο τελεστής \hat{p}^2 ορίζεται και είναι θετικός, θα ορίζεται και ο τελεστής $\sqrt{\hat{p}^2}$, ο οποίος μπορεί να γραφεί συμβατικά ως $|\hat{p}|$. Το γεγονός ότι ορίζεται ως τελεστής το απόλυτο της ορμής, αλλά όχι η ορμή σημαίνει ότι υπάρχει αμφισημία ως προς το πρόσημο της ορμής. Δεν μπορούμε ξεχωρίζουμε θετικές και αρνητικές ορμές, δεδομένου ότι το σωματίο μπορεί να ανακλαστεί στο $x = 0$ και να αλλάξει πρόσημο η ορμή του, χωρίς καμία εξωτερική επέμβαση.

Ο τελεστής της θέσης ορίζεται ως πολλαπλασιαστικός $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ χωρίς κανένα πρόβλημα. Εφόσον ορίζονται οι τελεστές \hat{p}^2 και \hat{x} ορίζεται και ο τελεστής Σρέντινγκερ $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$.

Τα θεωρήματα για το διακριτό φάσμα του τελεστή Σρέντινγκερ του $L^2(\mathbf{R})$ μεταφέρονται ατόφια και στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$. Συγκεκριμένα, οι ιδιοτιμές του τελεστή Σρέντινγκερ στο $L_D^2(\mathbf{R}^+)$ δεν έχουν εκφυλισμό και η n -στη διεγερμένη κατάσταση έχει n κόμβους. (Το σημείο $x = 0$ δεν μετρά ως κόμβος.)

Σε ότι αφορά το συνεχές φάσμα, τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα, η βασική διαφορά είναι ότι δεν υπάρχει εκφυλισμός. Υπάρχει μία ιδιοσυνάρτηση $g_k(x)$ για κάθε τιμή της ενέργειας $E = \frac{k^2}{2m}$, η οποία προσδιορίζεται ως ο μοναδικός γραμμικός συνδυασμός των f_{k+} και f_{k-} της Εξ. (6.65) που ικανοποιεί $g_k(0) = 0$. Στην ημιευθεία υπάρχει μόνο μία κατεύθυνση εισερχόμενων κυμάτων, από το $+\infty$ στο 0, και γι' αυτό δεν υπάρχει εκφυλισμός.

Γράφουμε $g_k(x) = af_{k+}(x) + bf_{k-}(x)$ για κάποιες σταθερές a και b . Η συνθήκη $g_k(0) = 0$ δίνει $a(1 + R_k) + bT_k = 0$, άρα $a = -T_k c$ και $b = (1 + R_k)c$ για κάποια σταθερά c . Έχοντας προσδιορίσει τα a και b , βρίσκουμε ότι

$$g_k(x) = \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} -2i \sin kx, & 0 \leq x < a \\ (1 + R_k) \left[e^{-ikx} - \left(\frac{T_k^2}{1+R_k} - \bar{R}_k \right) e^{ikx} \right], & x > b \end{cases} \quad (6.103)$$

Η σταθερά κανονικοποίησης c βρίσκεται από την απαίτηση να ταυτίζεται η $g_k(x)$ με τα κερ του \hat{p}^2 , όταν $V(x) = 0$ και άρα $T_k = 1$, $R_k = \bar{R}_k = 0$. Αμέσως βρίσκουμε ότι $c = i$.

6.6.2 Σωματίο σε κουτί

Στη συνέχεια εξετάζουμε συστήματα στα οποία οι τιμές της θέσης περιορίζονται σε ένα πεπερασμένο διάστημα $I_L = [0, L]$, όπως για παράδειγμα ένα σωματίο που κινείται εντός κουτιού με πλήρως ανακλαστικά τοιχώματα. Χρησιμοποιούμε κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ για $x \in [0, L]$, οι οποίες ικανοποιούν συνοριακές συνθήκες Ντιρισλέ στα σύνορα του I_L , δηλαδή $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Ο αντίστοιχος χώρος Χίλμπερτ συμβολίζεται ως $L_D^2(I_L)$.

Όπως είδαμε στο Κεφ. 6.6.1, κάθε συνάρτηση που μηδενίζεται στο $x = 0$ γράφεται ως $\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} b(k) \sin kx$. Η απαίτηση μηδενισμού στο $x = L$, σημαίνει ότι $\sin kL = 0$, δηλαδή ότι είναι επιτρεπτές μόνο διακριτές τιμές του k ,

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.104)$$

Ορίζουμε τις συναρτήσεις $f_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$, οι οποίες ικανοποιούν τη σχέση

$$\begin{aligned} \int_0^L dx f_n(x) f_{n'}(x) &= \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{n'\pi x}{L} \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L dx \left[\cos \frac{(n-n')\pi x}{L} - \cos \frac{(n+n')\pi x}{L} \right] = \delta_{nn'} - \delta_{-nn'} = \delta_{nn'}, \end{aligned} \quad (6.105)$$

όπου στο τελευταίο βήμα, $\delta_{-nn'} = 0$ εφόσον $n, n' > 0$. Οπότε οι συναρτήσεις f_n αποτελούν ένα ορθοκανονικό σύνολο στο $L^2_D(I_L)$. Καθώς κάθε συνάρτηση που υπόκειται στις συγκεκριμένες συνοριακές συνθήκες μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των $\sin \frac{n\pi x}{L}$, τα f_n ορίζουν ορθοκανονική βάση. Στο συμβολισμό Ντιράκ, θα αναπαριστούμε τις συναρτήσεις f_n ως $|n\rangle$.

Όπως και για το σωματίο σε ημιευθεία, ο τελεστής \hat{p} δεν ορίζεται, αλλά ορίζεται ο τελεστής $\hat{p}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, ο οποίος ικανοποιεί

$$\hat{p}^2 |n\rangle = k_n^2 |n\rangle = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} |n\rangle. \quad (6.106)$$

Είναι αξιοσημείωτο ότι ο τελεστής \hat{p}^2 έχει διακριτό φάσμα, οπότε και η Χαμιλτονιανή ελεύθερου σωματιδίου μάζας m , $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ έχει διακριτό φάσμα με ιδιοτιμές

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2}{2mL^2}. \quad (6.107)$$

6.6.3 Περιοδικές συνοριακές συνθήκες

Αν στην ευθεία των πραγματικών αριθμών ταυτίσουμε τα σημεία $x = 0$ και $x = L$, σχηματίζεται ένας κύκλος περιμέτρου L , ή ισοδύναμα ακτίνας $R = \frac{L}{2\pi}$. Οπότε κυματοσυναρτήσεις που ικανοποιούν τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες $\psi(0) = \psi(L)$, ουσιαστικά αντιστοιχούν στην κίνηση σωματιδίου σε έναν κύκλο ακτίνας $R = \frac{L}{2\pi}$. Είναι βολικό να χρησιμοποιήσουμε τη μεταβλητή γωνίας $\theta = x/R$, με περίοδο 2π . Το εσωτερικό γινόμενο δύο κυματοσυναρτήσεων ψ και ϕ γράφεται ως

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_0^L \psi^*(x) \phi(x) dx = R \int_0^{2\pi} d\theta \psi^*(\theta) \phi(\theta), \quad (6.108)$$

δηλαδή ως ένα ολοκλήρωμα στο μοναδιαίο κύκλο S^1 . Ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει αυτό το σύστημα αποτελείται από όλες τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις στο S^1 και συμβολίζεται ως $L^2(S^1, R d\theta)$.

Από την ανάλυση Φουριέ, ξέρουμε ότι μπορούμε να γράψουμε οποιαδήποτε συνάρτηση στον κύκλο ως

$$\psi(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\theta}. \quad (6.109)$$

Οι συναρτήσεις $f_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{in\theta}$ ικανοποιούν τη σχέση $R \int_0^{2\pi} d\theta f_n^*(\theta) f_m(\theta) = \delta_{mn}$ και ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στον $L^2(S^1, Rd\theta)$. Θα τις αναπαριστούμε με τα κετ $|n\rangle$.

Ο τελεστής 'στροφορμής' $\hat{\ell} = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$ είναι καλά ορισμένος, και τα κετ $|n\rangle$ αποτελούν ιδιοδιανύσματα του,

$$\hat{\ell}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (6.110)$$

Ο τελεστής της ορμής ορίζεται ως $\hat{p} = -i \frac{\partial}{\partial x} = \frac{2\pi}{L} \hat{\ell}$ και οι ιδιοτιμές του είναι ίσες με $n \frac{2\pi}{L}$.

Τελεστής θέσης x ή γωνίας θ δεν ορίζεται. Ο λόγος είναι ότι δεν μπορεί να οριστεί αυτοσυζυγής τελεστής με περιοδικότητα στο φάσμα, έτσι ώστε οι ιδιοτιμές $\theta = 0$ και $\theta = 2\pi$ να ταυτίζονται. Το φάσμα ενός αυτοσυζυγούς τελεστή είναι υποσύνολο της ευθείας των πραγματικών αριθμών, και δεν είναι δυνατό κανείς να τοποθετήσει έναν κύκλο ως υποσύνολο της ευθείας με συνεχή τρόπο. Ωστόσο δεν υπάρχει πρόβλημα να οριστούν οι αυτοσυζυγείς τελεστές του ημιτόνου \hat{s} και του συνημιτόνου \hat{c}

$$\hat{c}\psi(\theta) = \cos \theta \psi(\theta) \quad \hat{s}\psi(\theta) = \sin \theta \psi(\theta), \quad (6.111)$$

Οποιαδήποτε περιοδική συνάρτηση $f(\theta)$ μπορεί να αναλυθεί σε αθροίσματα δυνάμεων ημιτόνων και συνημιτόνων του θ και άρα να οριστεί αντίστοιχος τελεστής \hat{f} , ως συνάρτηση των \hat{c} και \hat{s} .

Εύκολα βρίσκουμε ότι οι τελεστές ημιτόνου, συνημιτόνου και στροφορμής ικανοποιούν τις ακόλουθες σχέσεις,

$$[\hat{c}, \hat{\ell}] = -i\hat{s}, \quad [\hat{s}, \hat{\ell}] = i\hat{c}, \quad [\hat{c}, \hat{s}] = 0. \quad (6.112)$$

οι οποίες αποτελούν τις θεμελιώδεις σχέσεις μετάθεσης για σωματίο σε κύκλο.

Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες χρησιμοποιούνται και ως μαθηματικό εργαλείο ακόμα και σε συστήματα που δεν εμφανίζουν περιοδικότητα. Ο λόγος είναι ότι με περιοδικές συνοριακές συνθήκες ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει μόνο διακριτό φάσμα, οπότε αρκετοί υπολογισμοί διευκολύνονται. Ειδικά στη στατιστική μηχανική, είθισται να ορίζονται όλες οι Χαμιλτονιανές σωματιδίων σε κύκλο ακτίνας R και στο τέλος να παίρνεται το όριο $R \rightarrow \infty$.

Στα πλαίσια αυτών των υπολογισμών είναι χρήσιμη η έννοια της *συνάρτησης αριθμού καταστάσεων* $\Omega(\epsilon)$. Έστω ένας τελεστής Χαμιλτον \hat{H} με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και ιδιοτιμές E_n , για κάποιο δείκτη $n = 0, 1, 2, \dots$ διακριτό φάσμα ορίζουμε

$$\Omega(\epsilon) = \text{αριθμός ιδιοτιμών του } \hat{H} \text{ μικρότερες του } \epsilon = \sum_{n, E_n < \epsilon} 1. \quad (6.113)$$

Γενικά η συνάρτηση Ω είναι ασυνεχής. Ωστόσο, στο όριο που η περίοδος L τείνει στο άπειρο, οι αποστάσεις μεταξύ ιδιοτιμών τείνουν στο μηδέν, οπότε η Ω προσεγγίζεται από μία συνεχή και παραγωγίσιμη συνάρτηση. Τότε ορίζουμε την *πυκνότητα καταστάσεων*

$$g(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon} \Omega(\epsilon), \quad (6.114)$$

η οποία περιέχει όλη τη σημαντική πληροφορία για τη συμπεριφορά των γενικευμένων ιδιοτιμών του \hat{H} στο όριο του συνεχούς.

Για παράδειγμα, θεωρούμε τη Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ με περιοδικές συνθήκες περιόδου L . Οι ιδιοτιμές της είναι $E_n = \frac{2\pi^2}{mL^2} n^2$, για $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Η συνθήκη $E_n < \epsilon$ γράφεται $|n| < \frac{L}{\pi} \sqrt{m\epsilon/2}$, άρα

$$\Omega(\epsilon) = \text{αριθμός ακεραίων } n \text{ με } |n| < \frac{L}{\pi} \sqrt{m\epsilon/2} = 2 \left[\frac{L}{\pi} \sqrt{m\epsilon/2} \right] + 1, \quad (6.115)$$

όπου $[x]$ συμβολίζει το ακέραιο μέρος ενός πραγματικού αριθμού. Καθώς $\frac{x-[x]}{x} \rightarrow 0$ όταν $x \rightarrow \infty$, στο όριο όπου το L τείνει στο άπειρο αντικαθιστούμε το $[x]$ με το x . Οπότε η συνάρτηση αριθμού καταστάσεων γίνεται συνεχής, $\Omega(\epsilon) = \frac{L}{\pi} \sqrt{2m\epsilon}$ (ο όρος $+1$ είναι αμελητέος συγκριτικά). Τέλος υπολογίζουμε την πυκνότητα καταστάσεων

$$g(\epsilon) = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}. \quad (6.116)$$

6.7 Τελεστής Σρέντινγκερ με περιοδικά δυναμικά

6.7.1 Θεώρημα του Μπλοχ

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχουν οι τελεστές Σρέντινγκερ με περιοδικό δυναμικό $V(x)$, επειδή περιγράφουν την κίνηση ηλεκτρονίων εντός κρυσταλλικού στερεού. Αυτοί οι τελεστές μπορούν να οριστούν είτε πάνω στην ευθεία των πραγματικών είτε με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στη δεύτερη περίπτωση, η περίοδος L των συνοριακών συνθηκών πρέπει να είναι πολύ μεγαλύτερη από την περίοδο a του δυναμικού. Για να είναι συμβατές οι δύο περιοδικότητες, πρέπει ο λόγος L/a να είναι κάποιος θετικός ακέραιος.

Σε ότι ακολουθεί θα θεωρήσουμε τελεστές Σρέντινγκερ ορισμένους πάνω στην ευθεία, δηλαδή θα δουλεύουμε με το χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$. Ορίζουμε τον μοναδιαίο τελεστή $\hat{T}_a = e^{ia\hat{p}}$, που δρα σε κυματοσυναρτήσεις ως $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$ —βλ. Εξ. (5.24). Βρίσκουμε ότι $\hat{T}_a[V(x)\psi(x)] = V(x+a)\psi(x+a) = V(x)\psi(x+a) = V(x)\hat{T}_a\psi(x)$, και άρα $[\hat{T}_a, \hat{V}] = 0$. Οπότε για τον τελεστή Σρέντινγκερ $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}$ ισχύει ότι

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0. \quad (6.117)$$

Αυτό σημαίνει ότι κάθε ιδιοσυνάρτηση $\psi(x)$ του \hat{H} είναι και ιδιοσυνάρτηση του \hat{T}_a ,

$$\hat{T}_a\psi(x) = C(a)\psi(x), \quad (6.118)$$

όπου $|C(a)| = 1$, αφού ο τελεστής \hat{T}_a είναι μοναδιαίος. Καθώς $\hat{T}_a^n = \hat{T}_{na}$ για κάθε ακέραιο n , θα ισχύει ότι $C(a)^n = C(na)$. Γράφοντας $C(a) = e^{i\theta(a)}$ παίρνουμε $n\theta(a) = \theta(na)$. Αυτό σημαίνει ότι $\theta(a) = ka$ για κάποια σταθερά k . Οπότε, η Εξ. (6.118) γίνεται

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x). \quad (6.119)$$

Παρατηρούμε ότι αν γράψουμε

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad (6.120)$$

η Εξ. (6.119) σημαίνει ότι $u(x+a) = u(x)$. Η Εξ. (6.119) είναι γνωστή ως *θεώρημα του Μπλοχ* (F. Bloch).

Οι σταθερές k δεν είναι μοναδικές, δεδομένου ότι αν αντικαταστήσουμε την k με την $k' = k + \frac{2\pi}{a}r$ για οποιοδήποτε ακέραιο r , η Εξ. (6.119) εξακολουθεί να ισχύει. Μπορούμε πάντα να επιλέξουμε $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$, έτσι ώστε η k να προσδιορίζεται μοναδικά.

Αντικαθιστούμε την Εξ. (6.120) στην εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\psi = E\psi$ και παίρνουμε

$$-\frac{1}{2m}u'' - i\frac{k}{m}u' + V(x)u = \left(E - \frac{k^2}{2m}\right)u. \quad (6.121)$$

Το θεώρημα του Μπλοχ σημαίνει ότι μπορούμε να βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις του \hat{H} , λύνοντας την Εξ. (6.121) για μία περίοδο του δυναμικού, και χρησιμοποιώντας τις Εξ. (6.120) για να επεκτείνουμε τη λύση για όλες τις τιμές του x .

6.7.2 Δυναμικό Κρόνιγκ-Πέννυ

Θα εξετάσουμε ως παράδειγμα το δυναμικό Κρόνιγκ-Πέννυ (Kronig-Penney)

$$V(x) = \eta \sum_{n=0}^{\infty} \delta(x - na). \quad (6.122)$$

Από το θεώρημα του Μπλοχ, αρκεί να λύσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών για μία περίοδο του δυναμικού. Εστιάζουμε σε ένα διάστημα που περιέχει τη συνάρτηση δέλτα που είναι επικεντρωμένη στο $x = 0$, $V(x) = \eta\delta(x)$.

Η γενική λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ $\psi'' + 2m[E - \eta\delta(x)]\psi = 0$ είναι

$$\psi_q(x) = \begin{cases} Ae^{-iqx} + Be^{iqx} & 0 < x < a \\ Ce^{-iqx} + De^{iqx} & -a < x < 0 \end{cases} \quad (6.123)$$

όπου $q = \sqrt{2mE}$. Η Εξ. (6.119) σημαίνει ότι η παραπάνω λύση επεκτείνεται σε όλο το \mathcal{R} εφόσον $C = e^{-i(k+q)a}A$ και $D = e^{-i(k-q)a}B$.

Η απαίτηση συνέχειας στο $x = 0$ δίνει $A + B = C + D$ και άρα

$$(1 - e^{-i(k+q)a})A = -(1 - e^{-i(k-q)a})B \quad (6.124)$$

Η Εξ. (6.87) δίνει $q(A - B - C + D) = 2m\eta i(A + B)$, δηλαδή

$$(1 - e^{-i(k+q)a} - i\frac{2m\eta}{q})A = B(1 - e^{-i(k-q)a} + i\frac{2m\eta}{q}) \quad (6.125)$$

Διαιρούμε κατά μέλη τις Εξ. (6.125) και (6.124) και παίρνουμε

$$1 - i\frac{2m\eta}{q(1 - e^{-i(k+q)a})} = -1 - i\frac{2m\eta}{q(1 - e^{-i(k-q)a})}, \quad (6.126)$$

η οποία δίνει ότι

$$\cos ka = \cos qa - \frac{m\eta}{q} \sin qa. \quad (6.127)$$

Ο αριστερός όρος της Εξ. (6.127) εξαρτάται μόνο από το k και παίρνει τιμές από -1 ως 1 . Ο δεξιός όρος εξαρτάται μόνο από το q και μπορεί να πάρει τιμές και εκτός του διαστήματος $[-1, 1]$. Για όσες τιμές του q η συνάρτηση $f(q) = |\cos qa - \frac{m\eta}{q} \sin qa|$ είναι μεγαλύτερη του 1 , η Εξ. (6.127) δεν έχει λύση και άρα δεν υπάρχουν αντίστοιχες ιδιοτιμές της ενέργειας $E = \frac{q^2}{2m}$. Το φάσμα $\sigma(\hat{H})$ του τελεστή Σρέντινγκερ \hat{H} χαρακτηρίζεται από ζώνες, δηλαδή μη επικαλυπτόμενα διαστήματα που πριέχουν ιδιοτιμές του \hat{H} και κενά ανάμεσά τους.

Για να μελετήσουμε τις ζώνες και τα κενά του φάσματος γράφουμε τη συνάρτηση f ως συνάρτηση του $x = qa$,

$$f(x) = |\cos x - \frac{b}{x} \sin x|, \quad (6.128)$$

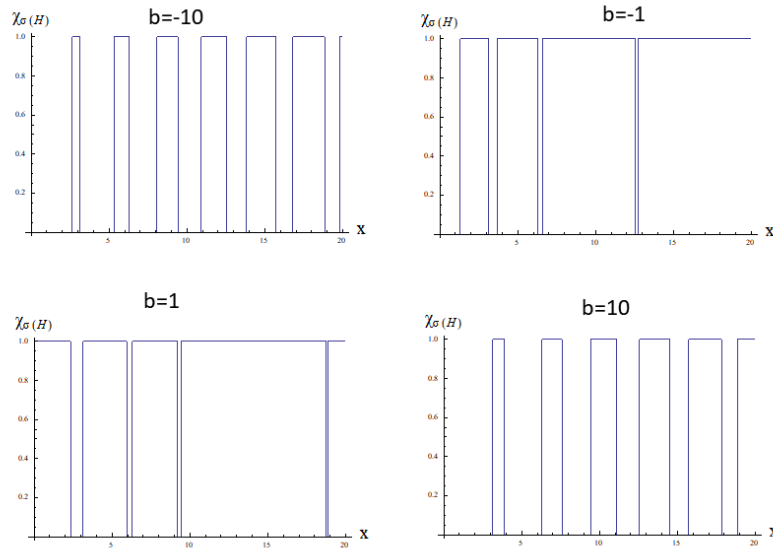
όπου $b = m\eta a$.

Παρατηρούμε ότι όσο μεγαλύτερη η τιμή του $|b|$, τόσο μεγαλύτερες τιμές μπορεί να πάρει η f και άρα τόσο συχνότερη θα είναι η εναλλαγή ζωνών και κενών. Στο σχήμα 6.6. δίνεται το γράφημα της χαρακτηριστικής συνάρτησης $\chi_{\sigma(\hat{H})}(x)$ του φάσματος. Αυτή η συνάρτηση παίρνει τιμή 1 σε μια ζώνη και 0 σε ένα κενό.

Για τις τιμές του q που αντιστοιχούν σε ζώνες, η Εξ. (6.127) λύνεται ως προς το k ,

$$k = \pm \frac{1}{a} \cos^{-1} \left[\cos qa - \frac{m\eta}{q} \sin qa \right]. \quad (6.129)$$

Παρατηρούμε ότι υπάρχουν δύο τιμές του k για κάθε τιμή του q , και άρα οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας χαρακτηρίζονται από διπλό εκφυλισμό.



Σχήμα 6.6: Η χαρακτηριστική συνάρτηση $\chi_{\sigma(\hat{H})}(E)$ του τελεστή Σρέντινγκερ ως συνάρτηση του $x = qa$, για διάφορες τιμές του $b = m\eta a$.

6.8 Θεωρία διαταραχών

Οι αποκλίνουσες σειρές είναι εφεύρεση του διαβόλου. Είναι ντροπή να βασίζεται κανείς σ' αυτές για οποιοδήποτε συμπέρασμα.

N. X. Άμπελ

Σε πολλά προβλήματα συναντούμε τελεστές \hat{H} της μορφής $\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$, όπου \hat{H}_0 ένα τελεστής του οποίου ξέρουμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα,

$$\hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_0, \tag{6.130}$$

και $\lambda\hat{V}$ ένας τελεστής που είναι συγκριτικά 'μικρός'. Συνήθως αυτό σημαίνει ότι είναι ανάλογος κάποιας αδιάστατης σταθεράς λ που θεωρούμε ότι είναι πολύ μικρότερη της μονάδας. Σ' αυτήν την περίπτωση, μπορούμε να υπολογίσουμε προσεγγιστικά τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του \hat{H} , θεωρώντας ότι απέχουν λίγο από τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του \hat{H}_0 . Η προσεγγιστική αυτή μέθοδος καλείται *θεωρία διαταραχών*.

Χρησιμοποιούμε το σύμβολο \hat{H} για τους τελεστές και E για τις ιδιοτιμές, δεδομένου ότι συχνά η διαταρακτική μέθοδος χρησιμοποιείται για να βρεθούν οι ιδιοτιμές του τελεστή Χάμιλτον \hat{H} που περιγράφει την ενέργεια του συστήματος. Ωστόσο, οι ίδιες εκφράσεις ισχύουν για τις διαταραχές οποιουδήποτε αυτοσυζυγούς τελεστή.

Γράφουμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του \hat{H} ως σειρά ως προς την παράμετρο λ ,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \tag{6.131}$$

$$|n\rangle = |n\rangle_0 + \lambda|n\rangle_1 + \lambda^2|n\rangle_2 + \dots \tag{6.132}$$

Οι όροι $|n\rangle_i$ και $E_n^{(i)}$, για $i > 0$ καλούνται *διορθώσεις* i τάξης λόγω της διαταραχής στις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές της ενέργειας, αντίστοιχα.

Αντικαθιστούμε τις Εξ. (6.131) και (6.132) στην Εξ. (16.1),

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})(|n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \dots) \end{aligned} \quad (6.133)$$

Η συνθήκη κανονικοποίησης $\langle n|n\rangle = 1$ δίνει

$$\lambda ({}_0\langle n|{}_1\rangle + {}_1\langle n|{}_0\rangle) + \lambda^2 ({}_1\langle n|{}_2\rangle + {}_2\langle n|{}_0\rangle + {}_0\langle n|{}_2\rangle) + \dots = 0 \quad (6.134)$$

Κάθε δύναμη του λ στην Εξ. (6.134) πρέπει να μηδενίζεται χωριστά. Αυτό σημαίνει ότι

$$\text{Re}_0\langle n|n\rangle_1 = 0 \quad (6.135)$$

$$\text{Re}_0\langle n|n\rangle_2 + {}_1\langle n|{}_1\rangle = 0. \quad (6.136)$$

Μπορούμε πάντα να επιλέξουμε τη φάση των διανυσμάτων $|n\rangle_0$ έτσι ώστε το γινόμενο ${}_1\langle n|{}_0\rangle$ να είναι πραγματικός. Οπότε η Εξ. (6.135) δίνει

$${}_0\langle n|{}_1\rangle = 0. \quad (6.137)$$

Διορθώσεις πρώτης τάξης. Στη συνέχεια εξισώνουμε τις ίδιες δυνάμεις του λ στην Εξ. (6.133). Σε τάξη λ^0 παίρνουμε την Εξ. (6.130). Σε τάξη λ^1 παίρνουμε

$$\hat{H}_0|n\rangle_1 + \hat{V}|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_1 + E_n^{(1)}|n\rangle_0. \quad (6.138)$$

Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (6.138) από αριστερά με ${}_0\langle n|$ βρίσκουμε

$$E_n^{(1)} = {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_0. \quad (6.139)$$

Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (6.138) από αριστερά με ${}_0\langle k|$ για $k \neq n$, παίρνουμε

$${}_0\langle k|n\rangle_1 = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (6.140)$$

όπου $V_{kn} = {}_0\langle k|\hat{V}|n\rangle_0$ και θεωρήσαμε ότι η $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$.

Από την Εξ. (6.140) σε συνδυασμό με την Εξ. (6.137) παίρνουμε εκπεφρασμένη σχέση για τη διόρθωση πρώτης τάξης στο ιδιοδιάνυσμα

$$|n\rangle_1 = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k\rangle_0. \quad (6.141)$$

Εκφυλισμός. Οι παραπάνω εκφράσεις είναι προβληματικές για εκφυλισμένες ιδιοτιμές του \hat{H}_0 . Έστω S_E ο N -διάστατος ιδιόχωρος μιας ιδιοτιμής E της \hat{H}_0 . Τότε οποιοδήποτε κανονικοποιημένο διάνυσμα $|n\rangle_0 \in S_E$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην Εξ. (6.139), με αποτέλεσμα, η διόρθωση πρώτης τάξης $E^{(1)}$ να μην ορίζεται μονοσήμαντα. Επίσης ο παρονομαστής της Εξ. (6.141) μηδενίζεται αν τα $|n\rangle$ και $|k\rangle$ ανήκουν στο S_E .

Η ίδια η διατύπωση του προβλήματος εμπεριέχει τη λύση του: απλά επιλέγουμε μία βάση στο S_E για την οποία το $|n\rangle_1$ δεν απειρίζεται. Συγκεκριμένα, έστω N διανύσματα $|k\rangle_0$ που ορίζουν ορθοκανονική βάση στο S_E . Πολλαπλασιάζοντας από αριστερά την Εξ. (6.138) με ${}_0\langle k|$, παίρνουμε

$$V_{kn} = E_n^{(1)} \delta_{kn}. \quad (6.142)$$

Αυτό σημαίνει ότι τα διανύσματα $|k\rangle_0$ πρέπει να επιλεχθούν ως ιδιοδιανύσματα του πίνακα $N \times N$ V_{kn} , που αντιστοιχεί στην προβολή του \hat{V} στον ιδιόχωρο S_E . Οι ιδιοτιμές του V_{kn} είναι οι ζητούμενες διορθώσεις πρώτης τάξης.

Το ίδιο πρόβλημα υπάρχει όταν έχουμε προσεγγιστικό εκφυλισμό στην \hat{H}_0 αντί για ακριβή, δηλαδή αν υπάρχουν ιδιοδιανύσματα $|r\rangle$ της \hat{H}_0 , με ιδιοτιμές που να ικανοποιούν $|E_r - E_{r'}| \sim \lambda$ για όλα τα $r, r' = 1, \dots, N$. Σ' αυτήν την περίπτωση, επιλέγουμε μία τιμή της ενέργειας \bar{E} που να ικανοποιεί $|\bar{E} - E_r| \sim \lambda$, και ορίζουμε $\Delta E_r = E_r - \bar{E}$. Για παράδειγμα, θα μπορούσαμε να διαλέξουμε το \bar{E} να είναι η μέση τιμή των E_r .

Στη συνέχεια επανορίζουμε τη Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 ως

$$\hat{H}'_0 := \hat{H}_0 - \sum_r \Delta E_r |r\rangle\langle r| \quad (6.143)$$

και τη διαταραχή

$$\hat{V}' := \hat{V} + \sum_r \Delta E_r |r\rangle\langle r|. \quad (6.144)$$

Εξακολουθεί να ισχύει ότι $\hat{H} = \hat{H}'_0 + \hat{V}'$ και ότι ο όρος \hat{V}' είναι τη τάξης του λ , ώστε να ισχύει η θεωρία διαταραχών. Αλλά πλέον ο \hat{H}'_0 είναι ακριβώς εκφυλισμένος, οπότε επιστρέφουμε στην προηγούμενη περίπτωση.

Διορθώσεις δεύτερης τάξης. Οι όροι τάξης λ^2 στην Εξ. (6.133) δίνουν

$$\hat{V}|n\rangle_1 + \hat{H}_0|n\rangle_2 = E_n^{(2)}|n\rangle_0 + E_n^{(1)}|n\rangle_1 + E_n^{(0)}|n\rangle_2. \quad (6.145)$$

Πολλαπλασιάζοντας με το ${}_0\langle n|$ από αριστερά και χρησιμοποιώντας την Εξ. (6.137) παίρνουμε τη διόρθωση δεύτερης τάξης για μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές

$$E_n^{(2)} = {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_1 = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (6.146)$$

Οι διορθώσεις δεύτερης τάξης στις ιδιοσυναρτήσεις καθώς και οι υψηλότερης τάξης διορθώσεις στη θεωρία διαταραχών μπορούν να υπολογιστούν αλγοριθμικά με αντίστοιχο τρόπο. Οι εκφράσεις γίνονται ολοένα και πιο πολύπλοκες. Δε θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια, οπότε δε δίνονται. Για τις εκφράσεις μέχρι την 5η τάξη μπορεί κανείς να ανατρέξει στο άρθρο της wikipedia [256].

Παράδειγμα 6.3. Θεωρούμε τον τελεστή Σρέντινγκερ δυναμικό αναρμονικού ταλαντωτή $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\hat{x}^4$. Εδώ \hat{H}_0 είναι ο τελεστής Σρέντινγκερ του αρμονικού ταλαντωτή.

Η σταθερά g έχει διάσταση [ενέργεια]/[μήκος]⁴, οπότε αν την πολλαπλασιάσουμε με την κλίμακα μήκους $1/\sqrt{m\omega}$ για τον αρμονικό ταλαντωτή εις την τετάρτη και τη διαιρέσουμε με την κλίμακα ενέργειας ω , παίρνουμε μια αδιάστατη ποσότητα

$$\lambda = \frac{g}{m^2\omega^3}. \quad (6.147)$$

Η θεωρία διαταραχών ισχύει όταν $\lambda \ll 1$. Η διόρθωση πρώτης τάξης στην ενέργεια είναι $E_n^{(1)} = g\langle n|\hat{x}^4|n\rangle$, οπότε από την Εξ. (6.36) παίρνουμε

$$E_n^{(1)} = \frac{3g}{2m^2\omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) = \lambda \frac{3\omega}{2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.148)$$

Για μεγάλες τιμές του n , η διόρθωση αυξάνει ανάλογα του n^2 και υπερβαίνει την $E_n^{(0)}$ που είναι ανάλογη του n . Αυτό σημαίνει ότι δεν έχει νόημα η θεωρία διαταραχών για υψηλά διεγερμένες στάθμες.

Παράδειγμα 6.4. Εξετάζουμε τον τελεστή $\hat{H} = \hat{\sigma}_3 + \lambda \hat{\sigma}_1$ σε κιούμπιτ. Όπως είδαμε στο κεφάλαιο 6.1.3, οι ιδιοτιμές αυτού του τελεστή είναι $E_{\pm} = \pm \sqrt{1 + \lambda^2}$. Θα υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές ως διαταραχές των ιδιοτιμών $E_{\pm}^{(0)} = \pm 1$ του τελεστή $\hat{H} = \hat{\sigma}_3$.

Η διόρθωση πρώτης τάξης είναι

$$E_{\pm}^{(1)} = \lambda \langle \pm | \hat{\sigma}_1 | \pm \rangle = 0. \quad (6.149)$$

Για τη διόρθωση δεύτερης τάξης, χρησιμοποιούμε το γεγονός ότι $\langle + | \hat{V} | - \rangle = \langle - | \hat{V} | + \rangle = \lambda$, οπότε η Εξ. (6.146) δίνει

$$E_{+}^{(2)} = \lambda^2 \frac{|\langle + | \hat{V} | - \rangle|^2}{E_{+}^{(0)} - E_{-}^{(0)}} = \frac{1}{2} \lambda^2, \quad E_{-}^{(2)} = \lambda^2 \frac{|\langle - | \hat{V} | + \rangle|^2}{E_{-}^{(0)} - E_{+}^{(0)}} = -\frac{1}{2} \lambda^2. \quad (6.150)$$

Βλέπουμε ότι μέχρι δεύτερη τάξη, $E_{\pm} = \pm (1 + \frac{1}{2} \lambda^2)$, δηλαδή δίνει τους δύο πρώτους όρους του αναπτύγματος Τέιλор της ακριβούς λύσης ως προς λ^2 . Αυτό ισχύει και σε υψηλότερες τάξης της θεωρίας διαταραχών, οπότε η σειρά που προκύπτει από τις διαταραχές ταυτίζεται με το ανάπτυγμα Τέιλор της ακριβούς λύσης.

Γενικά όμως η διαταρακτική σειρά δεν είναι κάποια σειρά Τέιλор, δεν είναι συγκλίνουσα σειρά για οσοδήποτε μικρό λ . Αυτό μπορούμε να το δούμε στην περίπτωση του αναρμονικού ταλαντωτή στο παράδειγμα 6.3. Έστω η ενέργεια της θεμελιώδους κατάσταση είναι μία συνάρτηση του λ , $E_0(\lambda)$. Αν υπήρχε μία σειρά $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n$ που να συγκλίνει στο $E_0(\lambda)$, η σύγκλιση θα ίσχυε για τιμές του λ σε κάποιο ανοικτό σύνολο $(-\epsilon, \epsilon)$ γύρω από το $\lambda = 0$, όπου $\epsilon > 0$. Οπότε η σειρά θα έπρεπε να συγκλίνει και για αρνητικό λ , έστω πολύ μικρό κατ' απόλυτο τιμή. Αλλά αυτό είναι αδύνατο: οποιαδήποτε αρνητική τιμή του λ κάνει τον τελεστή \hat{H} μη φραγμένο από κάτω, οπότε δεν υπάρχει θεμελιώδης κατάσταση.

Η σειρά για τον αναρμονικό ταλαντωτή δεν είναι μία συγκλίνουσα σειρά, είναι μία *ασυμπτωτική σειρά*. Για διευκρίνιση δίνουμε τους ορισμούς.

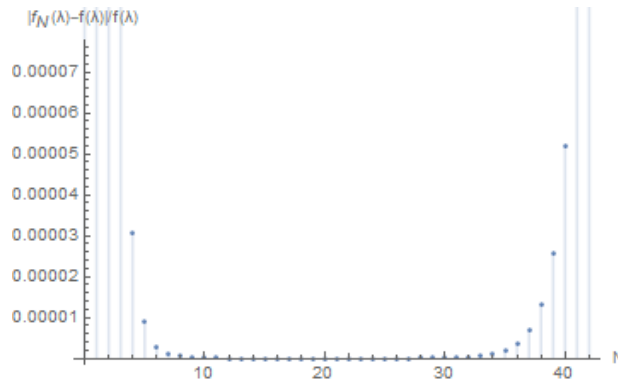
- Μία σειρά $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n$ συγκλίνει σε μία συνάρτηση $f(\lambda)$ αν, για κάθε λ οι πρώτοι N όροι $f_N(\lambda) := \sum_{n=0}^N a_n \lambda^n$ προσεγγίζουν με οσοδήποτε μεγάλη ακρίβεια το $f(\lambda)$, αρκεί να διαλέξουμε επαρκώς μεγάλο N .
- Μία σειρά $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n$ είναι ασυμπτωτική στη συνάρτηση $f(\lambda)$, αν για κάθε N , το σχετικό σφάλμα της προσέγγισης του $f(\lambda)$ από το $f_N(\lambda)$ μπορεί να γίνει οσοδήποτε μικρό, αρκεί να διαλέξουμε επαρκώς μικρό λ , δηλαδή

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-N} [f_N(\lambda) - f(\lambda)] = 0. \quad (6.151)$$

Μία ασυμπτωτική σειρά δεν είναι συγκλίνουσα. Για παράδειγμα, η σειρά $\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n! \lambda^n$ δεν είναι συγκλίνουσα για $\lambda \neq 0$, γιατί οσοδήποτε μικρό και να είναι το λ , από μια τιμή του n και πάνω, οι όροι της γίνονται οσοδήποτε μεγάλοι σε απόλυτη τιμή—αυτό διαπιστώνεται εύκολα αν λάβει κανείς την προσέγγιση του Στίρλινγκ $\log n! \simeq n \log n - n$ που ισχύει για μεγάλα n . Αποδεικνύεται όμως ότι η σειρά είναι ασυμπτωτική στη συνάρτηση $f(\lambda) = E_1(\lambda^{-1}) e^{\lambda^{-1}} / \lambda$, όπου $E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$.

Έστω ότι προσεγγίζουμε μία συνάρτηση f με τους πρώτους N όρους σε μια ασυμπτωτική σειρά. Αν θέλουμε σχετική ακρίβεια $\epsilon \ll 1$, ο $(N + 1)$ -στος όρος στη σειρά πρέπει να είναι μικρότερος κατά ένα κλάσμα ϵ από το N -στο: $|a_{N+1}| \lambda^{N+1} < \epsilon |a_N| \lambda^N$. Άρα,

$$\lambda < \epsilon \left| \frac{a_N}{a_{N+1}} \right|. \quad (6.152)$$



Σχήμα 6.7: Η σχετική ακρίβεια με την οποία η ασυμπτωτική σειρά $f_N(\lambda) = \sum_{n=1}^N (-1)^n n! \lambda^n$ προσεγγίζει τη συνάρτηση $f(\lambda) = E_1(\lambda^{-1})e^{\lambda^{-1}}/\lambda$, ως συνάρτηση του N , για $\lambda = 0.05$. Η σειρά δίνει καλή ακρίβεια για μια περιοχή τιμών του N , αλλά από μια τιμή του N και μετά η προσέγγιση γίνεται ολοένα και πιο άστοχη.

Η επιθυμητή ακρίβεια επιτυγχάνεται μόνο αν το λ είναι μικρότερο από την κρίσιμη τιμή $\lambda_c(N, \epsilon) = \epsilon^{-1} \left| \frac{a_N}{a_{N+1}} \right|$.

Βεβαίως στη θεωρία διαταραχών, το λ είναι μία σταθερά που χαρακτηρίζει ένα φυσικό σύστημα, δεν μπορεί να γίνει οσοδήποτε μικρό. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία μέγιστη τιμή του N μέχρι την οποία επιτυγχάνεται καλή προσέγγιση στη συνάρτηση f , αλλά για μεγαλύτερο N η προσέγγιση αποτυγχάνει—βλ. Σχ. 6.7. Δηλαδή κρατώντας περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα διαταραχών δεν παίρνουμε απαραίτητα καλύτερο αποτέλεσμα. Παραδείγματα για τον αναρμονικό ταλαντωτή δίνονται στο Ένθετο 6.2.

Θα επανέλθουμε στη διαταρακτική προσέγγιση με περισσότερες λεπτομέρειες και εφαρμογές στο Κεφ. 16.

Ένθετο 6.2. Διαταρακτική σειρά για τον αναρμονικό ταλαντωτή

Το 1971, οι Μπέντερ (C. Bender) και Βου (T. Wu) ανέλυσαν τη συμπεριφορά των διαταρακτικών όρων υψηλών τάξης για τον αναρμονικό ταλαντωτή, δηλαδή για τη Χαμιλτονιανή του παραδείγματος 6.3. Υπολόγισαν τους συντελεστές a_n στη διαταρακτική σειρά $E_0(\lambda) = \frac{1}{2}\omega (1 + \sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n)$ για την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης.

Οι πρώτοι δώδεκα όροι της σειράς δίνονται στον ακόλουθο πίνακα.

n	1	2	3	4	5	6
a_n	0.75	-2.6	10.8	-241.3	$3.58 \cdot 10^3$	$-6.40 \cdot 10^4$
n	7	8	9	10	11	12
a_n	$1.33 \cdot 10^6$	$-3.14 \cdot 10^7$	$8.34 \cdot 10^8$	$-2.45 \cdot 10^{10}$	$7.89 \cdot 10^{11}$	$-2.77 \cdot 10^{13}$

Έστω ότι θέλουμε να προσεγγίσουμε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του αναρμονικού ταλαντωτή με σχετική ακρίβεια $\epsilon = 10^{-3}$, στην 6η τάξη της θεωρίας διαταραχών. Από την Εξ. (6.152), αυτό είναι εφικτό μόνο αν $\lambda < 10^{-3} |a_6/a_7| = 0.00005$.

Έστω ότι το λ είναι καθορισμένο σε ένα φυσικό σύστημα και παίρνει την τιμή 0.05, που είναι σημαντικά μικρότερη από τη μονάδα. Στην 6η τάξη της θεωρίας διαταραχών, η Εξ. Eq. (6.152) ικανοποιείται μόνο αν $\epsilon > 2.5$. Αυτό σημαίνει ότι για αυτή τη τιμή του λ , η θεωρία διαταραχών στην 6η τάξη δεν έχει νόημα. Με τον ίδιο τρόπο, δείχνουμε ότι η πρώτη τάξης θεωρία διαταραχών έχει σχετική ακρίβεια 17%, η δεύτερης τάξης 21%, και η τρίτης τάξης έχει λάθος χειρότερο από 100%.

Παρότι λοιπόν η τιμή $\lambda = 0.05$ φαντάζει μικρή, δεν είναι αρκετά μικρή ώστε να δίνει αξιόπιστες διαταρακτικές εκτιμήσεις. Αν την ελαττώσουμε κατά έναν παράγοντα 10, αυξανουμε την ακρίβεια κατά 10, άρα η τιμή $\lambda = 0.005$ είναι καλή για μια προσέγγιση με ακρίβεια της τάξης του ένα τοις εκατό.

Οι Μπέντερ και Βου υπολόγισαν επίσης την ασυμπτωτική συμπεριφορά a_n ,

$$a_n \simeq \frac{(-1)^{n+1} \sqrt{6}}{\pi^{3/2}} 3^n \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \frac{95}{72n} + O(n^{-2})\right]. \quad (6.153)$$

Αυτό σημαίνει ότι $a_n \lambda^n \sim n!(3\lambda)^n$ για μεγάλα n , δηλαδή η διαταρακτική σειρά συμπεριφέρεται ασυμπτωτικά όπως η σειρά $f(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} n! \lambda^n$, που δίνεται στο Σχ. 6.7.

Ερωτήσεις

1. Με τί ισούνται παρακάτω τελεστές; (i) $(\hat{\sigma}_2)^{1927}$, (ii) $(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)^{2004}$, (iii) $\hat{\sigma}_-^{33}$;
2. Μία ιδιοσυνάρτηση του τελεστή Σρέντινγκερ στην ευθεία έχει δύο τοπικά μέγιστα και ένα τοπικό ελάχιστο. Σε ποια ιδιοτιμή αντιστοιχεί;
3. Τι εννοούμε όταν λέμε ότι το φαινόμενο της σήραγγας δεν έχει ανάλογο στην κλασική φυσική;
4. Εξηγήστε υπό ποια έννοια δεν ορίζεται ο τελεστής της ορμής για σωματίο σε κουτί και τι σημαίνει αυτό φυσικά.
5. Συναντάτε την ακόλουθη πρόταση. "Αφού όλες οι μετρήσεις έχουν πεπερασμένη ακρίβεια, γιατί να χρησιμοποιούμε τελεστές με συνεχές φάσμα και να μην αρκεστούμε σ' αυτούς με διακριτό φάσμα. Στην τελική, μπορούμε να θεωρήσουμε κάθε σύστημα εντός ενός επαρκώς μεγάλου κουτιού με περιοδικές συνοριακές συνθήκες." Σχολιάστε.
6. Σχεδιάστε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης αριθμού καταστάσεων $\Omega(\epsilon)$ για το δυναμικό Κρόνιγκ-Πέννυ.
7. Εξηγήστε με αναλογίες από την κλασική φυσική γιατί δεν μπορούμε να περιμένουμε τη θεωρία διαταραχών να δουλεύει για υψηλά διεγερμένες ιδιοτιμές της ενέργειας.
8. Σε σχέση με την αξιοπιστία της θεωρίας διαταραχών στην κλασική μηχανική, όπου επίσης οδηγεί σε μη συγκλίνουσες σειρές, ο Πουανκαρέ έγραφε [91].

Έστω δύο σειρές με όρους $\frac{1000^n}{n!}$ και $\frac{n!}{1000^n}$. Ένας γεωμέτρης θα πει ότι η πρώτη σειρά συγκλίνει και μάλιστα γρήγορα, γιατί ο 1000000στος όρος είναι πολύ μικρότερος από τον 999999στο. Αλλά θα θεωρήσει τη δεύτερη σειρά ως αποκλίνουσα, γιατί οι όροι αυξάνουν ασυμπτωτικά πέρα από κάθε όριο. Ένας φυσικός θα θεωρήσει την πρώτη σειρά ως αποκλίνουσα, γιατί οι πρώτοι 1000 όροι αυξάνουν και τη δεύτερη ως συγκλίνουσα γιατί οι πρώτοι 1000 όροι ελαττώνονται, και μάλιστα πολύ γρήγορα.

Σχολιάστε.

Ασκήσεις

1. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές των τελεστών $\hat{\sigma}_+$ και $\hat{\sigma}_-$ στο \mathcal{C}^2 .
2. Βρείτε το γενικότερο τελεστή στο \mathcal{C}^2 που είναι και αυτοσυζυγής και μοναδιαίος.
3. Δείξτε ότι για οποιονδήποτε τελεστή \hat{A} στο \mathcal{C}^2 ,

$$\sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i \hat{A} \hat{\sigma}_i = -\hat{A} + (\text{Tr} \hat{A}) \hat{I}. \quad (6.154)$$

4. Χρησιμοποιήστε την ταυτότητα του Χάνταμαρ για να υπολογίσετε την ποσότητα $e^{i\hat{A}s} \hat{a} e^{-i\hat{A}s}$, όπου $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2})$.
5. Υπολογίστε τις ποσότητες $\langle n | \hat{p}^4 | n \rangle$ και $\langle n | \hat{x}^2 \hat{p}^2 | n \rangle$ για έναν αρμονικό ταλαντωτή.

6. Δείξτε ότι $\langle n, j | n', j' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{jj'}$ για τα διανύσματα $|n, j\rangle$ της Εξ. (6.34).
7. Υπολογίστε τις εκφράσεις $\langle z | \hat{x}^4 | z \rangle$ και $\langle z | \hat{p}^4 | z \rangle$ για μια σύμφωνη κατάσταση $|z\rangle$.
8. Για έναν αρμονικό ταλαντωτή ορίζουμε τον τελεστή $\hat{b} = \lambda \hat{a} + \mu \hat{a}^\dagger$. (α) Δείξτε ότι $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \hat{I}$ αν $\lambda^2 - \mu^2 = 1$. (β) Προσδιορίστε τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές του \hat{b} .
9. Υπολογίστε τα w_1, w_2, w_3 της Εξ. (6.72). Ο γρηγορότερος τρόπος είναι να θέσετε εξαρχής $k = k'$ και να υπολογίσετε τα ολοκληρώματα ως προς x των εσωτερικών γινομένων εισάγοντας μία συνάρτηση αποκοπής $e^{-\epsilon|x|}$ και παίρνοντας το όριο $\epsilon \rightarrow 0$ στο τέλος. Θα αναγνωρίσετε τη συνάρτηση δέλτα από την έκφρασή της ως όριο Λορεντσιανών συναρτήσεων, Εξ. (5.44).
10. Δείξτε ότι η φάση $\phi_k = \arg T_k$ του πλάτους μετάδοσης T_k ικανοποιεί $\frac{d}{dk} \phi_k < 0$.
11. Υπολογίστε το πλάτος μετάδοσης T_k για το τετραγωνικό φράγμα δυναμικού όταν $E > V_0$. Δείξτε ότι η πιθανότητα μετάδοσης γίνεται ίση με τη μονάδα, όταν ισχύει η συνθήκη συντονισμού

$$\sqrt{2m(E - V_0)} = \frac{n\pi}{a},$$

όπου $n = 1, 2, 3, \dots$

12. Θεωρείστε το συμμετρικό διπλό φράγμα δυναμικού,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in (-\infty, -a - \frac{r}{2}) \cup (-\frac{r}{2}, \frac{r}{2}) \cup (a + \frac{r}{2}, \infty) \\ V_0 & x \in [-a - \frac{r}{2}, -\frac{r}{2}] \cup [\frac{r}{2}, a + \frac{r}{2}] \end{cases}$$

που αποτελείται από δύο πανομοιότυπα τετραγωνικά φράγματα δυναμικού ύψους V_0 και πλάτους a σε απόσταση r . (α) Δείξτε ότι το πλάτος μετάδοσης γράφεται ως

$$T_k = \frac{t_k^2}{1 - r_k^2 e^{2ik(r+a)}},$$

όπου t_k και r_k τα πλάτη μετάδοσης και ανάκλασης για το ένα φράγμα δυναμικού. (β) Γράφοντας $t_k = |t_k| e^{i\phi_k}$ και $r_k = -i|r_k| e^{i\phi_k}$, δείξτε ότι αν το k είναι λύση της εξίσωσης

$$\cos [2(k(r+a) + \phi_k)] = -1,$$

τότε $|T_k| = 1$, δηλαδή έχουμε πλήρη μετάδοση του 'κύματος'. Οι αντίστοιχες τιμές της ενέργειας καλούνται *ενέργειες συντονισμού* του διπλού φράγματος.

13. Υπολογίστε το πλάτος μετάδοσης και το πλάτος ανάκλασης για δυναμικό διπλού φράγματος δέλτα, $V(x) = \eta[\delta(x - \frac{a}{2}) + \delta(x + \frac{a}{2})]$.
14. Βρείτε τις ιδιοτιμές του τελεστή Σρέντινγκερ για έναν αρμονικό ταλαντωτή στην ημιευθεία $x > 0$.
15. Θεωρείστε σωματίο σε ημιευθεία $x > 0$ και δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & 0 < x < a \\ 0 & a \leq x \end{cases}$$

Δείξτε ότι οι αρνητικές ιδιοτιμές E του τελεστή Σρέντινγκερ, προκύπτουν από λύσεις της εξίσωσης $\sqrt{x} \tan(b\sqrt{1-x}) = -\sqrt{1-x}$, όπου $x = |E|/V_0$ και $b = \sqrt{2mV_0}a$. Δείξτε ότι για b επαρκώς κοντά στο μηδέν υπάρχει μόνο η λύση $x = 1$.

16. (α) Δείξτε ότι η ποσότητα $\frac{T_k^2}{1+R_k} - \bar{R}_k$ που εμφανίζεται στην Εξ. (6.103) για τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα του τελεστή Σρέντινγκερ έχει μέτρο 1 και άρα μπορεί να γραφεί ως $e^{i\Theta_k}$. (β) Υπολογίστε το Θ_k για δυναμικό $V(x) = \eta\delta(x - a)$.
17. Δείξτε ότι ο τελεστής $\hat{Q} = -ix \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2}$ είναι αυτοσυζυγής στο $L^2(\mathbf{R}^+)$. Δείξτε ότι οι συναρτήσεις $f_q(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} x^{-\frac{1}{2}+iq}$ για κάθε $q \in \mathbf{R}$ είναι γενικευμένα ιδιοδιανύσματα του και ικανοποιούν τη συνθήκη κανονικοποίησης $\int_0^\infty dx f_q(x) f_{q'}^*(x) = \delta(q - q')$. Χρησιμοποιείστε την ταυτότητα του Χάνταμαρ για να δείξετε ότι $e^{is\hat{Q}} \hat{x} e^{-is\hat{Q}} = e^s \hat{x}$. Ποια είναι η φυσική σημασία του \hat{Q} ;

18. Σωματίο μάζας m βρίσκεται σε κουτί πλάτους L υπό δυναμικό $V(x) = \eta\delta(x - \xi L)$, όπου $0 < \xi < 1$. Δείξτε ότι οι ιδιοτιμές του τελεστή Σρέντινγκερ είναι $E_n = \frac{1}{2mL^2}x_n^2$, όπου x_n οι λύσεις της εξίσωσης $x [\cot(\xi x) + \cot((1 - \xi)x)] = 2m\eta L$.
19. Βρείτε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή Σρέντινγκερ για σωματίο μάζας m που κινείται σε δακτύλιο με περίοδο L και υπό δυναμικό $V(x) = \eta\delta(x)$. Σχολιάστε το αποτέλεσμα.
20. Θεωρείστε το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_α που ορίζεται από ελιγμένες (twisted) συνοριακές συνθήκες στο διάστημα $[0, L]$, $\psi(L) = e^{2\pi i\alpha}\psi(0)$, για $\alpha \in [0, 1]$. Υπολογίστε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή $\hat{\ell} = -i\frac{\partial}{\partial\theta}$, όπου $\theta = \frac{2\pi}{L}x$. Ποια είναι η θεμελιώδης κατάσταση του τελεστή $\hat{\ell}^2$;
21. Αρμονικός ταλαντωτής συχνότητας ω διαταράσσεται από ασθενές δυναμικό $g\hat{x}^3$. Υπολογίστε τη διόρθωση πρώτης και δεύτερης τάξης στις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής.
22. Έστω σωματίο εντός μονοδιάστατου κουτιού μήκους L κάτω από ένα ασθενές δυναμικό $V(x) = V_0 \cos(\pi x/L)$. (α) Δείξτε ότι οι διορθώσεις πρώτης τάξης στην ενέργεια μηδενίζονται. (β) Υπολογίστε τη διόρθωση στην θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος. (γ) Βρείτε τη διόρθωση δεύτερης τάξης στην ενέργεια για τη θεμελιώδη και την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος.
23. Μία Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 έχει δύο ιδιοδιανύσματα $|a\rangle$ και $|b\rangle$ με ιδιοτιμές που διαφέρουν μεταξύ τους κατά Δ . Το σύστημα διαταράσσεται από ένα δυναμικό \hat{V} , με στοιχεία πίνακα $\langle a|\hat{V}|b\rangle$ της τάξης μεγέθους του Δ . Γράψτε τις αντίστοιχες ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του τελεστή $\hat{H}_0 + \hat{V}$ στην πρώτη τάξης της θεωρίας διαταραχών.
24. Σωματίο μάζας m κινείται σε δακτύλιο ακτίνας R κάτω από την επίδραση ασθενούς δυναμικού

$$V(\theta) = \begin{cases} V_0\theta, & \theta \in [0, \alpha) \\ 0, & \theta \in [\alpha, 2\pi) \end{cases} \quad (6.155)$$

όπου $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$. Υποθέτοντας ότι $V_0mR^2 \ll 1$, βρείτε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα της ενέργειας στην πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών.

Βιβλιογραφία

- Περισσότερα για την έννοια των σύμφωνων καταστάσεων και τις εφαρμογές, βλ. το εισαγωγικό άρθρο στον τόμο των Klauder και Skagerstam [94].
- Για μαθηματικές ιδιότητες του τελεστή Σρέντινγκερ σε μια διάσταση, βλ. το βιβλίο των Berezin και Shubin [93].

Κεφάλαιο 7

Κβαντικές πιθανότητες

Η υπάρχουσα κβαντική θεωρία μπορεί να απαντήσει μόνο ερωτήσεις της μορφής “Αν πραγματοποιηθεί αυτό το πείραμα, ποια είναι τα αποτελέσματα και οι πιθανότητές τους;” Δεν μπορεί, επί της αρχής, να απαντήσει ερωτήσεις της μορφής “Τί πραγματικά συμβαίνει όταν..;”. Ο μαθηματικός φορμαλισμός της κβαντικής θεωρίας, σαν την οργουελλιανή Νεογλώσσα, δεν έχει καν τις λέξεις για να θέσει ένα τέτοιο ερώτημα.

E. T. Τζέινς [96]

7.1 Γενίκευση του κανόνα του Μπορν

Όπως είδαμε στο κεφ. 3, η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης του Μπορν αποτέλεσε έναν από τους θεμέλιους λίθους της κβαντικής θεωρίας. Σύμφωνα με την ερμηνεία του Μπορν, η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ ενός σωματιδίου (σε μία δεδομένη χρονική στιγμή) ορίζει μία πυκνότητας πιθανότητας $|\psi(x)|^2$ ως προς τη θέση x . Αυτό το αποτέλεσμα γενικεύεται για καταστατικά διανύσματα οποιουδήποτε χώρου Χίλμπερτ και για οποιαδήποτε φυσική ποσότητα με τον ακόλουθο τρόπο.

Έστω κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$ που περιγράφει ένα σωματίο σε μία διάσταση. Σύμφωνα με την αρχή του Μπορν, η πιθανότητα $\text{Prob}(U)$ να βρεθεί η θέση του σωματιδίου στην περιοχή $U \subset \mathbf{R}$ είναι

$$\text{Prob}(U) = \int_U dx |\langle x|\psi\rangle|^2 = \langle \psi | \left(\int_U dx |x\rangle\langle x| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_U | \psi \rangle, \quad (7.1)$$

όπου \hat{P}_U είναι ο φασματικός προβολέας της θέσης που αντιστοιχεί στο σύνολο U .

Έχοντας εκφράσει τον κανόνα του Μπορν συναρτήσει καταστατικών διανυσμάτων και φασματικών προβολέων, τον γενικεύουμε για οποιοδήποτε παρατηρήσιμο μέγεθος.

Θεμελιώδης αρχή 3. Έστω ότι ένα φυσικό σύστημα περιγράφεται από το κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\psi\rangle$ και ότι γίνεται μέτρηση που αντιστοιχεί στον αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} . Τότε η πιθανότητα $\text{Prob}(U)$ για το αποτέλεσμα της μέτρησης να πάρει τιμές εντός του συνόλου $U \subset \mathbf{R}$ δίνεται από τη σχέση

$$\text{Prob}(U) = \langle \psi | \hat{P}_U | \psi \rangle. \quad (7.2)$$

όπου \hat{P}_U είναι ο φασματικός προβολέας του \hat{A} που αντιστοιχεί στο U .

Παρατηρούμε ότι οι πιθανότητες (7.2) παραμένουν αναλλοίωτες κάτω από το μετασχηματισμό $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\theta}|\psi\rangle$. Δηλαδή η αλλαγή φάσης ($e^{i\theta}$) ενός καταστατικού διανύσματος δεν επηρεάζει τις πιθανότητες—και άρα τις φυσικές προβλέψεις της θεωρίας. Αυτό ισχύει μόνο εφόσον μιλάμε για διατάξεις στις οποίες δε δημιουργούνται επαλληλίες αυτού του καταστατικού διανύσματος. Το διάνυσμα $|\phi\rangle + |\psi\rangle$ δίνει εν γένει διαφορετικές πιθανότητες από το διάνυσμα $|\phi\rangle + e^{i\theta}|\psi\rangle$.

Στην ειδική περίπτωση που εξετάζουμε μέτρηση τελεστή \hat{A} με διακριτό φάσμα, $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$, η πιθανότητα p_n να μετρήσουμε την ιδιοτιμή a_n είναι

$$p_n = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle. \quad (7.3)$$

Αν καμία ιδιοτιμή δεν είναι εκφυλισμένη, τότε $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$, όπου $|n\rangle$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα και άρα

$$p_n = |\langle n | \psi \rangle|^2. \quad (7.4)$$

Η μέση τιμή $\langle \hat{A} \rangle$ του μεγέθους που αντιστοιχεί σε έναν τελεστή $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ είναι ίση με $\langle \hat{A} \rangle = \sum_n a_n p_n = \sum_n a_n \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_n a_n \hat{P}_n | \psi \rangle$, οπότε

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (7.5)$$

Η τυπική απόκλιση ΔA των μετρήσεων που αντιστοιχούν στον τελεστή \hat{A} ορίζεται ως

$$(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2. \quad (7.6)$$

Ο συσχετισμός $\text{Cor}(\hat{A}, \hat{B})$ ή C_{AB} δύο μετρήσιμων ποσοτήτων που αντιστοιχούν σε τελεστές \hat{A} και \hat{B} ορίζεται ως

$$\text{Cor}(\hat{A}, \hat{B}) = \frac{1}{2} \langle \psi | \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle. \quad (7.7)$$

Ο συσχετισμός είναι πραγματική ποσότητα, αφού ο τελεστής $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ είναι αυτοσυζυγής. Από τον ορισμό παρατηρούμε ότι $\text{Cor}(\hat{A}, \hat{B}) = \text{Cor}(\hat{B}, \hat{A})$ καθώς και ότι $\text{Cor}(\hat{A}, \hat{A}) = (\Delta A)^2$. Ο συσχετισμός ποσοτικοποιεί το βαθμό στατιστικής εξάρτησης μεταξύ του \hat{A} και \hat{B} στην κατάσταση $|\psi\rangle$.

Για έναν τελεστή \hat{A} με συνεχές φάσμα $\hat{A} = \int d\lambda \hat{P}_\lambda$, οι πιθανότητες προέρχονται από μία πυκνότητα πιθανότητας

$$p(\lambda) = \langle \psi | \hat{P}_\lambda | \psi \rangle \quad (7.8)$$

αφού το λ είναι συνεχής μεταβλητή. Αν $\hat{P}_\lambda = |\lambda\rangle\langle\lambda|$ για κάποιο κενό $|\lambda\rangle$, τότε $p(\lambda) = |\langle\lambda|\psi\rangle|^2$.

Η ανισότητα του Γιένσεν, Εξ. (1.26) ισχύει και για κβαντικές πιθανότητες

$$\langle F(\hat{A}) \rangle \geq F(\langle \hat{A} \rangle) \quad (7.9)$$

για κάθε κυρτή συνάρτηση $F: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ και αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} . Η απόδειξη προκύπτει άμεσα από το φασματικό θεώρημα. Για $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και $p_n = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle$, η Εξ. (7.9) γράφεται ως $\sum_n p_n F(a_n) \geq F(\sum_n p_n a_n)$, που ταυτίζεται με την κλασική ανισότητα Γιένσεν (1.26).

Παράδειγμα 7.1. Ιδιαίτερα χρήσιμες είναι οι Γκαουσιανές κυματοσυναρτήσεις

$$\psi_{\bar{q}, \bar{p}}(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp \left[-\frac{(x - \bar{q})^2}{4\sigma^2} + i\bar{p}x \right], \quad (7.10)$$

όπου οι σταθερές \bar{q} και \bar{p} είναι οι μέσες τιμές της θέσης και της ορμής αντίστοιχα. Για κατάλληλη επιλογή του σ ταυτίζονται με τις σύμφωνες καταστάσεις (6.53). Η κατανομή πιθανοτήτων ως προς της θέση

$$|\psi_{\bar{q},\bar{p}}(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(x - \bar{q})^2}{2\sigma^2} \right], \quad (7.11)$$

είναι επικεντρωμένη γύρω από το \bar{q} με τυπική απόκλιση $\Delta x = \sigma$.

Στη βάση της ορμής παίρνουμε

$$\tilde{\psi}_{\bar{q},\bar{p}}(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\sigma^2(p - \bar{p})^2 - i\bar{q}k \right], \quad (7.12)$$

με αντίστοιχη κατανομή πιθανοτήτων

$$|\tilde{\psi}_{\bar{q},\bar{p}}(p)|^2 = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-2\sigma^2(p - \bar{p})^2 \right], \quad (7.13)$$

που είναι επικεντρωμένη γύρω από το \bar{p} με τυπική απόκλιση $\Delta p = (2\sigma)^{-1}$.

7.2 Στατιστική μίξη και μήτρα πυκνότητας

Στο κεφ. 4.2 ανέφερα ότι η περιγραφή της κατάστασης με διανύσματα ενός χώρου Χίλμπερτ δεν είναι η γενικότερη δυνατή. Η γενικότερη περιγραφή της κατάστασης απαιτεί την εισαγωγή της έννοιας της μήτρας πυκνότητας. Πρώτα όμως θα εξηγήσουμε τις έννοιες της *στατιστικής μίξης* και της *καθαρής κατάστασης* στην κλασική θεωρία.

7.2.1 Κλασική στατιστική μίξη

Η στατιστική μίξη και η καθαρή κατάσταση είναι έννοιες που κληρονομήθηκαν στη θεωρία πιθανοτήτων από τη χημεία και συγκεκριμένα από τις διαδικασίες ανάμιξης και διαχωρισμού ουσιών.

Ας θεωρήσουμε ένα διάλυμα εντός ενός δοχείου A, το οποίο αποτελείται από n διαφορετικές ουσίες. Έστω p_i , $i = 1, 2, \dots, n$ το μοριακό κλάσμα της ουσίας με δείκτη i στο διάλυμα, δηλαδή ο λόγος του αριθμού των μορίων τύπου i προς το συνολικό αριθμό μορίων. Προφανώς θα ισχύει ότι $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. Μπορούμε να περιγράψουμε την κατάσταση του δοχείου A από ένα διάνυσμα γραμμής $\vec{w}_A = (p_1, p_2, \dots, p_n)$. Ομοίως σε ένα άλλο δοχείο B που περιέχει διάλυμα από τις ίδιες ουσίες με μοριακά κλάσματα q_i μπορούμε να αντιστοιχίσουμε ένα άλλο διάνυσμα γραμμής $\vec{w}_B = (q_1, q_2, \dots, q_n)$.

Έστω τώρα ότι αναμιγνύουμε τα διαλύματα από τα δύο δοχεία, ρίχνοντας σε ένα τρίτο δοχείο Γ διάλυμα σε ποσοστό ίσο με λ από το δοχείο A και διάλυμα σε ποσοστό ίσο με $1 - \lambda$ από το δοχείο B. Στο τέλος της διαδικασίας, το διάλυμα του δοχείου Γ χαρακτηρίζεται από μοριακό κλάσμα $\lambda p_i + (1 - \lambda)q_i$ για κάθε τύπο ουσίας, ή ισοδύναμα από ένα διάνυσμα

$$\vec{w}_\Gamma = \lambda \vec{w}_A + (1 - \lambda) \vec{w}_B \quad (7.14)$$

Ένα άθροισμα διανυσμάτων της μορφής (7.14) για $0 \leq \lambda \leq 1$ καλείται *κυρτός συνδυασμός*.

Δεδομένου ότι μιλάμε για υγρά μπορεί κανείς να ακολουθήσει την αντίστροφη διαδικασία από τη μίξη, δηλαδή την ανάλυση ενός διαλύματος στα συστατικά του. Θεωρούμε τα n διανύσματα \vec{e}_i , όπου

$$\vec{e}_1 = (1, 0, \dots, 0), \vec{e}_2 = (0, 1, \dots, 0), \dots, \vec{e}_n = (0, 0, \dots, 1). \quad (7.15)$$

Κανένα από τα διανύσματα \vec{e}_i δεν μπορεί να γραφτεί ως κυρτός συνδυασμός άλλων διανυσμάτων, δηλαδή δεν μπορεί να προέλθει από κάποια μίξη. Τα διανύσματα \vec{e}_i αντιστοιχούν σε καθαρές ουσίες, δηλαδή σε δοχεία που περιέχουν ένα και μόνο ένα συστατικό. Προφανώς οποιοδήποτε διάνυσμα $\vec{w} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ μπορεί να γραφτεί ως

$$\vec{w} = \sum_{i=1}^n p_i \vec{e}_i, \quad (7.16)$$

δηλαδή ως κυρτός συνδυασμός των διανυσμάτων που αντιστοιχούν σε καθαρές ουσίες.

Τα παραπάνω είναι διαισθητικά προφανή αν μιλάμε για διαλύματα. Άμεσα μεταφέρονται στη θεωρία πιθανοτήτων αν θεωρήσει κανείς ότι το σύνολο των n διαφορετικών ουσιών αντιστοιχίζεται στον δειγματικό χώρο ενός συστήματος. Ένα δοχείο που περιέχει διάλυμα αντιστοιχίζεται σε ένα στατιστικό σύνολο που περιγράφεται από μία κατανομή πιθανοτήτων p_i για $i = 1, \dots, n$, ή ισοδύναμα από ένα διάνυσμα πιθανοτήτων $\vec{w} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$. Για παράδειγμα μπορεί κανείς να θεωρήσει ένα πείραμα τύχης κατά το οποίο διαλέγεται τυχαία ένα μόριο από το δοχείο: η πιθανότητα το μόριο αυτό να ανήκει στην i ουσία δίνεται από το p_i .

Η διαδικασία της μίξης δύο ή περισσοτέρων διαλυμάτων αντιστοιχεί στη *στατιστική μίξη* δύο ή περισσοτέρων στατιστικών συνόλων. Έστω ότι έχουμε k στατιστικά σύνολα, κάθε μία εκ των οποίων χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα πιθανοτήτων

$$\vec{w}_r = (p_{r,1}, p_{r,2}, \dots, p_{r,n}), \quad (7.17)$$

για $r = 1, 2, \dots, k$. Ορίζουμε το στατιστικό μίγμα των κατανομών αυτών με σχετικά βάρη λ_r , όπου $\sum_{r=1}^k \lambda_r = 1$, ως το στατιστικό σύνολο που περιγράφεται από το διάνυσμα πιθανοτήτων

$$\vec{w}_{mix} = \sum_{r=1}^k \lambda_r \vec{w}_r. \quad (7.18)$$

Για παράδειγμα, αν το στατιστικό σύνολο με δείκτη r έχει $N_r \gg 1$ στοιχεία, και η μίξη αντιστοιχεί στη συνένωση όλων των επιμέρους στατιστικών συνόλων σε ένα μεγάλο στατιστικό σύνολο με $N = \sum_{r=1}^k N_r$ στοιχεία, το σχετικό βάρος κάθε στατιστικού συνόλου είναι $\lambda_r = N_r/N$, εφόσον $N_r \gg 1$.

Με την ίδια αντιστοιχία κατανομών και διαλυμάτων, ορίζουμε ως *καθαρές κατανομές* αυτές που δεν αποτελούν μίξη άλλων κατανομών. Οι καθαρές κατανομές αντιστοιχούν σε πειράματα τύχης όπου πάντα καταλήγουν στο ίδιο αποτέλεσμα και περιγράφονται από τα διανύσματα πιθανοτήτων (7.15).

Η ανάλυση ενός διανύσματος πιθανοτήτων \vec{w} ως κυρτός συνδυασμός των καθαρών κατανομών σύμφωνα με την Εξ. (7.16) είναι μοναδική¹. Κατά συνέπεια η διαδικασία ανάλυσης μιας κατανομής στις καθαρές που τη συνθέτουν και μετά επανασύνθεσής της μέσω μίξης των καθαρών κατανομών είναι πλήρως αντιστρεπτή και μονοσήμαντη.

7.2.2 Μήτρα πυκνότητας

Η έννοια της στατιστικής μίξης είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την έννοια της πιθανότητας. Μπορούμε πάντα να αναμείξουμε δύο διαφορετικά στατιστικά σύνολα, εφόσον αυτά περιγράφουν τα ίδια ενδεχόμενα. Κατά συνέπεια μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την έννοια της στατιστικής μίξης και για τις πιθανότητες της κβαντικής θεωρίας.

Θεωρούμε μία συσκευή η οποία προετοιμάζει ένα φυσικό σύστημα σε καταστάσεις που αντιστοιχούν σε διανύσματα ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} . Γενικά, ο πειραματικός δεν έχει απόλυτο έλεγχο

¹Αυτή η παρατήρηση θα ήταν τετριμμένα προφανής, αν στην κβαντική πιθανότητα δεν ίσχυε κάτι διαφορετικό.

πάνω σε όλες τις παραμέτρους τις πειραματικής συσκευής. Σε κάθε επανάληψη του πειράματος οι διακυμάνσεις των παραμέτρων οδηγούν σε διαφορετική προετοιμαζόμενη κατάσταση. Ας μοντελοποιήσουμε αυτού του είδους την τυχαιότητα με τον ακόλουθο τρόπο. Η συσκευή μπορεί να προετοιμάσει το σύστημα σε καταστάσεις που αντιστοιχούν σε κάποια διανύσματα $|\psi_a\rangle$ με αντίστοιχη πιθανότητα w_a .

Έστω τώρα ότι μετράμε μία ποσότητα που αντιστοιχεί στον τελεστή \hat{A} σε ένα στατιστικό σύνολο που παρήχθη από την παραπάνω συσκευή. Η πιθανότητα $\text{Prob}(U)$ για $U \in \sigma(\hat{A})$ προκύπτει από τη μίξη των κατανομών πιθανοτήτων $\langle \psi_a | \hat{P}_U | \psi_a \rangle$ που αντιστοιχούν σε κάθε διάνυσμα, με αντίστοιχο βάρος w_a

$$\text{Prob}(U) = \sum_a w_a \langle \psi_a | \hat{P}_U | \psi_a \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{P}_U), \quad (7.19)$$

όπου $\hat{\rho} = \sum_a w_a |\psi_a\rangle \langle \psi_a|$ είναι ένας θετικός τελεστής που ικανοποιεί τη σχέση $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$.

Ορισμός 7.1 Μήτρα πυκνότητας καλείται κάθε θετικός τελεστής $\hat{\rho}$ σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} που ικανοποιεί $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$.

Δεδομένου ότι μια μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ έχει πεπερασμένο ίχνος, έχει μόνο διακριτό φάσμα. Επίσης, εφόσον η $\hat{\rho}$ είναι θετικός πίνακας, οι ιδιοτιμές της είναι θετικές. Άρα γράφεται ως

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n \hat{P}_n,$$

όπου $0 \leq w_n \leq 1$ και \hat{P}_n οι αντίστοιχοι φασματικοί προβολείς. Βεβαίως, $\sum_n w_n = \text{Tr} \hat{\rho} = 1$.

Μία μήτρα πυκνότητας που έχει μόνο μία ιδιοτιμή ίση με μονάδα και όλες τις άλλες μηδενικές καλείται *καθαρή*. Αυτό σημαίνει ότι μία καθαρή μήτρα πυκνότητας γράφεται στη μορφή $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$ για κάποιο κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\psi\rangle$ του χώρου Χίλμπερτ. *Μικτή* καλείται κάθε μήτρα πυκνότητας που δεν είναι καθαρή.

Αξιοσημείωτες είναι οι μήτρες πυκνότητες *μέγιστης άγνοιας* που ορίζονται στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^N ως $\hat{\rho} = N^{-1} \hat{I}$. Αυτές είναι οι "πιο μικτές" δυνατές καταστάσεις, γιατί δε μας προσφέρουν καθόλου πληροφορία για το σύστημα.

Μία μήτρα πυκνότητας στο \mathcal{C}^N είναι ένας $N \times N$ αυτοσυζυγής τελεστής. Ως τέτοιος, προσδιορίζεται από N^2 ανεξάρτητους πραγματικούς αριθμούς. Αυτός ο αριθμός προκύπτει ως εξής, N διαγώνια πραγματικά στοιχεία και $(N^2 - N)/2$ μη-διαγώνια μιγαδικά. Άρα συνολικά έχουμε $N + (N^2 - N) = N^2$ πραγματικά ανεξάρτητα στοιχεία. Αν τώρα λάβουμε υπόψη τη συνθήκη κανονικοποίησης της μήτρας πυκνότητας αφαιρούμε έναν αριθμό. Καταλήγουμε ότι η γενική μήτρα πυκνότητας στο \mathcal{C}^N προσδιορίζεται από $N^2 - 1$ πραγματικούς.

Έστω $|n\rangle$ και $|m\rangle$ δύο διανύσματα μίας ορθοκανονική βάσης. Η ανισότητα Κωσύ-Σβαρτς για τα διανύσματα $\sqrt{\hat{\rho}}|n\rangle$ και $\sqrt{\hat{\rho}}|m\rangle$ δίνει $|\langle n | \hat{\rho} | m \rangle|^2 \leq \langle n | \hat{\rho} | n \rangle \langle m | \hat{\rho} | m \rangle$, δηλαδή

$$|\rho_{mn}| \leq \sqrt{\rho_{nn} \rho_{mm}}. \quad (7.20)$$

Η διάκριση καθαρών και μικτών καταστάσεων γίνεται στη βάση του παραπάνω αποτελέσματος.

Θεώρημα 7.2 Κάθε μήτρα πυκνότητας ικανοποιεί τη σχέση $\hat{\rho} \geq \hat{\rho}^2$. Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν η $\hat{\rho}$ είναι καθαρή.

Απόδειξη. Έστω w_n οι ιδιοτιμές της $\hat{\rho}$ και \hat{P}_n οι αντίστοιχοι φασματικοί προβολείς. Δεδομένου ότι $0 \leq w_n \leq 1$, ισχύει ότι $w_n - w_n^2 \geq 0$, άρα $\sum_n (w_n - w_n^2) \hat{P}_n \geq 0$, άρα $\hat{\rho} - \hat{\rho}^2 \geq 0$. Η ισότητα ισχύει όταν $w_n = w_n^2$ για κάθε n , δηλαδή $w_n = 0$ ή $w_n = 1$. Δεδομένου ότι $\sum_n w_n = 1$, πρέπει όλα τα w_n να μηδενίζονται, εκτός από ένα, έστω το w_a το οποίο ισούται με 1. Τότε $\text{Tr} \hat{\rho} = \text{Tr} \hat{P}_a = 1$, οπότε ο \hat{P}_a είναι μονοδιάστατος, και άρα η $\hat{\rho}$ είναι καθαρή.

Το θεώρημα 7.2. σημαίνει ότι $Tr(\hat{\rho} - Tr\hat{\rho}^2) \geq 0$ ή ισοδύναμα $Tr\hat{\rho}^2 \leq 1$, με την ισότητα να ισχύει μόνο για καθαρή κατάσταση. Άρα η ποσότητα

$$\gamma = Tr\hat{\rho}^2 \quad (7.21)$$

είναι μέτρο του πόσο καθαρή είναι μία κατάσταση, γι' αυτό και καλείται *καθαρότητα* της κατάστασης $\hat{\rho}$. Στο \mathcal{C}^N , οι τιμές του γ κυμαίνονται μεταξύ της ελάχιστης τιμής $\frac{1}{N}$ που επιτυγχάνεται από τη μήτρα πυκνότητας μέγιστης άγνοιας και του 1 που αντιστοιχεί σε καθαρές καταστάσεις.

7.2.3 Μήτρες πυκνότητας ενός κιούμπι

Από την Εξ. (6.2) και το γεγονός ότι $Tr\hat{\sigma}_i = 0$, βρίσκουμε ότι ο γενικότερος αυτοσυζυγής τελεστής $\hat{\rho}$ στο \mathcal{C}^2 που ικανοποιεί τη σχέση $Tr\hat{\rho} = 1$ είναι της μορφής

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \mathbf{r} \cdot \hat{\sigma}), \quad (7.22)$$

για πραγματικούς αριθμούς (r_1, r_2, r_3) .

Η Εξ. (6.4) μας επιτρέπει να εκφράσουμε τους αριθμούς r_i ως

$$Tr(\hat{\rho}\hat{\sigma}_i) = \frac{1}{2} \sum_j r_j Tr(\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i) = \frac{1}{2} \sum_j r_j \delta_{ij} Tr\hat{I} = r_i, \quad (7.23)$$

Όπως δείξαμε στο Κεφ. 6.1, οι ιδιοτιμές του τελεστή (7.22) είναι $\frac{1}{2}(1 \pm |\mathbf{r}|)$, άρα ο $\hat{\rho}$ είναι θετικός αν και μόνο αν $|\mathbf{r}| \leq 1$, έτσι ώστε και οι δυο ιδιοτιμές να είναι θετικές. Δηλαδή ο χώρος των μητρών πυκνότητας στο \mathcal{C}^2 είναι ισοδύναμος με τη μοναδιαία μπάλα στο \mathbf{R}^3

$$B_2 = \{(r_1, r_2, r_3) | r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 \leq 1\}.$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι $Tr\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}(1 + |\mathbf{r}|)^2 + \frac{1}{4}(1 - |\mathbf{r}|)^2 = \frac{1}{2}(1 + |\mathbf{r}|^2)$. Το κριτήριο καθαρότητας $Tr\hat{\rho}^2 = 1$ ικανοποιείται μόνο όταν $|\mathbf{r}| = 1$, δηλαδή οι καθαρές μήτρες πυκνότητας ορίζουν τη μοναδιαία σφαίρα, το σύνορο του B_2 , η οποία καλείται *σφαίρα του Μπλοχ*. Το κέντρο της σφαίρας $\mathbf{r} = 0$ αντιστοιχεί στη μήτρα πυκνότητας μέγιστης άγνοιας $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{I}$.

Για να μελετήσουμε τη σφαίρα του Μπλοχ εκφράζουμε ένα γενικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ του \mathcal{C}^2 , κανονικοποιημένο στη μονάδα, ως

$$|\psi\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |0\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |1\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (7.24)$$

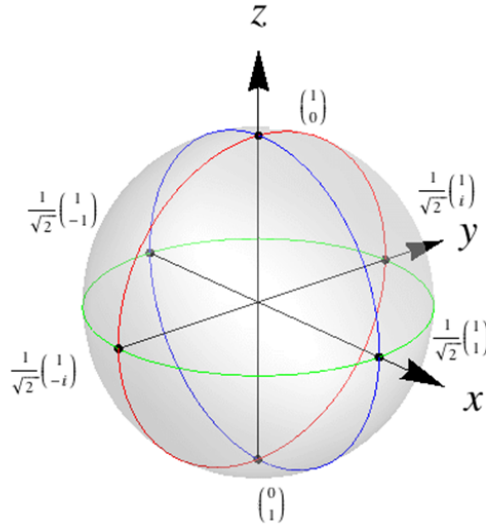
όπου θ και ϕ οι συνήθεις σφαιρικές συντεταγμένες, με $\theta \in [0, \pi]$ και $\phi \in [0, 2\pi]$. Από τη σχέση (7.23) εκφράζουμε το αντίστοιχο διάνυσμα \mathbf{r}_ψ ως συνάρτηση των θ και ϕ

$$\mathbf{r}_\psi = \langle \psi | \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (7.25)$$

Ας θεωρήσουμε δύο διανύσματα $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$. Μπορούμε να διαλέξουμε μια βάση ώστε το $|\phi\rangle$ να βρίσκεται στο βόρειο πόλο της σφαίρας του Μπλοχ: ($\theta = 0$), οπότε το αντίστοιχο διάνυσμα $\mathbf{r}_\phi = (0, 0, 1)$. Αν το $|\psi\rangle$ είναι της μορφής (7.24), τότε

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{r}_\psi \cdot \mathbf{r}_\phi). \quad (7.26)$$

Παρατηρούμε ότι $|\langle \psi | \phi \rangle| = 0$ αν και μόνο αν $\mathbf{r}_\psi \cdot \mathbf{r}_\phi = -1$, δηλαδή δύο ορθογώνια διανύσματα αντιστοιχούν σε αντιδιαμετρικά σημεία της σφαίρας του Μπλοχ—βλ. σχήμα 6.2. Άρα μία ορθοκανονική βάση αντιστοιχεί σε μία διάμετρο της σφαίρας του Μπλοχ.



Σχήμα 7.1: Η σφαίρα του Μπλοχ. Οι καθαρές μήτρες πυκνότητας αντιστοιχούν σε σημεία της σφαίρας, οι μικτές σε σημεία του εσωτερικού της. Αντιδιαμετρικά σημεία στη σφαίρα αντιστοιχούν σε ορθογώνια διανύσματα.

7.2.4 Μήτρα πυκνότητας για σωματίο σε μία διάσταση

Μια μήτρα πυκνότητας στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}, dx)$ αντιστοιχεί σε μία συνάρτηση δύο μεταβλητών, $\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$. Οι ιδιότητες μίας μήτρας πυκνότητας σημαίνουν ότι η συνάρτηση $\rho(x, x')$ ικανοποιεί τις ιδιότητες

- (i) $\rho(x, x) \geq 0$, ως συνέπεια της θετικότητας του $\hat{\rho}$.
- (ii) $\rho^*(x, x') = \rho(x', x)$, αφού η $\hat{\rho}$ είναι αυτοσυζυγής.
- (iii) $\int dx \rho(x, x) = 1$, καθώς $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$.
- (iv) $|\rho(x, x')| \leq \sqrt{\rho(x, x)\rho(x', x')}$, δηλαδή το ανάλογο της Εξ. (7.20) για συνεχές φάσμα.

Μία μήτρα πυκνότητας είναι καθαρή μόνο αν $\rho(x, x') = \psi(x)\psi^*(x')$ για κάποια συνάρτηση ψ .

Η δράση των τελεστών θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} στη συνάρτηση $\rho(x, x')$ γίνεται ως εξής. Το γινόμενο $\hat{x}\hat{\rho}$ αντιστοιχεί στη συνάρτηση $x\rho(x, x')$ και το γινόμενο $\hat{p}\hat{\rho}$ στη συνάρτηση $x'\rho(x, x')$. Αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι

$$\langle x | \hat{x} \hat{\rho} | x' \rangle = x \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = x \rho(x, x') \quad \text{και} \quad \langle x | \hat{p} \hat{\rho} | x' \rangle = x' \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = x' \rho(x, x')$$

Το γινόμενο $\hat{p}\hat{\rho}$ αντιστοιχεί στη συνάρτηση $-i \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, y)$ και το γινόμενο $\hat{\rho}\hat{p}$ στη συνάρτηση $-i \frac{\partial}{\partial x'} \rho(x, y)$. Για να το δείξουμε, αναλύουμε τη μήτρα πυκνότητας ως προς μία ορθοκανονική βάση που τη διαγωνιοποιεί: $\hat{\rho} = \sum_n w_n |n\rangle \langle n|$. Οπότε,

$$\langle x | \hat{p} \hat{\rho} | x' \rangle = \sum_n w_n \langle x | \hat{p} | n \rangle \langle n | x' \rangle = -i \sum_n w_n \frac{\partial}{\partial x} \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x'). \quad (7.27)$$

Κατά τον ίδιο τρόπο αποδεικνύεται ότι $\langle x | \hat{\rho} \hat{p} | x' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial x'} \rho(x, x')$.

Παράδειγμα 7.2. Έστω μία Γκαουσιανή μήτρα πυκνότητας $\rho(x, x') = C \exp(-ax^2 - bx'^2 + 2cxx')$ για μιγαδικές σταθερές a, b και c . Παρατηρούμε ότι η μήτρα πυκνότητας είναι καθαρή μόνο όταν

$c = 0$, γιατί μόνο τότε μπορεί να γραφεί στη μορφή $\psi(x)\psi^*(x')$. Η συνθήκη αυτοσυζυγίας $\rho^*(x, x') = \rho(x', x)$ δίνει ότι $a = b^*$ και $c = c^*$. Γράφουμε $a = \kappa + i\lambda$, όπου κ και λ πραγματικοί, έτσι ώστε η

$$\rho(x, x') = C \exp [-\kappa(x^2 + x'^2) - i\lambda(x^2 - x'^2) + 2cxx'], \quad (7.28)$$

να γράφεται συναρτήσει τριών πραγματικών σταθερών κ , λ και c . Αυτό σημαίνει ότι $\rho(x, x) = Ce^{-2(\kappa-c)x^2}$. Η συνθήκη κανονικοποίησης σημαίνει ότι $\kappa > c$ και ότι $C = \sqrt{\frac{2(\kappa-c)}{\pi}}$. Για την ολοκλήρωση χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα (1.38).

Επίσης υπολογίζουμε την καθαρότητα της μήτρας πυκνότητας

$$\begin{aligned} \gamma = Tr \hat{\rho}^2 &= \int dx dy \rho(x, y) \rho(y, x) = C^2 \int dx dy e^{-2\kappa(x^2+y^2)+4cxy} \\ &= \frac{2(\kappa-c)}{\pi} \frac{\pi}{2\sqrt{\kappa^2-c^2}} = \sqrt{\frac{\kappa-c}{\kappa+c}}, \end{aligned} \quad (7.29)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (1.42). Επιβεβαιώνουμε ότι η μήτρα πυκνότητας είναι καθαρή ($\gamma = 1$) μόνο αν $c = 0$.

7.3 Φυσική σημασία της κβαντικής κατάστασης

7.3.1 Επανορισμός των βασικών κανόνων

Με δεδομένο ότι η έννοια της στατιστικής μίξης εμφανίζεται οπουδήποτε υπάρχουν πιθανότητες και βασιζόμενοι στις ιδιότητες της μήτρας πυκνότητας που παρουσιάσαμε παραπάνω, οδηγούμαστε σε μία γενίκευση των βασικών αρχών 1 και 3 της κβαντικής θεωρίας.

Θεμελιώδης αρχή 1β. Σε κάθε φυσικό σύστημα αντιστοιχεί ένας χώρος Χίλμπερτ. Μπορούμε να αντιστοιχίζουμε καταστάσεις του συστήματος με μήτρες πυκνότητας στο χώρο Χίλμπερτ.

Η παραπάνω αρχή συνοδεύεται από τον εξής κανόνα στατιστικής μίξης για κβαντικά συστήματα. Έστω ότι έχουμε προετοιμάσει ένα στατιστικό σύνολο που αποτελείται από $N_1 \gg 1$ πανομοιότυπα συστήματα σε κατάσταση με μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_1$, ένα στατιστικό σύνολο $N_2 \gg 1$ συστημάτων σε κατάσταση με μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_2$, κ.ο.κ. Ορίζουμε το στατιστικό βάρος κάθε στατιστικού συνόλου ως $\lambda_i = N_i/N$, όπου $N = \sum_i N_i$. Τότε το στατιστικό σύνολο που αντιστοιχεί στην ένωση όλων των παραπάνω στατιστικών συνόλων περιγράφεται από τη μήτρα πυκνότητας

$$\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i \hat{\rho}_i. \quad (7.30)$$

Θεμελιώδης αρχή 3β. Έστω ότι ένα φυσικό σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση που αντιστοιχεί στη μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ και ότι γίνεται μέτρηση που αντιστοιχεί στον αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} . Τότε η πιθανότητα $\text{Prob}(U)$ το αποτέλεσμα της μέτρησης να πάρει τιμές εντός του συνόλου U δίνεται από τη σχέση

$$\text{Prob}(U) = Tr \left(\hat{\rho} \hat{P}_U \right). \quad (7.31)$$

Σε περίπτωση που τα ενδεχόμενα αντιστοιχούν στα διανύσματα μιας ορθοκανονικής βάσης $|n\rangle$ (δηλαδή οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή δεν έχουν εκφυλισμό), οι πιθανότητες αντιστοιχούν στα διαγώνια στοιχεία της μήτρας πυκνότητας

$$\rho_{nn} = \langle n|\hat{\rho}|n\rangle. \quad (7.32)$$

Η μέση τιμή μίας ποσότητας που αντιστοιχεί στον αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ είναι

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \text{Prob}(n) a_n = \sum_n a_n \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n) \\ &= \text{Tr} \left(\hat{\rho} \sum_n a_n \hat{P}_n \right) = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}). \end{aligned} \quad (7.33)$$

Εύκολα αποδεικνύεται ότι η κβαντική ανισότητα Γιένσεν (7.9) ισχύει και για τις πιθανότητες που ορίζονται από την Εξ. (7.31).

Ο συσχετισμός δύο τελεστών ορίζεται ως

$$\text{Cor}(\hat{A}, \hat{B}) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\hat{\rho}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \right] - \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{B}). \quad (7.34)$$

και η τυπική απόκλιση του \hat{A} είναι $(\Delta A)^2 = C(\hat{A}, \hat{A})$.

Αν οι μετρήσεις αντιστοιχούν σε έναν τελεστή με συνεχές φάσμα $\hat{A} = \int d\lambda \lambda \hat{P}_\lambda$, οι πιθανότητες προέρχονται από μία πυκνότητα πιθανότητας

$$p(x) = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_x). \quad (7.35)$$

Αν $\hat{P}_\lambda = |\lambda\rangle\langle\lambda|$ για κάποιο κενό $|\lambda\rangle$, τότε $p(\lambda) = \langle \lambda|\hat{\rho}|\lambda\rangle$.

Παράδειγμα 7.3. Για τον τελεστή της θέσης \hat{x} στο $L^2(\mathbf{R})$, η πυκνότητα πιθανότητας αντιστοιχεί στα διαγώνια στοιχεία $\rho(x, x)$ μιας μήτρας πυκνότητας $\rho(x, x')$. Για την Γκαουσιανή μήτρα πυκνότητας (7.28), βρίσκουμε ότι ότι $\langle \hat{x} \rangle = \int dx x \rho(x, x) = 0$, και ότι $\langle \hat{x}^2 \rangle = \int dx x^2 \rho(x, x) = \frac{1}{4(k-c)}$. Παραγωγίζοντας $\frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x') = 2(-\kappa x - i\lambda x + cx') \rho(x, x')$ και

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x') = [-2\kappa - 2i\lambda + 4(-\kappa x - i\lambda x + cx')^2] \rho(x, x').$$

Κατά συνέπεια,

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \int dx \langle x|\hat{p}\hat{\rho}|x\rangle = -2i(-\kappa - i\lambda + c) \int dx x \rho(x, x) = 0 \\ \langle \hat{p}^2 \rangle &= \int dx \langle x|\hat{p}^2\hat{\rho}|x\rangle = \int dx [2\kappa + 2i\lambda - 4(-\kappa - i\lambda + c)^2 x^2] \rho(x, x) \\ &= 2\kappa + 2i\lambda - (\kappa - c + i\lambda)^2 \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\kappa^2 + \lambda^2 - c^2}{\kappa - c} \\ \langle \hat{x}\hat{p} \rangle &= \int dx \langle x|\hat{x}\hat{p}\hat{\rho}|x\rangle = -2i \int dx (-\kappa - i\lambda + c) x^2 \rho(x, x) \\ &= -2i(-\kappa - i\lambda + c) \langle \hat{x}^2 \rangle = -\frac{\lambda}{\kappa - c} + \frac{i}{2}. \end{aligned} \quad (7.36)$$

Στους παραπάνω υπολογισμούς, χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (1.38) για τα Γκαουσιανά ολοκληρώματα.

Καθώς οι μέσες τιμές της θέσης και της ορμής μηδενίζονται, $C_{xp} = \text{Re}\langle \hat{x}\hat{p} \rangle$, οπότε καταλήγουμε ότι

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{4(\kappa - c)}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\kappa^2 + \lambda^2 - c^2}{\kappa - c}, \quad C_{xp} = -\frac{\lambda}{\kappa - c} \quad (7.37)$$

Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάσαμε τη θεμελιώδη αρχή της κβαντικής θεωρίας, ότι μία κατάσταση αντιστοιχεί σε ένα χώρο Χίλμπερτ. Τρία κεφάλαια μετά γενικεύσαμε αυτήν την αρχή, αντιστοιχίζοντας την κατάσταση με μήτρες πυκνότητας. Ο αναγνώστης έχει κάθε λόγο να ανησυχεί για το ενδεχόμενο στο κεφάλαιο 10, να δούμε ότι η μήτρα πυκνότητας δεν είναι αρκετά γενική και άντε πάλι να ξαναδιατυπώνουμε τη θεμελιώδη αρχή.

Ευτυχώς, δεν πρόκειται να συμβεί αυτό. Μας το εγγυάται ένα από τα σημαντικότερα μαθηματικά αποτελέσματα για την κβαντική θεωρία, το *θεώρημα του Γκλήσον* (A. M. Gleason)— βλ. Ένθετο 7.1. Σύμφωνα με το θεώρημα του Γκλήσον, η γενικότερη δυνατή έννοια κατάστασης στην κβαντική θεωρία αντιστοιχίζεται πλήρως μαθηματικά με μία μήτρα πυκνότητας. Οπότε αν βρεθούμε ποτέ να περιγράφουμε τις καταστάσεις με αντικείμενα που δεν αντιστοιχούν σε μήτρες πυκνότητας, είτε θα έχουμε πάει πέρα από την κβαντική θεωρία είτε θα έχουμε κάνει κάποιο λάθος.

Με δεδομένο το θεώρημα του Γκλήσον, μπορούμε να ταυτίζουμε τη φυσική έννοια της κατάστασης σε μία χρονική στιγμή με το μαθηματικό αντικείμενο μήτρα πυκνότητας. Οπότε πλέον θα χρησιμοποιούμε τις λέξεις "κατάσταση" και "μήτρα πυκνότητας" ως συνώνυμα. Όταν αναφερόμαστε σε καθαρές καταστάσεις, θα αποκαλούμε καταστάσεις και τα αντίστοιχα διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ. Επιπλέον, θα συντομεύουμε φράσεις του τύπου "μέτρηση φυσικής ποσότητας που αντιστοιχεί στον αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} " σε "μέτρηση του \hat{A} ".

Ένθετο 7.1. Θεώρημα του Γκλήσον

Το θεώρημα του Γκλήσον προϋποθέτει το γενικότερο δυνατό χαρακτηρισμό μιας κβαντικής κατάστασης και αποδεικνύει ότι σε κάθε κατάσταση μπορεί κανείς να αντιστοιχίσει μία και μοναδική μήτρα πυκνότητας.

Η ιδέα στην οποία βασίζεται είναι ότι η μέτρηση σε ένα φυσικό σύστημα και η προετοιμασία του συστήματος είναι δύο ξεχωριστές διαδικασίες. Για παράδειγμα, μπορούμε να έχουμε ένα σωλήνα Τόμσον που παράγει ηλεκτρόνια και να τον καλιμπράρουμε έτσι ώστε να παράξει ένα στατιστικό σύνολο ηλεκτρονίων. Αν δύο προετοιμασίες του σωλήνα Τόμσον είναι πανομοιότυπες, τότε και τα στατιστικά σύνολα είναι ίδια και αντιστοιχίζονται στο ίδιο μαθηματικό αντικείμενο. Αυτό το αντικείμενο είναι η κατάσταση του συστήματος.

Η κατάσταση δεν επηρεάζεται από τι μετρήσεις θα αποφασίσουμε να κάνουμε στα ηλεκτρόνια. Ένα σωλήνας Τόμσον με συγκεκριμένη προετοιμασία μπορεί να τοποθετηθεί είτε σε μια διάταξη που μετράμε θέση των ηλεκτρονίων είτε σε μια διάταξη που μετράμε ορμή, είτε σε μια διάταξη που μετράμε στροφορμή. Μία φυσική θεωρία πρέπει να μας δίνει προβλέψεις για τα αποτελέσματα ενός πειράματος από τη γνώση του πώς προετοιμάσαμε το σύστημα. Άρα η κατάσταση ως μαθηματικό αντικείμενο πρέπει να αποδίδει τις πιθανότητες για όλες τα δυνατά ενδεχόμενα, όλων των δυνατών μετρήσεων.

Όπως είδαμε τα αποτελέσματα μιας μέτρησης στην κβαντική θεωρία αντιστοιχούν σε φασματικούς προβολείς \hat{P}_U κάπου αυτοσυζυγούς τελεστή \hat{A} , όπου U υποσύνολο του φάσματος $\sigma(\hat{A})$ του \hat{A} . Η γνώση της κατάστασης μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τις πιθανότητες $\text{Prob}(U)$ για κάθε U . Έστω ότι το U μπορεί να γραφεί ως ένωση $\cup_i U_i$ κάποιων μικρότερων υποσυνόλων U_i του $\sigma(\hat{A})$, όπου $U_i \cap U_j = \emptyset$ αν $i \neq j$. Από το φασματικό θεώρημα $\hat{P}_U = \sum_i \hat{P}_{U_i}$. Επίσης το πρώτο αξίωμα Κολμογκόροφ για τις πιθανότητες σημαίνει ότι $\text{Prob}(U) = \sum_i \text{Prob}(U_i)$. Άρα περιμένουμε ότι η κβαντική κατάσταση θα ορίζει τις πιθανότητες ως κατάλληλη γραμμική συνάρτηση των προβολικών τελεστών.

Οδηγούμαστε έτσι στον εξής ορισμό.

Ορισμός 7.3 Κατάσταση σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι μία συνάρτηση ω που σε κάθε προβολικό τελεστή \hat{P} στον \mathcal{H} αποδίδει ένα θετικό αριθμό $\omega(\hat{P}) \in [0, 1]$, και ικανοποιεί τις εξής συνθήκες.

1. $\omega(\hat{0}) = 0$.

2. $\omega(\hat{I}) = 1$.
3. Αν ο προβολικός τελεστής \hat{P} γράφεται ως αριθμησιμο άθροισμα προβολικών τελεστών $\hat{P} = \sum \hat{P}_i$, όπου $\hat{P}_i \hat{P}_j = 0$ για $i \neq j$, τότε

$$\omega(\hat{P}) = \sum_i \omega(\hat{P}_i). \quad (7.38)$$

Με βάση τον παραπάνω ορισμό, ο Γκλήσον απέδειξε το εξής [97].

Θεώρημα 7.4 Θεώρημα του Γκλήσον. Για κάθε χώρο Χίλμπερτ με διάσταση μεγαλύτερη του 2, κάθε κατάσταση ω αντιστοιχεί σε μία και μοναδική μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_\omega$, έτσι ώστε

$$\omega(\hat{P}) = Tr(\hat{\rho}_\omega \hat{P}), \quad (7.39)$$

για κάθε προβολικό τελεστή \hat{P} στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} .

Η απόδειξη του θεωρήματος του Γκλήσον είναι διαβόητα δύσκολη παρότι έχουν γίνει πολλές προσπάθειες απλοποίησης της—βλ. το άρθρο [98] για μία από τις απλούστερες αποδείξεις. Η σημασία του ωστόσο είναι ξεκάθαρη. Εφόσον δεχόμαστε ότι τα φυσικά μεγέθη αναπαρίστανται από τελεστές σε χώρο Χίλμπερτ, οι μήτρες πυκνότητας προσφέρουν τη γενικότερη δυνατή περιγραφή των κβαντικών καταστάσεων.

7.3.2 Η μινιμαλιστική ερμηνεία

Επανερχόμαστε στο ερώτημα που πρωτοθίξαμε στο κεφ. 4, τί σημαίνει η έννοια της κατάστασης στην κβαντική θεωρία. Η κατάσταση αναφέρεται στον τρόπο που έχει προετοιμαστεί ένα σύστημα είτε στο εργαστήριο είτε στη φύση προτού γίνουν μετρήσεις σ' αυτό. Η πληροφορία για την προετοιμασία ενσωματώνεται σε ένα μαθηματικό αντικείμενο, τη μήτρα πυκνότητας, από το οποίο λαμβάνουμε προβλέψεις για τα αποτελέσματα των μετρήσεων που κάνουμε, υπό τη μορφή των πιθανοτήτων, όπως δίνονται από την Εξ. (7.31).

Η παραπάνω ερμηνεία της κατάστασης είναι ο *ελάχιστος κοινός παρονομαστής* για την κατανόηση και χρήση της κβαντικής θεωρίας. Είναι λογικά συνεπής, και αρκεί για να εξηγήσει την τεράστια επιτυχία της κβαντικής μηχανικής στην πρόβλεψη των πειραματικών αποτελεσμάτων. Θα αποκαλούμε αυτήν την ερμηνεία *μινιμαλιστική*.

Ένα ζήτημα που τίθεται ακόμα και στη μινιμαλιστική ερμηνεία είναι πώς να ερμηνεύσουμε τις πιθανότητες που εμφανίζονται στην κβαντική θεωρία. Είδαμε στο κεφ. 1.5, ότι οι πιθανότητες επιδέχονται είτε τη λογική είτε τη συχνοτική ερμηνεία. Η διαφορά είναι σημαντική, δεδομένου ότι στη δεύτερη περίπτωση οι πιθανότητες αναφέρονται αποκλειστικά σε ένα στατιστικό σύνολο, ενώ στην πρώτη χρησιμοποιούνται και για μεμονωμένα συστήματα. Η ερώτηση έχει ιδιαίτερο τρέχον ενδιαφέρον, γιατί πλέον είναι εφικτή η απομόνωση και οι μετρήσεις σε μεμονωμένα μικροσκοπικά συστήματα (π.χ. άτομα ή ιόντα). Δεδομένου ότι χρησιμοποιούμε την κβαντική θεωρία για να περιγράψουμε τέτοια συστήματα, η λογική ερμηνεία των κβαντικών πιθανοτήτων φαντάζει προτιμότερη.

Η μεγάλη δυσκολία της μινιμαλιστικής ερμηνείας είναι ότι στα πλαίσιά της η έννοια της κατάστασης είναι ημιυποκειμενική. Αφορά όχι το σύστημα αυτό καθαυτό, αλλά και τον τρόπο που μπορούμε εμείς να το γνωρίζουμε. Έρχεται σε αντίθεση με μία παράδοση που ξεκινά από τη Νευτώνεια φυσική, στην οποία οι βασικές μαθηματικές δομές της θεωρίας αντιστοιχίζονται σε αντικειμενικά χαρακτηριστικά του κόσμου και όχι στην πληροφορία που εμείς έχουμε για τον κόσμο ή στους τρόπους κωδικοποίησης αυτής της πληροφορίας. Γι' αυτό το λόγο πολλοί φυσικοί προσπαθούν να ερμηνεύσουν τις κβαντικές καταστάσεις με τέτοιο τρόπο ώστε να αναφέρονται σε αντικειμενικά χαρακτηριστικά των φυσικών συστημάτων. Αναφέραμε, για παράδειγμα, τον Σρέντινγκερ, ο οποίος επιχείρησε να ερμηνεύσει τις κυματοσυναρτήσεις ως πραγματικά κύματα.

Όπως θα δούμε σε επόμενα κεφάλαια, οι απόπειρες αντικειμενικής ερμηνείας της κβαντικής κα-

τάστασης είναι είτε αποτυχημένες (γιατί αντιφάσκουν με βασικές αρχές της φυσικής, ή οδηγούν σε ασυμφωνία με το πείραμα), είτε ανεπαρκείς (δεν αποκλείονται αμέσως, αλλά απαιτούν πολύ περισσότερη δουλειά προκειμένου να γίνουν πειστικές). Ως εκ τούτου δεν αποτελούν κοινό τόπο για την επιστημονική κοινότητα. Γενικότερα, καμία ερμηνεία της κβαντικής κατάστασης πέρα από τη μινιμαλιστική δεν είναι καθολικά αποδεκτή.

Από την άλλη, μπορούμε να πούμε με βεβαιότητα ότι η μινιμαλιστική ερμηνεία είναι ελλιπής, επειδή χρησιμοποιεί την έννοια της μέτρησης ως θεμελιώδη. Μία μέτρηση είναι κι αυτή μια φυσική διαδικασία που πρέπει να περιγραφεί από τους κανόνες μιας φυσικής θεωρίας. Αν αυτή η περιγραφή υπόκειται στην κβαντική θεωρία, τότε η μινιμαλιστική ερμηνεία μας οδηγεί στο φαύλο κύκλο να χρησιμοποιούμε την έννοια της μέτρησης προκειμένου να ορίσουμε την έννοια της μέτρησης. Αν πάλι, η περιγραφή των μετρήσεων δεν υπόκειται στην κβαντική θεωρία, έχουμε το παράδοξο να υπάρχουν φυσικά συστήματα (οι μετρητικές συσκευές και ή ο συνειδητός ανθρώπινος παρατηρητής) που δεν υπόκεινται στην κβαντική θεωρία, παρότι αποτελούνται από άτομα που είναι κβαντικά συστήματα. Αυτό το παράδοξο δεν μπορεί να λυθεί χωρίς μια νέα φυσική θεωρία.

Στο Ένθετο 7.2 παρουσιάζεται ένα δείγμα διαφορετικών απόψεων για την ερμηνεία των κβαντικών καταστάσεων. Συνιστώ στον αναγνώστη να δώσει προσοχή στη λεπτομέρεια της διατύπωσης. Θα διαπιστώσει ότι οι απόψεις διαφέρουν σημαντικά μεταξύ τους, εφόσον πάνε να κινηθούν πέρα από τη μινιμαλιστική ερμηνεία.

Σ' αυτό το βιβλίο αναπτύσσεται η κβαντική θεωρία με βάση τη μινιμαλιστική ερμηνεία. Συνιστώ στον αναγνώστη να την υιοθετήσει προσωρινά, έως ότου να εξοικειωθεί με τους τρόπους που χρησιμοποιείται η κβαντική θεωρία στην πράξη και τα βασικά θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα που πρέπει να σέβεται κάθε απόπειρα ερμηνείας. Στο τελευταίο κεφάλαιο θα μπούμε σε βάθος σε ερμηνευτικά θέματα, οπότε ο αναγνώστης θα έχει τη δυνατότητα να αποφασίσει με ενήμερο τρόπο ποια από τις δυνατές ερμηνείες της κβαντικής κατάστασης—και γενικότερα της κβαντικής θεωρίας—βρίσκει πιο πειστική.

Ένθετο 7.2. Ερμηνείες της κβαντικής κατάστασης

«Η κβαντική κατάσταση συνδυάζει αντικειμενικά και υποκειμενικά στοιχεία. Περιέχει προτάσεις για πιθανότητες ή καλύτερα για δυνατότητες (δύναμις στην Αριστοτέλεια φιλοσοφία) και αυτές οι προτάσεις είναι τελείως αντικειμενικές καθώς δεν αναφέρονται σε κάποιον παρατηρητή. Περιέχει όμως και προτάσεις για τη γνώση του συστήματος, η οποία είναι βεβαίως υποκειμενική, καθώς μπορεί να διαφέρει σε διαφορετικούς παρατηρητές. Σε ιδανικές περιπτώσεις το υποκειμενικό στοιχείο μπορεί να είναι αμελητέο σε σχέση με το αντικειμενικό...»

B. Χάιζενμπεργκ [44]

«Πρέπει να σκεφτούμε το όλο κύμα σαν να περιγράφει ένα και μοναδικό σωματίο ... Οι κυματοσυναρτήσεις είναι πολύ διαφορετικές από τα κύματα της κλασικής φυσικής ως προς το εξής: τα διαφορετικά μέρη του κύματος δεν μπορούν να θεωρηθούν ως τοπικές διαταραχές...Οι κυματοσυναρτήσεις έχουν έναν έντονα μη-τοπικό χαρακτήρα. Υπό αυτήν την έννοια είναι ολιστικές οντότητες.»

P. Πένροουζ [99]

«Μου είναι ξεκάθαρο ότι η στατιστική ερμηνεία του Μπορν για την κβαντική θεωρία είναι η μόνη δυνατή. Η κυματοσυνάρτηση δεν περιγράφει μία κατάσταση ενός μεμονωμένου συστήματος. Αναφέρεται σε πολλά συστήματα, σε ένα στατιστικό σύνολο συστημάτων όπως αυτά της στατιστικής μηχανικής.»

A. Αϊνστάιν [100]

«Το ερώτημα αν τα κύματα είναι πραγματικά, ή απλά μία συνάρτηση για τη βολική περιγραφή και πρόβλεψη φαινομένων είναι θέμα προτίμησης. Προσωπικά προτιμώ να θεωρώ ένα κύμα πιθανοτήτων, ακόμα και σε έναν 3N-διάστατο χώρο ως πραγματική οντότητα και σίγουρα ως κάτι περισσότερο από ένα απλό εργαλείο για υπολογισμούς... Γενικά πώς θα μπορούσαμε να βασιζόμαστε σε πιθανοτικές προβλέψεις αν

δεν αναφερόμαστε σε κάτι πραγματικό και αντικειμενικό;»
M. Μπορν [101]

«Η κβαντική κατάσταση δεν αποτελεί αντικειμενική ιδιότητα ενός μεμονωμένου συστήματος, αλλά κωδικοποίηση πληροφορίας, που προέρχεται από τη γνώση για το πώς προετοιμάστηκε το σύστημα και η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μελλοντικές προβλέψεις.»

Τζ. Μπ Χάρτλ [102]

«...για τις κβαντικές καταστάσεις μπορεί να δοθεί ένας ξεκάθαρος εργαλειακός ορισμός, βασισμένος στην έννοια των πειραμάτων....Αν κανείς επαναλάβει αυτά τα πειράματα πολλές φορές, ύστερα από την ίδια προετοιμασία, βρίσκουμε ότι η στατιστική κατανομή των αποτελεσμάτων κάθε πειράματος τείνει σε ένα όριο. Κάθε ενδεχόμενο έχει μία σαφή πιθανότητα. Οπότε μπορούμε να ορίσουμε μία κατάσταση ως εξής: η κατάσταση ορίζεται από τις πιθανότητες των διαφόρων αποτελεσμάτων σε κάθε πείραμα που μπορεί να διανοηθεί κανείς.»

A. Πέρες [58]

7.3.3 Διάκριση επαλληλίας και μίξης

Η επαλληλία και η μίξη είναι δύο διαφορετικές διαδικασίες κατά τις οποίες δύο διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ μπορούν να συνδυαστούν ώστε να ορίσουν μία κβαντική κατάσταση, οι οποίες συχνά συγχέονται.

Έστω ότι έχουμε δύο διανύσματα $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$ σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Η *επαλληλία* αυτών των διανυσμάτων ορίζεται από την πράξη της πρόσθεσης στον \mathcal{H} , όπως για παράδειγμα στο ορισμό του διανύσματος $|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi\rangle + |\phi\rangle)$. Η αντίστοιχη μήτρα πυκνότητας είναι καθαρή:

$$\hat{\rho}_1 = |\chi\rangle\langle\chi|. \quad (7.40)$$

Η *μίξη* των $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$ ορίζεται από την πρόσθεση των αντίστοιχων μητρών πυκνότητας, όπως για παράδειγμα

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}(|\psi\rangle\langle\psi| + |\phi\rangle\langle\phi|). \quad (7.41)$$

Η επαλληλία και η μίξη είναι διαφορετικές τόσο μαθηματικά όσο και φυσικά. Οδηγούν σε διαφορετικές πιθανότητες ακόμα κι αν γίνονται με ίδιο στατιστικό βάρος. Για παράδειγμα, για μετρήσεις της θέσης \hat{x} , η μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_1$ παραπάνω δίνει πυκνότητα πιθανότητας

$$p_1(x) = \langle x|\hat{\rho}_1|x\rangle = \frac{1}{2}|\langle x|\psi\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle x|\phi\rangle|^2 + \text{Re}(\langle\psi|x\rangle\langle x|\phi\rangle), \quad (7.42)$$

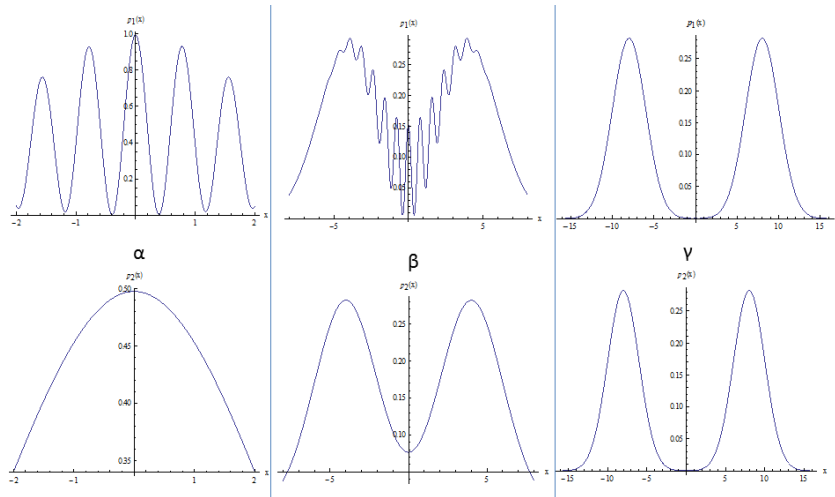
ενώ η μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_2$ δίνει την πυκνότητα πιθανότητας

$$p_2(x) = \langle x|\hat{\rho}_2|x\rangle = \frac{1}{2}|\langle x|\psi\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle x|\phi\rangle|^2 \quad (7.43)$$

Οι δύο πυκνότητες πιθανότητας διαφέρουν ως προς τον τελευταίο όρο της Εξ. (7.42), τον όρο *συμβολής*. Η λέξη "συμβολή" χρησιμοποιείται επειδή αυτός ο όρος είναι αντίστοιχος αυτού που περιγράφει τη συμβολή στο πείραμα των δύο οπών. Μια σύγκριση των Εξ. (7.42) και (7.43) δίνεται στο Σχ. 7.2.

7.3.4 Διαφορά κλασικής και κβαντικής μίξης

Στο Κεφ. 6.2.1, είδαμε ότι η μίξη είναι μια αντιστρεπτή διαδικασία στην κλασική θεωρία πιθανοτήτων. Αν εμείς αναμείξουμε καθαρά διανύσματα πιθανοτήτων \vec{e}_i για να σχηματίσουμε ένα διάνυσμα πιθανοτήτων \vec{w} , τότε η ανάλυση του \vec{w} μας δίνει με μοναδικό τρόπο αρχικά διανύσματα που



Σχήμα 7.2: Θεωρούμε τις Γκαουσιανές κυματοσυναρτήσεις $\psi(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp[-(x-L/2)/(4\sigma^2)+ipx]$ και $\phi(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp[-(x+L/2)/(4\sigma^2)]$ που αποτελούν διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$. Οι δύο συναρτήσεις έχουν το ίδιο εύρος σ και τα κέντρα τους απέχουν απόσταση L . Η $\psi(x)$ έχει περιοδικότητα με αντίστοιχο κυματάριθμο p . Αποδίδονται οι πυκνότητες πιθανότητες $p_1(x)$ και $p_2(x)$ ως προς τη θέση, που αντιστοιχούν σε επαλληλία και μίξη αντίστοιχα, βάσει των Εξ. (7.42) και (7.43). (α) $L/\sigma = 0,5$, (β) $L/\sigma = 2$, και (γ) $L/\sigma = 4$. Οι δυο πυκνότητες πιθανότητας ταυτίζονται όταν μεγαλώνει ο λόγος L/σ , οπότε οι όροι συμβολής στην Εξ. (7.42) γίνονται αμελητέοι.

χρησιμοποιήθηκαν μαζί με τις αντίστοιχες αναλογίες. Γι' αυτό το λόγο θεωρούμε τα καθαρά διανύσματα πιθανοτήτων ως πιο θεμελιώδη, και συχνά τα ταυτίζουμε με μικροκαταστάσεις ενός φυσικού συστήματος.

Στην κβαντική θεωρία όμως, η μίξη δεν είναι μία αντιστρεπτή διαδικασία. Υπάρχουν άπειροι τρόποι να εκφράσουμε μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ ως μίξη καθαρών καταστάσεων $\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, εφόσον δε θέτουμε κάποιο περιορισμό στα διανύσματα $|\psi_i\rangle$. Είναι προφανές ότι σε ένα κιούμπιτ υπάρχουν άπειροι τρόποι να γράψουμε ένα μη μοναδιαίο διάνυσμα Μπλοχ ως κυρτό συνδυασμό δυο μοναδιαίων διανυσμάτων. Αυτό σημαίνει ότι αν η $\hat{\rho}$ δημιουργήθηκε από μίξη στατιστικών συνόλων με διαφορετικές καταστάσεις, δεν υπάρχει διαδικασία ανάλυσης να πάρουμε πίσω τα στατιστικά σύνολα με τα οποία ξεκινήσαμε.

Θα μπορούσε κανείς να απαιτήσει τα διανύσματα $|\psi_i\rangle$ της ανάλυσης να ορίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο. Αλλά και πάλι, αν μια μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ έχει έστω μία ιδιοτιμή με εκφυλισμό δύο, δεν μπορούμε να βρούμε δύο μοναδικά ορθογώνια ιδιοδιανύσματα που να τις αντιστοιχούν: υπάρχουν άπειρα δυνατά τέτοια ζεύγη στον αντίστοιχο ιδιόχωρο.

Μπορούμε να δούμε ένα απλό παράδειγμα στην περίπτωση ενός κιούμπιτ. Έστω ότι έχουμε μία συσκευή που παράγει ένα μίγμα των καταστάσεων $|0\rangle$ και $|1\rangle$ με βάρος ίσο με $\frac{1}{2}$ και για τις δύο. Η αντίστοιχη μήτρα πυκνότητας είναι αυτή της μέγιστης άγνοιας, $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{I}$, αφού λόγω της ανάλυσης της μονάδας $|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \hat{I}$. Αλλά η ανάλυση της μονάδας ισχύει για οποιαδήποτε βάση στο χώρο Χίλμπερτ (για παράδειγμα, αυτή που αποτελείται από ιδιοδιανύσματα του $\hat{\sigma}_1$), οπότε η $\hat{\rho}$ μπορεί να αναλυθεί σε οποιοδήποτε ορθογώνιο ζεύγος διανυσμάτων. Δεν μπορούμε να πάρουμε με μοναδικό τρόπο τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ από τα οποία συνετέθη.

Για τους παραπάνω λόγους δεν μπορούμε να πούμε ότι οι καθαρές καταστάσεις είναι κατά κάποιον τρόπο πιο θεμελιώδεις από τις μικτές στην κβαντική θεωρία. Σε αντίθεση με την κλασική θεωρία, δεν μπορούμε να πούμε ότι μια μικτή μήτρα πυκνότητας περιγράφει την άγνοια μας για το ποια καθαρή κατάσταση χαρακτηρίζει ένα σύστημα.

Ένθετο 7.3. Εντροπίες και βαθμός μίξης καταστάσεων

Εντροπία Σάνον

Το κυριότερο μέτρο της τυχαιότητας μίας κλασικής κατανομής πιθανοτήτων είναι η *εντροπία του Σάνον* (Claude Shannon). Ιστορικά, η εντροπία Σάνον εμφανίστηκε στη θεωρία πληροφορίας και ποσοτικοποιούσε πόση πληροφορία χάνεται από ένα σήμα, επειδή λόγω στατιστικών διακυμάνσεων μπορεί να μη φτάσει στο δέκτη ακριβώς όπως στάλθηκε από τον πομπό [103]. Καλείται εντροπία, γιατί μαθηματικά μοιάζει με την έκφραση της εντροπίας που εισήγαγε ο Γκιμπς στη στατιστική μηχανική.

Ορισμός 7.5 Εντροπία Σάνον. Έστω Γ ένας δειγματικός χώρος με N στοιχεία και $\vec{w} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ μία κατανομή πιθανοτήτων στο Γ . Η εντροπία Σάνον της κατανομής ορίζεται ως

$$I[\vec{w}] = - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i, \quad (7.44)$$

και είναι πάντα μη-αρνητική ποσότητα.

Επιλέγουμε τη συνάρτηση $f(x) = -x \log x$ στον ορισμό της εντροπίας επειδή είναι κοίλη ($f''(x) < 0$), οπότε ικανοποιεί τη σχέση ορισμού των κοίλων συναρτήσεων

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \geq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2), \quad (7.45)$$

όπου $0 \leq \lambda \leq 1$.

Η εντροπία Σάνον $I[\vec{w}]$ έχει τις ακόλουθες ιδιότητες.

1. Η ελάχιστη τιμή της είναι 0 επιτυγχάνεται για τις καθαρές κατανομές πιθανοτήτων \vec{e}_i της Εξ. (7.15).
Απόδειξη. Άμεση, καθώς τα διανύσματα \vec{e}_i έχουν συνιστώσες 0 και 1, και $p \log p = 0$, για $p = 0$ και για $p = 1$.
2. Η μέγιστη τιμή της $I[\vec{w}]$ είναι $\log N$ και επιτυγχάνεται για την κατανομή πλήρους άγνοιας, $p_i = N^{-1}$, για κάθε $i = 1, \dots, N$.
Απόδειξη. Βρίσκουμε το μέγιστο της $I[\vec{w}]$ ως προς τα p_i υπό τη συνθήκη $\sum_{i=1}^N p_i = 1$ χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πολλαπλασιαστών Λαγκράνζ. Απαιτούμε $\frac{\partial}{\partial p_i} [I + c(\sum_{i=1}^N p_i - 1)] = 0$, όπου c ο πολλαπλασιαστής Λαγκράνζ. Βρίσκουμε ότι $-1 - p_i + c = 0$, δηλαδή όλα τα p_i είναι μεταξύ τους ίσα, οπότε από την κανονικοποίηση προκύπτει ότι $p_i = N^{-1}$.
3. Είναι *κοίλη συνάρτηση*: Έστω κατανομές πιθανότητας \vec{w}_r , όπου $r = 1, 2, \dots, k$ και αριθμοί $0 \leq \lambda_r \leq 1$ με $\sum_{r=1}^k \lambda_r = 1$. Τότε,

$$I[\sum_{r=1}^k \lambda_r \vec{w}_r] \geq \sum_{r=1}^k \lambda_r I[\vec{w}_r]. \quad (7.46)$$

Απόδειξη. Για $k = 2$, η σχέση (7.46) γράφεται $I(\lambda \vec{w}_1 + (1 - \lambda) \vec{w}_2) \geq \lambda I(\vec{w}_1) + (1 - \lambda) I(\vec{w}_2)$, η οποία προκύπτει άμεσα από τη σχέση (7.45). Με επαγωγή αποδεικνύεται για οποιονδήποτε αριθμό όρων k .

Η σχέση (7.46) σημαίνει ότι η εντροπία Σάνον μεγαλώνει ως αποτέλεσμα της μίξης. Πάντα χάνουμε πληροφορία όταν δύο στατιστικά σύνολα αναμιγνύονται.

Εφαρμογή σε κβαντικές πιθανότητες

Έστω ότι έχουμε προετοιμάσει ένα κβαντικό σύστημα σε μία κατάσταση $\hat{\rho}$ και μετράμε μία φυσική ποσότητα που αντιστοιχεί σε έναν αυτοσυζυγή τελεστή με διακριτό φάσμα, $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$. Η πιθανότητα

ότι η μέτρηση θα δώσει τιμή a_n είναι ίση με $p_n = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n)$. Ορίζουμε την εντροπία Σάνον αυτής της μέτρησης ως

$$I(\hat{\rho}, \hat{A}) = - \sum_n p_n \log p_n. \quad (7.47)$$

Εξετάζουμε την ειδική περίπτωση ενός κιούμπιτ, για μια μήτρα πυκνότητας που αντιστοιχεί στο διάνυσμα \mathbf{r} της σφαίρας του Μπλοχ και για έναν τελεστή $\hat{A} = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, όπου \mathbf{m} μοναδιαίο διάνυσμα. Οι φασματικοί προβολείς \hat{P}_{\pm} του \hat{A} δίνονται από τη σχέση (6.18). Οπότε οι πιθανότητες p_{\pm} που αντιστοιχούν στη μέτρηση των ιδιοτιμών ± 1 είναι $p_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \mathbf{r} \cdot \mathbf{m})$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (7.47) παίρνουμε

$$I(r, x) = \log 2 + \frac{r}{2} x \log \left[\frac{1 - rx}{1 + rx} \right] - \frac{1}{2} \log [1 - r^2 x^2], \quad (7.48)$$

όπου γράψαμε $\mathbf{r} \cdot \mathbf{m} = rx$, όπου $r = |\mathbf{r}|$ και $|x| \leq 1$.

Για σταθερό r , η εντροπία Σάνον έχει ένα τετριμμένο μέγιστο για $x = 0$, οπότε $= \log 2$. Για να βρούμε το ελάχιστο παρατηρούμε ότι $\partial I / \partial x < 0$ εφόσον $x > 0$, οπότε το άκρο του διαστήματος ορισμού της $x = 1$ είναι και το σημείο ελάχιστης τιμής της συνάρτησης. Δεδομένου ότι $I(r, x) = I(r, -x)$, το ίδιο ελάχιστο υπάρχει για $x = -1$, και είναι

$$I_{\min}(r) = -w_- \log w_- - w_+ \log w_+, \quad (7.49)$$

όπου $w_{\pm} = 1 \pm r$ οι ιδιοτιμές της μήτρας πυκνότητας $\hat{\rho}$. Το ελάχιστο αυτό αντιστοιχεί σε τελεστή \hat{A} που έχει τις ίδιες ιδιοσυναρτήσεις με τη μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$, καθώς τα διανύσματα \mathbf{r} και \mathbf{m} είναι παράλληλα.

Εντροπία φον Νόιμαν

Το παραπάνω αποτέλεσμα γενικεύεται σε οποιοδήποτε σύστημα. Το ελάχιστο της εντροπίας Σάνον (7.47) ως προς όλους τους δυνατούς αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} εξαρτάται μόνο από τη μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Αυτή η ελάχιστη τιμή γράφεται $S(\hat{\rho})$ και καλείται *εντροπία φον Νόιμαν* της κατάστασης $\hat{\rho}$. Για μια μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho} = \sum_n w_n |n\rangle \langle n|$,

$$S[\hat{\rho}] = - \sum_n w_n \log w_n, \quad (7.50)$$

όπου υπονοείται ότι αν μία ιδιοτιμή έχει εκφυλισμό D_n αθροίζεται D_n φορές.

Η Εξ. (7.50) γράφεται ισοδύναμα ως

$$S[\hat{\rho}] = -\text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}). \quad (7.51)$$

Καθώς ένας μετασχηματισμός της μορφής $\hat{\rho} \rightarrow \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$, για μοναδιαίο \hat{U} δεν επηρεάζει τις ιδιοτιμές της $\hat{\rho}$, $S[\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger] = S[\hat{\rho}]$.

Η εντροπία φον Νόιμαν ικανοποιεί επίσης τις ακόλουθες ιδιότητες.

1. Αν η κατάσταση $\hat{\rho}$ είναι καθαρή, τότε $S[\hat{\rho}] = 0$.
2. Για κάθε μοναδιαίο τελεστή \hat{U} , $S[\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger] = S[\hat{\rho}]$.
3. Στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^N , η μέγιστη τιμή της εντροπίας von Neumann αντιστοιχεί στην κατάσταση πλήρους άγνοιας $\hat{\rho} = N^{-1} \hat{I}$. Η μέγιστη τιμή είναι ίση με $\log N$.
4. Η εντροπία φον Νόιμαν είναι κοίλη συνάρτηση: Έστω μήτρες πυκνότητας $\hat{\rho}_r$, όπου $r = 1, 2, \dots, k$ και αριθμοί $0 \leq \lambda_r \leq 1$ με $\sum_{r=1}^k \lambda_r = 1$. Ισχύει ότι

$$S\left[\sum_{r=1}^k \lambda_r \hat{\rho}_r\right] \geq \sum_{r=1}^k \lambda_r S[\hat{\rho}_r], \quad (7.52)$$

7.4 Σχέσεις αβεβαιότητας

Οι κβαντικές καταστάσεις ενσωματώνουν στον ορισμό τους την αρχή της αβεβαιότητας, αν και με κάπως διαφορετική φυσική ερμηνεία από την αρχική έκφραση του Χάιζενμπεργκ.

Θεώρημα 7.6 Ανισότητα Κέναρντ-Ρόμπερτσον [104, 105]. Έστω \hat{A} και \hat{B} αυτοσυζυγείς τελεστές με τυπικές αποκλίσεις ΔA και ΔB σε μία κατάσταση $\hat{\rho}$. Τότε

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} \left| \text{Tr} \left(\hat{\rho} [\hat{A}, \hat{B}] \right) \right| \quad (7.53)$$

Απόδειξη. Θεωρούμε χωρίς απώλεια γενικότητας ότι $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{B} \rangle = 0$. Αν δεν ισχύει, χρησιμοποιούμε τους τελεστές $\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ και $\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ και η απόδειξη παραμένει ίδια. Οπότε έχουμε $(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}^2)$ και ομοίως για τον τελεστή \hat{B} .

Παρατηρούμε ότι $\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}^2) = \text{Tr}[\sqrt{\hat{\rho}} \hat{A} (\sqrt{\hat{\rho}} \hat{A})^\dagger]$, οπότε χρησιμοποιώντας την ανισότητα (5.66) για τους τελεστές $\sqrt{\hat{\rho}} \hat{A}$ και $\sqrt{\hat{\rho}} \hat{B}$ παίρνουμε

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}^2) \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{B}^2) \geq \left| \text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}} \hat{A} (\sqrt{\hat{\rho}} \hat{B})^\dagger) \right|^2 = \left| \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A} \hat{B}) \right|^2. \quad (7.54)$$

Στη συνέχεια γράφουμε

$$2\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A} \hat{B}) = \text{Tr}(\hat{\rho} (\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A})) + \text{Tr}(\hat{\rho} [\hat{A}, \hat{B}]). \quad (7.55)$$

Ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος της Εξ. (7.55) είναι πραγματικός και ο δεύτερος φανταστικός. Οπότε,

$$\left| \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A} \hat{B}) \right|^2 = C_{AB}^2 + \frac{1}{4} \left| \text{Tr}(\hat{\rho} [\hat{A}, \hat{B}]) \right|^2, \quad (7.56)$$

όπου C_{AB} είναι ο συσχετισμός των μεγεθών \hat{A} και \hat{B} .

Η Εξ. (7.54) γίνεται

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 - C_{AB}^2 \geq \frac{1}{4} \left| \text{Tr}(\hat{\rho} [\hat{A}, \hat{B}]) \right|^2, \quad (7.57)$$

απ' όπου παίρνουμε την (7.53).

Στην ειδική περίπτωση των τελεστών θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} , η Εξ. (7.53) δίνει

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}. \quad (7.58)$$

Η ισότητα στη σχέση (7.58) ικανοποιείται για τις Γκαουσιανές κυματοσυναρτήσεις (7.10).

Η σχέση (7.58) μοιάζει με τη σχέση αβεβαιότητας (3.54) του Χάιζενμπεργκ. Όντως οι Κέναρντ και Ρόμπερτσον απέδειξαν τη σχέση (7.58) προσπαθώντας να βρουν μια πιο μαθηματική διατύπωση της αρχής της αβεβαιότητας του Χάιζενμπεργκ. Ωστόσο η σημασία των Δx και Δp είναι διαφορετική στις δύο σχέσεις. Στη σχέση (3.54) τα Δx και Δp είναι σφάλματα σε διάταξη που μετρά ταυτόχρονα θέση και ορμή και αφορούν ακόμα και ένα μεμονωμένο σωματίο. Στη σχέση (7.58), τα Δx και Δp είναι τυπικές αποκλίσεις των μετρήσεων από δύο ξεχωριστά πειράματα, ένα που μετρά τη θέση και ένα που μετρά την ορμή. Ως τυπικές αποκλίσεις προσδιορίζονται στο επίπεδο του στατιστικού συνόλου των μετρήσεων και όχι σε μεμονωμένο σωματίο.

Η Εξ. (7.57) μας προσφέρει μια πιο ακριβή σχέση αβεβαιότητας που λαμβάνει υπόψη το συσχετισμό θέσης και ορμής. Σημαίνει ότι η γενικευμένη αβεβαιότητα $\mathcal{A}^2 := (\Delta x)^2 (\Delta p)^2 - C_{xp}^2$ ικανοποιεί

$$\mathcal{A} \geq \frac{1}{2}. \quad (7.59)$$

Η Εξ. (7.59) γράφεται με έναν τρόπο, που παρότι πολύπλοκος για ένα σωματίο, γενικεύεται ώστε να μπορεί να δώσει τη σχέση αβεβαιότητας σε συστήματα πολλών σωματιδίων. Ορίζουμε τον πίνακα συσχετισμού

$$V := \begin{pmatrix} C_{xx} & C_{xp} \\ C_{cp} & C_{pp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\Delta x)^2 & C_{xp} \\ C_{xp} & (\Delta p)^2 \end{pmatrix}, \quad (7.60)$$

και τον πίνακα

$$\Omega = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} \langle [\hat{x}, \hat{x}] \rangle & \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle \\ \langle [\hat{p}, \hat{x}] \rangle & \langle [\hat{p}, \hat{p}] \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.61)$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας $V + \frac{i}{2}\Omega$ έχει θετικό ίχνος, και ότι η Εξ. (7.59) σημαίνει ότι $\det(V + \frac{i}{2}\Omega) \geq 0$. Άρα το άθροισμα και το γινόμενο των δύο ιδιοτιμών του $V + \frac{i}{2}\Omega$ είναι μη αρνητικά, άρα οι ιδιοτιμές είναι μη αρνητικές, άρα ο πίνακας $V + \frac{i}{2}\Omega$ είναι θετικός. Το αντίστροφο επίσης ισχύει με προφανή τρόπο. Άρα η σχέση (7.59) είναι ισοδύναμη με την ανισότητα πινάκων

$$V \geq -\frac{i}{2}\Omega. \quad (7.62)$$

Παράδειγμα 7.4. Για την Γκαουσιανή μήτρα πυκνότητας (7.28), η Εξ. (7.37) δίνει

$$(\Delta x)(\Delta p) = \frac{1}{2(\kappa - c)} \sqrt{\kappa^2 + \lambda^2 - c^2}, \quad (7.63)$$

η οποία παίρνει την ελάχιστη τιμή για $\lambda = c = 0$, που αντιστοιχεί σε σύμφωνες καταστάσεις. Η γενικευμένη αβεβαιότητα \mathcal{A} παίρνει τιμές

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\kappa + c}{\kappa - c}} = \frac{1}{2\gamma}, \quad (7.64)$$

όπου γ η καθαρότητα της κατάστασης, Εξ. (7.29). Η ελάχιστη τιμή του \mathcal{A} επιτυγχάνεται για καθαρές Γκαουσιανές καταστάσεις, όπου $c = 0$.

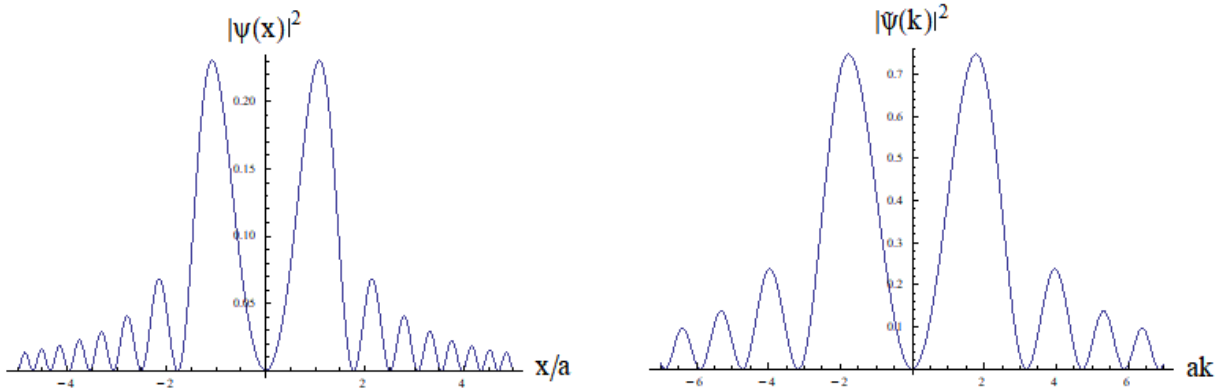
Οι τυπικές αποκλίσεις δεν είναι πάντα αξιόπιστα μέτρα αβεβαιότητας. Για να το διαπιστώσουμε, εξετάζουμε μία κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} \frac{\sin(\frac{x^2}{a^2})}{x}$. Εύκολα βρίσκουμε ότι για αυτήν την κατάσταση $\langle \hat{x} \rangle = 0$ και $\langle \hat{p} \rangle = 0$. Οπότε

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin^2 \left(\frac{x^2}{a^2} \right) = \infty \quad (7.65)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{2}{a^2} \cos \left(\frac{x^2}{a^2} \right) - \frac{\sin \left(\frac{x^2}{a^2} \right)}{x^2} \right)^2 = \infty. \quad (7.66)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση $|\psi(x)|^2$ και η πυκνότητα πιθανότητας για την ορμή $|\tilde{\psi}(p)|^2$ αναπαρίστανται στο Σχ. 7.2. Παρότι οι τυπικές αποκλίσεις απειρίζονται, οι κατανομές πιθανοτήτων είναι εντοπισμένες στο χώρο και μπορούμε να προσδιορίσουμε άλλα μέτρα αβεβαιότητας. Για παράδειγμα, μπορούμε να ορίσουμε ως δx το εύρος των τιμών του x που βρίσκονται κάτω από τις δύο μεγάλες κεντρικές κορυφές στο γράφημα της $|\psi(x)|^2$, $\delta x \simeq 3,6a$. Ομοίως μπορούμε να ορίσουμε ως δp το εύρος των τιμών του p που βρίσκονται κάτω από τις δύο μεγάλες κεντρικές κορυφές στο γράφημα της $|\tilde{\psi}(p)|^2$, $\delta p = 6,4/a$. Για αυτά τα μέτρα αβεβαιότητας, $\delta x \delta p \simeq 23$.

Ένα γενικό μέτρο αβεβαιότητας για τη θέση και την ορμή, που δουλεύει ακόμα και σε περιπτώσεις που οι τυπικές αποκλίσεις απειρίζονται περιγράφεται στο ένθετο 7.4.



Σχήμα 7.3: Γραφική παράσταση της πυκνότητας πιθανότητας για τη θέση $|\psi(x)|^2$ και της πυκνότητας πιθανότητας για την ορμή $|\tilde{\psi}(p)|^2$ για την $\psi(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} \frac{\sin(\frac{x^2}{a^2})}{x}$.

Ένθετο 7.4. Εντροπικές σχέσεις αβεβαιότητας

Οι σχέσεις αβεβαιότητας Κέναρντ-Ρόμπερτσον διατυπώνονται και συναρτήσεσι των εντροπιών Σάνον [111, 112, 113]. Αυτή η διατύπωση είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για να περιγράψει κβαντικές καταστάσεις στην οποία οι τυπικές αποκλίσεις δε δίνουν επαρκή πληροφορία για τη στατιστική των μετρήσεων στο φυσικό σύστημα.

Μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ ορίζει μία κατανομή πιθανοτήτων ως προς τη θέση $\langle x|\hat{\rho}|x \rangle$ και μία ως προς ορμή $\langle p|\hat{\rho}|p \rangle$. Κατ' αυτόν τον τρόπο ορίζονται και οι εντροπίες Σάνον ως προς τη θέση και την ορμή,

$$I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) = - \int dx \langle x|\hat{\rho}|x \rangle \log \langle x|\hat{\rho}|x \rangle \quad I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) = - \int dp \langle p|\hat{\rho}|p \rangle \log \langle p|\hat{\rho}|p \rangle. \quad (7.67)$$

Η εντροπική σχέση αβεβαιότητας είναι η ανισότητα

$$I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) + I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) \geq \log(\pi e), \quad (7.68)$$

η απόδειξη της οποίας [114] είναι ιδιαίτερα τεχνική και δε δίνεται εδώ. Οι εντροπίες Σάνον $I_{\hat{x}}$ και $I_{\hat{p}}$ μπορούν να γίνουν ξεχωριστά αρνητικές και μάλιστα οσοδήποτε μικρές. Ωστόσο το άθροισμά τους έχει ένα θετικό κάτω όριο, κάτι που σημαίνει ότι υπάρχει άνω όριο στην πληροφορία που μπορούμε να πάρουμε όταν συνδυάζουμε τις πιθανότητες ενός πειράματος μέτρησης της θέσης και ενός πειράματος μέτρησης της ορμής.

Για να βρούμε τη σχέση της εντροπίας Σάνον με την τυπική απόκλιση, αναζητούμε την πυκνότητα πιθανότητας $p(x)$ που ελαχιστοποιεί την εντροπία Σάνον για σταθερή τυπική απόκλιση σ_x . Χρησιμοποιούμε τη μέθοδο πολλαπλασιαστών Λαγκράνζ: αναζητούμε το ελάχιστο της ποσότητας $-\int dx p(x) \log p(x) + \lambda(\int dx x^2 p(x) - \sigma_x^2)$, όπου λ ο πολλαπλασιαστής Λαγκράνζ. Το ελάχιστο βρίσκεται διαφορίζοντας ως προς $p(x)$ (για ευκολία αντικαταστήστε το x με ένα διακριτό δείκτη και το άθροισμα με ολοκλήρωση). Βρίσκουμε $-\ln p(x) - 1 + \lambda x^2 = 0$, δηλαδή η $p(x)$ που ελαχιστοποιεί την εντροπία είναι μία Γκαουσιανή. Θέτοντας $p(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ παίρνουμε

$$I[p] \leq \frac{1}{2} \log(2\pi\sigma^2) + \int dx p(x) \frac{x^2}{2\sigma^2} = \frac{1}{2} \log(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \log(2\pi e\sigma^2). \quad (7.69)$$

Εφαρμόζοντας την ανισότητα (7.69) στις $I_{\hat{x}}(\hat{\rho})$ και $I_{\hat{p}}(\hat{\rho})$ βρίσκουμε

$$I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) \leq \frac{1}{2} \log [2\pi e \Delta x^2] \quad I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) \leq \frac{1}{2} \log [2\pi e \Delta p^2], \quad (7.70)$$

Προσθέτοντας κατά μέλη βρίσκουμε ότι

$$I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) + I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) \leq \log [2\pi e \Delta x \Delta p]. \quad (7.71)$$

Η σύγκριση των ανισοτήτων (7.68) και (7.71) επιβεβαιώνει τη σχέση Κέναρντ-Ρόμπερτσον. Και οι δυο ανισότητες γίνονται ισότητες για σύμφωνες καταστάσεις.

Βεβαίως η ανισότητα (7.68) εφαρμόζεται ακόμα και για καταστάσεις που η ανισότητα Κέναρντ-Ρόμπερτσον δε δουλεύει. Ως παράδειγμα εξετάζουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} \frac{\sin(\frac{x^2}{a^2})}{x}$, της οποίας οι τυπικές αποκλίσεις Δx και Δp απειρίζονται. Αριθμητικά βρίσκουμε $I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) \simeq \log a + 1, 57$ και $I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) \simeq -\log a + 5, 63$. Άρα $I_{\hat{x}}(\hat{\rho}) + I_{\hat{p}}(\hat{\rho}) \simeq 7, 2$, δηλαδή μία πεπερασμένη τιμή που επιτρέπει σύγκριση με το κάτω όριο $\log(\pi e) \simeq 2, 14$ της Εξ. (7.68).

7.5 Η συνάρτηση Βίγκνερ

Όπως εξήγησα στο κεφ. 1.5, οι πιθανότητες σε ένα κλασικό σύστημα σωματιδίων περιγράφονται από μία πυκνότητα πιθανότητας στον καταστατικό χώρο Γ του συστήματος. Στην κβαντική θεωρία οι πιθανότητες ορίζονται μέσω των μητρών πυκνότητας σε έναν κατάλληλο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Θα ήταν χρήσιμο να βρεθεί μία μετάφραση από τη μία γλώσσα στην άλλη, δηλαδή μία σύγκριση των κλασικών και των κβαντικών πιθανοτήτων που αφορούν τις θέσεις και τις ορμές των σωματιδίων.

Μία τέτοια μετάφραση δίνεται από τη *συνάρτηση Βίγκνερ* (Wigner). Η συνάρτηση Βίγκνερ είναι μία *κατανομή ψευδο-πιθανοτήτων* στον καταστατικό χώρο, η οποία αντιστοιχίζεται μοναδικά σε μία μήτρα πυκνότητας και αποδίδει σωστά τις κβαντικές πιθανότητες για μετρήσεις θέσεις και για μετρήσεις ορμής.

Η έκφραση "κατανομή ψευδοπιθανοτήτων" εκφράζει ότι η συνάρτηση Βίγκνερ, παρότι έχει πολλές ιδιότητες του ορισμού μίας κατανομής πιθανοτήτων, δεν τις έχει όλες: *συγκεκριμένα μπορεί να πάρει και αρνητικές τιμές*. Κάτι τέτοιο είναι αναμενόμενο, γιατί αν μπορούσαμε να περιγράψουμε ένα κβαντικό σύστημα με αυθεντικές κατανομές πιθανοτήτων στον καταστατικό χώρο, δε θα χρειαζόμασταν την κβαντομηχανική, αλλά θα χρησιμοποιούσαμε κάποια απλή γενίκευση της κλασικής στατιστικής μηχανικής.

Εξετάζουμε τη συνάρτηση Βίγκνερ για ένα σωματίο που κινείται στην ευθεία. Σ' αυτήν την περίπτωση ο χώρος Χίλμπερτ είναι ο $L^2(\mathbf{R})$ και ο κλασικός καταστατικός χώρος είναι ο $\Gamma = \mathbf{R}^2$ που περιγράφει τη θέση x και την ορμή p του σωματιδίου.

Για κάθε κατάσταση $\hat{\rho}$ ορίζουμε τη συνάρτηση Βίγκνερ $W : \Gamma \rightarrow \mathbf{R}$ ως

$$W(x, p) := \frac{1}{2\pi} \int dy \langle x - \frac{y}{2} | \hat{\rho} | x + \frac{y}{2} \rangle e^{ipy}. \quad (7.72)$$

Ο ορισμός (7.72) είναι ειδική περίπτωση του *μετασχηματισμού Βάουλ-Βίγκνερ*, ο οποίος αντιστοιχίζει κάθε τελεστή \hat{A} στο $L^2(\mathbf{R})$ σε μία συνάρτηση $F_{\hat{A}}(x, p)$ στο Γ , ως

$$F_{\hat{A}}(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int dy \langle x - \frac{y}{2} | \hat{A} | x + \frac{y}{2} \rangle e^{ipy}. \quad (7.73)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Βάουλ-Βίγκνερ δίνεται από τη σχέση

$$\langle x | \hat{A} | x' \rangle = \int dp F_{\hat{A}}(\frac{x+x'}{2}, p) e^{ip(x-x')}. \quad (7.74)$$

Η επιβεβαίωση είναι άμεση. Αντικαθιστούμε την Εξ. (7.74) στην Εξ. (7.73) και βλέπουμε ότι προκύπτει ταυτότητα.

Οι σημαντικότερες ιδιότητες της συνάρτησης Βίγκνερ είναι ότι (i) αποδίδει τις κβαντικές πιθανότητες με τρόπο που μοιάζει με κλασική θεωρία πιθανοτήτων και (ii) οι περιθωριακές κατανομές της για θέση και ορμή της συνάρτησης Βίγκνερ ταυτίζονται με αυτές που δίνει η κβαντική θεωρία.

Η ιδιότητα (i) είναι συνέπεια της ταυτότητας

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \int dx dp W(x, p) F_{\hat{A}}(x, p), \quad (7.75)$$

που ισχύει για κάθε τελεστή \hat{A} και μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Για να αποδείξουμε την Εξ. (7.75) ξεκινάμε από το δεξί μέλος της εξίσωσης και αντικαθιστούμε τις Εξ. (7.72) και (7.73). Βρίσκουμε ότι $\int dx dp W(x, p) F_{\hat{A}}(x, p) = \int dx dx' \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle \langle x' | \hat{A} | x \rangle = \int dx \langle x | \hat{\rho} \hat{A} | x \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$. Βεβαίως, το δεξί σκέλος της Εξ. (7.75) μόνο μοιάζει με την αντίστοιχη εξίσωση της κλασικής θεωρίας πιθανοτήτων, δεδομένου ότι η συνάρτηση Βίγκνερ δεν παίρνει μόνο θετικές τιμές.

Η ιδιότητα (ii) εκφράζεται από τις σχέσεις

$$\int dp W(x, p) = \langle x | \hat{\rho} | x \rangle \quad (7.76)$$

$$\int dx W(x, p) = \langle p | \hat{\rho} | p \rangle \quad (7.77)$$

Η απόδειξη της Εξ. (7.76) είναι άμεση, καθώς η ολοκλήρωση ως προς p στην Εξ. (7.72) δίνει μία συνάρτηση $\delta(y)$. Για την απόδειξη της Εξ. (7.77) υπολογίζουμε Γράφουμε τα στοιχεία πίνακα ως προς τη θέση

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \int dk dk' \langle x | k \rangle \langle k | \hat{\rho} | k' \rangle \langle k' | x' \rangle = \int \frac{dk dk'}{2\pi} e^{ikx - ik'x'} \langle k | \hat{\rho} | k' \rangle$$

συναρτήσεως των κεντρικών ορμών, τα οποία εδώ συμβολίζουμε ως $|k\rangle$. Βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} W(x, p) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk dk' \left(\int dy e^{iy(p - \frac{k+k'}{2})} \right) e^{i(k-k')x} \langle k | \hat{\rho} | k' \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk dk' \delta(p - \frac{k+k'}{2}) e^{i(k-k')x} \langle k | \hat{\rho} | k' \rangle. \end{aligned} \quad (7.78)$$

Θέτουμε $K = \frac{k+k'}{2}$ και $\xi = k' - k$, οπότε η Εξ. (7.78) γράφεται

$$\begin{aligned} W(x, p) &= \frac{1}{2\pi} \int dK d\xi \delta(p - K) e^{-i\xi x} \langle K - \xi/2 | \hat{\rho} | K + \xi/2 \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\xi \langle p - \xi/2 | \hat{\rho} | p + \xi/2 \rangle e^{-i\xi x}. \end{aligned} \quad (7.79)$$

Ολοκληρώνοντας ως προς x , και δεδομένου ότι $\int dx e^{-i\xi x} = 2\pi\delta(\xi)$, καταλήγουμε στην Εξ. (7.77).

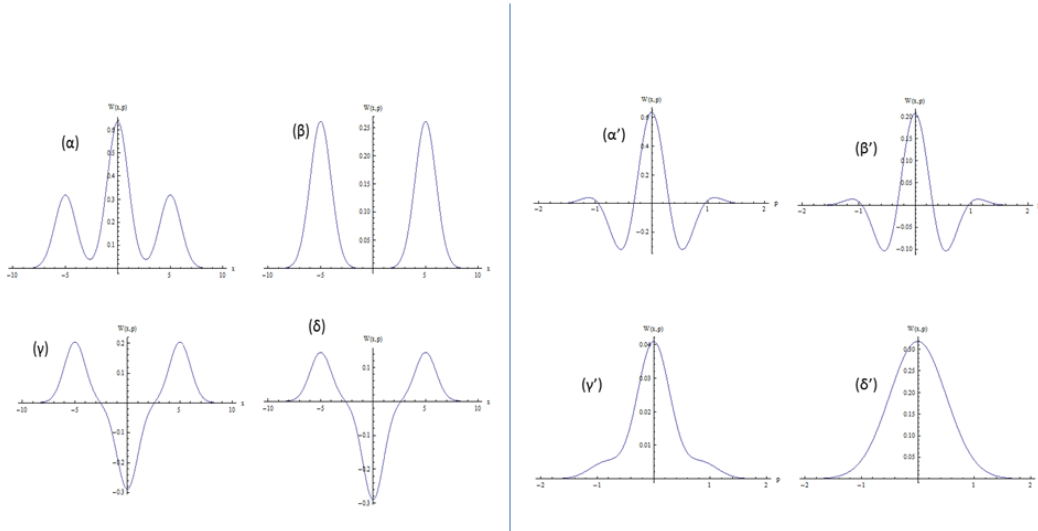
Παράδειγμα 7.5. Υπολογίζουμε τη συνάρτηση Βίγκνερ της Γκαουσιανής κυματοσυνάρτησης $\psi_{\bar{q}, \bar{p}}$ της Εξ. (7.10). Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα (1.38) βρίσκουμε

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi} e^{-\frac{(x-\bar{q})^2}{2\sigma^2} - 2\sigma^2(p-\bar{p})^2}. \quad (7.80)$$

Παρατηρούμε ότι η συνάρτηση Βίγκνερ (7.80) είναι θετική.

Υπολογίζουμε τώρα τη συνάρτηση Βίγκνερ για μια κυματοσυνάρτηση γάτας του Σρέντινγκερ

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\bar{q}, \bar{p}}(x) + \psi_{\bar{q}', \bar{p}'}(x)], \quad (7.81)$$



Σχήμα 7.4: Αριστερά, η εξάρτηση της συνάρτησης Βίγκνερ (7.82) από το x για διαφορετικές τιμές του p και για $L/\sigma = 10$. (α) $p = 0$, (β) $p = \pi/L$, (γ) $p = 1, 5\pi/L$ και (δ) $p = 2\pi/L$. Δεξιά, η εξάρτηση της συνάρτησης Βίγκνερ από το p για διαφορετικές τιμές του x : (α') $x = 0$, (β') $x = \sigma$, (γ') $x = 2, 8\sigma$ και (δ') $x = L/2$.

που αντιστοιχεί στην επαλληλία δύο Γκαουσιανών με διαφορετικές τιμές της μέσης θέσης και της μέσης ορμής. Για ευκολία θα θεωρήσουμε $\bar{p} = \bar{p}' = 0$ και $\bar{q} = L/2 = -\bar{q}'$, δηλαδή επαλληλία δύο κυματοπακέτων με ίδιο κυματάριθμο αλλά με κέντρα που απέχουν κατά L . Βρίσκουμε ότι

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi} e^{-2\sigma^2 p^2} \left[e^{-\frac{(x+\frac{L}{2})^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(x-\frac{L}{2})^2}{2\sigma^2}} + 2e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cos\left(\frac{pL}{2}\right) \right]. \quad (7.82)$$

Παρατηρούμε ότι αν $L \gg \sigma$ τότε για $\cos(pL/2)$ κοντά στο -1 η συνάρτηση Βίγκνερ παίρνει αρνητικές τιμές. Η γραφική παράσταση της συνάρτησης (7.82) δίνεται στο Σχ. 7.3. Η ταλαντωτική συμπεριφορά της συνάρτησης Βίγκνερ, η οποία παίρνει και αρνητικές τιμές είναι το σύνηθες για επαλληλίες καταστάσεων με διαφορετικά κέντρα θέσης ή ορμής.

Η συνάρτηση Βίγκνερ σχετίζεται άμεσα με τις σύμφωνες καταστάσεις $|z\rangle$ που ορίστηκαν στο Κεφ. 6.2.1. Οι Γκαουσιανές καταστάσεις (7.10) ταυτίζονται με τις σύμφωνες καταστάσεις για $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{q}/\sigma + i\sigma\bar{p})$.

Η Εξ. (7.75) για $\hat{A} = |z\rangle\langle z|$ δίνει

$$\langle z|\hat{\rho}|z\rangle = \int dx dp W_\rho(x, p) W_z(x, p) = \int \frac{dx dp}{\pi} e^{-\frac{(\bar{q}-x)^2}{2\sigma^2} - 2\sigma^2(\bar{p}-p)^2} W_\rho(x, p) \quad (7.83)$$

για οποιαδήποτε μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Δεδομένου ότι $\langle z|\hat{\rho}|z\rangle \geq 0$, βλέπουμε ότι η συνέλιξη της συνάρτησης Βίγκνερ με μία Γκαουσιανή δίνει πάντα μία θετική συνάρτηση. Η συνάρτηση $e^{-\frac{(\bar{q}-x)^2}{2\sigma^2} - 2\sigma^2(\bar{p}-p)^2}$ παίρνει τιμές κοντά στη μονάδα για μια περιοχή τιμών των \bar{q}, \bar{p} γύρω από το (x, p) με εμβαδόν της τάξης του 1, αλλιώς παίρνει πολύ μικρές τιμές. Υπάρχει λοιπόν ένας περιορισμός στο πόσο αρνητική μπορεί να γίνει η συνάρτηση Βίγκνερ, μία ολοκλήρωση της σε μια περιοχή εμβαδού της τάξης του 1 δίνει θετικό αριθμό.

7.6 Συνδυασμός αποτελεσμάτων από διαφορετικά πειράματα

7.6.1 Θεώρημα του Βίγκνερ

Οι μετρήσεις της θέσης και οι μετρήσεις της ορμής αντιστοιχούν σε διαφορετικά πειράματα. Η κατανομή πιθανοτήτων για τη θέση $\langle x|\hat{\rho}|x\rangle$ μετρείται με άλλη πειραματική διάταξη από την κατανομή πιθανοτήτων $\langle p|\hat{\rho}|p\rangle$ για την ορμή. Δεν είναι δεδομένο ότι θα υπάρχει μία κατανομή πιθανότητας από κοινού για θέση και ορμή, που να καλύπτει και τα δύο πειράματα. Είδαμε ότι η συνάρτηση Βίγκνερ απέτυχε να ορίσει από κοινού πιθανότητες αυτού του τύπου, γιατί δεν είναι θετική.

Θα μπορούσε όμως κάποιος άλλος ορισμός να επιτύχει; Η απάντηση είναι ένα emphaticό όχι. Εν γένει, δεν μπορούμε να συνδυάσουμε αποτελέσματα από διαφορετικά πειράματα στο επίπεδο των κατανομών πιθανοτήτων, εκτός αν οι αντίστοιχοι τελεστές μετατίθενται. Η πρόταση αυτή καλείται συνήθως *θεώρημα του Βίγκνερ*.

Η απόδειξη έχει ως εξής. Θεωρούμε δύο πειράματα που αντιστοιχούν σε μετρήσεις δύο διαφορετικών τελεστών, έστω $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και $\hat{B} = \sum_m b_m \hat{Q}_m$. Έστω ότι μπορούμε να συνδυάσουμε τα αποτελέσματά των δύο πειραμάτων, υπό την έννοια ότι υπάρχει μία κατανομή από κοινού πιθανοτήτων $p(a_n, b_m)$ για τα δύο παρατηρήσιμα μεγέθη για κάθε κατάσταση $\hat{\rho}$.

Εξ ορισμού οι περιθωριακές πιθανότητες για τα a_n και b_m ταυτίζονται με αυτές της κβαντικής θεωρίας,

$$\sum_n p(a_n, b_m) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{Q}_m) \quad \sum_m p(a_n, b_m) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_n) \quad (7.84)$$

Οι πιθανότητες $p(a_n, b_m)$ πρέπει να είναι γραμμικές συναρτήσεις του $\hat{\rho}$ προκειμένου να συμπεριφέρονται σωστά κάτω από τη μίξη στατιστικών συνόλων. Άρα γράφονται

$$p(a_n, b_m) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}_{nm}) \quad (7.85)$$

για κάποιους θετικούς τελεστές \hat{A}_{nm} .

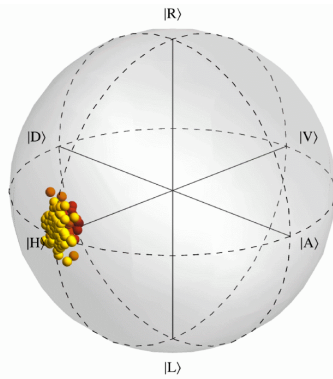
Εφόσον οι Εξ. (7.84) ισχύουν για κάθε $\hat{\rho}$, ισχύει ότι

$$\sum_n \hat{A}_{nm} = \hat{Q}_m, \quad \sum_m \hat{A}_{nm} = \hat{P}_n. \quad (7.86)$$

Θα αποδείξουμε ότι οι σχέσεις (7.86) δεν ικανοποιούνται. Αρκεί να το αποδείξουμε για ένα κιούμπι, γιατί ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{C}^2 είναι υπόχωρος οποιουδήποτε χώρου Χίλμπερτ υψηλότερης διάστασης.

Σε ένα κιούμπι, οι δείκτες n και m παίρνουν μόνο δύο τιμές, έστω 1 και 2. Οι σχέσεις (7.86) σημαίνουν ότι $\hat{A}_{11} + \hat{A}_{12} = \hat{P}_1$. Λόγω της θετικότητας των \hat{A}_{1m} καταλήγουμε ότι $\hat{A}_{1m} \leq \hat{P}_1$. Δεδομένου ότι ο \hat{P}_1 είναι μονοδιάστατος, η ανισότητα ικανοποιείται μόνο αν $\hat{A}_{1m} = 0$ ή αν $\hat{A}_{1m} = \hat{P}_1$. Και στις δύο περιπτώσεις, $[\hat{A}_{1m}, \hat{P}_1] = 0$. Ομοίως δείχνουμε ότι $[\hat{A}_{2m}, \hat{P}_2] = 0$. Αφού $\hat{P}_2 = \hat{I} - \hat{P}_1$, θα ισχύει και ότι $[\hat{A}_{2m}, \hat{P}_1] = 0$. Η Εξ. (7.86) δίνει $\hat{Q}_m = \hat{A}_{1m} + \hat{A}_{2m}$. Οπότε βρίσκουμε ότι $[\hat{Q}_m, \hat{P}_n] = 0$. Αφού μετατίθενται οι φασματικοί προβολείς, μετατίθενται και οι αντίστοιχοι αυτοσυζυγείς τελεστές. Καταλήξαμε ότι $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Άρα από κοινού πιθανότητα για τα \hat{A} και \hat{B} μπορεί (ενδεχομένως) να οριστεί μόνο αν οι δύο τελεστές μετατίθενται.

Στη γενική περίπτωση είναι αδύνατο να συνδυαστούν τα αποτελέσματα από δύο διαφορετικές πειραματικές διατάξεις κάτω από μία κοινή κατανομή πιθανοτήτων.



Σχήμα 7.5: Ο προσδιορισμός της κβαντικής κατάστασης στη σφαίρα του Μπλοχ για κιούμπιτ που αντιστοιχεί στην πόλωση φωτονίων [107]. Κάθε σφαιρίδιο αντιστοιχεί σε ανακατασκευή της κβαντικής κατάστασης σε ένα στατιστικό σύνολο 150 φωτονίων. Η διασπορά των σφαιριδίων καταδεικνύει τα σφάλματα που οφείλονται στο μικρό μέγεθος του στατιστικού συνόλου.

Όπως είχε πει ο Μπορ [106]

“Ενδείξεις που προκύπτουν από διαφορετικές πειραματικές συνθήκες δεν μπορούν να κατανοηθούν στα πλαίσια μίας και μοναδικής περιγραφής, αλλά πρέπει να θεωρηθούν σαν συμπληρωματικές, με την έννοια ότι μόνο η ολότητα των φαινομένων εξαντλεί την πιθανή πληροφορία για τα αντικείμενα.”

7.6.2 Κβαντική τομογραφία

Το γεγονός ότι δεν μπορούμε να συνδυάσουμε τα αποτελέσματα δύο διαφορετικών πειραμάτων σε μια από κοινού κατανομή πιθανοτήτων δε σημαίνει ότι δεν μπορούμε να τα συνδυάσουμε με άλλους τρόπους. Μπορούμε να κατασκευάσουμε πειραματικά την κβαντική κατάσταση που αντιστοιχεί σε μία συγκεκριμένη προετοιμασία ενός φυσικού συστήματος. Αυτή η διαδικασία καλείται *κβαντική τομογραφία* (σε αναλογία με τους τομογράφους στην ιατρική) ή *εκτίμηση κβαντικής κατάστασης*.

Το απλούστερο παράδειγμα κβαντικής τομογραφίας είναι ο προσδιορισμός της κατάστασης ενός κιούμπιτ. Όπως δείξαμε στο κεφ. 7.1, η κατάσταση ενός κιούμπιτ προσδιορίζεται πλήρως από ένα διάνυσμα $r \in \mathbf{R}^3$ που ικανοποιεί τη σχέση $|r| \leq 1$. Οι συνιστώσες r_i αυτού του διανύσματος είναι ίσες με τις αναμενόμενες τιμές των μητρών του Πάουλι $\hat{\sigma}_i$. Άρα για να προσδιορίσουμε την κβαντική κατάσταση αρκεί να βρούμε τις αναμενόμενες τιμές των $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ και $\hat{\sigma}_3$. Γι’ αυτό λέμε ότι το σύνολο των τριών μητρών του Πάουλι είναι *πληροφοριακά πλήρες*. Αντίθετα, η μέτρηση δύο μητρών του Πάουλι δεν αρκεί για να προσδιορίσει την κβαντική κατάσταση. Βέβαια υπάρχουν άλλες τριάδες μεγεθών ή και σύνολα με περισσότερα στοιχεία, που είναι επίσης πληροφοριακά πλήρη.

Η ανακατασκευή μία κβαντικής κατάστασης στο εργαστήριο βασίζεται σε αναμενόμενες τιμές που είναι γνωστές μόνο προσεγγιστικά. Λόγω σφαλμάτων, τα δεδομένα δεν προσδιορίζουν μοναδικά μία κατάσταση (δηλαδή ένα και μοναδικό διάνυσμα r για ένα κιούμπιτ) αλλά μία περιοχή στο χώρο των καταστάσεων—βλ. Σχ. 7.4. Η διαδικασία απαιτεί νέες μεθόδους στατιστικής ανάλυσης ειδικά σχεδιασμένες για κβαντικά συστήματα.

Για συστήματα που περιγράφονται από απειροδιάστατους χώρους Χίλμπερτ (π.χ. σωμάτια) η ανακατασκευή της κβαντικής κατάστασης είναι πιο δύσκολη. Η γενική ιδέα σ’ αυτήν την περίπτωση είναι να μετρηθούν οι κατανομές πιθανοτήτων για έναν σύνολο από διαφορετικά παρατηρήσιμα μεγέθη και από αυτές να ανακατασκευαστεί η κβαντική κατάσταση. Η κατάλληλη επιλογή του συνόλου των μετρούμενων μεγεθών προσφέρει αρκετή πληροφορία για να κατασκευαστεί η συνάρτηση Βίγκνερ ενός συστήματος και από αυτήν η κβαντική κατάσταση—βλ. Ένθετο 7.4.

Πολύ συχνά, ο τομογραφικός προσδιορισμός μίας κατάστασης καλείται “μέτρηση της κατάστα-

σης". Αυτή είναι μεν δόκιμη έκφραση σε σχέση με τη συνήθη χρήση της λέξης "μέτρηση", αλλά είναι πολύ διαφορετική από αυτό που καλούσαμε μέτρηση μέχρι στιγμής. Όταν λέμε ότι μετράμε ένα φυσικό μέγεθος, αυτό σημαίνει ότι παίρνουμε μία τιμή για κάθε επανάληψη του πειράματος, ή ισοδύναμα μία τιμή για κάθε μέλος ενός στατιστικού συνόλου. Αντίθετα όταν "μετράμε" μία κατάσταση δεν παίρνουμε ποτέ μία τιμή σε κάθε επανάληψη του πειράματος, γιατί η κατάσταση δεν είναι ένα φυσικό μέγεθος. Αυτό που κάνουμε είναι ότι από ένα σύνολο μετρήσεων προσδιορίζουμε το μαθηματικό αντικείμενο που ενσωματώνει όλην την πληροφορία για το πώς προετοιμάστηκε το σύστημα, τη μήτρα πυκνότητας.

Για να ξεχωρίζουμε τις έννοιες θα περιορίσουμε τη χρήση της λέξης "μέτρηση" αποκλειστικά και μόνο για τα φυσικά μεγέθη, ενώ για τις καταστάσεις θα μιλάμε για "ανακατασκευή" ή "τομογραφία".

Ένθετο 7.4. Ομόδυνη κβαντική τομογραφία

Σε πολλά φωτονικά συστήματα μπορούν να γίνουν μετρήσεις τελεστών \hat{A}_ϕ που αντιστοιχούν σε γραμμικούς συνδυασμούς του τελεστή θέσης \hat{x} και ορμής \hat{p} σωματιδίου,

$$\hat{A}_\phi = \hat{x} \cos \phi + \hat{p} \sin \phi, \quad (7.87)$$

για πολλές διαφορετικές τιμές της γωνίας ϕ . Για να είμαστε ακριβείς, το \hat{x} και το \hat{p} αντιστοιχούν στο πλάτος του αντίστοιχου ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, αλλά η μαθηματική περιγραφή είναι ίδια με αυτή ενός σωματιδίου.

Αναπαριστούμε τις γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις $|a, \phi\rangle$ του \hat{A}_ϕ , με συναρτήσεις $f_{a,\phi}(x)$. Η εξίσωση ιδιοτιμών του \hat{A}_ϕ είναι

$$-i \sin \phi \frac{df_{a,\phi}}{dx} + \cos \phi x f_{a,\phi} = a f_{a,\phi}. \quad (7.88)$$

Επιδέχεται λύσεις

$$f_{a,\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi |\sin \phi|}} e^{-\frac{i \cot \phi}{2} x^2 + i \frac{a}{\sin \phi} x}, \quad (7.89)$$

κανονικοποιημένες ως $\langle a, \phi | a', \phi \rangle = \int dx f_{a,\phi}^*(x) f_{a',\phi}(x) = \delta(a - a')$.

Για κάθε προετοιμαζόμενη κατάσταση $\hat{\rho}$ η συνάρτηση κατανομής για τις μετρήσεις του \hat{A}_ϕ είναι

$$p_\phi(a) = \langle a, \phi | \hat{\rho} | a, \phi \rangle = \int dx dx' f_{a,\phi}(x) \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle f_{a,\phi}(x') \quad (7.90)$$

Κάνοντας αλλαγή μεταβλητών σε $X = (x + x')/2$ και $y = x' - x$ βρίσκουμε

$$\begin{aligned} p_\phi(a) &= \frac{1}{2\pi |\sin \phi|} \int dX d\xi \langle X - \xi/2 | \hat{\rho} | X + \xi/2 \rangle e^{i(\frac{a}{\sin \phi} - X \cot \phi)y} \\ &= \frac{1}{|\sin \phi|} \int dX W(X, \frac{a}{\sin \phi} - X \cot \phi), \end{aligned} \quad (7.91)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (7.72).

Λύνουμε για τη συνάρτηση Βίγκνερ εισάγοντας τους μετασχηματισμούς Φουριέ

$$p_\phi(a) = \frac{1}{2\pi} \int dz \tilde{p}_\phi(z) e^{iaz}, \quad W(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int dudv e^{iux+ivp} \tilde{W}(u, v), \quad (7.92)$$

οπότε η Εξ. (7.91) δίνει

$$\tilde{W}(u, v) = \tilde{p}_{\tan^{-1}(v/u)} \left(\sqrt{u^2 + v^2} \right). \quad (7.93)$$

Καταλήγουμε ότι η μέτρηση των κατανομών $p_\phi(a)$ για πολλές διαφορετικές τιμές του ϕ επιτρέπει τον υπολογισμό της συνάρτησης Βίγκνερ στη βάση της σχέσης (7.93).

Η μέθοδος αυτή καλείται ομόδυνη κβαντική τομογραφία και προτάθηκε από τους Φόγκελ και Ρίσκεν το 1989 [109]. Λίγα χρόνια μετά έγινε η πρώτη χρήση της σε πειραματική ανακατασκευή της συνάρτησης Βίγκνερ [110].

Ερωτήσεις

1. Τί μέτρηση πρέπει να κάνει κανείς σε ένα στατιστικό σύνολο από κιούμπι για να ξεχωρίσει μεταξύ της καθαρής κατάστασης $|\psi\rangle = \cos\theta|0\rangle + \sin\theta|1\rangle$ και της μικτής $\hat{\rho} = \cos^2\theta|0\rangle\langle 0| + \sin^2\theta|1\rangle\langle 1|$;
2. Εξηγήστε σε τί διαφέρει η σχέση αβεβαιότητας των Κέναρντ-Ρόμπερτσον από την αρχική του Χάιζενμπεργκ.
3. Η σχέση αβεβαιότητας Κέναρντ-Ρόμπερτσον για θέση και ορμή είναι τετριμμένη για σωματίο σε κουτί και για σωματίο σε κύκλο. Γιατί;
4. Ορίστε μερικά μέτρα αβεβαιότητας που θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν στον ορισμό μιας σχέσης αβεβαιότητας αντί για την τυπική απόκλιση.
5. Συχνά λέγεται ότι με την κβαντική τομογραφία "κάνουμε μέτρηση" της κβαντικής κατάστασης. Εξηγήστε τι διαφορά έχει αυτή η "μέτρηση" από τις μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων που αντιστοιχούν σε αυτοσυζυγείς τελεστές.
6. Έστω μία πηγή που παράγει σωματία που περιγράφονται από μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Σε ένα πείραμα μετράμε τη θέση των σωματιδίων τη χρονική στιγμή t μετά την εκπομπή τους και από τις μετρήσεις κατασκευάζουμε την πυκνότητα πιθανότητας $w(x)$ για τη θέση. Σε ένα άλλο πείραμα μετράμε την ορμή των σωματιδίων τη χρονική στιγμή t μετά την εκπομπή τους και από τις μετρήσεις κατασκευάζουμε την πυκνότητα πιθανότητας $\bar{w}(p)$ για την ορμή. Έχουμε αρκετή πληροφορία για να κατασκευάσουμε την κβαντική κατάσταση τη χρονική στιγμή t ;

Ασκήσεις

1. Σύστημα προετοιμάζεται σε κατάσταση $\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 1 & 1 \\ -i & 1 & 2 \end{pmatrix}$ και πάνω του γίνεται μέτρηση που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, όπου $\epsilon > 0$. Ποια είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης και ποιες οι αντίστοιχες πιθανότητες;
2. Βρείτε τις τιμές των α και β για τις οποίες η μήτρα πυκνότητας

$$\hat{\rho} = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} \alpha & -i & \beta & i \\ i & 1 & 2i & -1 \\ \beta & -2i & 2\beta & 2i \\ -i & -1 & -2i & \alpha \end{pmatrix}$$

αντιστοιχεί σε καθαρή κατάσταση.

3. Έστω $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ ο τελεστής αριθμού κβάντων για έναν αρμονικό ταλαντωτή. Υπολογίστε την τυπική απόκλιση ΔN (α) για μία σύμφωνη κατάσταση $|z\rangle$ και (β) για ένα ιδιοδιάνυσμα του τελεστή $\hat{b} = \lambda \hat{a} + \mu \hat{a}^\dagger$ (Άσκηση 6.8).

4. Έχουμε μία πηγή μικροσκοπικών συστημάτων που περιγράφονται από το χώρο Χίλμπερτ C^3 (σωμάτια με σπιν 1). Σ' αυτά τα συστήματα γίνονται μετρήσεις που αντιστοιχούν στους τελεστές

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ύστερα από μια σειρά μετρήσεων βρίσκουμε ότι $\langle \hat{J}_1 \rangle = \langle \hat{J}_2 \rangle = 0$, ενώ $\langle \hat{J}_3 \rangle = a$. (α) Βρείτε όλες τις καταστάσεις που είναι συμβατές με την παραπάνω πληροφορία αν $a = 1$. (β) Ποιες από τις παραπάνω καταστάσεις είναι καθαρές; (γ) Επαναλάβετε τα παραπάνω ερωτήματα για $a = 0$.

5. Για κάθε μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ και αυτοσυζυγή τελεστή \hat{A} ορίζουμε τη γεννήτρια συνάρτηση $Z(x) := \text{Tr}(\hat{\rho} e^{ix\hat{A}})$.

(α') Δείξτε ότι $\langle \hat{A}^n \rangle = (-i)^n \frac{d^n}{dx^n} Z(x) \Big|_{x=0}$ και ότι $(\Delta A)^2 = -\frac{d^2}{dx^2} \log Z(x) \Big|_{x=0}$.

(β') Δείξτε ότι ο μετασχηματισμός Φουριέ της $Z(x)$, $p(a) = \int \frac{da}{2\pi} Z(x) e^{-ixa}$ αντιστοιχεί σε μία πυκνότητα πιθανότητας για την ποσότητα \hat{A} .

(γ') Υπολογίστε την $p(a)$ για τελεστή με διακριτό φάσμα $\hat{A} = \sum_i a_i \hat{P}_i$.

6. Έστω $\hat{\rho}_i$ μήτρες πυκνότητες με καθαρότητες γ_i και $\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i \hat{\rho}_i$ μία μίξη τους, όπου $0 \leq \lambda_i \leq 1$ και $\sum_i \lambda_i = 1$. Δείξτε ότι η καθαρότητα γ της $\hat{\rho}$ ικανοποιεί την ανισότητα $\gamma \leq \sum_i \lambda_i \gamma_i$. Πότε ισχύει η ισότητα;
7. Θεωρείστε την Γκαουσιανή κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp[-\frac{(1+ir)(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + ip_0x]$, όπου σ, r, x_0, p_0 σταθερές. (α) Δείξτε ότι $\langle \hat{x} \rangle = x_0$ και $\langle \hat{p} \rangle = p_0$. (β) Υπολογίστε τις τυπικές αποκλίσεις $(\Delta x)^2$, $(\Delta p)^2$ και τη σύζευξη C_{xp} . (γ) Για ποιες τιμές των παραμέτρων επιτυγχάνεται το κάτω όριο στην Εξ. (7.58); (δ) Υπολογίστε την ποσότητα $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 - C_{xp}^2$ και συγκρίνετε με το κάτω όριο της Εξ. (7.57).
8. Ελεύθερο σωματίο μάζας m περιγράφεται από την Γκαουσιανή κυματοσυνάρτηση της παραπάνω άσκησης. Υπολογίστε την τυπική απόκλιση της Χαμιλτονιανής \hat{H} και τη σύζευξη C_{xH} .
9. Υπολογίστε τις τυπικές αποκλίσεις $(\Delta x)^2$, $(\Delta p)^2$ και τη σύζευξη C_{xp} για τις ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ της Χαμιλτονιανής ενός αρμονικού ταλαντωτή. Συγκρίνετε τη γενικευμένη αβεβαιότητα \mathcal{A} με το κάτω όριο όπως δίνεται από την Εξ. (7.59).
10. (α) Βρείτε τη συνάρτηση Βίγκνερ για τις τρεις πρώτες ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής του αρμονικού ταλαντωτή. (β) Προσποιούμενοι ότι η συνάρτηση Βίγκνερ είναι κατανομή πιθανοτήτων, βρείτε τις αντίστοιχες κατανομές ενέργειας. Συγκρίνετε με την κβαντική κατανομή ενέργειας.
11. Έστω $\psi_0(x)$ η θεμελιώδης κατάσταση του τελεστή Σρέντινγκερ για δυναμικό δέλτα, Εξ. (6.90). (α) Υπολογίστε τις τυπικές αποκλίσεις Δx και Δp . (β) Βρείτε τη συνάρτηση Βίγκνερ.
12. Σωματίο στην ημιευθεία \mathbf{R}^+ προετοιμάζεται στην κατάσταση $\psi(x) = \lambda x e^{-\lambda x}$, για $\lambda > 0$. (α) Υπολογίστε την τυπική απόκλιση Δx . (β) Υπολογίστε την πυκνότητα πιθανότητας που αντιστοιχεί στις μετρήσεις του τελεστή $|\hat{p}|$. (γ) Υπολογίστε την τυπική απόκλιση $\Delta|p|$ και το γινόμενο $\Delta x \Delta|p|$. (δ) Υπολογίστε την κατανομή πιθανοτήτων για τις τιμές του τελεστή \hat{Q} της Ασκ. 6.17.
13. Σωματίο σε κουτί δυναμικού μήκους L προετοιμάζεται σε κατάσταση $\psi(x) = \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x)$. (α) Υπολογίστε τις πιθανότητες που αντιστοιχούν στις δυνατές τιμές του τελεστή $|\hat{p}|$. (β) Υπολογίστε τις τυπικές αποκλίσεις Δx και $\Delta|p|$ καθώς και το γινόμενο $\Delta x \Delta|p|$.
14. Σωματίο σε δακτύλιο περιμέτρου L προετοιμάζεται στην κατάσταση

$$\psi(x) = \begin{cases} Cx, & x \in [0, \frac{L}{2}] \\ C(L-x), & x \in [\frac{L}{2}, L] \end{cases}$$

(α) Υπολογίστε το συντελεστή κανονικοποίησης C . (β) Βρείτε την τυπική απόκλιση για τον τελεστή σπινιτόνου \hat{c} και για τον τελεστή ημιτόνου \hat{s} . (γ) Βρείτε την κατανομή πιθανοτήτων για τη στροφορμή \hat{l} .

15. Ορίζουμε την κατανομή Χουσίμι (Husimi) μίας κατάστασης $\hat{\rho}$ στο $L^2(\mathbf{R})$ ως $f_H(q, p) = \langle qp | \hat{\rho} | qp \rangle$ όπου $|qp\rangle$ μία σύμφωνη κατάσταση που αντιστοιχεί στο σημείο (q, p) του κλασικού καταστατικού χώρου για σωματίο στη μία διάσταση. (α) Δείξτε ότι η f_H ορίζει μία πυκνότητα πιθανότητας στον καταστατικό χώρο. (β) Υπολογίστε την τυπική απόκλιση θέσης και ορμής για την κατανομή Χουσίμι. (γ) Δείξτε ότι οι περιθωριακές κατανομές της Χουσίμι δεν αναπαράγουν τις προβλέψεις της κβαντικής θεωρίας για κατανομή πιθανοτήτων θέσης και ορμής.
16. Έστω δύο προβολικοί τελεστές \hat{P} και \hat{Q} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Ορίζουμε τον αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{C} = \frac{1}{2}(\hat{P}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{P})$. (α) Δείξτε ότι ο \hat{C} έχει πάντα μία αρνητική ιδιοτιμή εκτός αν $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$. (Αποδείξτε το αποτέλεσμα για κιούμπιτ και μετά επιχειρηματολογήστε γιατί γενικεύεται σε οποιονδήποτε χώρο Χίλμπερτ.) (β) Χρησιμοποιείστε αυτό το αποτέλεσμα για να αποδείξετε ότι για μία γενική κβαντική κατάσταση, ο συσχετισμός (7.34) δύο αυτοσυζυγών τελεστών $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και $\hat{B} = \sum_m b_m \hat{Q}_m$ δεν μπορεί να προέλθει από μία κλασική από κοινού κατανομή πιθανοτήτων $p(a_n, b_m)$, εκτός (ενδεχομένως) αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Βιβλιογραφία

- Για τη μαθηματική δομή του χώρου των κβαντικών καταστάσεων, βλ. το κλασικό άρθρο του Mielnik [115] και το βιβλίο των Beltrametti και Cassinelli [116].
- Για την εντροπία στην κβαντική μηχανική, βλ. το άρθρο επισκόπησης του Wehrl [118]. Για τη συνάρτηση Βίγκνερ, βλ. το άρθρο επισκόπησης του Balazs [117]. Για κβαντική τομογραφία, βλ. το άρθρο επισκόπησης των D' Ariano et al [119].
- Σε ότι αφορά το θεώρημα του Βίγκνερ, το συμπέρασμα του κεφ. 7.6.1 αποδίδεται στον Βίγκνερ αλλά όχι η παρούσα απόδειξη, η οποία προέρχεται από το βιβλίο του Davies [120].

Κεφάλαιο 8

Χρονική εξέλιξη

Αν με ρωτήσετε τί είναι τα ηλεκτρόνια και τα πρωτόνια, θα πρέπει να σας απαντήσω ότι αυτή δεν είναι μια χρήσιμη ερώτηση και ότι δεν έχει καν νόημα. Το σημαντικό για τα ηλεκτρόνια και τα πρωτόνια δεν είναι το τί είναι αλλά το πώς συμπεριφέρονται, πώς κινούνται. Υπάρχει μια καλή αναλογία με το σκάκι. Στο σκάκι έχουμε διάφορους πεσσούς, βασιλείς, άλογα, πιόνια κοκ. Αν ρωτήσετε τί είναι ένας πεσσός, θα απαντήσει κανείς ότι είναι ένα κομμάτι ξύλο, ή ένα κομμάτι ελεφαντόδοντο ή ίσως μόνο ένα σύμβολο γραμμένο στο χαρτί. Δεν κάνει διαφορά. Κάθε πεσσός έχει ένα χαρακτηριστικό τρόπο κίνησης και αυτό είναι το μόνο που έχει σημασία. Το όλο παιχνίδι του σκακιού προκύπτει από τον τρόπο που κινούνται οι διάφοροι πεσσοί.

Π. Ντιράκ [121]

8.1 Ο κανόνας χρονικής εξέλιξης

8.1.1 Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης

Είδαμε στο κεφάλαιο 3, ότι στη γέννηση της κβαντικής θεωρίας, υπήρχαν δύο διαφορετικές περιγραφές της χρονικής εξέλιξης.

Στην περιγραφή κατά Χάιζενμπεργκ, τα παρατηρήσιμα μεγέθη αντιστοιχούν σε πίνακες A_{nm} . Αυτοί εξελίσσονται στο χρόνο σύμφωνα με τον κανόνα

$$A_{mn}(t) = e^{i(E_m - E_n)t} A_{mn}(0), \quad (8.1)$$

όπου E_n είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας. Στην περιγραφή κατά Σρέντινγκερ, η έμφαση δίνεται στην κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ για N σωματίνα, η οποία εξελίσσεται σύμφωνα με την εξίσωση

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \sum_{i=1} \frac{1}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi. \quad (8.2)$$

Στο κεφ. 3.3.2 δείξαμε ότι αυτές οι δύο περιγραφές της χρονικής εξέλιξης είναι μαθηματικά ισοδύναμες. Στο φορμαλισμό του χώρου Χίλμπερτ ενοποιούνται με την εισαγωγή της έννοιας της μοναδιαίας εξέλιξης. Η λογική έχει ως εξής.

Καταρχάς παρατηρούμε ότι ο τελεστής

$$\hat{H} = - \sum_{i=1} \frac{1}{2m_i} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (8.3)$$

που εμφανίζεται στην εξίσωση του Σρέντινγκερ για N σωμάτια είναι αυτοσυζυγής. Για ευκολία θα υποθέσουμε ότι ο \hat{H} έχει αποκλειστικά διακριτό φάσμα, οπότε ικανοποιεί την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ και τα ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση.

Η εξίσωση του Σρέντινγκερ γράφεται ως $i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$. Πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με το μπρα $\langle n|$ παίρνουμε την εξίσωση $i\frac{\partial}{\partial t}\langle n|\psi\rangle = E_n\langle n|\psi\rangle$, η οποία επιδέχεται λύση $\langle n|\psi(t)\rangle = e^{-iE_nt}\langle n|\psi(0)\rangle$. Χρησιμοποιώντας την ανάλυση της μονάδας για τη βάση $|n\rangle$,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_nt}|n\rangle\langle n|\psi(0)\rangle = \hat{U}_t|\psi(0)\rangle, \quad (8.4)$$

όπου

$$\hat{U}_t = \sum_n e^{-iE_nt}|n\rangle\langle n| = e^{-i\hat{H}t} \quad (8.5)$$

είναι ένας μοναδιαίος τελεστής, που καλείται *τελεστής χρονικής εξέλιξης*.

Άμεση συνέπεια της Εξ. (8.5) είναι η χρήσιμη ταυτότητα

$$\hat{H} = i\dot{\hat{U}}_t\hat{U}_t^\dagger = i\hat{U}_t^\dagger\dot{\hat{U}}_t, \quad (8.6)$$

όπου η τελεία αντιστοιχεί σε παραγώγιση ως προς t .

Έστω τώρα ένα παρατηρήσιμο μέγεθος που αντιστοιχεί στον τελεστή \hat{A} . Έστω ότι εξελίσσεται στο χρόνο ως

$$\hat{A}(t) = \hat{U}_t^\dagger\hat{A}(0)\hat{U}_t. \quad (8.7)$$

Τότε τα στοιχεία μήτρας $A_{mn}(t) = \langle m|\hat{A}(t)|n\rangle$, όπου $|m\rangle$ και $|n\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις του \hat{H} όντως εξελίσσονται σύμφωνα με τον κανόνα του Χάιζενμπεργκ. Δηλαδή είτε στην περιγραφή του Σρέντινγκερ είτε στην περιγραφή του Χάιζενμπεργκ, η εξέλιξη στο χρόνο γίνεται μέσω του μοναδιαίου τελεστή (8.5).

Παραγωγίζοντας την Εξ. (8.7) ως προς το χρόνο και χρησιμοποιώντας την Εξ. (8.6) βρίσκουμε τη διαφορική εξίσωση εξέλιξης για ένα φυσικό μέγεθος \hat{A} ,

$$-i\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad (8.8)$$

8.1.2 Εικόνα Σρέντινγκερ και εικόνα Χάιζενμπεργκ

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι στην κβαντική θεωρία έχουμε δύο ισοδύναμους τρόπους να περιγράψουμε τη χρονική εξέλιξη.

1. *Εικόνα Σρέντινγκερ*. Οι καταστάσεις εξελίσσονται στο χρόνο σύμφωνα με τον κανόνα $|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}_t|\psi\rangle$, ενώ τα παρατηρήσιμα μεγέθη μένουν σταθερά.
2. *Εικόνα Χάιζενμπεργκ*. Τα παρατηρήσιμα μεγέθη εξελίσσονται στο χρόνο σύμφωνα με την Εξ. (8.7), ενώ οι καταστάσεις μένουν αναλλοίωτες.

Οι δύο περιγραφές είναι ισοδύναμες δεδομένου ότι όλες οι φυσικές προβλέψεις της θεωρίας εκφράζονται μέσω πιθανοτήτων. Έστω ότι το σύστημα έχει προετοιμαστεί σε μία κατάσταση $|\psi_0\rangle$ τη στιγμή $t = 0$. Θεωρούμε μία μέτρηση που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} = \sum_n a_n\hat{P}_n$ τη χρονική στιγμή t . Τότε η πιθανότητα να μετρηθεί η τιμή a_n είναι

$$\text{Prob}(a_n, t) = \langle\psi_0|\hat{U}_t^\dagger\hat{P}_n\hat{U}_t|\psi_0\rangle. \quad (8.9)$$

Η Εξ. (8.9) μπορεί να γραφεί ως $\text{Prob}(a_n, t) = \langle \psi_t | \hat{P}_n | \psi_t \rangle$ όπου $|\psi_t\rangle = \hat{U}_t |\psi_0\rangle$ η κατάσταση τη χρονική στιγμή t στην εικόνα του Σρέντινγκερ.

Η σχέση φασματικής ανάλυσης $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ παραμένει αναλλοίωτη κάτω από τη χρονική εξέλιξη στην εικόνα του Χάιζενμπεργκ, αφού σημαίνει ότι $\hat{U}_t^\dagger \hat{A} \hat{U}_t = \sum_n a_n \hat{U}_t^\dagger \hat{P}_n \hat{U}_t$ ή ισοδύναμα $\hat{A}(t) = \sum_n a_n \hat{P}_n(t)$. Οπότε η Εξ. (8.9) μπορεί να γραφεί και ως $\text{Prob}(a_n, t) = \langle \psi_0 | \hat{P}(t) | \psi_0 \rangle$. Άρα, είτε την εικόνα του Σρέντινγκερ χρησιμοποιήσουμε είτε την εικόνα του Χάιζενμπεργκ, οι πιθανοτικές προβλέψεις της θεωρίας είναι ίδιες.

Διατυπώνουμε τη θεμελιώδη αρχή της κβαντικής θεωρίας στην εικόνα του Σρέντινγκερ κυρίως επειδή είναι πιο εύχρηστη στα περισσότερα θέματα που θα αντιμετωπίσουμε σ' αυτό το βιβλίο.

Θεμελιώδης αρχή 4. Σε ένα κλειστό φυσικό σύστημα και απουσία μετρήσεων, η κβαντική κατάσταση εξελίσσεται κάτω από τη δράση μίας οικογένειας μοναδιαίων τελεστών $e^{-i\hat{H}t}$ ως $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$, όπου t ο χρόνος και \hat{H} αυτοσυζυγής τελεστής, που καλείται η Χαμιλτονία (ή τελεστής Χάμιλτον) του συστήματος.

Για να δούμε πώς η παραπάνω αρχή μεταφέρεται σε μικτές καταστάσεις, αναλύουμε κάθε μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ στις ιδιοκαταστάσεις της $|\psi_i\rangle$,

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (8.10)$$

Κάθε κερ $|\psi_i\rangle$ εξελίσσεται ως $|\psi_i\rangle \rightarrow \hat{U}_t |\psi_i\rangle$ και κάθε μπρα ως $\langle \psi_i| \rightarrow \langle \psi_i | \hat{U}_t^\dagger$, οπότε η μήτρα πυκνότητας εξελίσσεται ως $\hat{\rho} \rightarrow \hat{U}_t \hat{\rho} \hat{U}_t^\dagger$.

Δηλαδή ο γενικότερος νόμος της χρονικής εξέλιξης στην εικόνα του Σρέντινγκερ είναι

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}_t \hat{\rho}(0) \hat{U}_t^\dagger. \quad (8.11)$$

Παραγωγίζουμε τα δύο μέλη της Εξ. (8.11) ως προς το χρόνο παίρνουμε

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \dot{\hat{U}}_t \hat{\rho}(0) \hat{U}_t^\dagger + \hat{U}_t \hat{\rho}(0) \dot{\hat{U}}_t^\dagger = \dot{\hat{U}}_t \hat{U}_t^\dagger \hat{\rho}(0) \hat{U}_t \dot{\hat{U}}_t^\dagger, \quad (8.12)$$

και χρησιμοποιώντας την Εξ. (8.6) βρίσκουμε μία εξίσωση εξέλιξης για τη μήτρα πυκνότητας

$$i \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (8.13)$$

η οποία καλείται *εξίσωση φον Νόιμαν* (von Neumann). Προσοχή, η εξίσωση φον Νόιμαν διαφέρει κατά ένα πρόσημο από την Εξ. (8.8).

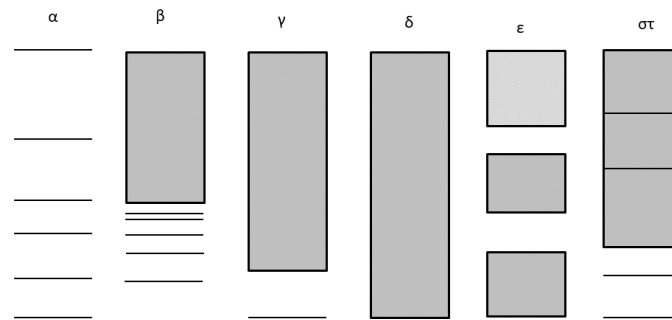
Για μεικτές καταστάσεις, η Εξ. (8.9) γράφεται

$$\text{Prob}(a_n, t) = \text{Tr}(\hat{U}_t \hat{\rho}_0 \hat{U}_t^\dagger \hat{P}_n). \quad (8.14)$$

8.2 Φυσική σημασία του κανόνα χρονικής εξέλιξης

8.2.1 Χαμιλτονιανή και ενέργεια

Ο τελεστής Χάμιλτον \hat{H} παίζει ένα διπλό ρόλο. Από τη μία δίνει την εξέλιξη ενός κλειστού συστήματος στο χρόνο, από την άλλη οι ιδιοτιμές του αντιστοιχούν στην ενέργεια του συστήματος. Η



Σχήμα 8.1: Διαφορετικά είδη φάσματος για τον τελεστή Χάμιλτον \hat{H} που περιγράφει ένα φυσικό σύστημα. (α) Πλήρες διακριτό φάσμα, όπως για τον αρμονικό ταλαντωτή. (β) Διακριτό φάσμα σε χαμηλές ενέργειες που αντιστοιχεί σε δέσμιες καταστάσεις και συνεχές φάσμα από μία τιμή της ενέργειας και μετά. Χαρακτηρίζει συστήματα όπως ένα ζεύγος πρωτονίου-ηλεκτρονίου, το οποίο μπορεί να υπάρχει είτε ως άτομο του υδρογόνου είτε ως δύο ανεξάρτητα σωμάτια. (γ) Μία και μοναδική διακριτή στάθμη (το κενό) και μετά συνεχές φάσμα. Χαρακτηρίζει συστήματα με μεταβλητό αριθμό σωματιδίων. (δ) Καθαρά συνεχές φάσμα, όπως για ένα ελεύθερο σωματίο. (ε) Καθαρά συνεχές φάσμα με κενά και ζώνες, όπως για σωματίο σε περιοδικό δυναμικό. (στ) Συνεχές και διακριτό φάσμα με το δεύτερο να υπάρχει και εντός του συνεχούς.

ενέργεια είναι μία διατηρούμενη ποσότητα, η οποία μπορεί να μετρηθεί και σε μακροσκοπικό επίπεδο. Γι' αυτό το λόγο αποτελεί το συνδετικό κρίκο μεταξύ της μικροσκοπικής και της μακροσκοπικής περιγραφής ενός συστήματος.

Ωστόσο στο μακροσκοπικό επίπεδο ισχύουν οι κανόνες της θερμοδυναμικής, οπότε ο τελεστής Χάμιλτον ενός κβαντικού συστήματος πρέπει να ικανοποιεί συγκεκριμένες προϋποθέσεις έτσι ώστε οι ιδιότητες της ενέργειας που περιγράφουν να είναι συμβατές με τη θερμοδυναμική.

Ειδικότερα, το φάσμα της Χαμιλτονιανής \hat{H} πρέπει να είναι φραγμένο από κάτω, δηλαδή πρέπει να υπάρχει μία ελάχιστη τιμή της ενέργειας. Αν δεν υπάρχει, τότε το σύστημα θα ακτινοβολεί συνεχώς μεταβαίνοντας σε καταστάσεις ολοένα και μικρότερης ενέργειας χωρίς τέλος. Θα μπορούμε δηλαδή να παίρνουμε ενέργεια από το σύστημα επ' άπειρω χωρίς να χρειαστεί να κάνουμε τίποτα. Αυτό βεβαίως θα ήταν παραβίαση του δεύτερου θερμοδυναμικού νόμου. Είναι ενδεικτικό ότι στο κλασικό άτομο του υδρογόνου, η κλασική Χαμιλτονιανή του ηλεκτρονίου $H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi r}$ δεν είναι φραγμένη από κάτω, αφού μπορεί να πάρει οσοδήποτε μικρές τιμές για r κοντά στο μηδέν. Σε αντίθεση, όπως είδαμε στο κεφ. 3, η κβαντική Χαμιλτονιανή έχει φάσμα φραγμένο από κάτω, καθώς χαρακτηρίζεται από μία ελάχιστη τιμή της ενέργειας. Η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας καλείται *θεμελιώδης κατάσταση* του συστήματος.

Στη μη σχετικιστική φυσική δεν υπάρχει κάποιος περιορισμός για την ελάχιστη τιμή της ενέργειας, η οποία μπορεί να είναι και αρνητική, όπως για παράδειγμα στο άτομο του υδρογόνου. Ωστόσο στη σχετικότητα, η ολική ενέργεια συμπεριλαμβάνει και την ενέργεια ηρεμίας των σωματιδίων πέρα από την κινητική και τη δυναμική ενέργεια. Σ' αυτήν την περίπτωση, η ολική ενέργεια δεν μπορεί ποτέ να γίνει αρνητική. Γιατί στη σχετικότητα, αν ένα φυσικό σύστημα χαρακτηρίζεται από αρνητική ενέργεια σε ένα σύστημα αναφοράς, πάντα μπορεί να βρεθεί ένα άλλο σύστημα αναφοράς στο οποίο η ενέργεια θα είναι οσοδήποτε μικρή θέλουμε, δηλαδή αρνητική ενέργεια με οσοδήποτε μεγάλη τιμή.

Όπως είδαμε από τη μελέτη του μονοδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ στο Κεφ. 6, ο τελεστής Χάμιλτον ενός συστήματος μπορεί να έχει και διακριτό και συνεχές φάσμα. Σε συστήματα που περιγράφονται

φουν σωμάτια το διακριτό φάσμα αντιστοιχεί σε δέσμιες καταστάσεις των σωματιδίων, δηλαδή σε καταστάσεις όπου τα σωμάτια είναι εντοπισμένα σε μία περιοχή του χώρου. Για παράδειγμα, όλες οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου αντιστοιχούν σε συναρτήσεις εντοπισμένες γύρω από τον πυρήνα, που μηδενίζονται εκθετικά στο άπειρο.

Το συνεχές φάσμα αντιστοιχεί σε γενικευμένα ιδιοδιάνυσματα που δεν εντοπίζονται σε μία περιοχή του χώρου. Αντιστοιχούν σε καταστάσεις που τα σωμάτια δεν έχουν "παγιδευτεί" από ελκτικές δυνάμεις και μπορούν να διαφύγουν στο άπειρο. Αυτές οι καταστάσεις αναφέρονται ως καταστάσεις *σκέδασης*.

Μία ποιοτική περιγραφή διαφορετικών ειδών φάσματος σε σωματιδιακά συστήματα δίνεται στο Σχ. 8.1. Οι περιπτώσεις (α)-(ε) στο Σχήμα 8.1 είναι οικείες από τη μελέτη των μονοδιάστατων συστημάτων στο Κεφ. 6. Η περίπτωση (στ) είναι καινούρια. Αφορά συστήματα στα οποία το διακριτό φάσμα βρίσκεται εντός του συνεχούς, δηλαδή μία κανονική ιδιοτιμή περικλείεται από γενικευμένες ιδιοτιμές με συνεχή τρόπο. Αυτή η συμπεριφορά είναι συχνή σε σύνθετα συστήματα. Έστω το σύστημα δύο ατόμων υδρογόνου σε μεγάλη μεταξύ τους απόσταση. Έστω $E_1 = -13,6 eV$ η θεμελιώδης και $E_2 = E_1/4$ η πρώτη διεγερμένη ιδιοτιμή ενέργειας του ενός ατόμου. Το σύστημα των δύο ατόμων έχει θεμελιώδη ίση με $2E_1$. Το κατώφλι ενέργειας στο οποίο αρχίζουν να εμφανίζεται το συνεχές φάσμα αντιστοιχεί σε $E = E_1$, δηλαδή στο ένα άτομο να βρίσκεται στη θεμελιώδη και το άλλο να έχει ιονιστεί. Ωστόσο η κατάσταση που και τα δύο άτομα βρίσκονται στην πρώτη διεγερμένη, αντιστοιχεί σε ενέργεια $E = 2E_2 = \frac{1}{2}E_1 > E_1$, δηλαδή έχουμε μία κανονική ιδιοτιμή για τιμές της ενέργειας για τις οποίες έχουμε και συνεχές φάσμα.

Επίσης, υπάρχουν περιπτώσεις που το φάσμα δεν είναι ούτε διακριτό, ούτε συνεχές, αλλά *ανώμαλο*, δηλαδή είναι ένα 'περίεργο' υποσύνολο του συνόλου των πραγματικών, για παράδειγμα, μπορεί να έχει δομή φράκταλ. Τέτοια συμπεριφορά είναι σπάνια, αλλά εμφανίζεται σε κάποιες Χαμιλτονιανές που περιγράφουν σωματίδια εντός σχεδόν περιοδικού δυναμικού [122].

8.2.2 Ο χρόνος στην κβαντική θεωρία

Στην εξίσωση του Σρέντινγκερ, ο χρόνος t εισέρχεται ακριβώς όπως και στην κλασική Νευτώνεια μηχανική. Αποτελεί μία εξωτερική παράμετρο του συστήματος. Δηλαδή, αντιστοιχεί στον χρόνο που μετράει ένα κλασικό ιδανικό ρολόι που δεν αλληλεπιδρά με το φυσικό σύστημα υπό εξέταση.

Στο Κεφ. 3.3 είχαμε αναφέρει την ασυμμετρία μεταξύ χώρου και χρόνου στην κβαντική θεωρία. Σε αντίθεση με χωρικές μεταβλητές (όπως η θέση ενός σωματιδίου), ο χρόνος δεν αντιστοιχεί σε παρατηρήσιμο μέγεθος στην κβαντική θεωρία, υπό την έννοια ότι δεν υπάρχει τελεστής του χρόνου. Συγκεκριμένα, δεν υπάρχει κάποιος αυτοσυζυγής τελεστής \hat{T} , ο οποίος να ικανοποιεί τη σχέση

$$e^{i\hat{H}t}\hat{T}e^{-i\hat{H}t} = \hat{T} + t\hat{I}. \quad (8.15)$$

Η Εξ. (8.15) είναι απαραίτητη για να έχει νόημα ο τελεστής \hat{T} ως τελεστής του χρόνου, δηλαδή για να συμβαδίζουν οι τιμές του με την εξέλιξη κατά Χάιζενμπεργκ.

Ο Πάουλι απέδειξε ότι αν η Χαμιλτονιανή \hat{H} έχει κάτω φράγμα, δεν υπάρχει τελεστής \hat{T} που να ικανοποιεί την Εξ. (8.15) [123].

Απόδειξη. Παίρνουμε το t στην Εξ. (8.15) να τείνει στο 0, οπότε από το ανάπτυγμα $e^{i\hat{H}t} \simeq \hat{I} + i\hat{H}t$, βρίσκουμε $[\hat{T}, \hat{H}] = i\hat{I}$. Έστω ότι ο τελεστής \hat{T} υπάρχει. Από τη σχέση (5.18) βρίσκουμε ότι $e^{ia\hat{T}}\hat{H}e^{-ia\hat{T}} = \hat{H} - a\hat{I}$, για κάθε $a \in \mathbf{R}$. Αν $|E\rangle$ (γενικευμένο) ιδιοδιάνυσμα του \hat{H} με ιδιοτιμή E ,

$$\hat{H}e^{-ia\hat{T}}|E\rangle = e^{-ia\hat{T}}(\hat{H} - a\hat{I})|E\rangle = (E - a)e^{-ia\hat{T}}|E\rangle,$$

δηλαδή το $e^{-ia\hat{T}}|E\rangle$ είναι γενικευμένο ιδιοδιάνυσμα του \hat{H} με ιδιοτιμή $E - a$. Δεδομένου ότι το a μπορεί να πάρει οσοδήποτε μεγάλη τιμή, για οποιοδήποτε αρχικό E το $E - a$ μπορεί να γίνει οσοδήποτε μικρό.

Αυτό σημαίνει ότι υπάρχουν αρνητικές ιδιοτιμές τις ενέργειας, οσοδήποτε μεγάλες σε απόλυτη τιμή, κάτι που έρχεται σε αντίφαση με την ύπαρξη κάτω φράγματος στην ενέργεια. Άρα ο τελεστής \hat{T} δεν υπάρχει.

Το ότι δεν υπάρχει τελεστής χρόνου φαινομενικά σημαίνει ότι ο χρόνος δεν είναι παρατηρήσιμη ποσότητα στην κβαντική θεωρία. Ωστόσο στο εργαστήριο μετράμε πολύ συχνά το χρόνο στον οποίον συμβαίνει ένα γεγονός, για παράδειγμα μετράμε τη χρονική στιγμή που ανιχνεύεται ένα σωματίο που εκπέμπεται από διασπώμενο πυρήνα. Αυτές οι μετρήσεις περιγράφονται από την κβαντική μηχανική, αλλά απαιτούν πιο λεπτομερή παρουσίαση της θεωρίας κβαντικών μετρήσεων και θα γίνει σε αργότερο κεφάλαιο.

Το θεώρημα του Πάουλι δηλώνει ουσιαστικά ότι τα κβαντικά ρολόγια δεν μπορεί να είναι καλά ρολόγια. Αν η μεταβλητή \hat{T} αντιστοιχεί στο δείκτη ενός ρολογιού, οι κβαντικές διακυμάνσεις τον αναγκάζουν να πηγαίνει και προς τα πίσω, όχι μόνο προς τα εμπρός.

8.2.3 Σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου

Είδαμε στο Κεφ. 7.4 ότι η ανισότητα Κέναρντ-Ρόμπινσον εκφράζει την αρχή της αβεβαιότητας θέσης-ορμής του Χάιζενμπεργκ συναρτήσει των μεταθετών τελεστών. Απουσία τελεστή του χρόνου, δεν είναι προφανές ποια είναι η αντίστοιχη έκφραση για τη σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου. Για την ακρίβεια, υπάρχουν αρκετοί διαφορετικοί τρόποι να εκφράσει κανείς τη σχέση αβεβαιότητας συναρτήσει τελεστών, με αρκετές διαφορές σε ότι αφορά το φυσικό τους περιεχόμενο.

Μία σημαντική διατύπωση της σχέσης αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου, που οφείλεται στους Μάντελσταμ (Л. Мандельштам) και Ταμ (И. Тамм) είναι η ακόλουθη [124]. Έστω ένα φυσικό σύστημα που περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} και χαρακτηρίζεται από Χαμιλτονιανή \hat{H} . Θεωρούμε τις μετρήσεις μιας ποσότητας \hat{A} . Η ανισότητα Κέναρντ-Ρόμπινσον (7.53) δίνει,

$$\Delta H \Delta A \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle |. \quad (8.16)$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση εξέλιξης (8.8), η Εξ. (8.16) γράφεται

$$\Delta H \Delta A \geq \frac{1}{2} | \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle | \quad (8.17)$$

Η Εξ. (8.17) καλείται ανισότητα Μάντελσταμ-Ταμ. Η ποσότητα

$$T_A = \frac{\Delta A}{| \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle |} \quad (8.18)$$

έχει διαστάσεις χρόνου. Η φυσική της ερμηνεία εξαρτάται από την επιλογή του τελεστή \hat{A} .

Σφάλματα ρολογιού. Έστω ότι ο \hat{A} αντιστοιχεί σε ένα βαθμό ελευθερίας που χρησιμοποιούμε ως ρολόι, δηλαδή η τιμή του \hat{A} όπως εξελίσσεται στο χρόνο αποτελεί μέτρο της χρονικής διάρκειας. Τότε η ποσότητα T_A ταυτίζεται με το σφάλμα δt προσδιορισμού του χρόνου, οπότε η Εξ. (8.17) γράφεται ως

$$\Delta H \delta t \geq \frac{1}{2}. \quad (8.19)$$

Παρατηρούμε ότι αν $\Delta H = 0$, δηλαδή σύστημα που βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ρολόι, γιατί θα έχει άπειρο σφάλμα.

Χρόνος ημιζωής ασταθών συστημάτων. Επιλέγουμε $\hat{A} = |\phi\rangle\langle\phi|$ για $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$. Έχουμε υπόψιν περιπτώσεις όπου το $|\phi\rangle$ αντιστοιχεί σε μία διεγερμένη κατάσταση ενός ατόμου ή ενός πυρήνα, η οποία

δε διαρκεί πολύ χρόνο αφού το σύστημα μεταπίπτει στη θεμελιώδη με εκπομπή ενός φωτονίου. Αφού $\hat{A} = \hat{A}^2$, $\Delta A = \sqrt{a - a^2}$, όπου $a = \langle \hat{A} \rangle$. Εξ' ορισμού,

$$a(t) = \langle \phi | e^{i\hat{H}t} | \phi \rangle \langle \phi | e^{-i\hat{H}t} | \phi \rangle = |\langle \phi | e^{-i\hat{H}t} | \phi \rangle|^2. \quad (8.20)$$

Η Εξ. (8.17) γράφεται

$$\frac{|\dot{a}|}{\sqrt{a - a^2}} \leq 2\Delta H. \quad (8.21)$$

Θεωρούμε ότι $a(0) = 1$, δηλαδή τη στιγμή $t = 0$ το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\phi\rangle$. Εφόσον περιγράψουμε μία ασταθή κατάσταση, $\dot{a} \leq 0$. Ολοκληρώνοντας τα δύο σκέλη της ανισότητας (8.21) από 0 ως t παίρνουμε

$$\arcsin \sqrt{a(t)} + \Delta H t \geq \frac{\pi}{2} \quad (8.22)$$

Για $t > \frac{\pi}{2\Delta H}$, η Εξ. (8.22) ικανοποιείται τετριμμένα, αλλά για $t < \frac{\pi}{2\Delta H}$ παίρνουμε

$$a(t) \geq \sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \Delta H t\right) = \cos^2(\Delta H t). \quad (8.23)$$

Ορίζουμε το χρόνο ημιζωής $\tau_{\frac{1}{2}}$ της κατάστασης $|\phi\rangle$, από την απαίτηση $a(\tau_{\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}$. Οπότε η Εξ. (8.23) δίνει μία σχέση μεταξύ της αβεβαιότητας στην ενέργεια της αρχικής κατάστασης και του χρόνου ημιζωής

$$\Delta H \tau_{\frac{1}{2}} \geq \arccos \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\pi}{4}. \quad (8.24)$$

Ταχύτητα κβαντικής εξέλιξης. Πλέον έχουμε τη δυνατότητα να δρούμε σε κβαντικά συστήματα με ακριβώς καθορισμένους τρόπους, δηλαδή να επιλέγουμε τη Χαμιλτονιανή που τα εξελίσει έτσι ώστε να τα οδηγήσουμε σε συγκεκριμένες κβαντικές καταστάσεις. Σ' αυτήν την περίπτωση, μας ενδιαφέρει η μετάβαση από μία αρχική κατάσταση $|\phi\rangle$ σε μια τελική κάθετη σ' αυτή. Έστω ότι η μετάβαση γίνεται σε χρόνο τ , θα πρέπει να ισχύει ότι $\langle \phi | e^{-i\hat{H}\tau} | \phi \rangle = 0$, και άρα από την Εξ. (8.20), $a(\tau) = 0$. Τότε, η Εξ. (8.22) δίνει

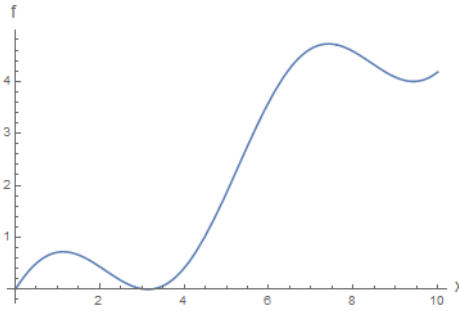
$$\Delta H \tau \geq \frac{\pi}{2} \quad (8.25)$$

Η Εξ. (8.25) συχνά αποκαλείται *κβαντικό όριο ταχύτητας*, δεδομένου ότι μας δίνει ένα κάτω όριο στο χρόνο τ που χρειάζεται για να εξελιχθεί ένα κβαντικό σύστημα από μία αρχική κατάσταση σε μία τελική που δεν επικαλύπτεται καθόλου με την αρχική.

Φαινομενικά, η Εξ. (8.25) φαίνεται να σημαίνει ότι δεν υπάρχει κάποιο όριο ταχύτητας αν $\Delta H = 0$. Ωστόσο αυτή η περίπτωση καλύπτεται από μια άλλη ανισότητα, που οφείλεται στους Μαργκόλους (Margolus) και Λεβίτιν (Levitin) [125],

$$\langle \hat{H} \rangle \tau \geq \frac{\pi}{2} \quad (8.26)$$

Για να αποδείξουμε την Εξ. (8.26) γράφουμε την ποσότητα $\langle \phi | e^{-i\hat{H}\tau} | \phi \rangle = x + iy$, όπου $x, y \in \mathbf{R}$. Για ευκολία υποθέτουμε ότι η Χαμιλτονιανή έχει συνεχές φάσμα, οπότε υπάρχει ορθοκανονική βάση $|n\rangle$ από ιδιοδιανύσματά της, με αντίστοιχες ιδιοτιμές E_n . Αναπτύσσοντας $|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, παίρνουμε



Σχήμα 8.2: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $f(x) = \cos(x) + \frac{2}{\pi}(x + \sin x) - 1$ για $x \geq 0$. Η ανισότητα (8.27) επιβεβαιώνεται καθώς η f είναι παντού θετική. Βλέπουμε ότι $f(x) = 0$ για $x = 0$ και $x = \pi$.

$\langle \phi | e^{-i\hat{H}\tau} | \phi \rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{-iE_n \tau}$, οπότε $x = \sum_n |c_n|^2 \cos(E_n \tau)$. Χρησιμοποιούμε την τριγωνομετρική ανισότητα

$$\cos x \geq 1 - \frac{2}{\pi}(x + \sin x) \tag{8.27}$$

που ισχύει για κάθε $x \geq 0$ —βλ. Σχ. 8.2. Βρίσκουμε ότι $x \geq \sum_n [1 - \frac{2}{\pi}(E_n \tau + \sin(E_n \tau))]$, ή ισοδύναμα

$$x \geq 1 - \frac{2}{\pi} \langle \hat{H} \rangle \tau + \frac{2}{\pi} y. \tag{8.28}$$

Για $t = \tau, x = y = 0$, οπότε καταλήγουμε στην Εξ. (8.26).

Οι ανισότητες (8.25) και (8.26) συνδυάζονται ως [126]

$$\tau \geq \frac{\pi}{2} \max\left\{ \frac{1}{\Delta H}, \frac{1}{\langle \hat{H} \rangle} \right\}. \tag{8.29}$$

Το κάτω όριο και στις δύο εξισώσεις (8.25) και (8.26) προκύπτει για καταστάσεις $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\theta}|1\rangle)$, όπου $|0\rangle$ η θεμελιώδης, $|1\rangle$ η πρώτη διεγερμένη και $e^{i\theta}$ τυχαία φάση.

8.2.4 Διατηρούμενες ποσότητες

Στην κλασική φυσική μια ποσότητα καλείται διατηρούμενη εφόσον η τιμή της δεν αλλάζει στο χρόνο. Ειδικά στη Χαμιλτόνια μηχανική, ως διατηρούμενη ποσότητα ορίζεται μία συνάρτηση F στον καταστατικό χώρο, η οποία ικανοποιεί τη σχέση

$$\{F, H\} = 0, \tag{8.30}$$

όπου H η κλασική Χαμιλτόνια του συστήματος. Η σχέση (1.6) σημαίνει ότι η Εξ. (8.30) συνεπάγεται ότι $\dot{F} = 0$.

Στην κβαντική θεωρία, η έννοια της διατηρήσιμης ποσότητας διακλαδώνεται σε δύο διαφορετικές έννοιες: (i) διατήρηση της κατανομής πιθανοτήτων και (ii) στη διατήρηση της τιμής της ποσότητας.

Διατήρηση της κατανομής πιθανοτήτων. Εμπνεόμενοι από την Εξ. (8.30), ορίζουμε ως διατηρούμενη ποσότητα για ένα κβαντικό σύστημα, κάθε τελεστή $\hat{Q} = \sum_q q \hat{P}_q$ που μετατίθεται με τον τελεστή Χάμιλτον \hat{H} ,

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = 0. \tag{8.31}$$

Η Εξ. (8.31) σημαίνει ότι $[\hat{P}_q, \hat{H}] = 0$ για κάθε φασματικό προβολέα \hat{P}_q του \hat{Q} . Βεβαίως, η Χαμιλτονιανή είναι η ίδια διατηρούμενη ποσότητα, καθώς $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$.

Ωστόσο, οι μετρήσεις μιας διατηρούμενη ποσότητα που ορίζεται κατ' αυτόν τον τρόπο *δε δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα*. Για παράδειγμα, αν προετοιμάσουμε ένα σύστημα σε επαλληλία δύο ιδιοδιανυσμάτων διαφορετικής ενέργειας $c_1|E_1\rangle + c_2|E_2\rangle$, με $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, ένα κλάσμα $|c_1|^2$ των αποτελεσμάτων της μέτρησης θα είναι E_1 και ένα κλάσμα $|c_2|^2$ των αποτελεσμάτων της μέτρησης θα είναι E_2 .

Στη γενική περίπτωση, η συνθήκη $[\hat{H}, \hat{Q}] = 0$ σημαίνει ότι $\hat{Q}(t)$ στην εικόνα του Χάιζενμπεργκ δεν εξαρτάται από το χρόνο t . Αυτό σημαίνει ότι και οι πιθανότητες μετρήσεων του \hat{Q} δεν εξαρτώνται από τη χρονική στιγμή που γίνεται η μέτρηση.

Διατήρηση της τιμής. Υπάρχει μία πιο ισχυρή έννοια διατηρούμενης ποσότητας, ως ένα παρατηρήσιμο μέγεθος \hat{Q} οποιαδήποτε μέτρηση του οποίου σε σύστημα που βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση δίνει ένα μοναδικό αποτέλεσμα που δεν εξαρτάται από το χρόνο. Αυτός ο ορισμός προϋποθέτει ότι ο \hat{Q} μετατίθεται με τον τελεστή Χάμιλτον. Επιπλέον, σημαίνει ότι οι φυσικά επιτρεπτές καθαρές καταστάσεις πρέπει να είναι ιδιοδιανύσματα του \hat{Q} . Δεν επιτρέπονται επαλληλίες καταστάσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές q του \hat{Q} . Τότε λέμε ότι η διατηρούμενη ποσότητα ορίζει *κανόνες υπερεπιλογής*—βλ. κεφ. 4.2. Σ' αυτήν την περίπτωση η αρχή της διατήρησης υπερνικά την αρχή της επαλληλίας.

Κανόνες υπερεπιλογής ορίζονται από το ηλεκτρικό φορτίο, καθώς και από άλλα διατηρούμενα φορτία της σωματιδιακής φυσικής, όπως ο λεπτονικός και ο βαρυονικός αριθμός. Για το ηλεκτρικό φορτίο, ο κανόνας υπερεπιλογής σημαίνει ότι δεν υπάρχει επαλληλία κατάστασης N ηλεκτρονίων με κατάσταση N' ηλεκτρονίων αν $N \neq N'$. Ωστόσο μπορεί να υπάρξει επαλληλία κατάστασης ενός ηλεκτρονίου με κατάσταση δύο ηλεκτρονίων και ενός ποζιτρονίου.

Μπορεί κανείς να απορήσει γιατί να μην υπάρχουν κανόνες επιλογής και για την ενέργεια, εφόσον και η ενέργεια διατηρείται όπως και το φορτίο. Η διαφορά είναι ότι μπορεί να γίνει μέτρηση του φορτίου ενός μικροσκοπικού συστήματος χωρίς να απαιτείται ανταλλαγή φορτίου με τη μετρητική συσκευή, σε αντίθεση με τη μέτρηση ενέργειας. Για παράδειγμα, μπορεί κανείς να προσδιορίσει το φορτίο ενός σωματιδίου μετρώντας τη θέση του αφότου κινηθεί εντός ενός κλασικού ηλεκτρικού πεδίου. Σε αντίθεση η ενέργεια του μικροσκοπικού συστήματος *δε* διατηρείται στη διάρκεια των μετρήσεων, δεδομένου ότι το σωματίο αλληλεπιδρά με τη μετρητική συσκευή κι αυτό σημαίνει ότι πρέπει να προστεθούν έξτρα όροι στη Χαμιλτονιανή.

8.3 Χρονική εξέλιξη σε απλά συστήματα

8.3.1 Χρονική εξέλιξη σε κιούμπιτ

Θεωρούμε ένα κιούμπιτ με τελεστή Χάμιλτον $\hat{H} = \mathbf{a} \cdot \hat{\sigma}$. Οι ιδιοτιμές του \hat{H} είναι $E_+ = |\mathbf{a}|$ και $E_- = -|\mathbf{a}|$, με αντιστοιχούς προβολικούς τελεστές $\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{I} \pm \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \hat{\sigma})$ (βλ. Κεφ. 6.1). Οπότε ο τελεστής $\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t}$ είναι

$$\begin{aligned} \hat{U}_t &= e^{-i|\mathbf{a}|t} \frac{1}{2} \left(\hat{I} + \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \hat{\sigma} \right) + e^{i|\mathbf{a}|t} \frac{1}{2} \left(\hat{I} - \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \hat{\sigma} \right) \\ &= \cos(|\mathbf{a}|t) \hat{I} - i \sin(|\mathbf{a}|t) \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \hat{\sigma}. \end{aligned} \quad (8.32)$$

Έστω μία αρχική κατάσταση $|\psi_0\rangle = |0\rangle$. Η κατάσταση $|\psi_t\rangle$ τη χρονική στιγμή t είναι

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_t|0\rangle = \left(\cos(|\mathbf{a}|t) - i \frac{a_3}{|\mathbf{a}|} \sin(|\mathbf{a}|t) \right) |0\rangle - i \frac{a_1 - ia_2}{|\mathbf{a}|} \sin(|\mathbf{a}|t) |1\rangle. \quad (8.33)$$

Υποθέτουμε ότι τη χρονική στιγμή t γίνονται μετρήσεις του $\hat{\sigma}_3$. Οι αντίστοιχες πιθανότητες είναι

$$\text{Prob}(+1, t) = |\langle 1|\psi_t\rangle|^2 = \frac{a_1^2 + a_2^2}{|\mathbf{a}|^2} \sin^2(|\mathbf{a}|t) \quad (8.34)$$

$$\text{Prob}(-1, t) = |\langle 0|\psi_t\rangle|^2 = \cos^2(|\mathbf{a}|t) + \frac{a_3^2}{|\mathbf{a}|^2} \sin^2(|\mathbf{a}|t). \quad (8.35)$$

Παρατηρούμε ότι η κατανομή πιθανοτήτων μεταβάλλεται περιοδικά με συχνότητα $|\mathbf{a}|$, εφόσον τουλάχιστον ένα από τα a_1, a_2 είναι διάφορο του μηδενός.

8.3.2 Ελεύθερο σωματίο

Εξετάζουμε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης για ένα ελεύθερο σωματίο μάζας m σε μία διάσταση. Έστω ένα καταστατικό διάνυσμα $|\psi_0\rangle$ και την εξέλιξή του

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi_0\rangle,$$

όπου $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$. Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις $\psi_t(x) := \langle x|\psi_t\rangle$ και $\psi_0(x) := \langle x|\psi_0\rangle$ συνδέονται από τη σχέση

$$\begin{aligned} \psi_t(x) &= \langle x|e^{-i\hat{H}t}|\psi_0\rangle \\ &= \int dx' \langle x|e^{-i\hat{H}t}|x'\rangle \langle x'|\psi_0\rangle = \int dx' G_t(x, x')\psi_0(x'), \end{aligned} \quad (8.36)$$

όπου η συνάρτηση

$$G_t(x, x') = \langle x|e^{-i\hat{H}t}|x'\rangle, \quad (8.37)$$

καλείται *διαδότης* για το ελεύθερο σωματίδιο. Η Εξ. (8.36) σημαίνει ότι ο διαδότης επιτρέπει τον προσδιορισμό της κυματοσυνάρτησης για οποιαδήποτε στιγμή t δεδομένου ότι τη γνωρίζουμε την αρχική στιγμή $t = 0$.

Ο διαδότης υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη φασματική ανάλυση

$$e^{-i\hat{H}t} = \int dp e^{-i\frac{p^2}{2m}t} |p\rangle \langle p|, \quad (8.38)$$

όπου $|p\rangle$ τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα της ορμής. Βρίσκουμε ότι

$$G_t(x, x') = \int dp e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{-i\frac{p^2}{2m}t + ip(x-x')} \quad (8.39)$$

Το ολοκλήρωμα της Εξ. (8.39) δεν ορίζεται γιατί η ολοκληρώσιμη ποσότητα ταλαντώνεται όταν το p τείνει στο άπειρο. Για να υπολογίσουμε το διαδότη, θέτουμε $t \rightarrow (t - i\epsilon)$ για $\epsilon > 0$. Οπότε στο Γκαουσιανό ολοκλήρωμα της Εξ. (8.39) εμφανίζεται ένας όρος $e^{-\epsilon\frac{p^2}{2m}}$, ο οποίος επιτρέπει στο ολοκλήρωμα να συγκλίνει. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (1.41) βρίσκουμε

$$G_{t-i\epsilon}(x, x') = \frac{1}{2\sqrt{\pi(\epsilon + i\frac{t}{2m})}} \exp\left[i\frac{m(x-x')^2}{2(t-i\epsilon)}\right]. \quad (8.40)$$

Στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$,

$$G_t(x, x') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} e^{i \frac{m(x-x')^2}{2t}}. \quad (8.41)$$

Ως παράδειγμα, εξετάζουμε την εξέλιξη μίας αρχικής Γκαουσιανής κατάστασης επικεντρωμένης γύρω από το $x = 0$ και με μέση ορμή p_0 .

$$\psi_0(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp\left[-\frac{x^2}{4\sigma^2} + ip_0x\right],$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (8.36) και χρησιμοποιώντας τον διαδότη (8.41) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \psi_t(x) &= (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} e^{\frac{imx^2}{2t}} \int dx' \exp\left[-\left(\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{im}{t}\right) \frac{x'^2}{2} + ix'(p_0 - \frac{mx}{t})\right] \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{(2\pi\sigma^2)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{im}{t}}} e^{\frac{imx^2}{2t} - \frac{\sigma^2(p_0 - \frac{mx}{t})^2}{1 - im\sigma^2}}. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας ως προς τη θέση τη χρονική στιγμή t υπολογίζεται

$$|\psi_t(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2} \sqrt{1 + \frac{t^2}{4m^2\sigma^4}}} \exp\left[-\frac{(x - \frac{p_0 t}{m})^2}{4\sigma^2(1 + \frac{t^2}{4m^2\sigma^4})}\right]. \quad (8.43)$$

Είναι μία Γκαουσιανή με κέντρο στο $p_0 t/m$ και τυπική απόκλιση $\Delta x(t) = \sigma \sqrt{1 + \frac{t^2}{4m^2\sigma^4}}$. Η τυπική απόκλιση αυξάνει με το χρόνο, δηλαδή το κυματοπακέτο *εξαπλώνεται* στο χώρο.

Παρατηρούμε ότι για $t \ll 2m\sigma^2$, $|\psi_t(x)|^2 = |\psi_0(x - p_0 t/m)|^2$, δηλαδή απλά μεταφέρεται το κέντρο της αρχικής κατανομής πιθανοτήτων $|\psi_0(x)|^2$ κατά $p_0 t/m$, όπως θα περίμενε κανείς από τις κλασικές εξισώσεις κίνησης. Ωστόσο στο όριο μεγάλου χρόνου $t \gg 2m\sigma^2$, η κατανομή τείνει να εξαπλωθεί σε όλο το χώρο, καθώς η τυπική απόκλιση αποκλίνει γραμμικά $\Delta x(t) \simeq \frac{t}{2m\sigma}$.

Ένθετο 8.1. Υπερ-φωτεινές ταχύτητες στην κβαντική εξέλιξη;

Έστω ένα σωματίο σε μία αρχική κατάσταση που είναι ακριβώς εντοπισμένη στο διάστημα $[0, a]$,

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \chi_{[0,a]}(x) \quad (8.44)$$

και έχει μηδενική μέση ορμή.

Βρίσκουμε τη χρονική της εξέλιξη με τον διαδότη (8.41)

$$\psi_t(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i a t}} \int_0^a dx' e^{i \frac{m(x-x')^2}{2t}} = \frac{1}{\sqrt{\pi i a}} \int_{-\sqrt{\frac{m}{2t}}x}^{-\sqrt{\frac{m}{2t}}(x-a)} ds e^{-is^2}, \quad (8.45)$$

όπου στο τελευταίο βήμα ορίσαμε τη μεταβλητή $s := \sqrt{\frac{m}{2t}}(x' - x)$. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό των ολοκληρωμάτων Φρενέ (Fresnel) $C(x) = \int_0^x ds \cos(s^2)$, $S(x) = \int_0^x ds \sin(s^2)$ βρίσκουμε

$$\psi_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2ia}} \left[(C - iS) \left(-\sqrt{\frac{m}{2t}}(x-a) \right) - (C - iS) \left(-\sqrt{\frac{m}{2t}}x \right) \right]. \quad (8.46)$$

Εξετάζουμε τη συμπεριφορά της $\psi_t(x)$ για $x \gg a$ και για χρόνους όχι πολύ μεγάλους ($t < ma^2$). Τα

ολοκληρώματα Φρενέ έχουν την ακόλουθη ασυμπτωτική συμπεριφορά για μεγάλο x ,

$$C(x) - iS(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1+i}{2} - i \frac{e^{ix^2}}{2x}, \quad (8.47)$$

οπότε παίρνουμε

$$\psi_t(x) = -\sqrt{\frac{it}{4ma}} \left[\frac{e^{i\frac{m}{2t}(x-a)^2}}{x-a} - \frac{e^{i\frac{m}{2t}x^2}}{x} \right]. \quad (8.48)$$

Εφόσον $x \gg a$, αντικαθιστούμε το $x-a$ στον παρονομαστή με x , και προσεγγίζουμε $(x-a)^2 \simeq x^2 - 2ax$. Παίρνουμε

$$\psi_t(x) = \sqrt{\frac{it}{4ma}} e^{i\frac{mx^2}{t}} \frac{1 - e^{-i\frac{ma}{t}x}}{x}. \quad (8.49)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας ως προς x είναι

$$|\psi_t(x)|^2 = \frac{t}{ma} \frac{\sin^2\left(\frac{ma}{2t}x\right)}{x^2}. \quad (8.50)$$

Έστω ότι τη χρονική στιγμή t γίνεται μία μέτρηση της θέσης του σωματιδίου γύρω από τη θέση $x = L \gg a$ με εύρος d . Η πιθανότητα εύρεσής του σ' αυτήν την περιοχή είναι

$$\text{Prob}(L, t) = \int_{L-\frac{d}{2}}^{L+\frac{d}{2}} dx |\psi_t(x)|^2. \quad (8.51)$$

Εφόσον $d \ll L$, προσεγγίζουμε

$$\text{Prob}(L, t) \simeq \frac{t}{2maL^2} \int_{L-\frac{d}{2}}^{L+\frac{d}{2}} dx \left[1 - \cos\left(\frac{ma}{t}x\right) \right]. \quad (8.52)$$

Για $t \ll mad$, η συχνότητα του ταλαντωτικού όρου στο ολοκλήρωμα γίνεται εξαιρετικά μεγάλη, οπότε η συνεισφορά του είναι αμελητέα. Καταλήγουμε ότι στο όριο των πολύ μικρών χρόνων

$$\text{Prob}(L, t) = \frac{td}{2maL^2}. \quad (8.53)$$

Βλέπουμε ότι υπάρχει πεπερασμένη πιθανότητα να ανιχνευθεί το σωματίο γύρω από το $x = L$ για οσοδήποτε μεγάλο L ακόμα και σε εξαιρετικά μικρούς χρόνους t . Η πιθανότητα πέφτει βέβαια με το L , αλλά απλά σαν αντίστροφη δύναμη, όχι πιο γρήγορα. Δεδομένου ότι αρχικά το σύστημα ήταν σίγουρα εντοπισμένο εντός του $[0, a]$, αν γίνει μία τέτοια ανίχνευση σημαίνει ότι το σωματίο κινήθηκε με εξαιρετικά μεγάλη ταχύτητα, που μπορεί να ξεπεράσει αυτή του φωτός.

Θα μπορούσε κανείς να απορρίψει αυτό το αποτέλεσμα ως τέχνημα που βασίζεται στην προσέγγιση ότι χρησιμοποιούμε μη-σχετικιστική φυσική για την περιγραφή των σωματιδίων. Ωστόσο ακόμα και στην πλήρη σχετικιστική περιγραφή ενός συστήματος στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας, μπορεί κανείς να αποδείξει το αντίστοιχο του παραπάνω αποτελέσματος [129, 130]. Δεν υπάρχει ακόμα πλήρης ομοφωνία για την ερμηνεία αυτών των αποτελεσμάτων. Είναι όμως σαφές ότι δεν μπορούν να γίνονται αποδεκτές καταστάσεις σωματιδίων που είναι αυστηρά εντοπισμένες σε μία περιοχή, αλλά πάντοτε οι κυματοσυναρτήσεις πρέπει να έχουν μία μεγάλη 'ουρά' και έξω από την περιοχή.

8.3.3 Αρμονικός ταλαντωτής

Ο ευκολότερος τρόπος να βρούμε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης για έναν αρμονικό ταλαντωτή είναι να λύσουμε τις εξισώσεις Χάιζενμπεργκ για τον αντίστοιχο τελεστή δημιουργίας \hat{a} . Θυμίζουμε ότι η Χαμιλτονιανή ενός αρμονικού ταλαντωτή γωνιακής συχνότητας ω είναι $\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}$.

Υπολογίζουμε την εξέλιξη κατά Χαίζενμπεργκ του \hat{a} χρησιμοποιώντας την Εξ. (5.18),

$$\hat{a}(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{a}e^{-i\hat{H}t} = \hat{a} \left[1 - i\omega t + \frac{(-i\omega t)^2}{2} + \dots \right] = e^{-i\omega t}\hat{a}. \quad (8.54)$$

Δρώντας τα δύο σκέλη της Εξ. (8.54) σε μια σύμφωνη κατάσταση $|z\rangle$ βρίσκουμε ότι

$$e^{i\hat{H}t}\hat{a}e^{-i\hat{H}t}|z\rangle = ze^{-i\omega t}|z\rangle. \quad (8.55)$$

Γράφοντας $|\phi\rangle = e^{-i\hat{H}t}|z\rangle$, παίρνουμε $\hat{a}|\phi\rangle = ze^{-i\omega t}|\phi\rangle$, δηλαδή η κατάσταση $|\phi\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση του \hat{a} με ιδιοτιμή $ze^{-i\omega t}$. Άρα η $|\phi\rangle$ ταυτίζεται με τη σύμφωνη κατάσταση $|ze^{-i\omega t}\rangle$. Καταλήγουμε ότι

$$e^{-i\hat{H}t}|z\rangle = |ze^{-i\omega t}\rangle, \quad (8.56)$$

δηλαδή η χρονική εξέλιξη μίας σύμφωνης κατάστασης παραμένει σύμφωνη κατάσταση.

Χρησιμοποιώντας την ανάλυση της μονάδας για σύμφωνες καταστάσεις, υπολογίζουμε τον διαδότη ως

$$G_t(x, x') = \int \frac{d^2z}{\pi} \langle x|e^{-i\hat{H}t}|z\rangle \langle z|x'\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi} \langle x|ze^{-i\omega t}\rangle \langle z|x'\rangle. \quad (8.57)$$

Γράφουμε $z = \sqrt{m\omega/2q} + i/\sqrt{2m\omega}p$, οπότε $ze^{-i\omega t} = (\sqrt{m\omega/2q} \cos \omega t + p/\sqrt{2m\omega} \sin \omega t) + i(p/\sqrt{2m\omega} \cos \omega t - \sqrt{m\omega/2q} \sin \omega t)$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (6.53), η Εξ. (8.57) γίνεται

$$G_t(x, x') = \sqrt{m\omega\pi} \int dqdp \exp \left[-\frac{m\omega(x' - q)^2}{2} + ipx' - \frac{m\omega(x - q \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t)^2}{2} + i(p \cos \omega t - m\omega q \sin \omega t)x \right]. \quad (8.58)$$

Η ολοκλήρωση δίνει

$$G_t(x, x') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega t)}} \exp \left[\frac{im\omega}{2 \sin(\omega t)} ((x^2 + x'^2) \cos(\omega t) - 2xx') \right]. \quad (8.59)$$

8.3.4 Σωματίο σε γενικό δυναμικό

Θα εξετάσουμε τη χρονική εξέλιξη για ένα σωματίο μάζας m σε μία διάσταση που κινείται εντός ενός δυναμικού $V(x)$, όπως στο Σχ. 6.1, που μηδενίζεται έξω από το διάστημα $[a, b]$. Όπως είχαμε δείξει στο Κεφ. 6.3.3, οι γενικευμένες ιδιοτιμές του τελεστή Σρέντινγκερ αντιστοιχούν σε κερ $|k, \pm\rangle$, όπου $k = \sqrt{2mE}$. Για ευκολία, θα θεωρήσουμε ότι ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει μόνο συνεχές φάσμα, δηλαδή δεν υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις.

Σύμφωνα με το φασματικό θεώρημα, ο τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι

$$e^{-i\hat{H}t} = \int_0^\infty dk e^{-i\frac{k^2}{2m}t} (|k, +\rangle \langle k, +| + |k, -\rangle \langle k, -|). \quad (8.60)$$

Έξω από το διάστημα $[a, b]$ τα κερ $|k, \pm\rangle$ είναι της μορφής (6.65). Θεωρούμε μία αρχική κατάσταση $|\psi_0\rangle$ επικεντρωμένη γύρω από το $x_0 < a$. Το x_0 είναι αρκετά μακριά από το a έτσι ώστε η $\psi_0(x)$ να εντοπίζεται στα αριστερά του δυναμικού. Επίσης απαιτούμε η κυματοσυνάρτηση της ορμής $\psi_0(p) =$

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ipx} \psi_0(x)$ να είναι συγκεντρωμένη γύρω από μία τιμή $p_0 > 0$, με εύρος $\Delta p \ll p_0$, έτσι ώστε $\tilde{\psi}_0(p) \simeq 0$ για $p < 0$. Αυτό εξασφαλίζει ότι το σωματίο σίγουρα κινείται προς τα δεξιά.

Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \langle k, + | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx (e^{-ikx} + R_k^* e^{ikx}) \psi_0(x) = \tilde{\psi}_0(k) + R_k^* \tilde{\psi}_0(-k) = \tilde{\psi}_0(k) \\ \langle k, - | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} T_k^* \int dx e^{ikx} \psi_0(x) = T_k^* \tilde{\psi}_0(-k) = 0, \end{aligned}$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι $\tilde{\psi}_0(-k) = 0$, αφού $k > 0$.

Η κυματοσυνάρτηση τη χρονική στιγμή t είναι

$$\psi_t(x) := \langle x | e^{-i\hat{H}t} | \psi_0 \rangle = \int_0^\infty dk \langle x | k, + \rangle \tilde{\psi}_0(k) e^{-i\frac{k^2}{2m}t}. \quad (8.61)$$

Για $x > b$,

$$\psi_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dk T_k \tilde{\psi}_0(k) e^{ikx - i\frac{k^2}{2m}t} \quad (8.62)$$

Για να υπολογίσουμε την Εξ. (8.62) πρώτα γράφουμε $T_k = |T_k| e^{i\phi_k}$. Στη συνέχεια παρατηρούμε ότι η ολοκληρώσιμη ποσότητα είναι επικεντρωμένη γύρω από το p_0 και άρα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση *αναπτύγματος της φάσης*, που παρουσιάστηκε στο Ένθετο 2.2 για τη μετάδοση σχεδόν μονοχρωματικών κυμάτων. Ακολουθούμε τα εξής βήματα.

Πρώτα, αντικαθιστούμε το $|T_k|$ με το $|T_{p_0}|$. Στη συνέχεια, αναπτύσσουμε τους όρους των φάσεων γύρω από το p_0 κρατώντας μέχρι όρους πρώτης τάξης ως προς το $k - p_0$. Δηλαδή γράφουμε $\theta_k = \theta_{p_0} + \theta'_{p_0}(k - p_0)$ και $k^2 = p_0^2 + 2p_0(k - p_0)$. Τέλος, επεκτείνουμε το κάτω όριο ολοκλήρωσης στο $-\infty$ μια και η συνεισφορά από αρνητικές τιμές του k είναι μηδενική.

Έτσι στην Εξ. (8.62) εμφανίζεται το ολοκλήρωμα $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty dk e^{ik(x - p_0 t/m + \theta'_{p_0})} \tilde{\psi}_0(k) = \psi_0(x - p_0 t/m + \theta'_{p_0})$. Καταλήγουμε ότι

$$\psi_t(x) = T_{p_0} e^{i\frac{p_0^2}{2m}t - ip_0\theta'_{p_0}} \psi_0(x - p_0 t/m + \theta'_{p_0}). \quad (8.63)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας ως προς τη θέση τη χρονική στιγμή t είναι

$$|\psi_t(x)|^2 = |T_{p_0}|^2 |\psi_0(x - p_0 t/m + \theta'_{p_0})|^2, \quad (8.64)$$

δηλαδή είναι η αρχική πυκνότητα πιθανότητας με μετατοπισμένο κέντρο και ύψος ελαττωμένο ύψος κατά $|T_{p_0}|^2$. Οπότε η πιθανότητα $\text{Prob}(x > b, t)$ να βρεθεί το σωματίο σε τιμές $x > b$ τη χρονική στιγμή t είναι ίση με

$$\text{Prob}(x > b, t) = \int_b^\infty dx |\psi_t(x)|^2 = |T_{p_0}|^2 \int_{b - p_0 t/m + \theta'_{p_0}}^\infty dx |\psi_0(x)|^2. \quad (8.65)$$

Για πολύ μεγάλο t , το κάτω όριο ολοκλήρωσης γίνεται $-\infty$, οπότε το ολοκλήρωμα γίνεται μονάδα. Οπότε σ' αυτό το όριο

$$\text{Prob}(x > b, t) = |T_{p_0}|^2. \quad (8.66)$$

Αυτός ο υπολογισμός εξηγεί την ερμηνεία του $|T_p|^2$ ως πιθανότητα μετάδοσης από φράγμα δυναμικού.

Η Εξ. (8.66) ισχύει εφόσον η Εξ. (8.63) αποτελεί καλή προσέγγιση για την κυματοσυνάρτηση. Η Εξ. (8.63) αγνοεί την εξάπλωση του κυματοπακέτου. Θεωρούμε ότι η εμβέλεια $d = b - a$ του δυναμικού είναι μικροσκοπική ποσότητα, και ότι η μέτρηση της θέσης γίνεται σε μακροσκοπική απόσταση από το δυναμικό. Αυτό σημαίνει ότι το κυματοπακέτο διαδίδεται τον περισσότερο χρόνο ως ελεύθερο σωματίο. Άρα μπορούμε να εκτιμήσουμε την εξάπλωση του κυματοπακέτου χρησιμοποιώντας τις εκφράσεις για το ελεύθερο σωματίο. Κατά συνέπεια η εξάπλωση του κυματοπακέτου είναι αμελητέα εφόσον περιοριζόμαστε σε χρόνους $t \lesssim m(\Delta x)^2$, όπου Δx η τυπική απόκλιση του αρχικού κυματοπακέτου. Από την άλλη, το όριο του μεγάλου χρόνου στην Εξ. (8.65) προϋποθέτει ότι $p_0 t/m \gg b + \theta'_{p_0}$. Όπως θα επιχειρηματολογήσουμε στη συνέχεια, ο όρος $b + \theta'_{p_0}$ είναι της τάξης μεγέθους της εμβέλειας d , οπότε παίρνουμε $t \gg m\ell/p_0$. Συνδυάζοντας τις δύο ανισότητες βρίσκουμε ότι ικανή συνθήκη για να ισχύει η Εξ. (8.66) είναι

$$\Delta x \gg \sqrt{\frac{d}{p_0}}. \quad (8.67)$$

Επίσης έχουμε απαιτήσει $\Delta p \ll p$, και εφόσον $\Delta p > (\Delta x)^{-1}$, καταλήγουμε σε μια δεύτερη συνθήκη για την Εξ. (8.66)

$$p\Delta x \gg 1. \quad (8.68)$$

Η Εξ. (8.63) σημαίνει ότι το εξερχόμενο σωματίο έχει υποστεί μία καθυστέρηση ίση με $-\frac{m}{p_0}\theta'_{p_0} = -\left(\frac{\partial\theta}{\partial E}\right)_{E_0} > 0$ διασχίζοντας την περιοχή $[a, b]$ —βλ. άσκηση 6.10, γιατί αυτή η ποσότητα είναι θετική. Σ' αυτό το χρόνο όμως συμπεριλαμβάνεται και ο χρόνος md/p_0 που θα διένυε την απόσταση d ένα κλασικό σωματίο απουσία δυναμικού. Οδηγούμαστε έτσι στην εκτίμηση ότι ο χρόνος που χρειάστηκε το σωματίο για να διασχίσει την περιοχή $[a, b]$ είναι

$$\tau = -\frac{m}{p_0}[\theta'_{p_0} + (b - a)]. \quad (8.69)$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε αυτήν την ποσότητα εφόσον έχουμε αναλυτικές εκφράσεις για το πλάτος μετάδοσης. Για φράγμα δυναμικού ύψους V_0 και πλάτους d , στο όριο αδιαφανούς φράγματος, το πλάτος μετάδοσης δίνεται από την Εξ. (6.84). Βρίσκουμε ότι

$$\tau = \frac{2m}{p_0\sqrt{2mV_0 - p_0^2}}. \quad (8.70)$$

Παρατηρούμε ότι το τ δεν εξαρτάται από το πλάτος του φράγματος, παρά μόνο από την ενέργεια. Άρα οσοδήποτε μεγάλο κι αν είναι το φράγμα, το σωματίο θα το διασχίσει στον ίδιο χρόνο. Φαινομενικά αυτό σημαίνει ότι η αναμενόμενη ταχύτητα d/τ του σωματιδίου κατά τη διάρκεια του φαινομένου σήραγγας μπορεί να γίνει οσοδήποτε μεγάλη και άρα να ξεπεράσει αυτού του φωτός.

Αυτή η συμπεριφορά των κβαντικών συστημάτων στο φαινόμενο σήραγγας καλείται φαινόμενο Χάρτμαν [127]. Το συμπέρασμα δεν αλλάζει αν θεωρήσουμε σχετικιστικά σωματίια. Ωστόσο αυτή η παραβίαση του ορίου της ταχύτητας του φωτός δεν είναι φυσική. Στην κβαντική θεωρία αυτό που μας νοιάζει είναι ο χρόνος στον οποίο γίνεται η ανίχνευση του σωματιδίου, γιατί αυτός και μόνο είναι μετρούμενος. Ο χρόνος τ είναι εκτιμώμενος και προκύπτει από τη συνδυασμό των αποτελεσμάτων δύο διαφορετικών πειραμάτων, ενός παρουσία δυναμικού και ενός απουσία δυναμικού, κάτι το οποίο έχουμε ήδη αναφέρει ότι οδηγεί σε παράδοξα στην κβαντική θεωρία.

Η Εξ. (8.64) ισχύει με δεδομένο ότι τόσο η πηγή των σωματιδίων όσο και οι ανιχνευτές βρίσκονται μακριά από την περιοχή όπου βρίσκεται το δυναμικό από την περιοχή του δυναμικού. Αποδεικνύεται ότι ο συνολικός χρόνος μεταξύ της εκπομπής του σωματιδίου (στην περιοχή $x < a$) και της ανίχνευσής του (στην περιοχή $x > b$) ποτέ δεν είναι μικρότερος από αυτό που χρειάζεται το φως για να διασχίσει το ίδιο διάστημα οσοδήποτε μεγάλη και αν είναι η ταχύτητα d/τ [128].

8.4 Συστήματα με χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή

8.4.1 Το χρονοδιατεταγμένο εκθετικό

Σε πολλά πειράματα δρούμε στα μικροσκοπικά συστήματα με εξωτερικά χρονοεξαρτώμενα ηλεκτρικά ή μαγνητικά πεδία. Σ' αυτές τις περιπτώσεις, η χρονική εξέλιξη δίνεται από την εξίσωση του Σρέντινγκερ με χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}(t) |\psi\rangle. \quad (8.71)$$

Γράφουμε τη λύση της ως $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, για κάποια αρχική στιγμή t_0 , όπου ο μοναδιαίος τελεστής $\hat{U}(t, t_0)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (8.72)$$

με αρχική συνθήκη $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$.

Η λύση της εξίσωσης (8.72) είναι

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \hat{I} - i \int_{t_0}^t ds \hat{H}(s) + (-i)^2 \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^{s_1} ds_2 \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) + \dots \\ &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^{s_1} ds_2 \dots \int_{t_0}^{s_{n-1}} ds_n \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) \dots \hat{H}(s_n). \end{aligned} \quad (8.73)$$

Για να το δείξουμε, αρκεί η παρατήρηση ότι η παράγωγος του n -στου όρου της σειράς (8.73) είναι ίση με τον $(n-1)$ -στο όρο της σειράς πολλαπλασιασμένο από αριστερά με $-i\hat{H}(t)$. Δηλαδή,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \left(-i \int_{t_0}^t ds \hat{H}(s) \right) &= \hat{H}(t) \hat{I} \\ i \frac{\partial}{\partial t} \left[(-i)^2 \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^{s_1} ds_2 \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) \right] &= \hat{H}(t) \left(-i \int_{t_0}^t ds \hat{H}(s) \right), \end{aligned} \quad (8.74)$$

και ούτω καθεξής. Οπότε λαμβάνοντας υπόψη όλους τους όρους της σειράς, η Εξ. (8.72) ικανοποιείται.

Μία εναλλακτική έκφραση της Εξ. (8.73) προέρχεται από την παρατήρηση ότι το ολοκλήρωμα που δίνει τον όρο δεύτερης τάξης γράφεται ως

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^{s_1} ds_2 \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) &= \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^t ds_2 \theta(s_1 - s_2) \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^t ds_2 \mathcal{T}[\hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2)], \end{aligned} \quad (8.74)$$

όπου η ποσότητα

$$\mathcal{T}[\hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2)] := \theta(s_1 - s_2) \hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) + \theta(s_2 - s_1) \hat{H}(s_2) \hat{H}(s_1) \quad (8.75)$$

καλείται *χρονοδιατεταγμένο γινόμενο των $\hat{H}(s_1)$ και $\hat{H}(s_2)$* .

Το χρονοδιατεταγμένο γινόμενο για n τελεστές $\hat{H}(s_i)$, όπου $i = 1, 2, \dots, n$, ορίζεται ως

$$\mathcal{T}[\hat{H}(s_1) \hat{H}(s_2) \dots \hat{H}(s_n)] = \hat{H}(s_{i_1}) \hat{H}(s_{i_2}) \dots \hat{H}(s_{i_n}), \quad (8.76)$$

όπου (i_1, i_2, \dots, i_n) μετάθεση των $(1, 2, \dots, n)$ για την οποία ισχύει $s_{i_1} \geq s_{i_2} \geq \dots \geq s_{i_n}$. Με αυτόν τον ορισμό, η Εξ. (8.73) γράφεται ως

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^{s_1} ds_2 \dots \int_{t_0}^{s_{n-1}} ds_n \mathcal{T}[\hat{H}(s_1)\hat{H}(s_2)\dots\hat{H}(s_n)], \quad (8.77)$$

όπου το $n!$ στον παρονομαστή προέκυψε λόγω του γεγονότος ότι υπάρχουν $n!$ διαφορετικές μεταθέσεις για τα n σημεία s_1, s_2, \dots, s_n .

Λόγω της Εξ. (8.73), ο τελεστής $\hat{U}(t, t_0)$ γράφεται εν συντομία $\mathcal{T}e^{-i\int_{t_0}^t ds \hat{H}(s)}$, όπου η εμφάνιση του \mathcal{T} σημαίνει ότι δεν έχουμε το συνηθισμένο εκθετικό, αλλά το ανάπτυγμα (8.77), το οποίο καλείται *χρονοδιατεταγμένο* (time-ordered) εκθετικό ή σειρά Ντάυσον (Dyson series).

8.4.2 Διαταρακτικός υπολογισμός του τελεστή χρονικής εξέλιξης

Το χρονοδιατεταγμένο εκθετικό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο ως εργαλείο υπολογισμού για Χαμιλτονιανές της μορφής $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, όπου \hat{H}_0 είναι μια Χαμιλτονιανή για την οποία μπορούμε να υπολογίσουμε ακριβώς τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $e^{-i\hat{H}_0 t}$ και \hat{V} μία μικρή διαταραχή, που μπορεί να είναι είτε χρονοανεξάρτητη είτε χρονοεξαρτημένη. Για να βρούμε τον τελεστή της χρονικής εξέλιξης $e^{-i\hat{H}t}$, ορίζουμε τον τελεστή

$$\hat{O}(t) := e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}t}, \quad (8.78)$$

ο οποίος ικανοποιεί τη σχέση

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) = -e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_0 e^{-i\hat{H}t} + e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H} e^{-i\hat{H}t} = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}t} = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}t} = \hat{V}(t) \hat{O}(t), \quad (8.79)$$

όπου $\hat{V}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t}$.

Δηλαδή καταλήγουμε σε μία εξίσωση της μορφής (8.72), όπου το $\hat{V}(t)$ παίζει το ρόλο της χρονοεξαρτημένης Χαμιλτονιανής. Άρα ο τελεστής \hat{O}_t εκφράζεται ως ένα χρονοδιατεταγμένο εκθετικό

$$\hat{O}(t) = \mathcal{T}e^{-i\int_0^t ds \hat{V}(s)}. \quad (8.80)$$

Όταν ο όρος \hat{V} είναι σχετικά μικρός, κρατάμε πεπερασμένο αριθμό όρων από το ανάπτυγμα (8.73) και έτσι παίρνουμε προσεγγιστικές λύσεις της Εξ. (8.80). Κρατώντας όρους μέχρι πρώτης τάξης ως προς \hat{V} στην Εξ. (8.73), παίρνουμε

$$\hat{O}(t) \simeq \hat{I} - i \int_0^t ds \hat{V}(s) \quad (8.81)$$

Η Εξ. (8.81) δεν ορίζει ένα μοναδιαίο τελεστή, όπως πρέπει να είναι ο \hat{O}_t . Ωστόσο με την ίδια προσεγγιστική ακρίβεια γράφουμε $\hat{O}(t) \simeq e^{-i\int_0^t ds \hat{V}(s)}$, ο οποίος είναι μοναδιαίος τελεστής, αφού είναι της μορφής $e^{i\hat{A}}$ για \hat{A} αυτοσυζυγή.

8.4.3 Πιθανότητες μετάβασης

Εφαρμόζουμε τα παραπάνω σε ένα σύστημα που περιγράφεται από μία Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 και έναν όρο διαταραχής $\hat{V} = f(t)\hat{A}$, για κάποιον τελεστή \hat{A} και για μία συνάρτηση $f(t)$ που είναι διάφορη του μηδενός μόνο στο διάστημα $[0, T]$. Θεωρούμε ότι το σύστημα είναι αρχικά στην ιδιοκατάσταση $|0\rangle$ του \hat{H}_0 .

Μεταβάσεις σε δέσμιες καταστάσεις. Πρώτα προσδιορίζουμε την πιθανότητα η διαταραχή να οδηγήσει σε μεταβάσεις σε άλλες δέσμιες καταστάσεις του συστήματος. Γράφουμε ως $|n\rangle$ τα ιδιοδιανύσματα της \hat{H}_0 και ως E_n τις αντίστοιχες ιδιοτιμές. Τότε, η πιθανότητα $\text{Prob}(n, t)$ να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση $|n\rangle$ τη χρονική στιγμή t είναι

$$\text{Prob}(n, t) = |\langle n|e^{-i\hat{H}t}|0\rangle|^2 = |\langle n|e^{-i\hat{H}_0t}\hat{O}(t)|0\rangle|^2 = |\langle n|\hat{O}(t)|0\rangle|^2. \quad (8.82)$$

Για $|n\rangle \neq |0\rangle$, η προσέγγιση (8.111) δίνει

$$\langle n|\hat{O}(t)|0\rangle \simeq -i \int_0^t ds f(s) \langle n|e^{i\hat{H}_0s} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0s}|0\rangle = -i A_{n0} \int_0^t ds f(s) e^{-i(E_0 - E_n)s}. \quad (8.83)$$

Για $t > T$ δεν αλλάζει κάτι αν επεκτείνουμε τα όρια της ολοκλήρωσης ως προς s στο $(-\infty, \infty)$. Οπότε, $\langle n|e^{-i\hat{H}t}|0\rangle = -i A_{n0} \tilde{f}(E_0 - E_n)$, όπου \tilde{f} ο μετασχηματισμός Φουριέ της f . Καταλήγουμε ότι

$$\text{Prob}(n, t) = |\tilde{f}(E_0 - E_n)|^2 |A_{n0}|^2. \quad (8.84)$$

Η Εξ. (8.84) ισχύει εφόσον η ποσότητα $\text{Prob}(n, t)$ είναι πολύ μικρότερη της μονάδας.

Εφόσον $t > T$, η πιθανότητα $\text{Prob}(n, t)$ δεν εξαρτάται από το t , οπότε τη γράφουμε ως $\text{Prob}(0 \rightarrow n)$ για να δείξουμε ότι αποτελεί την πιθανότητα μετάβασης από την αρχική κατάσταση $|0\rangle$ στην τελική $|n\rangle$.

Πιθανότητα ιονισμού. Εξετάζουμε την περίπτωση όπου η διαταραχή οδηγεί σε μία μετάβαση από την αρχική δέσμια κατάσταση στο συνεχές φάσμα του \hat{H}_0 . Ένα παράδειγμα είναι ο ιονισμός ενός ατόμου από έναν εξωτερικό ΗΜ παλμό: το ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από μία δέσμια κατάσταση σε μία κατάσταση σκέδασης. Έστω $|E, r\rangle$ τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα του \hat{H}_0 για ενέργεια E , όπου ο δείκτης r υποδηλώνει εκφυλισμό.

Ακολουθούμε την ίδια λογική με την απόδειξη της Εξ. (8.84), και αθροίζουμε ως προς το r , προκειμένου να υπολογίσουμε την πυκνότητα πιθανότητας ιονισμού $p(E)$ με τελική ενέργεια E ,

$$p(E) = |\tilde{f}(E_0 - E)|^2 A(E) \quad (8.85)$$

όπου ορίσαμε $A(E) := \sum_r |\langle E, r|\hat{A}|0\rangle|^2$.

Για τη συνολική πιθανότητα ιονισμού p_{ion} ολοκληρώνουμε ως προς όλες τις ενέργειες στο συνεχές φάσμα $\sigma_c(\hat{H}_0)$ του \hat{H}_0 .

$$p_{ion} = \int_{\sigma_c(\hat{H}_0)} dE |\tilde{f}(E_0 - E)|^2 A(E). \quad (8.86)$$

Χρυσός κανόνας του Φέρμι. Έστω ότι η συνάρτηση $f(t)$ είναι σταθερή και ίση με τη μονάδα για όλα τα $t > 0$, δηλαδή η διαταραχή \hat{V} είναι μόνιμα παρούσα. Το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty f(t) e^{-iEs} ds$ δε συγκλίνει, οπότε γράφουμε $f(t) = e^{-t/T}$, με στόχο να πάρουμε το όριο $T \rightarrow \infty$ στο τέλος. Η παράμετρος $T = \int_0^\infty dt f(t)$ είναι ουσιαστικά η αναμενόμενη διάρκεια του παλμού. Έτσι, $\tilde{f}(E) = \frac{1}{T^{-1} + iE}$.

Γι' αυτήν την επιλογή του f , η Εξ. (8.86) δίνει

$$\frac{p_{ion}}{T} = \int_{\sigma_c(\hat{H}_0)} dE \frac{T^{-1}}{T^{-2} + (E - E_0)^2} A(E) \quad (8.87)$$

Από την Εξ. (5.44) παρατηρούμε ότι στο όριο $T \rightarrow \infty$, η ποσότητα $\frac{T^{-1}}{T^{-2} + (E - E_0)^2}$ συγκλίνει στο $\pi \delta(E - E_0)$, οπότε το δεξί σκέλος της Εξ. (8.87) ισούται με $\pi A(E_0)$. Άρα και ο αριστερός όρος θα πρέπει να

συγκλίνει σε πεπερασμένη ποσότητα. Αυτή τη συμβολίζουμε ως w_{ion} , έχει διαστάσεις αντιστρόφου χρόνου και ουσιαστικά αντιστοιχεί στο ρυθμό διάσπασης της αρχικής κατάστασης.

Καταλήγουμε λοιπόν στο λεγόμενο χρυσό κανόνα του Φέρμι,

$$w_{ion} = \pi A(E_0), \quad (8.88)$$

που μας επιτρέπει να υπολογίζουμε το ρυθμό διάσπασης ασταθών κβαντικών συστημάτων. Παρατηρούμε ότι για να είναι διάφορη του μηδενός η ποσότητα (8.88), πρέπει οπωσδήποτε να υπάρχουν καταστάσεις του συνεχούς φάσματος στην ίδια ενέργεια με την αρχική κατάσταση $|0\rangle$. Αυτό σημαίνει ότι το φάσμα της Χαμιλτονιανής είναι του τύπου (στ) στο Σχ. 8.1 και ότι η $|0\rangle$ δεν μπορεί να είναι η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος.

Πρέπει να τονίσουμε ότι η παραπάνω απόδειξη είναι προβληματική, γι' αυτό και μιλάμε για κανόνα του Φέρμι και όχι για θεώρημα του Φέρμι. Για να συγκλίνει ο λόγος $\frac{p_{ion}}{T}$ σε μία σταθερά, πρέπει το p_{ion} να απειρίζεται για $T \rightarrow \infty$, κάτι που είναι ασύμβατο με τον ορισμό του σαν πιθανότητα ($p_{ion} \leq 1$), πόσο μάλλον με τη διαταρακτική προσέγγιση που προϋποθέτει ότι $p_{ion} \ll 1$. Ο χρυσός κανόνας όντως δουλεύει, αλλά τη μαθηματικά σωστή απόδειξή του θα τη δούμε σε επόμενο κεφάλαιο.

Αρμονική διαταραχή. Θεωρούμε στη συνέχεια περιοδικό παλμό $f(t) = \cos \Omega t$ για μεγάλους χρόνους, $T \rightarrow \infty$. Ισοδύναμα γράφουμε $f(t) = \cos(\Omega t)e^{-t/T}$ και παίρνουμε το όριο $T \rightarrow \infty$ στο τέλος του υπολογισμού.

Βρίσκουμε ότι $\tilde{f}(E) = \frac{T^{-1} + iE}{\Omega^2 + (T^{-1} + iE)^2}$, οπότε

$$|\tilde{f}(E)|^2 = \frac{1}{4} \frac{1 + (ET)^{-2}}{\left(\frac{\Omega^2 - E^2 + T^{-2}}{2E}\right)^2 + T^{-2}}. \quad (8.89)$$

Για $T \rightarrow \infty$, η Εξ. (5.44) δίνει $|\tilde{f}(E)|^2 = \frac{\pi T}{4} \delta\left(\frac{\Omega^2 - E^2}{2E}\right) = \frac{\pi T}{2} [\delta(E - \Omega) + \delta(E + \Omega)]$. Με την ίδια λογική που οδηγεί στο χρυσό κανόνα του Φέρμι, βρίσκουμε το ρυθμό ιονισμού

$$w_{ion} = \frac{\pi}{2} [A(E_0 + \Omega) + A(E_0 - \Omega)]. \quad (8.90)$$

Στο όριο $\Omega \rightarrow 0$ παίρνουμε την Εξ. (8.88).

Παράδειγμα 8.1. Θεωρούμε ως \hat{H}_0 τον τελεστή Σρέντινγκερ για σωματίο μάζας m σε δυναμικό $V(x) = -\eta\delta(x)$ που εξετάσαμε στο Κεφ. 6.5.1. Χαρακτηρίζεται από ένα και μοναδικό ιδιοδιάνυσμα $\psi_0(x) = \sqrt{m\eta}e^{-m\eta|x|}$ με ενέργεια $E_0 = -\frac{m\eta^2}{2}$ και γενικευμένα ιδιοδιανύσματα $|k, \pm\rangle$ για $k = \frac{k^2}{2m}$, που δίνονται από την Εξ. (6.91). Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε τα ιδιοδιανύσματα $|E, \pm\rangle = \sqrt{\frac{m}{k}}|k, \pm\rangle$, τα οποία ικανοποιούν τη σχέση κανονικοποίησης $\langle E, \pm | E', \pm \rangle = \delta(E - E')$.

Θεωρούμε τη δράση ενός εξωτερικού παλμού $\hat{V}(t) = f(t)\hat{x}$, όπου η συνάρτηση $f(t)$ μηδενίζεται έξω από το διάστημα $[0, T]$. Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα $\int_0^\infty dx x e^{-ax} = a^{-2}$ και την Εξ. (6.92), παίρνουμε

$$\langle 0 | \hat{x} | E, \pm \rangle = \sqrt{\frac{\eta}{2\pi}} \frac{i\eta(2mE)^{1/4}}{(E - E_0)^2}. \quad (8.91)$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι

$$A(E) = \begin{cases} \frac{\eta^3}{\pi} \frac{\sqrt{2mE}}{(E - E_0)^4}, & E \geq 0 \\ 0, & E < 0. \end{cases} \quad (8.92)$$

Η πιθανότητα ιονισμού είναι

$$p_{ion} = \frac{\eta^3}{\pi} \int_0^\infty dE |\tilde{f}(E_0 - E)|^2 \frac{\sqrt{2mE}}{(E - E_0)^4}. \quad (8.93)$$

Για πολύ σύντομο παλμό, γράφουμε $f(t) = \lambda\delta(t - t_0)$ για κάποια σταθερά λ και $t_0 \in [0, T]$. Σ' αυτήν την περίπτωση $\tilde{f}(E) = \lambda e^{-iEt_0}$, οπότε

$$p_{ion} = \frac{\eta^3 \lambda^2}{\pi} \int_0^\infty dE \frac{\sqrt{2mE}}{(E - E_0)^4} = \frac{\lambda^2}{2m^2 \eta^2}, \quad (8.94)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{(x+a)^4} = \frac{\pi}{16a^{5/2}}$.

Ο ρυθμός ιονισμού μηδενίζεται για σταθερό εξωτερικό πεδίο, αφού $A(E_0) = 0$, ενώ για περιοδική διαταραχή, η Εξ. (8.90) σημαίνει ότι ο ρυθμός ιονισμού είναι μη μηδενικός μόνο όταν $\Omega > |E_0|$ και ίσος με $\frac{\pi}{2} A(\Omega - |E_0|)$.

8.4.4 Ταλαντώσεις Ράμπι

Στη συνέχεια, εξετάζουμε την εξέλιξη ενός κιούμπι κάτω από τη δράση ενός ισχυρού χρονοεξαρτώμενου πεδίου, για το οποίο δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη διαταρακτική έκφραση του τελεστή χρονικής εξέλιξης.

Θεωρούμε τη χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}(t) = \frac{\omega}{2}(\hat{I} + \hat{\sigma}_3) + gf(t)\hat{\sigma}_1, \quad (8.95)$$

όπου $\omega > 0$ και g σταθερά με διαστάσεις ενέργειας. Η Χαμιλτονιανή (8.95) περιγράφει, για παράδειγμα, τη θεμελιώδη ($|0\rangle$) και τη διεγερμένη ($|1\rangle$) ενεργειακή στάθμη ενός ατόμου η οποία υπόκειται στη δράση ενός κλασικού εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου (λείζερ) που μεταβάλλεται στο χρόνο σύμφωνα με τη συνάρτηση $f(t)$.

Γράφουμε τη Χαμιλτονιανή (8.95) ως $\hat{H}_0 + \hat{V}$, ξεχωρίζοντας τον τελεστή \hat{H}_0 που περιγράφει την ενδογενή δυναμική του κιούμπι από τον τελεστή \hat{V} που περιγράφει τη δράση του εξωτερικού πεδίου.

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\omega}{2}(\hat{I} + \hat{\sigma}_3) = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{V} &= gf(t)\hat{\sigma}_1 = g \begin{pmatrix} 0 & f(t) \\ f(t) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.95)$$

Έστω $\hat{U}(t)$ ο τελεστής χρονικής εξέλιξης που αντιστοιχεί στη Χαμιλτονιανή (8.95). Ορίζουμε τον τελεστή $\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{U}(t)$. Παραγωγίζοντας ως προς t βρίσκουμε

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) = \hat{V}(t) \hat{O}(t), \quad (8.96)$$

όπου

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & gf(t) \\ gf(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= gf(t) \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.96)$$

Η εξίσωση (8.96) δεν έχει ακριβή λύση για γενικό $f(t)$, γι' αυτό το λόγο καταφεύγουμε σε προσεγγίσεις για την επίλυση της. Η προσέγγιση τυχαίου κύματος (Random Wave Approximation, RWA) είναι χρήσιμη όταν η εξωτερική δύναμη είναι περιοδική με συχνότητα πολύ κοντά σ' αυτή του κιούμπι. Έστω $f(t) = \cos(\tilde{\omega}t)$, $\tilde{\omega}$ μια εξωτερική συχνότητα που θεωρούμε ότι ικανοποιεί τη συνθήκη $|\tilde{\omega} - \omega| \ll \omega$. Ο τελεστής (8.96) γίνεται

$$\hat{V}(t) = \frac{g}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega+\tilde{\omega})t} + e^{i(\omega-\tilde{\omega})t} \\ e^{-i(\omega+\tilde{\omega})t} + e^{-i(\omega-\tilde{\omega})t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.97)$$

Η προσέγγιση τυχαίου κύματος βασίζεται στο ότι, για $|\tilde{\omega} - \omega| \ll \omega$, οι ταλαντώσεις με συχνότητα $\tilde{\omega} + \omega$ είναι πολύ πιο γρήγορες από τις ταλαντώσεις με συχνότητα $|\omega - \tilde{\omega}|$. Στη διάρκεια μία περιόδου των δεύτερων οι πρώτες έχουν επαναληφθεί πολλές φορές. Αν μας ενδιαφέρουν μετρήσεις σε χρονικές κλίμακες πολύ μεγαλύτερες του $\tilde{\omega}^{-1}$ μπορούμε να πάρουμε ένα μέσο όρο των γρήγορων ταλαντώσεων αφού γίνονται σε χρόνους που δεν μπορούμε να ξεχωρίσουμε. Αυτό σημαίνει ότι ο όρος $e^{i(\omega+\tilde{\omega})t}$ στην Εξ. (8.97) μπορεί να αντικατασταθεί από τη μέση τιμή του σε μία περίοδο, που είναι μηδέν. Έτσι,

$$\hat{V}(t) \simeq \frac{g}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega-\tilde{\omega})t} \\ e^{-i(\omega-\tilde{\omega})t} & 0 \end{pmatrix} = e^{i\hat{H}_1 t} \hat{V}_1 e^{-i\hat{H}_1 t}, \quad (8.98)$$

όπου

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \Delta \hat{\sigma}_3 \quad \hat{V}_1 = \frac{g}{2} \sigma_1. \quad (8.99)$$

Η ποσότητα $\Delta = \omega - \tilde{\omega}$ είναι η διαφορά της εξωτερικής συχνότητας από την εσωτερική του κιούμπι και καλείται *αποσυντονισμός* του συστήματος.

Για να λύσουμε την Εξ. (8.96), ορίζουμε $\hat{O}_1(t) = e^{-i\hat{H}_1 t} \hat{O}(t)$, οπότε από την Εξ. (8.98) βρίσκουμε

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_1(t) = \hat{H}_2 \hat{O}_1(t), \quad (8.100)$$

όπου $\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \hat{V}_1$. Η λύση της Εξ. (8.100) είναι $\hat{O}_1(t) = e^{-i\hat{H}_2 t}$, και χρησιμοποιώντας την Εξ. (8.32) βρίσκουμε

$$\hat{O}_1(t) = \cos(\Omega_R t) \hat{I} + i \frac{\sin(\Omega_R t)}{2\Omega_R} (g\hat{\sigma}_1 + \Delta\hat{\sigma}_3), \quad (8.101)$$

όπου η συχνότητα

$$\Omega_R = \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 + g^2}, \quad (8.102)$$

καλείται συχνότητα Ράμπι (Rabi) του συστήματος.

Ο συνολικός τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}_1 t} e^{-i\hat{H}_2 t}$. Αν τη στιγμή $t = 0$, το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|0\rangle$, η πιθανότητα να βρεθεί στην κατάσταση $|1\rangle$ τη χρονική στιγμή t είναι $p(1, t) = |\langle 1|\hat{U}(t)|0\rangle|^2$. Καθώς $\langle 1|\hat{U}(t)|0\rangle = e^{i\omega t + \frac{i\Delta}{2}t} \langle 1|e^{-i\hat{H}_2 t}|0\rangle$, παίρνουμε

$$p(1, t) = |\langle 1|e^{-i\hat{H}_2 t}|0\rangle|^2 = \frac{g^2}{4\Omega_R^2} \sin^2(\Omega_R t), \quad (8.103)$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (8.32).

Η πιθανότητα (8.103) είναι περιοδική συνάρτηση του χρόνου και περιγράφει *ταλαντώσεις Ράμπι* (Rabi). Οι ταλαντώσεις αυτές είναι αξιοσημείωτες, γιατί η συχνότητά Ω_R δεν είναι κοντά ούτε στην εσωτερική συχνότητα του κιούμπιτ ούτε στη συχνότητα της εξωτερικής δύναμης. Εν γένει είναι πολύ μικρότερη από τις παραπάνω, σε βαθμό που η περίοδος μίας ταλάντωσης μπορεί να διακριθεί πειραματικά. Επίσης, τόσο η συχνότητα Δ όσο και η σταθερά σύζευξης g είναι χαρακτηριστικά της εξωτερικής πηγής και μπορούν να ρυθμίζονται κατά βούληση από τον πειραματικό. Για παράδειγμα, αν το κιούμπιτ αντιστοιχεί σε ένα άτομο και η εξωτερική περιοδική δύναμη αντιστοιχεί σε προσπίπτουσα ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (λείζερ), το g είναι ανάλογο της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, η οποία αποτελεί ρυθμιζόμενη παράμετρο του λείζερ.

8.5 Η αδιαβατική προσέγγιση

8.5.1 Το αδιαβατικό θεώρημα

Στη συνέχεια εξετάζουμε την περίπτωση όπου η χρονική εξάρτηση της Χαμιλτονιανής $\hat{H}(t)$ είναι εξαιρετικά ασθενής. Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η περίπτωση που η Χαμιλτονιανή εξαρτάται από κάποιες εξωτερικές παραμέτρους, οι τιμές των οποίων μεταβάλλονται σε χρονική κλίμακα πολύ μεγαλύτερη από αυτή που αντιστοιχεί στους μικροσκοπικούς χρόνους της κβαντικής εξέλιξης. Τέτοια περίπτωση είναι η αργή μεταβολή ενός εξωτερικού πεδίου ή η κίνηση των τοιχωμάτων για ένα σωματίο περιορισμένο σε κουτί.

Σ' αυτό το πρόβλημα είναι χρήσιμο να ορίσουμε τα *στιγμαία ιδιοδιανύσματα* $|n, t\rangle$ και τις στιγμιαίες ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής $\hat{H}(t)$,

$$\hat{H}|n, t\rangle = E_n(t)|n, t\rangle. \quad (8.104)$$

Θεωρούμε για ευκολία ότι η Χαμιλτονιανή έχει αμιγώς διακριτό φάσμα.

Αναπτύσσουμε τη γενική λύση $|\psi(t)\rangle$ της εξίσωσης Σρέντινγκερ

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad (8.105)$$

ως προς τη βάση των στιγμιαίων ιδιοδιανυσμάτων, $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n, t\rangle$. Η Εξ. (8.105) γίνεται

$$\sum_n \left[(\dot{c}_n(t) - iE_n(t))|n, t\rangle + c_n(t)\frac{d}{dt}|n, t\rangle \right] = 0. \quad (8.106)$$

Γράφουμε $c_n(t) = b_n(t)e^{-i\theta_n(t)}$, όπου $\theta_n = \int_0^t ds E_n(s)$, οπότε η Εξ. (8.106) γίνεται

$$\sum_n e^{-i\theta_n(t)} \left[\dot{b}_n(t)|n, t\rangle + b_n(t)\frac{d}{dt}|n, t\rangle \right] = 0. \quad (8.107)$$

Πολλαπλασιάζοντας με το μπρα $\langle m, t|$, παίρνουμε

$$\dot{b}_m(t) + \sum_n b_n(t)e^{-i[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}\langle m, t|\frac{d}{dt}|n, t\rangle = 0. \quad (8.108)$$

Για να υπολογίσουμε το $\langle m, t|\frac{d}{dt}|n, t\rangle$ παραγωγίζουμε ως προς t και τα δύο σκέλη της Εξ. (8.104), οπότε βρίσκουμε $\dot{\hat{H}}|n, t\rangle + \hat{H}\frac{d}{dt}|n, t\rangle = \dot{E}_n(t)|n, t\rangle + E_n(t)\frac{d}{dt}|n, t\rangle$. Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με το μπρα $\langle m, t|$, οπότε

$$[E_m(t) - E_n(t)]\langle m, t|\frac{d}{dt}|n, t\rangle = \dot{E}_n\delta_{mn} - \langle m, t|\dot{\hat{H}}|n, t\rangle. \quad (8.109)$$

Για $m \neq n$ και απουσία εκφυλισμού,

$$\langle m, t | \frac{d}{dt} | n, t \rangle = \frac{\langle m, t | \dot{H} | n, t \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}. \quad (8.110)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (8.108) βρίσκουμε

$$\dot{b}_m(t) + \langle m, t | \frac{d}{dt} | m, t \rangle b_m(t) + \sum_{n \neq m} b_n(t) e^{-i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \frac{\langle m, t | \dot{H} | n, t \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} = 0. \quad (8.111)$$

Στο Ένθετο 8.2 αποδεικνύεται ότι για επαρκώς αργή μεταβολή της Χαμιλτονιανής με το χρόνο, ο τελευταίος όρος στην Εξ. (8.111) γίνεται πολύ μικρός και μπορεί να αγνοηθεί. Αυτό το αποτέλεσμα είναι γνωστό ως *αδιαβατικό θεώρημα*. Οπότε η Εξ. (8.111) γίνεται

$$\dot{b}_m(t) + \langle m, t | \frac{d}{dt} | m, t \rangle b_m(t) = 0. \quad (8.112)$$

Η ποσότητα $\langle m, t | \frac{d}{dt} | m, t \rangle$ είναι καθαρά φανταστική καθότι η παραγωγή της συνθήκης κανονικοποίησης $\langle m, t | m, t \rangle = 1$, δίνει $\text{Re} \langle m, t | \frac{d}{dt} | m, t \rangle = 0$. Γράφουμε λοιπόν

$$\langle m, t | \frac{d}{dt} | m, t \rangle = -iR_m(t), \quad (8.113)$$

οπότε η Εξ. (8.111) λύνεται ως

$$b_m(t) = b_m(0) e^{-i \int_0^t ds R_m(s)}. \quad (8.114)$$

Άρα η γενική λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ γράφεται ως

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-i \int_0^t ds [R_n(s) - E_n(s)]} |n, t\rangle. \quad (8.115)$$

Αυτό σημαίνει ότι αν το σύστημα βρίσκεται αρχικά σε μία στιγμιαία ιδιοκατάσταση $|n, t\rangle$ της Χαμιλτονιανής, θα παραμείνει σε στιγμιαία ιδιοκατάσταση αποκομίζοντας κατά τη χρονική εξέλιξη μία φάση

$$\phi_n(t) = \int ds \langle n, s | i \frac{d}{ds} - \hat{H}(s) | n, s \rangle = \gamma_n(t) - \chi_n(t), \quad (8.116)$$

όπου $\gamma_n(t) = \int ds \langle n, s | i \frac{d}{ds} | n, s \rangle$ είναι η κινηματική συνεισφορά στη φάση και $\chi_n(t) = \int ds E_n(s)$ η δυναμική συνεισφορά στη φάση.

Ένθετο 8.2. Απόδειξη του αδιαβατικού θεωρήματος

Για να εξετάσουμε την περίπτωση της εξαιρετικά αργής μεταβολής της Χαμιλτονιανής θεωρούμε ότι η εξάρτηση της \hat{H} από το χρόνο είναι μέσω του συνδυασμού t/μ , όπου το μ είναι μία αδιάστατη ποσότητα που παίρνει μεγάλες τιμές. Βεβαίως την ίδια εξάρτηση από το χρόνο θα έχουν και τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα $|n, t\rangle$ και οι γενικευμένες ιδιοτιμές $E_n(t)$. Το ζητούμενο είναι να βρούμε τη μορφή της Εξ. (8.111) στο όριο $\mu \rightarrow \infty$. Αλλάζουμε μεταβλητή χρόνου σε $\tau = t/\mu$, οπότε η Εξ. (8.111) γίνεται

$$\frac{d}{d\tau} b_m(\tau) + \langle m, \tau | \frac{d}{d\tau} | m, \tau \rangle b_m(\tau) + \sum_{n \neq m} b_n(\tau) e^{-i\mu[\theta_n(\tau) - \theta_m(\tau)]} \frac{\langle m, \tau | \dot{H}(\tau) | n, \tau \rangle}{E_n(\tau) - E_m(\tau)} = 0 \quad (8.117)$$

Ολοκληρώνοντας όλους τους όρους της Εξ. (8.117) παίρνουμε

$$b_m(\tau) - b_m(0) + \int_0^\tau ds \langle m, s | \frac{d}{ds} | m, s \rangle b_m(s) \quad (8.118)$$

$$+ \sum_{n \neq m} \int_0^\tau ds b_n(s) e^{-i\mu[\theta_n(s) - \theta_m(s)]} \frac{\langle m, s | \dot{H}(s) | n, s \rangle}{E_n(s) - E_m(s)} = 0 \quad (8.119)$$

Θεωρούμε ότι οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής απέχουν μεταξύ τους απόσταση τουλάχιστον ϵ_0 για όλες τις χρονικές στιγμές, δηλαδή

$$|E_n(t) - E_m(t)| > \epsilon_0 \quad (8.120)$$

για κάθε n, m με $n \neq m$. Αυτό σημαίνει ότι η ποσότητα $\theta_n(s) - \theta_m(s)$ είναι πάντα είτε θετική είτε αρνητική. Επιπλέον $|\theta_n(s) - \theta_m(s)| \geq \epsilon_0 s$, οπότε η φάση αλλάζει με συχνότητα μεγαλύτερη του ϵ_0 . Άρα το ολοκλήρωμα στον τελευταίο όρο της Εξ. (8.119) είναι της μορφής $I(\tau) = \int_0^\tau ds e^{\pm i\mu a(s)} f(s)$, όπου $a(s)$ μια θετική αύξουσα συνάρτηση και $f(s)$ μια συνεχής συνάρτηση. Με ολοκλήρωση κατά παράγοντες βρίσκουμε

$$I(\tau) = \frac{1}{\pm i\mu} \left(e^{\pm i\mu a(s)} \frac{f(s)}{\dot{a}(s)} \Big|_0^\tau - \int_0^\tau ds e^{\pm i\mu a(s)} g(s) \right), \quad (8.121)$$

όπου $g(s) = \frac{d}{ds} \frac{f(s)}{\dot{a}(s)}$. Το ολοκλήρωμα στην Εξ. (8.121) είναι κι αυτό της ίδιας μορφής με το $I(t)$, οπότε με ολοκλήρωση κατά παράγοντες εμφανίζεται κι αυτό έναν πολλαπλασιαστικό όρο μ^{-1} και ένα άλλο ολοκλήρωμα ίδιου τύπου. Καταλήγουμε ότι το $I(s)$ συμπεριφέρεται ως μ^{-1} για μεγάλα μ , οπότε στο όριο $\mu \rightarrow 0$, $I(t) = 0$.

Άρα ο τελευταίος όρος της Εξ (8.111) είναι πολύ μικρός στο όριο της εξαιρετικά αργούς μεταβολής. Αποδείξαμε λοιπόν το *αδιαβατικό θεώρημα*. Στην παραπάνω απόδειξη θεωρήσαμε Χαμιλτονιανή με διακριτό φάσμα, χωρίς εκφυλισμό και υπό τη συνθήκη (8.120), όπως στην αρχική απόδειξη του φασματικού θεωρήματος από τους Μπορν και Φοκ [131]. Το θεώρημα έχει γενικευτεί για Χαμιλτονιανή με εκφυλισμένες ιδιοτιμές [132] και απουσία της συνθήκης (8.120) [133].

8.5.2 Γεωμετρική φάση

Έστω ότι το φυσικό μας σύστημα χαρακτηρίζεται από κάποιες εξωτερικές παραμέτρους a_1, a_2, \dots, a_n , οι οποίες μπορούν να μεταβληθούν μακροσκοπικά. Για παράδειγμα, τα a_i μπορούν να αντιστοιχούν σε ένα εξωτερικό ηλεκτρικό ή μαγνητικό πεδίο ή στις διαστάσεις ενός κουτιού στο οποίο είναι κλεισμένο το σύστημα. Κάθε δυνατή τιμή των a_1, a_2, \dots, a_n ορίζει ένα σημείο ενός συνόλου Γ και θα αναπαρίσταται από ένα διάνυσμα \mathbf{a} .

Σ' αυτό το σύστημα η Χαμιλτονιανή $\hat{H}(\mathbf{a})$ είναι συνάρτηση του \mathbf{a} , και ομοίως οι ιδιοτιμές της $E_n(\mathbf{a})$ και τα ιδιοδιανύσματα $|n, \mathbf{a}\rangle$. Έστω ότι αλλάζουμε τις τιμές των εξωτερικών παραμέτρων με το χρόνο, ώστε να ορίζεται μία διαδρομή $\mathbf{a}(t)$ στο Γ . Για επαρκώς αργή μεταβολή ισχύει το αδιαβατικό θεώρημα. Έστω ότι η αρχική κατάσταση είναι ιδιοδιάνυσμα της αρχικής Χαμιλτονιανής $\hat{H}[\mathbf{a}(0)]$. Γράφουμε την κατάσταση τη χρονική στιγμή t ως $|\mathbf{a}(t)\rangle$, όπου αγνοούμε το δείκτη n που προσδιορίζει την ιδιοτιμή.

Αγνοώντας το δείκτη n , γράφουμε $R(t) = i \langle \mathbf{a}(t) | \frac{d}{dt} | \mathbf{a}(t) \rangle = \sum_i A_i[\mathbf{a}(t)] da_i/dt$, όπου

$$A_i(\mathbf{a}) = i \langle \mathbf{a} | \frac{\partial}{\partial a_i} | \mathbf{a} \rangle \quad (8.122)$$

είναι ένα διανυσματικό πεδίο ορισμένο στο Γ , το οποίο καλείται *σύνδεση Μπέρυ* (M. Berry).

Έστω τώρα ότι η διαδρομή $\mathbf{a}(t)$ είναι κλειστή, δηλαδή $\mathbf{a}(T) = \mathbf{a}(0)$. Τότε η κινηματική συνεισφορά στη φάση

$$\gamma = \sum_i \int_0^T dt A_i(\mathbf{a}(t)) \frac{da_i(t)}{dt} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{a}, \quad (8.123)$$

εξαρτάται μόνο από την κλειστή διαδρομή και όχι από το πώς αυτή εξαρτάται από το χρόνο t . Γι' αυτό το λόγο καλείται *γεωμετρική φάση* [134].

Παρατηρούμε ότι η γεωμετρική φάση μηδενίζεται αν $A_i = \partial f / \partial a_i$ για οποιαδήποτε βαθμωτή συνάρτηση f στο Γ . Οπότε ο μετασχηματισμός βαθμίδας,

$$A_i \rightarrow A_i + \frac{\partial f}{\partial a_i}, \quad (8.124)$$

ανάλογος της Εξ. (1.19) για το ΗΜ πεδίο, δεν αλλάζει την τιμή της γεωμετρικής φάσης.

Παράδειγμα 8.3. Θεωρούμε κιούμπιτ με χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή $\hat{H} = -\mathbf{a}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Εφόσον το διάνυσμα \mathbf{a} έχει τρεις συνιστώσες, ο χώρος Γ ταυτίζεται με το \mathbf{R}^3 .

Από την Εξ. (6.17), τα στιγμιαία ιδιοδιανύσματα $|\mathbf{a}\rangle$ με τη χαμηλότερη ενέργεια ($-|\mathbf{a}(t)|$) είναι της μορφής

$$|\mathbf{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{a}|(|\mathbf{a}| - a_3)}} \begin{pmatrix} a_1 - ia_2 \\ |\mathbf{a}| - a_3 \end{pmatrix}. \quad (8.125)$$

Είναι βολικό να χρησιμοποιήσουμε τις συνήθεις πολικές συντεταγμένες (a, θ, ϕ) , όπου $a_1 = a \sin \theta \cos \phi$, $a_2 = a \sin \theta \sin \phi$, $a_3 = a \cos \theta$, έτσι ώστε

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (8.126)$$

Τα διανύσματα $|\mathbf{a}\rangle$ δεν εξαρτώνται από την παράμετρο $a = |\mathbf{a}|$.

Διαφορίζοντας βρίσκουμε ότι

$$d|\mathbf{a}\rangle = \begin{pmatrix} \left(-\frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2} d\theta - i \cos \frac{\theta}{2} d\phi\right) e^{-i\phi} \\ \frac{1}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta \end{pmatrix}. \quad (8.127)$$

Για να βρούμε τη σύνδεση Μπέρυ υπολογίζουμε το εσωτερικό γινόμενο

$$\langle \mathbf{a} | d|\mathbf{a}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \left(-\frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2} d\theta - i \cos \frac{\theta}{2} d\phi\right) + \frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = -\frac{i}{2} (1 + \cos \theta) d\phi. \quad (8.128)$$

Η σύνδεση Μπέρυ έχει συνιστώσες

$$A_\theta = 0, \quad A_\phi = \frac{1}{2} (1 + \cos \theta). \quad (8.129)$$

Με ένα μετασχηματισμό βαθμίδας μπορούμε να αφαιρέσουμε το σταθερό όρο $\frac{1}{2}$ από το A_ϕ έτσι ώστε $A_\phi = \frac{1}{2} \cos \theta$. Από το θεώρημα του Στόουκς, η γεωμετρική φάση $\gamma(C) = \frac{1}{2} \oint_C \cos \theta d\phi$ για μια κλειστή διαδρομή C ισούται με $-\frac{1}{2} \int_S \sin \theta d\theta d\phi$, όπου S η περιοχή της μοναδιαίας σφαίρας που περικλείεται από την C . Το ολοκλήρωμα $\int_S \sin \theta d\theta d\phi$ είναι ίσο με το εμβαδόν της S , η ισοδύναμη με τη στερεά γωνία $\Omega(C)$ ως προς το κέντρο της σφαίρας. Καταλήγουμε λοιπόν ότι

$$\gamma(C) = -\frac{1}{2} \Omega(C). \quad (8.130)$$

Ομοίως για τα στιγμιαία ιδιοδιανύσματα μέγιστης ενέργειας, η γεωμετρική φάση σε μια διαδρομή C υπολογίζεται $\gamma(C) = \frac{1}{2} \Omega(C)$.

Ερωτήσεις

1. Συναντάτε τον εξής ισχυρισμό. "Η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου σημαίνει ότι για πολύ μικρούς χρόνους η ενέργεια δε διατηρείται στην κβαντική θεωρία." Ποια είναι η γνώμη σας;
2. Διατυπώστε ακριβώς τον ορισμό των χρονικών παραμέτρων που εμφανίζονται στις διαφορετικές εφαρμογές της σχέσης αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου στο Κεφ. 8.2.3.
3. Εξετάστε τις προσεγγίσεις που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό της Εξ. (8.66) και προτείνετε περριπτώσεις που η Εξ. (8.66) δεν ισχύει.
4. Πώς αλλάζει η γεωμετρική φάση αν η Χαμιλτονιανή $\hat{H}(t)$ αντικατασταθεί από την $f(t)\hat{H}(t)$ για κάποια συνάρτηση f ;

Ασκήσεις

1. Έστω κιούμπιτ με Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \omega\hat{\sigma}_3$, όπου $\omega > 0$, που προετοιμάζεται σε αρχική κατάσταση $\hat{\rho}_0$ ($t = 0$). Αν τη χρονική στιγμή t γίνει μέτρηση της ποσότητας $\hat{A} = \sigma_1$, ποιες είναι οι πιθανότητες για τα αποτελέσματα της μέτρησης; Θεωρείστε το γενικότερο δυνατό $\hat{\rho}_0$.
2. Έστω κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^3 . Η Χαμιλτονιανή του συστήματος έχει ιδιοδιανύσματα $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$, με αντίστοιχες ιδιοτιμές $E_1 = 0, E_2 = \omega, E_3 = 3\omega$, όπου $\omega > 0$. Το σύστημα προετοιμάζεται αρχικά ($t = 0$) σε μία κατάσταση

$$\hat{\rho}_0 = \frac{2}{3}|\alpha_+\rangle\langle\alpha_+| + \frac{1}{3}|\alpha_-\rangle\langle\alpha_-|,$$

όπου $|\alpha_{\pm}\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle \pm \sqrt{2}|2\rangle + |3\rangle)$. Μετά από χρόνο t γίνεται μέτρηση που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} = k|\alpha_+\rangle\langle\alpha_+| - k|\alpha_-\rangle\langle\alpha_-|$, όπου $k > 0$. Ποια είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης, και ποιες οι αντίστοιχες πιθανότητες;

3. Θεωρείστε την εξελισσόμενη κυματοσυνάρτηση (8.42) για ελεύθερο σωματίο και χρησιμοποιήστε τη θέση \hat{x} του σωματιδίου ως 'ρολόι' για το χρόνο. Βρείτε την αβεβαιότητα του χρόνου δt κατά Μάντελσταμ και Ταμ, και υπολογίστε το γινόμενο $\Delta H \delta t$.
4. Αποδείξτε την ανισότητα (8.27).
5. (α) Δείξτε ότι η ισότητα στην Εξ. (8.26) προκύπτει για καταστάσεις $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\theta}|1\rangle)$, όπου $|0\rangle$ η θεμελιώδης και $|1\rangle$ η πρώτη διεγερμένη. (β) Αποδείξτε την ανισότητα $-\frac{\pi^2}{4}(1 - \cos x) + x \sin x + 2x^2 \geq 0$ προκειμένου να δείξετε ότι $a(t) \geq 1 + \frac{4t}{\pi^2}\dot{a} - \frac{4t^2}{\pi^2}(\Delta H)^2$, όπου το $a(t)$ δίνεται από την Εξ. (8.20). (γ) Δείξτε ότι η κατάσταση $|\psi\rangle$ δίνει ισότητα και στην Εξ. (8.26).
6. Υπολογίστε το διαδότη για ελεύθερο σωματίο μάζας m που κινείται στην ημιευθεία.
7. Υπολογίστε το διαδότη για ένα σωματίο που κινείται σε μία διάσταση, όταν η σχέση ενέργειας-ορμής για το σωματίο είναι $E = v|p|$, όπου v η ταχύτητα διάδοσης.
8. Βρείτε το διαδότη (8.59) για τον αρμονικό ταλαντωτή από την Εξ. (8.58). Χρησιμοποιήστε την ταυτότητα για n -διάστατο Γκαουσιανό ολοκλήρωμα

$$\int d^n \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^T A \xi + b^T \xi} = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\det A} e^{b^T A^{-1} b},$$

όπου ξ και b διανύσματα στήλης και A θετικός πίνακας.

9. Έστω ο διαδότης ενός σωματιδίου $G_t(x, x') = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | x' \rangle$ για μιγαδική παράμετρο χρόνου $t = -i\tau$, $\tau > 0$. (α) Δείξτε ότι για $\tau \rightarrow \infty$, η κυρίαρχη συνεισφορά στο διαδότη είναι της μορφής $\psi_0(x)\psi_0^*(x')e^{-E_0\tau}$, όπου ψ_0 η ιδιοκατάσταση χαμηλότερης ενέργειας και E_0 η αντίστοιχη ιδιοτιμή. (β) Υπολογίστε το $\psi_0(x)$ και το E_0 για το διαδότη του αρμονικού ταλαντωτή (8.59).
10. Γράψτε την κυματοσυνάρτηση (8.61) για $x < a$. Θεωρώντας σχεδόν μονοχρωματική αρχική κατάσταση με ορμή p_0 δείξτε ότι για $t \rightarrow \infty$, $\text{Prob}(x < a, t) = |R_{p_0}|^2$.
11. (α) Αποδείξτε την Εξ. (8.70). (β) Βρείτε το χρόνο τ που κάνει ένα σωματίο για να διασχίσει το δυναμικό δέλτα.
12. Κιούμπιτ με Χαμιλτονιανή $\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\omega\hat{\sigma}_3$ προετοιμάζεται στη θεμελιώδη κατάσταση $|0\rangle$. Τη χρονική στιγμή $t = 0$ δρα πάνω του ασθενής παλμός διάρκειας T , που αντιστοιχεί σε όρο αλληλεπίδρασης $f(t)\hat{\sigma}_1$ στη Χαμιλτονιανή. Υπολογίστε την πιθανότητα να έχει διεγερθεί το κιούμπιτ για $t > T$, αν (α) $f(t) = g \sin(\frac{\pi t}{T})$, (β) $f(t) = g$ και (γ) $f(t) = \lambda\delta(t)$, για σταθερές g και λ .
13. Αρμονικός ταλαντωτής συχνότητας ω προετοιμάζεται στη θεμελιώδη κατάσταση $|0\rangle$. Τη χρονική στιγμή $t = 0$ δρα πάνω του ασθενής παλμός διάρκειας T , που αντιστοιχεί σε έναν όρο αλληλεπίδρασης $f(t)\hat{x}$ στη Χαμιλτονιανή. Υπολογίστε την πιθανότητα να βρεθεί στη διεγερμένη κατάσταση $|n\rangle$ ($n > 0$) για $t > T$, αν (α) $f(t) = g \sin(\frac{\pi t}{T})$, (β) $f(t) = g$ και (γ) $f(t) = \lambda\delta(t)$, για σταθερές g και λ .
14. Αποδείξτε την Εξ. (8.91).
15. Υπολογίστε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης για κιούμπιτ με Χαμιλτονιανή (8.95) στα πλαίσια της αδιαβατικής προσέγγισης.
16. Σωματίο μάζας m σε μία διάσταση κινείται υπό χρονοεξαρτημένο δυναμικό δέλτα $V(x) = -\eta(t)\delta(x)$, για $\eta(t) = \eta_0 + \gamma \cos(\omega t)$, όπου $\eta_0 > \gamma > 0$. Υπολογίστε στην αδιαβατική προσέγγιση τη γεωμετρική και τη δυναμική φάση για τη θεμελιώδη κατάσταση του.
17. Τα στιγμιαία ιδιοδιανύσματα $|n, t\rangle$ μιας χρονοεξαρτημένης Χαμιλτονιανής μπορούν να οριστούν και με διαφορετικές χρονοεξαρτημένες φάσεις $e^{i\theta_n(t)}|n, t\rangle$. Δείξτε ότι κάτω από το μετασχηματισμό $|n, t\rangle \rightarrow e^{i\theta_n(t)}|n, t\rangle$, η φάση (8.116) μετασχηματίζεται ως $\phi_n(t) \rightarrow \phi_n(t) - [\theta_n(t) - \theta_n(0)]$.
18. Σωματίο βρίσκεται εντός μονοδιάστατου κουτιού $[0, L(t)]$, με την απόσταση των τοιχωμάτων να μεταβάλλεται με το χρόνο ως $L(t) = L_0 + a \sin(\omega t)$, $0 < a < L_0$. Αν αρχικά βρίσκεται σε γραμμική επαλληλία $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ της στιγμιαίας Χαμιλτονιανής, βρείτε την κατάσταση τη χρονική στιγμή $t = \frac{2\pi}{\omega}$ στην αδιαβατική προσέγγιση.
19. Θεωρείστε ότι ένα σωματίο σε μία διάσταση δρα κάτω από χρονοεξαρτημένη Χαμιλτονιανή που το υποχρεώνει να εξελίσσεται σε μία διαδρομή από σύμφωνες καταστάσεις $|z(t)\rangle$. Υπολογίστε την αντίστοιχη σύνδεση Μπέρυ.

Βιβλιογραφία

- Για το χρόνο στην κβαντική θεωρία, βλ. το άρθρο του Zeh, Time in Quantum Theory, στο Compendium of Quantum Physics [135], το βιβλίο του Zeh [136] ενώ μια ιστορική επισκόπηση δίνεται στο εισαγωγικό άρθρο από τον J. C. Muga στον τόμο [137]. Για ένα ευρύτερο πλαίσιο συζήτησης για το χρόνο στην κβαντική θεωρία βλέπε το άρθρο Isham και Savvidou [138].
- Για τη σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου, βλ. το άρθρα επισκόπησης του Busch στο [137] και το [139].
- Για τη γεωμετρική φάση και τις εφαρμογές της, βλ. τον τόμο [140].

Κεφάλαιο 9

Αναγωγή της κβαντικής κατάστασης

...οι κβαντομηχανικές εξισώσεις κίνησης δεν περιγράφουν τη διαδικασία της μέτρησης. Απλά βοηθούν στον υπολογισμό των πιθανοτήτων για τα αποτελέσματα των μετρήσεων. Αυτές οι πιθανότητες αποτελούν το πραγματικό περιεχόμενο της κβαντικής θεωρίας. Ο φορμαλισμός των καταστατικών διανυσμάτων, εξισώσεων κίνησης κλπ είναι απλά το μέσο για να υπολογιστούν αυτές οι πιθανότητες. Τα αποτελέσματα των παρατηρήσεων είναι η μόνη "πραγματικότητα" που υπόκειται της κβαντικής μηχανικής. Το καταστατικό διάνυσμα δεν αναπαριστά την πραγματικότητα. Είναι απλά ένα υπολογιστικό εργαλείο.

E. Βίγκνερ [142]

9.1 Κλασική αναγωγή της κατάστασης

Πολλά πειράματα απαιτούν την εκτέλεση όχι μίας αλλά περισσότερων μετρήσεων σε ένα μικροσκοπικό σύστημα. Για παράδειγμα, έστω ότι μελετάμε ένα σωματίο A το οποίο διασπάται σε ένα ζεύγος σωματιδίων B και Γ που κινούνται προς διαφορετικές κατευθύνσεις και το καθένα ανιχνεύεται από διαφορετικό ανιχνευτή σε διαφορετικές χρονικές στιγμές. Χρειαζόμαστε έναν κανόνα που μας λέει πώς να ενσωματώσουμε την πληροφορία από την πρώτη μέτρηση (έστω του σωματιδίου B) στην κβαντική κατάσταση προκειμένου να περιγράψουμε τη δεύτερη μέτρηση (του σωματιδίου Γ).

Ας δούμε πρώτα το αντίστοιχο πρόβλημα στο επίπεδο της κλασικής θεωρίας πιθανοτήτων. Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα που περιγράφεται από έναν καταστατικό χώρο Γ . Προετοιμάζουμε ένα στατιστικό σύνολο από τέτοια συστήματα που περιγράφονται από την πυκνότητα πιθανότητας $p(x)$, όπου $x \in \Gamma$. Σε κάθε σύστημα κάνουμε δύο διαδοχικές μετρήσεις, πρώτα μία που αντιστοιχεί σε συνάρτηση F και κατόπιν μία που αντιστοιχεί σε συνάρτηση G . Έστω C_λ το υποσύνολο του Γ που αντιστοιχεί σε τιμή λ της συνάρτησης F , ($F(x) = \lambda$) και D_μ το υποσύνολο του Γ που αντιστοιχεί σε τιμές μ της συνάρτησης G ($G(x) = \mu$).

Όταν γίνει η μέτρηση του F τότε ένα κλάσμα

$$\text{Prob}(\lambda) = \int_{C_\lambda} p(x) dx = \int dx \chi_{C_\lambda}(x) p(x) \quad (9.1)$$

του στατιστικού συνόλου θα βρεθεί με τιμή λ . Η από κοινού πιθανότητα $\text{Prob}(\lambda, \mu)$ να έχει βρεθεί λ στην πρώτη και μ στη δεύτερη μέτρηση ταυτίζεται με την πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην τομή $C_\lambda \cap D_\mu$, δηλαδή

$$\text{Prob}(\lambda, \mu) = \int_{C_\lambda \cap D_\mu} dx p(x) = \int dx \chi_{C_\lambda \cap D_\mu}(x) = \int dx \chi_{D_\mu}(x) [\chi_{C_\lambda}(x) p(x)]. \quad (9.2)$$

Η δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(\mu|\lambda)$ να μετρήσουμε μ δεδομένου ότι έχουμε μετρήσει λ είναι

$$\text{Prob}(\mu|\lambda) = \frac{\text{Prob}(\lambda, \mu)}{\text{Prob}(\lambda)} = \int dx \chi_{D_\mu}(x) \frac{\chi_{C_\lambda}(x)p(x)}{\text{Prob}(\lambda)}. \quad (9.3)$$

Δηλαδή για να πάρουμε τη δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(\mu|\lambda)$ περιγράφουμε το στατιστικό υποσύνολο που μετρήθηκε να έχει τιμή λ στην πρώτη μέτρηση με την πυκνότητα πιθανότητας

$$\chi_{C_\lambda}(x)p(x)/\text{Prob}(\lambda).$$

Συμπεραίνουμε ότι στην κλασική θεωρία πιθανοτήτων, η ενσωμάτωση πληροφορίας στη στατιστική περιγραφή λόγω μετρήσεων γίνεται με βάση τον ακόλουθο κανόνα.

Κλασικός κανόνας αναγωγής της κατάστασης. Αν ένα στατιστικό σύνολο περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας $p(x)$, το στατιστικό υποσύνολο στο οποίο μετρήθηκε τιμή λ μιας μεταβλητής F , περιγράφεται μετά τη μέτρηση από την πυκνότητα πιθανότητας

$$\frac{\chi_{C_\lambda}(x)p(x)}{\text{Prob}(\lambda)}.$$

9.2 Κβαντική αναγωγή της κατάστασης

9.2.1 Αναγωγή για καθαρές καταστάσεις

Ακολουθούμε την αναλογία μεταξύ κλασικών και κβαντικών μετρήσεων, όπως παρουσιάστηκε στο κεφ. 5.8. Έστω ότι έχουμε δύο διαδοχικές μετρήσεις που αντιστοιχούν σε δύο τελεστές $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και $\hat{B} = \sum_m b_m \hat{Q}_m$. Υποθέτουμε καθαρή αρχική κατάσταση $|\psi\rangle$. Από την αναλογία μεταξύ φασματικών προβολών και χαρακτηριστικών συναρτήσεων οδηγούμαστε στον εξής κανόνα.

Θεμελιώδης αρχή 5. Αν ένα στατιστικό σύνολο περιγράφεται από ένα καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$, το στατιστικό υποσύνολο στο οποίο η μέτρηση του τελεστή \hat{A} έδωσε τιμή a_n περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα

$$|\psi; a_n\rangle = \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}}. \quad (9.2)$$

Η παραπάνω σχέση καλείται *κανόνας αναγωγής της κβαντικής κατάστασης*.

Αν οι φασματικοί προβολείς είναι μονοδιάστατοι $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$, για μια ορθοκανονική βάση $|n\rangle$, τότε ο κανόνας αναγωγής της κατάστασης απλοποιείται ως

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi, a_n\rangle = \frac{\langle n | \psi \rangle}{|\langle n | \psi \rangle|} |n\rangle. \quad (9.3)$$

Η δεσμευμένη πιθανότητα να μετρηθεί τιμή b_m στη δεύτερη μέτρηση αφού βρεθεί τιμή a_n στην πρώτη είναι

$$\text{Prob}(b_m|a_n) = \langle \psi; a_n | \hat{Q}_m | \psi; a_n \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{P}_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}. \quad (9.4)$$

Η από κοινού πιθανότητα να βρεθεί αποτέλεσμα a_n στην πρώτη μέτρηση και στη συνέχεια αποτέλεσμα b_m στη δεύτερη μέτρηση είναι

$$\text{Prob}(a_n, b_m) = \text{Prob}(b_m|a_n) \cdot \text{Prob}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{P}_n | \psi \rangle. \quad (9.5)$$

Βλέπουμε ότι η σειρά με την οποία γίνονται οι μετρήσεις επηρεάζει τις από κοινού πιθανότητες:

$$\text{Prob}(a_n, b_m) \neq \text{Prob}(b_m, a_n) \quad (9.6)$$

εκτός αν $[\hat{P}_n, \hat{Q}_m] = 0$, για κάθε n και m , ή ισοδύναμα αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Σ' αυτήν την περίπτωση

$$\text{Prob}(a_n, b_m) = \langle \psi | \hat{P}_n \hat{Q}_m | \psi \rangle. \quad (9.7)$$

Αντιδιαστέλλουμε την Εξ. (9.6) με την κλασική από κοινού πιθανότητα (9.2), η οποία δεν εξαρτάται από τη σειρά των δυο μετρήσεων. Βλέπουμε ότι ο κανόνας αναγωγής της κβαντικής κατάστασης εισάγει μία ιδιάζουσα φορά του χρόνου στην κβαντική μηχανική.

9.2.2 Αναγωγή γενικών καταστάσεων

Η Θεμελιώδης αρχή 5 εύκολα γενικεύεται για την περίπτωση που η αρχική κατάσταση του στατιστικού συνόλου αντιστοιχεί σε μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Δεδομένου ότι μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ αναλύεται σε ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$, ως $\hat{\rho} = \sum_i w_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, μπορούμε να εφαρμόσουμε την αρχή 5 σε κάθε διάνυσμα $|\psi_i\rangle$ χωριστά. Καταλήγουμε στο εξής.

Θεμελιώδης αρχή 5β. Αν ένα στατιστικό σύνολο περιγράφεται από την μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$, το στατιστικό υποσύνολο στο οποίο η μέτρηση του τελεστή \hat{A} έδωσε τιμή a_n περιγράφεται από την μήτρα πυκνότητας

$$\hat{\rho}(a_n) = \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n)}.$$

Η δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(a_n|b_m)$ να μετρηθεί τιμή b_m στη δεύτερη μέτρηση αφού βρεθεί τιμή a_n στην πρώτη είναι

$$\text{Prob}(b_m|a_n) = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}_m \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n)}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n)}, \quad (9.7)$$

ενώ η από κοινού πιθανότητα $\text{Prob}(a_n, b_m)$ είναι

$$\text{Prob}(a_n, b_m) = \text{Tr}(\hat{Q}_m \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n) = \text{Tr}(\hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{P}_n \hat{\rho}) \quad (9.8)$$

Και πάλι η σειρά των μετρήσεων επηρεάζει τις πιθανότητες εκτός αν $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, οπότε

$$\text{Prob}(a_n, b_m) = \text{Tr}(\hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{\rho}) \quad (9.9)$$

Η σχέση (9.8) δεν περιέχει τη συνεισφορά της Χαμιλτονιανής εξέλιξης του συστήματος. Έστω ότι το σύστημα περιγράφεται από Χαμιλτονιανή \hat{H} . Αν η πρώτη μέτρηση γίνεται τη χρονική στιγμή t_1 και η δεύτερη τη χρονική στιγμή t_2 , τότε εξελίσσουμε κάθε κατάσταση $\hat{\rho}(a_n)$ που προκύπτει μετά την πρώτη μέτρηση ως $e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)} \hat{\rho}(a_n) e^{i\hat{H}(t_2-t_1)}$. Καταλήγουμε ότι

$$\text{Prob}(a_n, t_1; b_m, t_2) = \text{Tr}(\hat{Q}_m e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)} \hat{P}_n e^{-i\hat{H}t_1} \hat{\rho} e^{i\hat{H}t_1} \hat{P}_n e^{i\hat{H}(t_2-t_1)}). \quad (9.10)$$

9.2.3 Διαφορά κλασικής και κβαντικής αναγωγής της κατάστασης

Με βάση τα παραπάνω θα μπορούσε κανείς να ισχυριστεί ότι η αναγωγή της κβαντικής κατάστασης είναι ο τρόπος με τον οποίο ορίζεται η έννοια της δεσμευμένης πιθανότητας στην κβαντική θεωρία. Ωστόσο υπάρχει μια σημαντική διαφοροποίηση του κβαντικού κανόνα αναγωγής της κατάστασης από τον κλασικό. Αφορά την περιγραφή του στατιστικού συνόλου ύστερα από μία διαδικασία μέτρησης.

Έστω ένα κλασικό στατιστικό σύνολο με N μέλη το οποίο περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας $p(x)$. Κάθε πιθανό αποτέλεσμα της μέτρησης λ αντιστοιχεί σε ένα στατιστικό υποσύνολο με $N\text{Prob}(\lambda)$ μέλη και άρα στατιστικό βάρος $\text{Prob}(\lambda)$, που περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας

$$p_\lambda(x) = \frac{\chi_{C_\lambda}(x)p(x)}{\text{Prob}(\lambda)}. \quad (9.11)$$

Άρα μετά τη μέτρηση το όλο στατιστικό σύνολο (με τα N μέλη) περιγράφεται από τη μίξη των πυκνοτήτων πιθανότητας (9.11) με βάρος $\text{Prob}(\lambda)$,

$$p'(x) = \sum_\lambda \text{Prob}(\lambda)p_\lambda(x) = \sum_\lambda \chi_{C_\lambda}(x)p(x) = 1 \cdot p(x) = p(x). \quad (9.12)$$

Βλέπουμε, ότι η μέτρηση δεν άλλαξε την πυκνότητα πιθανότητας που περιγράφει το στατιστικό σύνολο.

Ας εφαρμόσουμε το αντίστοιχο σκεπτικό σε ένα στατιστικό σύνολο από κβαντικά συστήματα, το οποίο περιγράφεται από μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Κάθε πιθανό αποτέλεσμα a_n μίας μέτρησης αντιστοιχεί σε ένα στατιστικό υποσύνολο με $N\text{Prob}(a_n)$ μέλη, και άρα στατιστικό βάρος $\text{Prob}(a_n)$, που περιγράφεται από μία μήτρα πυκνότητας

$$\hat{\rho}(a_n) = \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\text{Prob}(a_n)}. \quad (9.13)$$

Μετά τη μέτρηση το όλο στατιστικό σύνολο περιγράφεται από τη μήτρα πυκνότητας

$$\hat{\rho}' = \sum_n \text{Prob}(a_n) \hat{\rho}(a_n) = \sum_n \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n, \quad (9.14)$$

η οποία γενικά διαφέρει από την αρχική μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$. Σε αντίθεση με το τί συμβαίνει στην κλασική θεωρία πιθανοτήτων, στην κβαντική θεωρία η ενσωμάτωση της πληροφορίας των αποτελεσμάτων της μέτρησης αλλάζει την κατάσταση που περιγράφει το σύστημα.

Αυτό σημαίνει το εξής. Στην κλασική θεωρία πιθανοτήτων δεν κάνει διαφορά αν έγινε μέτρηση και εμείς δεν ξέρουμε το αποτέλεσμα της ή αν δεν έγινε καν μέτρηση σε ένα σύστημα. Η άγνοια είναι μαθηματικά ισοδύναμη με την απουσία μέτρησης. Κβαντικά όμως αυτό δεν ισχύει: ακόμα κι αν έχουμε άγνοια για το αποτέλεσμα της μέτρησης, τα αποτελέσματα οποιασδήποτε μελλοντικής μέτρησης στο σύστημα *εξαρτώνται από το γεγονός ότι προηγήθηκε άλλη μέτρηση*.

Η κβαντική κατάσταση δεν περιγράφει μόνο τη γνώση που έχουμε για ένα σύστημα, γιατί μεταβάλλεται στις μετρήσεις ανεξάρτητα της γνώσης μας ως παρατηρητές για το αποτέλεσμα της μέτρησης.

Θα μπορούσε κανείς να διερωτηθεί, μήπως η αλλαγή της κατάστασης οφείλεται σε αλληλεπίδραση του μετρούμενου συστήματος με τη μετρητική συσκευή; Η απάντηση είναι αρνητική. Η αλληλεπίδραση με τη μετρητική συσκευή θα οδηγούσε σε μοναδιαία εξέλιξη της κβαντικής κατάστασης σύμφωνα με την εξίσωση του Σρέντινγκερ: $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$ για κάποιον μοναδιαίο τελεστή \hat{U} , που δεν είναι συμβατή με την Εξ. (9.14).

9.2.4 Διαδοχικές μετρήσεις σε κιούμπιτ

Έστω ότι κάνουμε δύο διαδοχικές μετρήσεις σε ένα κιούμπιτ, όπου η πρώτη αντιστοιχεί σε αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A} = \hat{\sigma}_1$ και η δεύτερη σε αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{B} = \hat{\sigma}_3$. Σύμφωνα με την Εξ. (6.18), οι φασματικοί προβολείς \hat{P}_\pm και \hat{Q}_\pm των \hat{A} και \hat{B} αντίστοιχα δίνονται από τις σχέσεις

$$\hat{P}_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{P}_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{Q}_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{Q}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.15)$$

Έστω ότι η αρχική κατάσταση είναι $|\psi\rangle = |1\rangle$. Οι από κοινού πιθανότητες για τα αποτελέσματα των μετρήσεων είναι, σύμφωνα με τη σχέση (9.8),

$$\begin{aligned} \text{Prob}(a = 1, b = 1) &= \langle 1 | \hat{P}_+ \hat{Q}_+ \hat{P}_+ | 1 \rangle = \frac{1}{4} & \text{Prob}(a = 1, b = -1) &= \langle 1 | \hat{P}_+ \hat{Q}_- \hat{P}_+ | 1 \rangle = \frac{1}{4} \\ \text{Prob}(a = -1, b = 1) &= \langle 1 | \hat{P}_- \hat{Q}_+ \hat{P}_- | 1 \rangle = \frac{1}{4} & \text{Prob}(a = -1, b = -1) &= \langle 1 | \hat{P}_- \hat{Q}_- \hat{P}_- | 1 \rangle = \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Σ' αυτό το παράδειγμα είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι οι πιθανότητες αλλάζουν αν αλλάξει η σειρά των μετρήσεων. Μετρώντας πρώτα τον \hat{B} και μετά το \hat{A} βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \text{Prob}(b = 1, a = 1) &= \langle 1 | \hat{Q}_+ \hat{P}_+ \hat{Q}_+ | 1 \rangle = \frac{1}{2} & \text{Prob}(b = 1, a = -1) &= \langle 1 | \hat{Q}_+ \hat{P}_- \hat{Q}_+ | 1 \rangle = \frac{1}{2} \\ \text{Prob}(b = -1, a = 1) &= \langle 1 | \hat{Q}_- \hat{P}_+ \hat{Q}_- | 1 \rangle = 0 & \text{Prob}(b = -1, a = -1) &= \langle 1 | \hat{Q}_- \hat{P}_- \hat{Q}_- | 1 \rangle = 0. \end{aligned}$$

Υπολογίζουμε επίσης τη συνολική πιθανότητα $\text{Prob}_2(b = 1)$ να βρεθεί το αποτέλεσμα +1 στη δεύτερη μέτρηση. Είναι ίση με

$$\text{Prob}_2(b = 1) = \text{Prob}(a = 1, b = 1) + \text{Prob}(a = -1, b = 1) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}. \quad (9.12)$$

Σε αντίθεση αν δεν είχε γίνει η πρώτη μέτρηση, η πιθανότητα να είχε μετρηθεί $b = +1$ θα ήταν ίση με $\langle 1 | \hat{Q}_+ | 1 \rangle = 1$. Επιβεβαιώνουμε αυτό που αναφέραμε προηγουμένως, ότι η άγνοια για το αποτέλεσμα μιας μέτρησης δεν είναι ισοδύναμη με το να μην υπάρχει μέτρηση.

9.3 Ερμηνεία της αναγωγής της κβαντικής κατάστασης

Για να ερμηνεύσουμε την αναγωγή της κβαντικής κατάστασης πρέπει πρώτα να κατανοήσουμε πώς εμφανίζεται στη μαθηματική περιγραφή. Παρατηρούμε στην Εξ. (9.10), ότι τόσο πριν όσο και μετά την αναγωγή, η κβαντική κατάσταση εξελίσσεται μέσω μοναδιαίων τελεστών σαν να μην έχει περάσει χρόνος. Αυτό σημαίνει ότι η αναγωγή αναπαρίσταται μαθηματικά ως μία στιγμιαία (ή σχεδόν στιγμιαία) διαδικασία.

Αν η κβαντική κατάσταση είναι αντικειμενικό χαρακτηριστικό ενός συστήματος, τότε αυτή η μαθηματική περιγραφή φαίνεται να υπονοεί δύο ξεχωριστούς κανόνες χρονικής εξέλιξης στην κβαντική θεωρία,

- η μοναδιαία εξέλιξη σε ένα κλειστό σύστημα, όσο αυτό δεν αλληλεπιδρά με κάποια μετρητική συσκευή. Αυτή η εξέλιξη της κβαντικής κατάστασης είναι πλήρως αιτιοκρατική, καθώς η εξίσωση του Σρέντινγκερ είναι μία διαφορική εξίσωση.
- η αναγωγή της κβαντικής κατάστασης όταν γίνεται μία μέτρηση και το μικροσκοπικό σύστημα 'επιλέγει' την τιμή της μεταβλητής που πραγματοποιείται.

Σ' αυτήν την περιγραφή, η τυχαιότητα της κβαντομηχανικής εμφανίζεται μόνο τη στιγμή της μέτρησης. Αυτή η ερμηνεία είναι αρκετά απλή και ελκυστική γιατί προσφέρει έναν κλασικά κατανοητό-σιμο τρόπο για το πώς λειτουργεί η κβαντική θεωρία. Αλλά είναι βαθιά προβληματική. Οι λόγοι είναι οι εξής.

Πού γίνεται η αναγωγή; Η παραπάνω ερμηνεία προϋποθέτει ότι η κατάσταση ενός συστήματος είναι ένα αντικειμενικό χαρακτηριστικό του συστήματος. Αυτό σημαίνει ότι θα μπορούμε να αποδώσουμε μία κβαντική κατάσταση στο σύνθετο σύστημα που αποτελείται και από το μικροσκοπικό σύστημα M που μετριέται όσο και από τη μετρητική συσκευή A . Με την ολοκλήρωση της μέτρησης, ο δείκτης της μετρητικής συσκευής (σκεφτείτε έναν αναλογικό δείκτη, όπως σε μια ζυγαριά) δείχνει μία συγκεκριμένη τιμή. Εφόσον ο δείκτης περιγράφεται ως κβαντικό μέγεθος, το γεγονός ότι παίρνει συγκεκριμένη τιμή σημαίνει ότι η κατάσταση του σύνθετου συστήματος $M+A$ υπέστη αναγωγή. Αλλά τι το ιδιαίτερο έχει ο δείκτης της συσκευής; Μπορούμε να υποθέσουμε ένα μεγαλύτερο σύστημα, το οποίο περιλαμβάνει το μικροσκοπικό σύστημα M , τη μετρητική συσκευή A και μια φωτογραφική μηχανή B που καταγράφει τη θέση του δείκτη. Τότε η θέση του δείκτη στη φωτογραφία περιγράφεται ως μια κβαντική μεταβλητή, και αφού είναι συγκεκριμένη, πρέπει να θεωρήσουμε αναγωγή στο σύστημα $M+A+B$; Και βεβαίως μπορούμε να συνεχίσουμε θεωρώντας ολοένα και μεγαλύτερα συστήματα $M+A+B+Γ+...$

Το πρόβλημα είναι ότι αν η αναγωγή γίνεται στο επίπεδο του M , δεν επηρεάζονται οι βαθμοί ελευθερίας του A . Αν γίνεται στο επίπεδο του $M+A$, επηρεάζονται οι βαθμοί ελευθερίας του M , αλλά δεν επηρεάζονται οι βαθμοί ελευθερίας του B , κοκ. Δηλαδή, η φυσική περιγραφή εξαρτάται από το επίπεδο στο οποίο έγινε η αναγωγή. Αλλά η κβαντική θεωρία δε μας λέει ποιο είναι αυτό το επίπεδο, γιατί δε μας λέει τι είναι αυτό που καθιστά μία φυσική διαδικασία μέτρηση. Άρα η θεωρία δεν μπορεί να μας προσδιορίσει μοναδικά ποια είναι η κβαντική κατάσταση του συστήματος $M+A+B$ μετά τη μέτρηση. Αυτή η αμφισημία είναι απογοητευτική, αν όχι ανεπίτρεπτη, για μια φυσική θεωρία. Αυτό είναι το λεγόμενο πρόβλημα της *οριοθέτησης*, ότι η κβαντική θεωρία προαπαιτεί το διαχωρισμό των φυσικών συστημάτων σε μετρούμενα και μετρούμενα, αλλά δεν μας λέει πώς να κάνουμε αυτό το διαχωρισμό.

Το πρόβλημα της οριοθέτησης δεν υφίσταται, αν εμείς αντιμετωπίζουμε την αναγωγή ως απλή κωδικοποίηση πληροφορίας για το αποτέλεσμα της μέτρησης, και όχι ως φυσική διαδικασία. Τότε δεν έχει σημασία με ποια οριοθέτηση κάνουμε την αναγωγή, αρκεί οι πιθανότητες που προκύπτουν για τα αποτελέσματα της μέτρησης να είναι συμβατές.

Μήπως όμως υπάρχει ένα προτιμητέο επίπεδο περιγραφής, στο οποίο γίνεται η αναγωγή ως φυσική διαδικασία και απλά δεν περιγράφεται από την υπάρχουσα θεωρία; Στην τελική, την ένδειξη της μετρητικής συσκευής (ή της κάμερας που φωτογραφίζει το αποτέλεσμα) την καταγράφει ένας άνθρωπος, συνήθως οπτικά. Οπότε η αναγωγή αφορά το σήμα από την ένδειξη της συσκευής στον αμφιβληστροειδή του παρατηρητή. Αλλά κι αυτό είναι αυθαίρετο σημείο περιγραφής, μπορούμε να πάμε πιο πίσω, στους νευρώνες και στο ηλεκτροχημικό σήμα που στέλνουν στον εγκέφαλο. Αλλά εδώ η διαδικασία έχει ένα τέλος, πέρα από το οποίο δεν μπορούμε να πάμε: αυτό είναι η καταγραφή του αποτελέσματος της μέτρησης στη συνείδηση του παρατηρητή. Οδηγούμαστε έτσι στη σκέψη ότι η αναγωγή γίνεται στο επίπεδο που το αποτέλεσμα της μέτρησης γίνεται συνειδητό, ή πιο χονδρικά, ότι η αναγωγή γίνεται από τη συνείδηση του παρατηρητή. Αυτή η ιδέα δεν μπορεί να αποκλειστεί από την ως τώρα γνώση μας, και είναι ιδιαίτερα ελκυστική για πολλούς. Δεν ξεπερνάει όμως το επίπεδο της εικασίας: απουσία μιας ανεξάρτητης θεωρίας της συνείδησης, δεν έχουμε τρόπο να τη χειριστούμε και να την αναπτύξουμε σε μια συγκροτημένη θεωρία.

Αναγωγή της κατάστασης και σχετικότητα. Υπάρχει ένα πολύ ισχυρότερο επιχείρημα ενάντια στην αντικειμενικότητα της κβαντικής κατάστασης και στη θεώρηση της αναγωγής της κατάστασης ως φυσική διαδικασία. Αυτό το επιχείρημα βασίζεται στη θεωρία της σχετικότητας.

Θα αναφερθούμε λεπτομερέστερα στην κβαντική θεωρία σε συνδυασμό με τη σχετικότητα σε μεταγενέστερο κεφάλαιο. Για το συγκεκριμένο θέμα, τα μόνα δεδομένα που χρειαζόμαστε είναι τα εξής.

1. Τα φυσικά γεγονότα αντιστοιχούν σε σημεία του χωροχρόνου. Ένα σημείο του χωροχρόνου A περιγράφεται σε ένα σύστημα αναφοράς Σ από μία χρονική συντεταγμένη $t(A)$ και τρεις χωρικές συντεταγμένες $x_1(A), x_2(A), x_3(A)$. Αν πάμε σε ένα άλλο σύστημα αναφοράς Σ' παίρνουμε διαφορετικές συντεταγμένες $t'(A)$ και $x'_1(A), x'_2(A), x'_3(A)$ για το ίδιο σημείο.
2. Υπάρχουν σημεία του χωροχρόνου, έστω A και B, με την εξής ιδιότητα. Υπάρχει σύστημα αναφοράς Σ στο οποίο το A συμβαίνει πριν από το B, $t(A) < t(B)$ και ένα άλλο σύστημα αναφοράς Σ' στο οποίο το B συμβαίνει πριν από το A, $t'(A) < t'(B)$. Τότε τα A και B καλούνται χωροειδώς απομακρυσμένα.

Ξεκινάμε περιγράφοντας το σύστημα στο σύστημα αναφοράς Σ . Έστω ότι αρχικά ένα κβαντικό σύστημα είναι στην κατάσταση $|\psi\rangle$. Στο σημείο A μετρούμε μία ποσότητα $\hat{X} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και στο σημείο B μία ποσότητα $\hat{Y} = \sum_m b_m \hat{Q}_m$. Περιοριζόμαστε στο στατιστικό υποσύνολο που μετρήθηκε a_n και b_m . Η κβαντική κατάσταση αλλάζει ως εξής,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle & \quad t < t(A) \\ c_1 \hat{P}_n |\psi\rangle & \quad t(A) < t < t(B) \\ c_2 \hat{Q}_m \hat{P}_n |\psi\rangle & \quad t > t(B), \end{aligned} \quad (9.13)$$

όπου c_1, c_2 σταθερές. Αυτή η εξέλιξη απεικονίζεται στο Σχ. 9.5.a.

Στο σύστημα Σ' , η αρχική κατάσταση, οι τελεστές μέτρησης και οι αντίστοιχοι προβολικοί αλλάζουν με βάση ένα συγκεκριμένο κανόνα. Θα συμβολίζουμε τις αντίστοιχες ποσότητες με έναν τόνο. Όπως θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο, αυτή η αλλαγή αντιστοιχεί σε ένα μοναδιαίο μετασχηματισμό, δηλαδή υπάρχει ένας μοναδιαίος τελεστής $\hat{U}_{\Sigma\Sigma'}$, έτσι ώστε $|\psi'\rangle = \hat{U}_{\Sigma\Sigma'} |\psi\rangle$, $\hat{X}' = \hat{U}_{\Sigma\Sigma'}^\dagger \hat{X} \hat{U}_{\Sigma\Sigma'}$, κοκ. Η κβαντική κατάσταση αλλάζει ως εξής

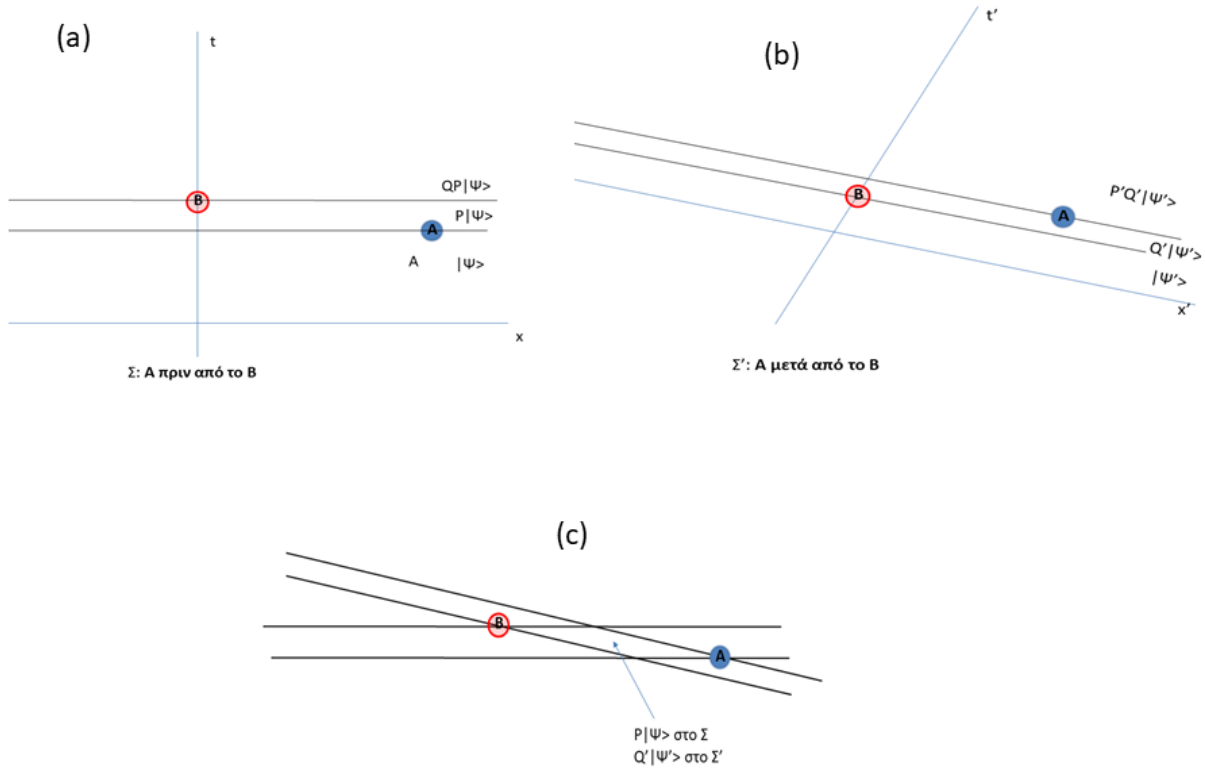
$$\begin{aligned} |\psi'\rangle & \quad t < t(A) \\ c'_1 \hat{Q}'_n |\psi'\rangle & \quad t(A) < t < t(B) \\ c'_2 \hat{Q}'_m \hat{P}'_n |\psi'\rangle & \quad t > t(B), \end{aligned} \quad (9.14)$$

όπου c'_1, c'_2 σταθερές. Αυτή η εξέλιξη απεικονίζεται στο Σχ. 9.5.b.

Σε μία περιοχή του χωροχρόνου—στο παραλληλόγραμμο του Σχ. 9.5.c—οι δύο εξελίξεις δίνουν ασύμβατα αποτελέσματα. Στο σύστημα αναφοράς Σ η κατάσταση είναι $c_1 \hat{P}_n |\psi\rangle$, ενώ στο σύστημα αναφοράς Σ' , η κατάσταση είναι $c'_1 \hat{Q}'_n |\psi'\rangle$. Δεδομένου ότι δεν υπάρχει κανένας περιορισμός στην επιλογή των \hat{X} και \hat{Y} , και άρα των \hat{P}_n και \hat{Q}_m , οι δύο αυτές καταστάσεις είναι τελείως διαφορετικές. Δεν μπορούν να συσχετιστούν μέσω ενός μοναδιαίου τελεστή $\hat{U}_{\Sigma\Sigma'}$. Δεν περιέχουν την ίδια φυσική πληροφορία ιδωμένη από διαφορετικά συστήματα αναφοράς.

Καταλήγουμε στο συμπέρασμα υπάρχουν περιοχές του χωροχρόνου, όπου είναι αμφίσημη η έννοια της κβαντικής κατάστασης. Από την άλλη, οι πιθανότητες ορίζονται με μοναδικό τρόπο, από την Εξ. (9.8), εφόσον θεωρήσουμε ότι $[\hat{X}, \hat{Y}] = 0$. Θα δούμε ότι αυτή η υπόθεση είναι αναγκαία σε σχετικιστικά συστήματα (εφόσον οι μετρήσεις είναι σε χωροειδώς απομακρυσμένες περιοχές), για να εξασφαλίσει την αιτιότητα.

Άρα η υπόθεση ότι η κβαντική κατάσταση είναι αντικειμενικό χαρακτηριστικό ενός φυσικού συστήματος και ο κανόνας αναγωγής της κατάστασης αντιστοιχεί φυσική διαδικασία δεν είναι συμβατή με τη σχετικότητα.



Σχήμα 9.1: Εξέλιξη της κατάστασης ύστερα από διαδοχικές μετρήσεις σε ένα σχετικιστικό σύστημα. (a) Σύστημα αναφοράς Σ. (b) Σύστημα αναφοράς Σ'. (c) Περιοχή του χωροχρόνου όπου οι δύο εξελίξεις είναι ασύμβατες.

Οδηγούμαστε έτσι στη θέση της μινιμαλιστικής ερμηνείας, ότι η κβαντική κατάσταση περιέχει κωδικοποίηση πληροφορίας για το φυσικό σύστημα. Σ' αυτό το πλαίσιο, η αναγωγή της κατάστασης είναι μέρος της περιγραφής του μικρόκοσμου, εξίσου σημαντική με τη μοναδιαία εξέλιξη, αλλά δεν αποτελεί μία ξεχωριστή φυσική διαδικασία. Είναι μέρος του αλγόριθμου που μας επιτρέπει να ορίζουμε κβαντικές πιθανότητες για πειράματα που εμπριέχουν πολλαπλές μετρήσεις. Αυτή η ερμηνεία της αναγωγής της κατάστασης υπονοείται στο κείμενο από το Βίγκνερ στην αρχή του κεφαλαίου. Είναι λογικά συνεπής, στο βαθμό που δεν επιχειρούμε να κινηθούμε πέρα από τα πλαίσια της μινιμαλιστικής ερμηνείας και είναι αυτή που θα ακολουθήσουμε στη συνέχεια του βιβλίου.

Αναδιατύπωση θεμελιωδών αρχών. Στα πλαίσια της μινιμαλιστικής ερμηνείας, είναι πιο κομψό να ενοποιήσουμε τις θεμελιώδεις αρχές 3, 4 και 5 σε μία αρχή που αποδίδει τις πιθανότητες σε ιστορίες μετρήσεων, δηλαδή σε σύνολα διαδοχικών μετρήσεων και να μην ξεχωρίζει την χρονική εξέλιξη από την αναγωγή της κατάστασης. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί παίρνοντας ως βασική αρχή μία γενίκευση του κανόνα (9.10).

Θεμελιώδης αρχή 3+4+5. Έστω κβαντικό σύστημα το οποίο προετοιμάζεται στην κατάσταση $\hat{\rho}$ τη στιγμή t_0 , και στο οποίο μετράμε την ποσότητα $\hat{A}^{(1)} = \sum_{n_1} a_{n_1}^{(1)} \hat{P}_{n_1}^{(1)}$ τη χρονική στιγμή t_1 , την ποσότητα $\hat{A}^{(2)} = \sum_{n_2} a_{n_2}^{(2)} \hat{P}_{n_2}^{(2)}$ τη χρονική στιγμή t_2 , ..., και την ποσότητα $\hat{A}^{(N)} = \sum_{n_N} a_{n_N}^{(N)} \hat{P}_{n_N}^{(N)}$ τη χρονική στιγμή t , όπου $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N$. Αν το σύστημα είναι κλειστό εκτός από την αλληλεπίδραση με τις μετρητικές συσκευές, τότε η πιθανότητα $p(a_{n_1}^{(1)}, a_{n_2}^{(2)}, \dots, a_{n_N}^{(N)})$, ότι η

πρώτη μέτρηση θα δώσει αποτέλεσμα $a_{n_1}^{(1)}$, η δεύτερη $a_{n_2}^{(2)}$, ..., και η N -στη αποτέλεσμα $a_n^{(N)}$ είναι

$$p(a_{n_1}^{(1)}, a_{n_2}^{(2)}, \dots, a_{n_N}^{(N)}) = Tr \left[\hat{P}_{n_N}^{(N)} e^{-i\hat{H}(t_{t_N}-t_{N-1})} \dots e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)} \hat{P}_{n_1}^{(1)} e^{i\hat{H}(t_1-t_0)} \hat{\rho} e^{i\hat{H}(t_1-t_0)} \hat{P}_{n_1}^{(1)} e^{i\hat{H}(t_2-t_1)} \dots e^{i\hat{H}(t_{t_N}-t_{N-1})} \right] \quad (9.14)$$

όπου \hat{H} η Χαμιλτονιανή του συστήματος.

Είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι οι θεμελιώδεις αρχές 3, 4 και 5, προκύπτουν ως ειδικές περιπτώσεις της σύνθετου αρχής 3+4+5. Σ' αυτή τη διατύπωση, το βασικό στοιχείο της κβαντικής θεωρίας είναι οι ιστορίες αποτελεσμάτων μέτρησης $\alpha := (a_{n_1}^{(1)}, a_{n_2}^{(2)}, \dots, a_{n_N}^{(N)})$, και η κατανομή πιθανοτήτων $p(\alpha)$ για αυτές τις ιστορίες, η οποία δίνεται από την Εξ. (9.14). Μ' αυτή τη διατύπωση γίνεται σαφές ότι τόσο ο κανόνας χρονικής εξέλιξης, όσο και η αναγωγή της κατάστασης είναι μέρος ενός θεμελιώδη κανόνα ορισμού πιθανοτήτων στην κβαντική θεωρία και όχι ξεχωριστές φυσικές διεργασίες¹.

Η Εξ. (9.14) μπορεί να γραφεί πιο κομψά ως εξής. Ορίζουμε τον *τελεστή ιστορίας*,

$$\hat{C}_\alpha = \hat{P}_{n_N}^{(N)}(t_N) \dots \hat{P}_{n_2}^{(2)}(t_2) \hat{P}_{n_1}^{(1)}(t_1), \quad (9.15)$$

όπου $\hat{P}_{n_i}^{(i)}(t_i) := e^{i\hat{H}(t_i-t_0)} \hat{P}_{n_i}^{(i)} e^{-i\hat{H}(t_i-t_0)}$ είναι η κατά Χάιζενμπεργκ εξέλιξη του προβολικού τελεστή $\hat{P}_{n_i}^{(i)}$. Έτσι η κατανομή πιθανοτήτων για τις ιστορίες γράφεται ως

$$p(\alpha) = Tr \left[\hat{C}_\alpha \hat{\rho}_0 \hat{C}_\alpha^\dagger \right]. \quad (9.16)$$

Δυναμική αναγωγή της κατάστασης. Όπως είπαμε στο Κεφ. 7, η μινιμαλιστική ερμηνεία είναι ελλιπής γιατί χρησιμοποιεί την έννοια της μέτρησης ως θεμελιώδη. Ο προσδιορισμός ενός μηχανισμού μέσω του οποίου γίνεται η αναγωγή της κατάστασης, θα μπορούσε να καλύψει αυτό το κενό. Αναφέραμε ήδη το ενδεχόμενο, η αναγωγή να προέρχεται από την συνείδηση ενός παρατηρητή. Η συνείδηση έχει τα εξής χαρακτηριστικά: δεν περιγράφεται από την κβαντική θεωρία και είναι πάντα παρούσα σε πειράματα, αφού πάει πακέτο με τον παρατηρητή. Οποιαδήποτε οντότητα έχει αυτά τα δύο στοιχεία θα μπορούσε να παίξει αυτό το ρόλο. Για παράδειγμα, αν η βαρύτητα δεν υπόκειται στην κβαντική θεωρία, δεδομένου ότι και αυτή είναι παρούσα παντού, θα μπορούσε και αυτή να αποτελεί το φορέα αναγωγής της κατάστασης [143, 144, 145].

Μια διαδεδομένη άποψη είναι ότι υπάρχουν δύο διαφορετικοί φυσικοί νόμοι χρονικής εξέλιξης, όπου ένας αντιστοιχεί στη μοναδιαία εξέλιξη και ένας στην αναγωγή της κατάστασης. Το σκεπτικό συνοψίζεται από τον Πένρουζ [99]

Συμβολίζω την εξέλιξη κατά Σρέντινγκερ ως U και την αναγωγή της κατάστασης ως R . Αυτή η εναλλαγή μεταξύ δύο φαινομενικά εντελώς διαφορετικών διαδικασιών μοιάζει πολύ περίεργος τρόπος συμπεριφοράς για τον κόσμο. Θα μπορούσαμε να φανταστούμε ότι αποτελεί μία προσέγγιση σε κάτι άλλο, άγνωστο για την ώρα. Ίσως υπάρχει μία πιο γενική μαθηματική εξίσωση ή ένας νόμος εξέλιξης για κάποια μαθηματική οντότητα, ο οποίος προσεγγίζεται σε κάποιο όριο από τη διαδικασία U και σε κάποιο άλλο από τη διαδικασία R . Η προσωπική μου γνώμη είναι ότι μία τέτοια αλλαγή στην κβαντική θεωρία μπορεί να αποδειχθεί σωστή, ίσως ως μέρος μίας νέας φυσικής του 21ου αιώνα.

Αυτές οι σκέψεις οδηγούν στην υπόθεση ότι υπάρχει μία φυσική διαδικασία, που μαθηματικά περιγράφεται από τον κανόνα της αναγωγής της κατάστασης, αλλά ισχύει καθολικά και δε συμβαίνει

¹Είναι προφανής η απορία, δεν είναι πολύ άκομψη η αρχή 3+4+5 για να είναι θεμελιώδης; Η απάντηση είναι ότι αν κανείς απαιτήσει την ύπαρξη ενός κανόνα απόδοσης πιθανοτήτων για ιστορίες, που να ικανοποιεί κάποιες απλές ιδιότητες, η αρχή 3+4+5 προκύπτει μοναδικά. Άρα υπάρχει μία κομψή μαθηματική διατύπωση της αρχής 3+4+5, σε ότι αφορά τις ιδιότητες των πιθανοτήτων για ιστορίες, αλλά αυτή είναι έξω από τα πλαίσια αυτού του βιβλίου.

ειδικά στις μετρήσεις. Αποτελεί μέρος της ενδογενούς δυναμικής εξέλιξης των φυσικών συστημάτων και γι' αυτό το λόγο καλείται *δυναμική αναγωγή του κυματοπακέτου* [146, 147]. Η πιθανότητα αναγωγής ενός μικροσκοπικού σωματιδίου είναι εξαιρετικά μικρή, αλλά αθροιστικά προκαλεί σημαντική αλλαγή στη δυναμική συστημάτων που αποτελούνται από μεγάλο αριθμό σωματιδίων. Αυτός είναι ο λόγος που οι μετρητικές συσκευές συμπεριφέρονται κλασικά, και φαίνεται σαν να προκαλούν οι ίδιες αναγωγή της κατάστασης των μικροσκοπικών συστημάτων.

Η δυναμική αναγωγή είναι ελκυστική σε πολλούς ερευνητές επειδή ενδέχεται να οδηγήσει σε μία διατύπωση της κβαντικής θεωρίας που να αναφέρεται στην εξέλιξη αντικειμενικών οντοτήτων. Ωστόσο δεν υπάρχει κάποια θεμελιώδης θεωρία δυναμικής αναγωγής, μόνο μία συλλογή από διαφορετικά μοντέλα. Κάθε μοντέλο προτείνει, μάλλον αυθαίρετα, μία συγκεκριμένη περιγραφή της αναγωγής. Τα μοντέλα αυτά οδηγούν σε διαφορετικές προβλέψεις από την κβαντική θεωρία σε κάποια πειράματα, και θα ελεγχθούν στο κοντινό μέλλον [148].

Τα μοντέλα δυναμικής αναγωγής δε θεραπεύουν την ασυμβατότητα της αναγωγής με τη σχετικότητα. Όταν εφαρμόζονται σε σχετικιστικά συστήματα οδηγούν σε μετάδοση πληροφορίας με ταχύτητες γρηγορότερες του φωτός. Γι' αυτό το λόγο, υποστηρίζονται από μία μειοψηφία των σύγχρονων φυσικών.

Συνοψίζοντας, υπάρχουν τρεις δυνατές ερμηνείες της αναγωγής της κβαντικής κατάστασης, εφόσον κανείς επιχειρήσει να κινηθεί πέρα από τη μινιμαλιστική ερμηνεία. Κάθε μία έχει τι δικές της προκλήσεις.

Ερμηνεία	Πρόκληση
Η αναγωγή είναι μέρος της διαχείρισης των πιθανοτήτων που αφορούν τις μετρήσεις στην κβαντική θεωρία.	Πρέπει να διατυπώσουμε την κβαντική θεωρία με τρόπο που να αποφεύγει τη μέτρηση ως θεμελιώδη έννοια.
Η αναγωγή είναι ένας δεύτερος κανόνας χρονικής εξέλιξης για τα φυσικά συστήματα.	Πρέπει να βρούμε ένα θεμελιώδη νόμο για αυτόν τον κανόνα και να τον συμβιβάσουμε με τη σχετικότητα.
Η αναγωγή οφείλεται στη δράση ενός εξωτερικού παράγοντα που δεν υπόκειται στην κβαντική θεωρία (συνείδηση, βαρύτητα).	Πρέπει κανείς να φτιάξει μία νέα, μεγαλύτερη θεωρία που να περιλαμβάνει και τον εξωτερικό παράγοντα.

9.4 Εφαρμογές

9.4.1 Μετρήσεις με ύστερη επιλογή

Σε σύστημα στο οποίο γίνονται δύο ή περισσότερες διαδοχικές μετρήσεις έχουμε την ευχέρεια να θεωρήσουμε πιθανότητες με *ύστερη επιλογή*, δηλαδή να αγνοήσουμε όλα τα αποτελέσματα της πρώτης μέτρησης αν η δεύτερη μέτρηση δεν έδωσε ένα συγκεκριμένο αποτέλεσμα.

Έστω ότι η πρώτη μέτρηση αντιστοιχεί σε αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και η δεύτερη σε αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{B} = \sum_m b_m \hat{Q}_m$. Θεωρούμε ένα πείραμα στο οποίο αγνοούμε οποιοδήποτε αποτέλεσμα εκτός και αν η δεύτερη μέτρηση έδειξε συγκεκριμένη ιδιοτιμή, έστω b_1 . Σ' αυτήν την περίπτωση, μας αφορά η δεσμευμένη πιθανότητα $\text{Prob}(a_n|b_1)$ για τα αποτελέσματα της πρώτης μέτρησης με δεδομένη την τιμή b_1 για τη δεύτερη μέτρηση. Σε αντίθεση με τη δεσμευμένη πιθανότητα (9.7), εδώ το δεδομένο b_1 αφορά μέτρηση που έγινε αργότερα.

Με βάση τον κανόνα των δεσμευμένων πιθανοτήτων παίρνουμε

$$\text{Prob}(a_n|b_1) = \frac{\text{Prob}(a_n, b_1)}{\sum_n \text{Prob}(a_n, b_1)} = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n \hat{Q}_1 \hat{P}_n)}{\sum_n \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_n \hat{Q}_1 \hat{P}_n)}. \tag{9.17}$$

Ο παρονομαστής στην Εξ. (9.17) είναι η πιθανότητα να βρεθεί b_1 στη δεύτερη μέτρηση ανεξάρτητα του τί έχει βρεθεί στην πρώτη.

Αν ο τελεστής \hat{Q}_1 που αντιστοιχεί στην τελική κατάσταση είναι μονοδιάστατος $\hat{Q}_1 = |\phi\rangle\langle\phi|$ και η κατάσταση $\hat{\rho}$ είναι καθαρή, $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, η δεσμευμένη πιθανότητα (9.17) γράφεται

$$\text{Prob}(a_n|b_1) = \frac{|\langle\psi|\hat{P}_n|\phi\rangle|^2}{\sum_n |\langle\psi|\hat{P}_n|\phi\rangle|^2}. \quad (9.18)$$

Παρατηρείστε τη συμμετρία μεταξύ αρχικής και τελικής κατάστασης. Σ' αυτές τις πιθανότητες δεν μπορούμε να διακρίνουμε αν το $|\psi\rangle$ είναι η αρχική κατάσταση ή η τελική. Σε μετρήσεις με ύστερη επιλογή είναι σαν να υπάρχουν δύο διαφορετικές καταστάσεις να περιγράφουν το ίδιο σύστημα, η αρχική κατάσταση $|\psi\rangle$ που αντιστοιχεί σε κάποια πρότερη επιλογή (την προετοιμασία του συστήματος) και η τελική κατάσταση $|\phi\rangle$ που αντιστοιχεί στην ύστερη επιλογή.

Δεν υπάρχει κανένας λόγος που να μας εμποδίζει από το να θεωρήσουμε την Εξ. (9.18) ως θεμελιώδη, δηλαδή να υποθέσουμε ότι θεμελιώδεις κβαντικές πιθανότητες ορίζονται τόσο με πρότερη όσο και με ύστερη επιλογή [149, 150]. Στα συνήθη πειράματα, η ύστερη επιλογή μπορεί να είναι τετριμμένη, οπότε αθροίζουμε ως προς όλες τις δυνατές τελικές καταστάσεις και παίρνουμε το συνήθη κανόνα πιθανοτήτων. Οπότε ένας τροποποιημένος κανόνας πιθανοτήτων με τελικές και αρχικές καταστάσεις δεν κάνει ιδιαίτερη διαφορά στα πλαίσια της μινιμαλιστικής ερμηνείας, που εστιάζει αποκλειστικά στην περιγραφή πειραμάτων.

Ωστόσο η διαφορά είναι πολύ σημαντική για κάθε απόπειρα περιγραφής της κβαντικής θεωρίας χωρίς αναφορά σε μέτρηση. Η κβαντική περιγραφή του σύμπαντος μπορεί να εμπεριέχει μία τελική όσο και μια αρχική κατάσταση. Θα έχει νόημα λοιπόν να αναφερόμαστε όχι μόνο για τις αρχικές συνθήκες του σύμπαντος—κάτι που γίνεται από την εποχή του Νεύτωνα—αλλά και για τις τελικές, κάτι που είναι εντελώς καινούριο στη φυσική. Βεβαίως, κάθε απόπειρα χρήσης της κβαντικής θεωρίας στο επίπεδο του σύμπαντος εμπεριέχει υψηλό βαθμό εικασίας, αλλά η συμμετρία της Εξ. (9.18) υποδεικνύει ενδιαφέροντες νέους τρόπους σκέψης σε ότι αφορά την κοσμολογία. Για παράδειγμα, προτείνεται ότι το θερμοδυναμικό βέλος του χρόνου (η αύξηση της εντροπίας του σύμπαντος) μπορεί να οφείλεται στην ασυμμετρία μεταξύ αρχικών και τελικών καταστάσεων [151].

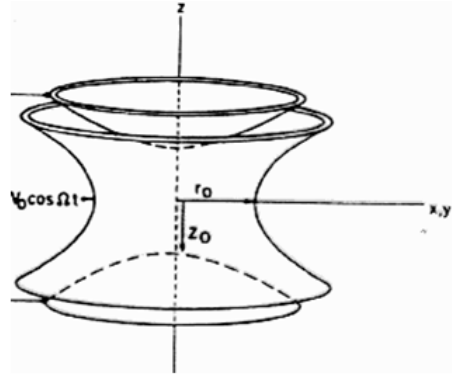
9.4.2 Κβαντικά άλματα

Όπως αναφέραμε στο κεφ. 2.3, ήδη από την εποχή της παλαιάς κβαντικής θεωρίας, ο Μπορ είχε υποθέσει ότι τα αποτελέσματα των μετρήσεων για κάθε φυσικό σύστημα προκύπτουν από μία ασυνεχή διαδικασία, ένα *κβαντικό άλμα*. Πλέον μπορούμε να διαπιστώσουμε πειραματικά την ύπαρξη ασυνεχών διαδικασιών μετάβασης [152], οι οποίες ταιριάζουν—ως ένα βαθμό—με τις ιδέες του Μπορ για τα κβαντικά άλματα, ως μη-αιτιακές μεταβάσεις που συμβαίνουν σχεδόν στιγμιαία. Αυτά τα πειράματα είναι εφικτά χάρη στην τεχνολογική δυνατότητα, ήδη από τη δεκαετία του 1980, να απομονώνουμε μεμονωμένα άτομα ή ιόντα και να δρούμε πάνω σ' αυτά.

Η πειραματική διάταξη με την οποία απομονώνονται μεμονωμένα άτομα ή ιόντα καλείται *παγίδα*, ατομική ή ιοντική. Γενικά, μία παγίδα αντιστοιχεί σε έναν κατάλληλο συνδυασμό ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων που περιορίζουν την κίνηση ενός ατόμου. Ένα σημαντικό είδος παγίδας είναι η ιοντική παγίδα Πάουλ (W. Paul), η οποία αποτελείται από τρία ηλεκτρόδια που φέρουν ταλαντευόμενο ηλεκτρικό δυναμικό στην οποία μπορεί να παγιδευτεί ένα ιόν στο κέντρο της—βλ. Ένθετο 9.1.

Ένθετο 9.1. Λειτουργία της παγίδας Πάουλ

Η γεωμετρία της παγίδας Πάουλ δίνεται στο σχήμα 9.1. Στα ηλεκτρόδια ασκείται μία συνεχής τάση U και μία



Σχήμα 9.2: Η ιοντική παγίδα Πάουλ είναι μία κοιλότητα με τρία ηλεκτρόδια, δύο υπερβολοειδή και ένα δακτύλιοειδές ανάμεσά τους, τα οποία φέρουν ταλαντευόμενο ηλεκτρικό δυναμικό. Μπορεί να παγιδεύσει ένα και μοναδικό ιόν στο κέντρο της. Οι ποσότητες r_0 και z_0 του σχήματος είναι κατασκευαστικά χαρακτηριστικά της παγίδας.

εναλλασσόμενη $V(t) = V_0 \cos(\Omega t)$. Λόγω της γεωμετρίας του συστήματος, το ηλεκτρικό δυναμικό κοντά στον άξονα συμμετρίας της παγίδας δίνεται από τη σχέση

$$\Phi = \frac{[U + V_0 \cos(\Omega t)](r^2 - 2z^2 + z_0^2)}{r_0^2 + 2z_0^2}, \quad (9.19)$$

όπου οι παράμετροι r_0 και z_0 ορίζονται στο σχήμα 9.1.

Η κίνηση του κέντρου μάζας ενός ιόντος με μάζα m περιγράφεται προσεγγιστικά από τις κλασικές εξισώσεις κίνησης $m\ddot{\mathbf{r}} = -e\nabla\Phi$.

Για το δυναμικό (9.19) παίρνουμε

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} + [a_1 - 2b_1 \cos(2\tau)]x = 0, \quad (9.20)$$

$$\frac{d^2y}{d\tau^2} + [a_1 - 2b_1 \cos(2\tau)]y = 0, \quad (9.21)$$

$$\frac{d^2z}{d\tau^2} + [a_2 - 2b_2 \cos(2\tau)]z = 0 \quad (9.22)$$

όπου $\tau = \frac{1}{2}\Omega t$ και

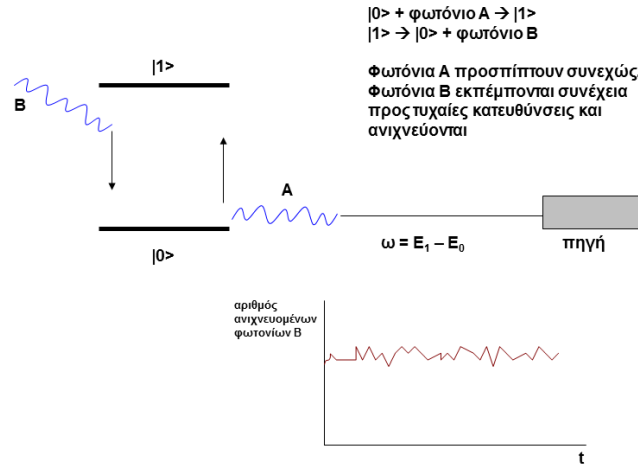
$$a_1 = -a_2 = \frac{8eU}{\Omega^2(r_0^2 + 2z_0^2)} \quad b_1 = -b_2 = -\frac{4eV_0}{\Omega^2(r_0^2 + 2z_0^2)}. \quad (9.23)$$

Παρατηρούμε ότι με μηδενική εναλλασσόμενη τάση, το ιόν δεν μπορεί να παγιδευτεί. Όταν στις κατευθύνσεις x, y η κίνηση είναι αρμονική ταλάντωση, η κίνηση στην κατεύθυνση z αντιστοιχεί σε αντεστραμμένο αρμονικό ταλαντωτή, με τροχιά που διαφεύγει από το κέντρο της παγίδας. Η εναλλασσόμενη τάση είναι απαραίτητη για τη λειτουργία της παγίδας.

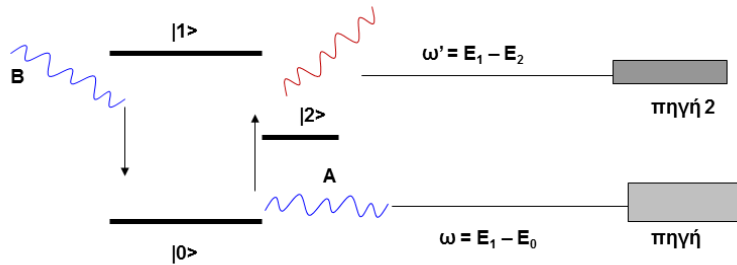
Η διαφορική εξίσωση $\ddot{u} + [a - 2b \cos(2\tau)]u = 0$, που περιγράφει την κίνηση και στους τρεις άξονες καλείται διαφορική εξίσωση Ματιέ (Matthieu). Οι ιοντικές παγίδες κατασκευάζονται με τέτοια χαρακτηριστικά ώστε $|a| < |b| \ll 1$. Σ' αυτό το όριο, οι λύσεις της εξίσωσης Ματιέ είναι της μορφής $u(\tau) = f(\tau) + v(\tau)$, όπου η f είναι μία περιοδική συνάρτηση μικρού πλάτους και μεγάλης συχνότητας που αντιστοιχεί σε μικροσκοπικές κινήσεις, και η $v(t)$ μία συνάρτηση μεγάλους πλάτους και μικρής συχνότητας που αντιστοιχεί σε μακροσκοπικές κινήσεις.

Για να βρούμε την $f(\tau)$ κρατάμε μόνο τους όρους $\frac{d^2f}{d\tau^2} - 2b \cos(2\tau)v = 0$ από την εξίσωση Ματιέ, οι οποίοι δέχονται την προσεγγιστική λύση $f = -\frac{1}{2}bv \cos(2\tau)$. Θέτοντας αυτήν την τιμή του f στο $u = f + v$, η εξίσωση Ματιέ γράφεται

$$\frac{d^2v}{d\tau^2} + \left[a - \frac{ab}{2} \cos(2\tau) + b^2 \cos^2(2\tau) \right] v = 0, \quad (9.24)$$



Σχήμα 9.3: Βασικές αρχές του συντονιστικού φθορισμού.



Σχήμα 9.4: Παρατήρηση κβαντικών αλμάτων σε ιοντικές παγίδες μέσω συντονιστικού φθορισμού σε δυο ενεργειακά επίπεδα $|1\rangle$ και $|2\rangle$.

Η $v(\tau)$ χαρακτηρίζεται από συχνότητες πολύ μικρότερες της μονάδας. Είναι καλή προσέγγιση να πάρουμε τη μέση τιμή του συντελεστή $[a - \frac{ab}{2} \cos(2\tau) + b^2 \cos^2(2\tau)]$ για μία περίοδο του $\cos(2\tau)$. Έτσι καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\frac{d^2v}{d\tau^2} + (a + \frac{b^2}{2})v = 0, \tag{9.25}$$

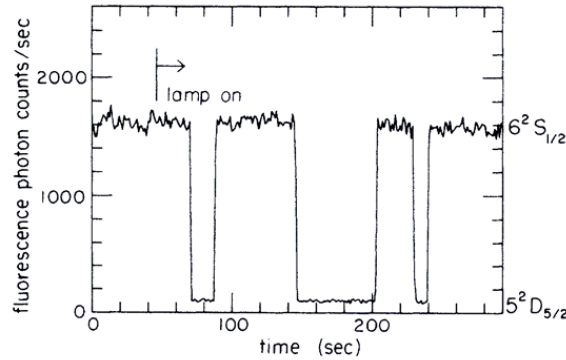
η οποία αντιστοιχεί σε αρμονική ταλάντωση (κίνηση περιορισμένη στο χώρο) αν $a + b^2/2 > 0$. Από την Εξ. (9.23) βλέπουμε ότι η συνθήκη ισχύει πάντα για την κίνηση στο επίπεδο $x - y$ (αφού $a_1 > 0$), ενώ για την κίνηση κατά τον άξονα z απαιτείται η συνθήκη

$$\frac{eV_0}{U\Omega^2(r_0^2 + 2z_0^2)} > 1. \tag{9.26}$$

Καταλήγουμε ότι αν ισχύει η ανισότητα (9.26), το ιόν παγιδεύεται.

Το φαινόμενο στο οποίο βασίζεται η πειραματική διαπίστωση των κβαντικών αλμάτων καλείται *συντονιστικός φθορισμός*. Περιγράφεται στο Σχ. 9.3. Σε ένα ιόν που είναι τοποθετημένο στο κέντρο της παγίδας προσπίπτει ακτινοβολία από λέιζερ γωνιακής συχνότητας ω , η οποία προκαλεί διέγερση της κατάστασης $|1\rangle$. Η κατάσταση $|1\rangle$ αποδιεγείρεται εκπέμποντας φωτόνιο ίδιας συχνότητας, αλλά διαφορετικής κατεύθυνσης από αυτά της εισερχόμενης δέσμης λέιζερ. Τα εξερχόμενα φωτόνια ανιχνεύονται. Αν ο ανιχνευτής είναι ένα φωτογραφικό φιλμ και αφηθεί αρκετό χρόνο θα δώσει μία φωτογραφία του παγιδευμένου ιόντος.

Οι παρατηρήσεις κβαντικών αλμάτων γίνονται σε παγιδευμένα ιόντα εκμεταλλευόμενοι το συντονιστικό φθορισμό σε σύστημα με τρία ενεργειακά επίπεδα, $|0\rangle$, $|1\rangle$ και $|2\rangle$, όπως στο σχήμα 9.4.



Σχήμα 9.5: Αριθμός φωτονίων λόγω φθορισμού στο πείραμα που περιγράφεται στο σχήμα 9.4. Η μετάβαση στην κατάσταση $|1\rangle$ είναι πρακτικά στιγμιαία, γίνεται σε χρόνο πολύ μικρότερο από το μέσο χρόνο ζωής της $|2\rangle$. Οπότε τα αποτελέσματα του πειράματος είναι συμβατά με το χαρακτηρισμό ‘κβαντικά άλματα’ για τις μεταβάσεις. Το πείραμα έγινε σε ιόν Ba^+ χρησιμοποιώντας δύο πηγές λέιζερ στα 493nm και 650nm.

Τα ενεργειακά επίπεδα είναι επιλεγμένα έτσι ώστε (α) οι αυθόρμητες μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ να είναι αδύνατες, και (β) οι αυθόρμητες μεταβάσεις $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$ να είναι πολύ πιο σπάνιες από ότι οι αυθόρμητες μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$. Αυτό σημαίνει ότι αν το σύστημα βρεθεί στη $|2\rangle$ θα μείνει αρκετή ώρα εκεί (στην τάξη μεγέθους του δευτερολέπτου).

Στέλνουμε στο παγιδευμένο ιόν ακτινοβολία από δύο λέιζερ, το ένα με συχνότητα $\omega = E_2 - E_0$ και το άλλο με συχνότητα $\omega' = E_1 - E_2$. Η ακτινοβολία συχνότητας ω προκαλεί συντονιστικό φθορισμό μεταξύ των επιπέδων $|1\rangle$ και $|0\rangle$. Η ακτινοβολία συχνότητας ω' προκαλεί εξαναγκασμένες μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$, οι οποίες δε γίνονται αυθόρμητα. Αν το ιόν βρεθεί στη $|2\rangle$ σταματά ο συντονιστικός φθορισμός και σταματούν να εκπέμπονται φωτόνια συχνότητας ω . Αυτό μέχρι να συμβεί μετάβαση $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$, οπότε ξαναρχίζει η διαδικασία φθορισμού. Αυτό σημαίνει ότι παρατηρώντας την εκπομπή φωτονίων συχνότητας ω από το ιόν, μπορούμε να προσδιορίσουμε πότε έγιναν οι μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$, καθώς και τον τρόπο με τον οποίο γίνονται.

Τα αποτελέσματα του πειράματος δίνονται στο σχήμα 9.5. Είναι σαφές ότι η μετάβαση από την $|1\rangle$ στη $|2\rangle$ γίνεται σε χρόνο πολύ μικρότερο του μέσου χρόνου ζωής της $|2\rangle$ έτσι ώστε να φαίνεται σχεδόν στιγμιαία.

Σημασία των πειραμάτων. Τα αποτελέσματα των πειραμάτων βρίσκονται σε πλήρη αντιστοιχία με την κβαντική θεωρία, η οποία προβλέπει σωστά τη στατιστική συμπεριφορά των αποτελεσμάτων [153, 154] όπως δίνονται στο Σχ. 9.5. Κατ’ αυτόν τον τρόπο, τα πειράματα των κβαντικών αλμάτων αποτελούν σημαντικό παράδειγμα όπου η κβαντική θεωρία εφαρμόζεται επιτυχώς για την περιγραφή ενός μεμονωμένου κβαντικού συστήματος (του ιόντος) και όχι ενός στατιστικού συνόλου.

Βεβαίως αν η αναγωγή της κατάστασης περιγράφει μεμονωμένα συστήματα και όχι στατιστικά σύνολα, η θεμελιώδης αρχή 5 πρέπει να γίνει πιο ισχυρή.

Στα πειράματα κβαντικών αλμάτων επιδεικνύεται σαφώς ότι η μετάβαση από μία ατομική κατάσταση σε μία άλλη είναι στιγμιαία, ή τουλάχιστον γίνεται σε χρονικές κλίμακες πολύ μικρότερες του μέσου χρόνου ζωής της διεγερμένης κατάστασης. Αυτή η περιγραφή είναι συμβατή με την ιδέα του Μπορ ότι η πηγή της τυχαιότητας στην κβαντική θεωρία είναι τα κβαντικά άλματα, δηλαδή στιγμιαίες, μη-αιτιακές διαδικασίες που δεν μπορεί να αναπαρασταθούν ως κίνηση σωματιδίων στο χώρο².

²Με βάση την ανάλυση του Κεφ. 9.3, η έννοια του κβαντικού άλματος δεν μπορεί να ταυτιστεί με αυτή της αναγωγής της κβαντικής κατάστασης, παρότι κάποιοι από τους ιδρυτές της κβαντικής θεωρίας είχαν επιχειρήσει έναν τέτοιο συσχετισμό. Η μαθηματική περιγραφή των κβαντικών αλμάτων εμπεριέχει έναν ιδιαίτερα πολύπλοκο συνδυασμό των θεμελιωδών αρχών 3,4 και 5.

9.4.3 Το κβαντικό φαινόμενο του Ζήνωνα

Ο Ζήνων ο Ελεάτης είναι γνωστός για τα παράδοξά του με τα οποία προσπαθούσε να αποδείξει το παράλογο της έννοιας της κίνησης. Ένα από τα παράδοξά του είναι αυτό του κινούμενου βέλους. Σε κάθε χρονική στιγμή, το βέλος ούτε κινείται προς εκεί που είναι, ούτε εκεί που δεν είναι. Δεν μπορεί να κινηθεί προς εκεί που δεν είναι, γιατί δεν υπάρχει χρόνος που μεσολαβεί για να μετακινηθεί εκεί. Δεν μπορεί να κινηθεί προς εκεί που είναι, γιατί είναι ήδη εκεί. Άρα αν εξετάσουμε το βέλος σε μία δεδομένη χρονική στιγμή δεν υπάρχει καμία κίνηση. Αν όλα είναι ακίνητα σε κάθε στιγμή, και ο χρόνος αποτελείται εξ ολοκλήρου από στιγμές, τότε η κίνηση είναι αδύνατη.

Στην κβαντική θεωρία υπάρχει ένα φαινόμενο κατά το οποίο η κατάσταση ενός συστήματος δεν αλλάζει αν κανείς του κάνει συνεχώς μετρήσεις [156]. Λόγω της αναλογίας με το παράδοξο του βέλους, ονομάστηκε κβαντικό φαινόμενο του Ζήνωνα [157].

Έστω ένα σύστημα που χαρακτηρίζεται από Χαμιλτονιανή \hat{H} . Έχουμε μία μετρητική συσκευή που αντιστοιχεί σε έναν προβολικό τελεστή \hat{P} , δηλαδή μία συσκευή που μετρά κατά πόσο η ιδιότητα που αντιστοιχεί στον \hat{P} επαληθεύεται ή όχι. Προετοιμάζουμε το σύστημα στην καθαρή κατάσταση $|\psi\rangle$, η οποία είναι ιδιοκατάσταση του \hat{P} , $\hat{P}|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Κάνουμε N μετρήσεις του \hat{P} , με χρονικό διάστημα δt μεταξύ μίας μέτρησης και της επόμενης. Η πιθανότητα $\text{Prob}(\hat{P}, N)$ να αληθεύει ο \hat{P} και στις N μετρήσεις είναι

$$\text{Prob}(\hat{P}, N) = \langle \psi | \hat{P} \hat{U}_{\delta t}^\dagger \hat{P} \hat{U}_{\delta t} \hat{P} \hat{U}_{\delta t}^\dagger \dots \hat{U}_{\delta t} \hat{P} \hat{U}_{\delta t} \hat{P} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{S}_{N,t}^\dagger \hat{S}_{N,t} | \psi \rangle, \quad (9.27)$$

όπου $\hat{S}_{N,t} = (\hat{P} \hat{U}_{\delta t} \hat{P})^N$, και γράφουμε $t = N \delta t$. Στο όριο συνεχών μετρήσεων, $N \rightarrow \infty$ με t σταθερό, $e^{-i\hat{H}\delta t} \simeq 1 - i\hat{H}\delta t/N$, οπότε

$$\hat{S}_t := \lim_{N \rightarrow \infty} (\hat{P} - i\hat{P}\hat{H}\hat{P}t/N)^N. \quad (9.28)$$

Για να βρούμε αυτό το όριο παρατηρούμε ότι έξω από τον ιδιόχωρο V του \hat{P} , ο τελεστής \hat{S}_t μηδενίζεται. Εντός V ,

$$\hat{S}_t = \lim_{N \rightarrow \infty} (\hat{I} - i\hat{P}\hat{H}\hat{P}t/N)^N = e^{-i\hat{P}\hat{H}\hat{P}t}. \quad (9.29)$$

Άρα, ο τελεστής \hat{S}_t είναι μοναδιαίος εντός του V . Για κάθε $|\psi\rangle \in V$, $\hat{S}_t^\dagger \hat{S}_t |\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Από την εξίσωση (9.27), υπολογίζουμε την πιθανότητα

$$\text{Prob}(\hat{P}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Prob}(\hat{P}, N) \quad (9.30)$$

το σύστημα να μετριέται συνεχώς και να βρίσκεται ο \hat{P} πάντα αληθής, μέχρι τη χρονική στιγμή t

$$\text{Prob}(\hat{P}, t) = \langle \psi | \hat{S}_t^\dagger \hat{S}_t | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (9.31)$$

Δηλαδή, αν το σύστημα μετριέται συνεχώς, δεν μπορεί να φύγει από το V . Για παράδειγμα, το σύστημα υπό μελέτη μπορεί να αντιστοιχεί σε ένα ασταθές σωματίο και ο V να περιέχει τις καταστάσεις κατά τις οποίες το σωματίο δεν έχει διασπαστεί. Οπότε το κβαντικό φαινόμενο του Ζήνωνα μας λέει ότι αν μετράμε συνέχεια αν διασπάστηκε το σωματίο, αυτό δε θα διασπαστεί ποτέ.

Η πρώτη παρατήρηση του κβαντικού φαινομένου του Ζήνωνα έγινε το 1989 από τη ομάδα του Ουάινλαντ στις ΗΠΑ [158]. Το πείραμα είναι παρόμοιο στη λογική με αυτό της ανίχνευσης των κβαντικών αλμάτων, δηλαδή εκμεταλλεύεται τις ιδιότητες ενός συστήματος 3 επιπέδων κάτω από την επίδραση δύο λέιζερ με διαφορετικές συχνότητες. Η θεωρητική περιγραφή αυτού του πειράματος δίνεται στο Ένθετο 9.2.

Ένθετο 9.2. Κβαντικό φαινόμενο του Ζήνωνα σε παγιδευμένα ιόντα.

Έστω ένα ιόν με τρεις ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής $|0\rangle$, $|1\rangle$ και $|2\rangle$ που ικανοποιούν τα εξής.

1. Η $|0\rangle$ είναι η θεμελιώδης κατάσταση, με ενέργεια $E_0 = 0$.
2. Η $|1\rangle$ είναι μια ευσταθής διεγερμένη κατάσταση με ενέργεια $E_1 = \omega_1$. Το ότι η $|1\rangle$ είναι ευσταθής σημαίνει ότι ο τυπικός χρόνος αυθόρμητης εκπομπής είναι πολύ μεγάλος.
3. Η $|2\rangle$ είναι μια ασταθής διεγερμένη κατάσταση με ενέργεια $E_2 = \omega_2$. Διασπάται αυθόρμητα στην $|0\rangle$ με εκπομπή φωτονίου συχνότητας ω_2 . Ωστόσο η αυθόρμητη μετάβαση από την $|2\rangle$ στην $|1\rangle$ δεν είναι εφικτή.

Με βάση τα παραπάνω, η δράση ενός λέιζερ συχνότητας ω_1 στο ιόν οδηγεί σε ταλαντώσεις Ράμπι μεταξύ των επιπέδων $|0\rangle$ και $|1\rangle$ με συχνότητα Ράμπι Ω_R , όπως στην Εξ. (8.102) για $\Delta = 0$. Περιορίζοντας την περιγραφή του συστήματος στον υπόχωρο που ορίζουν τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$, ο τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι αυτός των ταλαντώσεων Ράμπι για $\Delta = 0$,

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_1 t} \cos(\Omega_R t) & ie^{-i\omega_1 t} \sin(\Omega_R t) \\ i \sin(\Omega_R t) & \cos(\Omega_R t) \end{pmatrix}. \quad (9.32)$$

Ένας παλμός συχνότητας ω_2 λειτουργεί σ' αυτό το σύστημα πολύ διαφορετικά. Αν το σύστημα βρίσκεται στη $|0\rangle$, τότε διεγείρεται στην κατάσταση $|2\rangle$, αλλά εκεί μένει ελάχιστο χρόνο. Επανερχεται στην $|0\rangle$ με εκπομπή φωτονίου. Αντίθετα αν το σύστημα είναι στην $|1\rangle$ ή στη $|2\rangle$ δεν επηρεάζεται καθόλου. Οπότε αν μετά τον παλμό ανιχνευτεί φωτόνιο συχνότητας ω_2 , έχουμε επιβεβαιώσει ότι το ιόν βρίσκεται στην $|0\rangle$. Αν όχι, βρίσκεται στο συμπληρωματικό υπόχωρο της $|0\rangle$. Αν περιορίσουμε την περιγραφή μας στο κιούμπι που ορίζεται από τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$, ο παλμός ω_2 λειτουργεί ως ένα ζεύγος προβολικών τελεστών $\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|$ και $\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|$ που δρα πάνω στην κβαντική κατάσταση με βάση τον κανόνα αναγωγής του κυματοπακέτου.

Έστω ότι το ιόν αρχικά βρίσκεται στη $|0\rangle$. Αν τη στιγμή $t = 0$, ανοίξει το λέιζερ συχνότητας ω_1 , η κατάσταση τη χρονική στιγμή t είναι $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|0\rangle$. Αν η δράση του λέιζερ κρατήσει χρόνο $T = \frac{\pi}{2\Omega_R}$, το σύστημα θα βρεθεί στην κατάσταση $|1\rangle$.

Έστω όμως ότι μέσα στο χρονικό διάστημα $[0, T]$ εκπέμπουμε n παλμούς συχνότητας ω_2 που αντιστοιχούν σε μέτρηση, με χρονική απόσταση μεταξύ τους ίση με $\tau = T/n$. Η κατάσταση $\hat{\rho}_t$ εξελίσσεται ύστερα από ένα χρονικό βήμα τ σε

$$\hat{\rho}_{t+\tau} = \hat{P}_0 \hat{U}_\tau \hat{\rho}_t \hat{U}_\tau^\dagger \hat{P}_0 + \hat{P}_1 \hat{U}_\tau \hat{\rho}_t \hat{U}_\tau^\dagger \hat{P}_1, \quad (9.33)$$

όπου $\hat{U}_\tau = \hat{U}(T/n)$.

Αυτός ο κανόνας εξέλιξης μηδενίζει τα μη-διαγώνια στοιχεία της μήτρας πυκνότητας σε κάθε βήμα, οπότε όλη η πληροφορία βρίσκεται στα διαγώνια στοιχεία. Για διαγώνια μήτρα πυκνότητας το διάνυσμα του Μπλοχ είναι της μορφής $(0, 0, r)$, οπότε η Εξ. (9.33) δίνει

$$r(t + \tau) = r(t) \cos(2\Omega_R \tau) = r(t) \cos(\pi/n) \quad (9.34)$$

Θεωρούμε αρχική κατάσταση $|0\rangle$, οπότε $r(0) = -1$. Για n βήματα, η Εξ. (9.34) δίνει $r(T) = -\cos^n(\pi/n)$. Στο όριο μεγάλων n γράφουμε $\cos(\pi/n) \simeq 1 - \frac{\pi^2}{2n^2}$, οπότε

$$r(T) = -\left(1 - \frac{\pi^2}{2n^2}\right)^n \sim e^{-\frac{\pi^2}{2n}}. \quad (9.35)$$

Αυτό σημαίνει ότι η πιθανότητα εύρεσης του ιόντος στην $|1\rangle$ τη χρονική στιγμή $t = T$ γίνεται

$$p_1(T) = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\frac{\pi^2}{2n}}\right) \simeq \frac{\pi^2}{4n}, \quad (9.36)$$

δηλαδή τείνει στο μηδέν όσο περισσότερους παλμούς στέλνουμε.

Δηλαδή αν δράσουμε μόνο με λέιζερ συχνότητας ω_1 για χρόνο T , το ιόν σίγουρα θα βρεθεί στην $|1\rangle$, κάτι που μπορούμε να το διαπιστώσουμε μετρώντας το φωτόνιο συχνότητας ω_1 που θα εκπέμψει όταν επιστρέψει στη θεμελιώδη. Αν όμως κατά τη διάρκεια αυτής της δράσης στείλουμε n παλμούς συχνότητας ω_2 , η μετάβαση στην κατάσταση $|1\rangle$ και η επακόλουθη εκπομπή φωτονίου γίνεται σπανιότερη και τείνει στο μηδέν όσο μεγαλύτερο γίνεται το n .

Ερωτήσεις

1. Διατυπώστε με ακρίβεια σε τί διαφέρει η κβαντική αναγωγή της κατάστασης από την αντίστοιχη κλασική.
2. Εξηγήστε τί εννοούμε όταν λέμε ότι η αναγωγή της κατάστασης δεν είναι μία φυσική διαδικασία.
3. Ο Αϊνστάιν έγραφε για την αναγωγή της κατάστασης [159]: "...η αλλαγή στην κυματοσυνάρτηση μέσω της παρατήρησης δεν αντιστοιχεί ουσιαστικά στην αλλαγή σε κάτι πραγματικό, αλλά στην αλλαγή της γνώσης μας για κάτι πραγματικό." Εξηγήστε γιατί ο ισχυρισμός του είναι λάθος.

Ασκήσεις

1. Δείξτε ότι δεν υπάρχει μοναδιαίος τελεστής για τον οποίον να ισχύει $\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger = \sum_n \hat{P}_n\hat{\rho}\hat{P}_n$.
2. Κιούμπιτ προετοιμάζεται στην κατάσταση $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$ και υπόκειται σε διαδοχικές μετρήσεις του $\hat{\sigma}_1$ και του $\hat{\sigma}_2$. Υπολογίστε τις από κοινού πιθανότητες. Στη συνέχεια επαναλάβετε τον υπολογισμό για την αντίστροφη σειρά μετρήσεων.
3. Κιούμπιτ προετοιμάζεται στην κατάσταση $|0\rangle$ και υπόκειται σε διαδοχικές μετρήσεις του $\hat{\sigma}_1$, του $\hat{\sigma}_2$ και του $\hat{\sigma}_3$. Ποια η πιθανότητα να έχει βρεθεί τιμή $+1$ και στις τρεις μετρήσεις;
4. Έστω γ η καθαρότητα μιας κατάστασης $\hat{\rho}$ πριν τη μέτρηση μιας ποσότητας $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ και γ' η καθαρότητα της κατάστασης $\hat{\rho}' = \sum_n \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n$ μετά τη μέτρηση. Δείξτε ότι $\gamma' \leq \gamma$. Πότε ισχύει η ισότητα;
5. Έστω κιούμπιτ που χαρακτηρίζεται από Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \omega \hat{\sigma}_1$. Τη χρονική $t = 0$ βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση $|\psi\rangle$ που αντιστοιχεί στη θετική ιδιοτιμή της \hat{H} και γίνεται μέτρηση που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} = \hat{\sigma}_3$. Γίνεται και δεύτερη μέτρηση που αντιστοιχεί στον τελεστή \hat{A} την χρονική στιγμή t . (α) Γράψτε τις πιθανότητες που αντιστοιχούν στα από κοινού αποτελέσματα των δύο μετρήσεων. (β) Θεωρείστε ότι κάνουμε την ύστερη επιλογή να κρατήσουμε μόνο τα αποτελέσματα για τα οποία η δεύτερη μέτρηση του \hat{A} έδωσε την τιμή $+1$. Υπολογίστε τις αντίστοιχες δεσμευμένες πιθανότητες.
6. Θεωρούμε πείραμα δύο διαδοχικών μετρήσεων σε ένα κιούμπιτ. Η πρώτη μετρητική συσκευή έχει μία γεννήτρια τυχαίων αριθμών, που δίνει 60% πιθανότητα να γίνει μέτρηση του τελεστή $\hat{\sigma}_1$ και 40% πιθανότητα να μη γίνει καμία μέτρηση. Η δεύτερη συσκευή μετράει το $\hat{\sigma}_3$. Ποια η αναμενόμενη τιμή $\langle \hat{\sigma}_3 \rangle$, αν η αρχική κατάσταση είναι η $|1\rangle$;
7. Θεωρούμε δύο διαδοχικές μετρήσεις ενός κιούμπιτ. Η πρώτη μετρητική συσκευή μετρά τον τελεστή $\mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}$, όπου το \mathbf{n} ορίζεται τυχαία σε κάθε πείραμα, έτσι ώστε να ακολουθεί την ομοιογενή κατανομή πάνω στη μοναδιαία σφαίρα. Αν η αρχική κατάσταση είναι μια τυχαία καθαρή κατάσταση $|\psi\rangle$, ποια είναι η κατάσταση περιγράφει το στατιστικό σύνολο των κιούμπιτ για τη δεύτερη μέτρηση;
8. Κάθε διάνυσμα $|c\rangle \in \mathcal{C}^3$ ορίζει μια φυσική ποσότητα C με δυνατές τιμές 1, που αντιστοιχεί στον προβολικό τελεστή $\hat{P}_c = |c\rangle\langle c|$, και 0, που αντιστοιχεί σε προβολικό τελεστή $\hat{I} - \hat{P}_c$. Θεωρούμε σύστημα που προετοιμάζεται στην κατάσταση $|0\rangle$, στο οποίο γίνονται δύο διαδοχικές μετρήσεις τέτοιων ποσοτήτων, πρώτα της B και μετά της C , με αντίστοιχα διανύσματα $|b\rangle$ και $|c\rangle$. (α) Δείξτε ότι η συνθήκη δεσμευμένης πιθανότητας $\text{Prob}(B = 1|C = 1) = 1$ σημαίνει ότι $|\langle a|b\rangle\langle b|c\rangle| = |\langle a|c\rangle|$. (β) Επιλέγουμε

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |c\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix},$$

για $\theta \in [0, \pi/2]$. Δείξτε ότι η εξίσωση $\text{Prob}(B = 1|C = 1) = 1$ δέχεται δύο οικογένειες λύσεων $|b\rangle = |y, \pm\rangle$ που παραμετροποιούνται από έναν αριθμό $y \in [0, 1]$.

$$|y, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \theta + y \sin^2 \theta}} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ y \sin \theta \\ \pm \sin \theta \sqrt{y - y^2} \end{pmatrix}.$$

(γ) Δείξτε ότι για $\tan \theta \geq \frac{1}{2\sqrt{2}}$ υπάρχουν τιμές του y , για τις οποίες τα διανύσματα $|y, +\rangle$ και $|y, -\rangle$ είναι μεταξύ τους ορθογώνια.

Κλασικά η συνθήκη $\text{Prob}(B = 1|C = 1) = 1$ σημαίνει ότι αν βρούμε $C = 1$ μπορούμε να συμπεράνουμε ότι $B = 1$ ακόμα κι αν δεν κάναμε μέτρηση. Αν πάμε να κάνουμε το ίδιο κβαντικά, θα καταλήγαμε σε δυο μη συνεπείς μεταξύ τους συνεπαγωγές, αφού τα αντίστοιχα διανύσματα $|b\rangle$ θα ήταν κάθετα [160].

9. Έστω ότι έχουμε μία οικογένεια καταστάσεων $|a\rangle$ που προσδιορίζεται από την παράμετρο $a \in \Gamma$. Θέλουμε να μετρήσουμε αν το σύστημα ακολουθεί μια συνεχή διαδρομή $a(t)$ στο Γ , όπου $t \in [0, T]$. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε χρονική στιγμή t κάνουμε μία μέτρηση που αντιστοιχεί στον προβολικό τελεστή $|a(t)\rangle\langle a(t)|$. Θεωρείστε N μετρήσεις σε χρονικές στιγμές με απόσταση $\delta t = T/N$, και πάρτε στο τέλος $N \rightarrow 0$. Δείξτε ότι η πιθανότητα $\text{Prob}[a(\cdot)]$ να μετρηθεί η διαδρομή $a(t)$ στο όριο του συνεχούς είναι ίση με $\langle a(0)|\hat{\rho}_0|a(0)\rangle$, οπότε αν $\hat{\rho}_0 = |a(0)\rangle\langle a(0)|$, $\text{Prob}[a(\cdot)] = 1$.

Αυτό σημαίνει ότι έχουμε ένα αντίθετο φαινόμενο από αυτό του Ζήνωνα [161], ότι αν πάμε να προσδιορίσουμε αν το σύστημα ακολουθεί μια διαδρομή, τότε θα την ακολουθήσει σίγουρα.

Βιβλιογραφία

- Πολλές κλασικές συζητήσεις για το ρόλο της αναγωγής της κβαντικής κατάστασης βρίσκονται ανατυπωμένες στο τόμο των Wheeler και Zurek [39]. Συνιστώ ιδιαίτερα τις διαλέξεις του Βίγκνερ. Επίσης συνιστώ τις συζητήσεις στο κεφ. 8 του Isham [10] και στο κεφ. 14 του d' Espagnat [162].
- Για τις ιοντικές παγίδες βλ. το άρθρο επισκόπησης του March [163]. Για τα πειράματα κβαντικών αλμάτων βλ. το εγκυκλοπαιδικό άρθρο του Carmichael, Quantum Jump Experiments στο Compendium of Quantum Physics [135] και το άρθρο επισκόπησης των Blatt και Zoller [164]. Επίσης ενδιαφέρουσες είναι οι διαλέξεις Νόμπελ των Ντέμελτ (H. Dehmelt) [165] και Πάουλ (W. Paul) [166].

Κεφάλαιο 10

Σύνθετα κβαντικά συστήματα και εναγκαλισμός

Και παρ' όλα αυτά, δεν έχεις ηθικούς ενδοιασμούς να ρωτήσεις ... πώς το πρώτο μισό του ζεύγους (εδώ) μπορεί να επηρεαστεί από τη μετρητική συσκευή που μετρά το δεύτερο μισό του ζεύγους (εκεί). Παρότι ξέρεις ότι η κβαντική θεωρία ξεγυμνώνει κάθε σωματίο από όλα τα κλασικά χαρακτηριστικά του (ακριβής θέση, ορμή, πόλωση κοκ), εξακολουθείς να πιστεύεις ότι διατηρεί μια καλώς ορισμένη "ύπαρξη" ως ξεχωριστή οντότητα.

A. Πέρες [167]

10.1 Τανυστικό γινόμενο

10.1.1 Ορισμός

Η μαθηματική δομή με την οποία περιγράφεται η σύνθεση συστημάτων στην κβαντική θεωρία είναι το *τανυστικό γινόμενο*. Ως έννοια το τανυστικό γινόμενο σχετίζεται με την ακόλουθη ιδιότητα των πινάκων. Έστω ότι έχουμε δύο διανύσματα

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix} \in \mathcal{C}^n \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_m \end{pmatrix} \in \mathcal{C}^m \quad (10.1)$$

Από αυτά τα διανύσματα μπορούμε να κατασκευάσουμε έναν πίνακα $n \times m$, τον οποίον θα συμβολίσουμε ως $\phi \otimes \psi$, με στοιχεία $(\phi \otimes \psi)_{ij} = \phi_i \psi_j$, όπου $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = 1, 2, \dots, m$. Ισοδύναμα ο πίνακας $\phi \otimes \psi$ γράφεται ως

$$\phi \otimes \psi = \begin{pmatrix} \phi_1 \psi_1 & \phi_2 \psi_1 & \dots & \phi_n \psi_1 \\ \phi_1 \psi_2 & \phi_2 \psi_2 & \dots & \phi_n \psi_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1 \psi_m & \phi_2 \psi_m & \dots & \phi_n \psi_m \end{pmatrix} \quad (10.2)$$

Ορίζουμε το τανυστικό γινόμενο $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m$ ως το χώρο Χίλμπερτ ο οποίος έχει ως διανύσματα όλους τους γραμμικούς συνδυασμούς της μορφής

$$\sum_{k=1}^r \phi^{(k)} \otimes \psi^{(k)},$$

για οποιοσδήποτε r -άδες διανυσμάτων $\phi^{(k)} \in \mathcal{C}^n$ και $\psi^{(k)} \in \mathcal{C}^m$, όπου $k = 1, 2, \dots, r$ και r ακέραιος. Προσοχή, βάζουμε το δείκτη k εντός παρένθεσης γιατί υποδηλώνει ένα από τα r διαφορετικά διανύσματα που επιλέγουμε κάθε φορά, όχι τις συνιστώσες ενός διανύσματος, όπως οι δείκτες της Εξ. (10.1). Το εσωτερικό γινόμενο στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m$ ορίζεται καταρχάς για τα διανύσματα της μορφής $\phi \otimes \psi$ ως

$$(\phi \otimes \psi, \phi' \otimes \psi')_{\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m} = (\phi, \phi')_{\mathcal{C}^n} \times (\psi, \psi')_{\mathcal{C}^m} \quad (10.2)$$

και επεκτείνεται σε οποιοδήποτε γραμμικό συνδυασμό της μορφής (10.2) μέσω της συνθήκης γραμμικότητας. Για παράδειγμα,

$$\begin{aligned} (\phi^{(1)} \otimes \psi^{(1)} + \phi^{(2)} \otimes \psi^{(2)}, \phi' \otimes \psi') &= (\phi^{(1)}, \phi)(\psi^{(1)}, \psi') \\ &+ (\phi^{(2)}, \phi)(\psi^{(2)}, \psi'). \end{aligned} \quad (10.2)$$

Ο γενικότερος γραμμικός συνδυασμός (10.2) αντιστοιχεί σε γενικό πίνακα $n \times m$, άρα ο χώρος Χίλμπερτ $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m$ είναι ισομορφικός με το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^{nm} των $n \times m$ πινάκων, δηλαδή

$$\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m = \mathcal{C}^{nm}. \quad (10.3)$$

Η παραπάνω περιγραφή είναι επαρκής για τον ορισμό του τανυστικού γινομένου $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, όταν οι χώροι Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 είναι πεπερασμένης διάστασης. Αν ένας από αυτούς του χώρους Χίλμπερτ είναι απειροδιάστατος τότε απαιτείται ένας αρκετά πιο πολύπλοκος ορισμός, που περιγράφεται στο Ένθετο 10.1.

Ένθετο 10.1. Ορισμός τανυστικού γινομένου

Πρώτα ορίζουμε την έννοια του **ελεύθερου διανυσματικού χώρου** $F(S)$ για ένα σύνολο S . Ο $F(S)$ είναι ένας διανυσματικός χώρος στους μιγαδικούς αριθμούς, ο οποίος χαρακτηρίζεται από μια βάση $|s\rangle$, που ορίζεται για κάθε $s \in S$. Προφανώς, αν το σύνολο S έχει n στοιχεία, τότε $F(S) = \mathcal{C}^n$.

Έστω δύο χώροι Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 με διανύσματα $|\phi\rangle_1$ και $|\psi\rangle_2$ αντίστοιχα. Το Καρτεσιανό γινόμενο $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ έχει ως στοιχεία ζεύγη $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$. Ο ελεύθερος διανυσματικός χώρος $F(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)$ έχει στοιχεία της μορφής

$$\alpha = \sum_{i=1}^r c_i (|\phi_i\rangle, |\psi_i\rangle) = c_1 (|\phi_1\rangle, |\psi_1\rangle) + c_2 (|\phi_2\rangle, |\psi_2\rangle) + \dots + (|\phi_r\rangle, |\psi_r\rangle) \quad (10.4)$$

όπου $c_i \in \mathcal{C}$.

Στο διανυσματικό χώρο $F(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)$ ορίζουμε ένα μέτρο ως εξής

$$\left\| \sum_{i=1}^r c_i (|\phi_i\rangle, |\psi_i\rangle) \right\|^2 = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r c_i c_j^* \langle \phi_j | \phi_i \rangle \langle \psi_j | \psi_i \rangle. \quad (10.5)$$

Το μέτρο (10.5) δεν αρκεί για να ορίσει ένα χώρο Χίλμπερτ, γιατί υπάρχουν διανύσματα στο $\alpha \in F(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)$, τα οποία ικανοποιούν $\|\alpha\| = 0$. Για να κατασκευάσουμε ένα χώρο Χίλμπερτ ταυτίζουμε δύο διανύσματα α και β του $F(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)$ αν ισχύει ότι $\|\alpha - \beta\| = 0$. Συγκεκριμένα, ορίζουμε την κλάση ισοδυναμίας $[\alpha]$ ως το σύνολο όλων των διανυσμάτων $\beta \in F(V_1 \times V_2)$ που ικανοποιούν τη σχέση $\|\alpha - \beta\| = 0$. Δεδομένου ότι

$$\left| \|\alpha - \beta\| - \|\alpha\| \right| \leq \|\beta\| \leq \|\alpha - \beta\| + \|\alpha\|, \quad (10.6)$$

παίρνουμε ότι $\|\beta\| = \|\alpha\|$, δηλαδή όλα τα διανύσματα στην κλάση ισοδυναμίας $[\alpha]$ έχουν το ίδιο μέτρο. Οπότε μπορούμε να αποδώσουμε ένα κοινό μέτρο $\|[\alpha]\|$ στην κλάση ισοδυναμίας $[\alpha]$,

Ο χώρος όλων των κλάσεων ισοδυναμίας $[\alpha]$, όπου $\alpha \in F(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)$, είναι το τανυστικό γινόμενο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ και το μέτρο $\|[\alpha]\|$ ορίζει ένα εσωτερικό γινόμενο μέσω της ταυτότητας πόλωσης, Εξ. (4.13). Η κλάση ισοδυναμίας $[(|\phi\rangle, |\psi\rangle)]$ συμβολίζεται ως $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

10.1.2 Συμβολισμός Ντιράκ

Ο φορμαλισμός Ντιράκ είναι ιδιαίτερα λειτουργικός για την περιγραφή του τανυστικού γινομένου. Ο χώρος Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ περιέχει διανύσματα της μορφής $\sum_{k=1}^r |\phi_k\rangle \otimes |\psi_k\rangle$, όπου $|\phi_k\rangle \in \mathcal{H}_1$ και $|\psi_k\rangle \in \mathcal{H}_2$, ενώ το εσωτερικό γινόμενο γράφεται

$$\left(\sum_{l=1}^{r'} \langle \phi_l | \otimes \langle \psi_l | \right) \left(\sum_{k=1}^r |\phi_k\rangle \otimes |\psi_k\rangle \right) = \sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^{r'} \langle \phi_l | \phi_k \rangle \langle \psi_l | \psi_k \rangle. \quad (10.7)$$

Διανύσματα της μορφής $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ καλούνται *χωριζόμενα*. Συχνά γράφουμε τα διανύσματα $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ ως $|\phi, \psi\rangle$ αλλά η χρήση αυτού του συμβολισμού απαιτεί πρότερη διευκρίνιση ότι αφορά τανυστικό γινόμενο προκειμένου να μην υπάρξει παρερμηνεία.

Αν τα διανύσματα $|n\rangle$ ορίζουν μια ορθοκανονική βάση του \mathcal{H}_1 και τα διανύσματα $|i\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση του \mathcal{H}_2 , τότε τα διανύσματα $|n, i\rangle = |n\rangle \otimes |i\rangle$ ορίζουν μία βάση στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Ένα διάνυσμα $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ αναλύεται ως $|\Psi\rangle = \sum_{n,i} a_{n,i} |n, i\rangle$, όπου

$$a_{n,i} = \langle n, i | \Psi \rangle \quad (10.8)$$

Η σχέση ανάλυσης της μονάδας στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ γράφεται

$$\hat{I} = \sum_{n,i} |n, i\rangle \langle n, i|. \quad (10.9)$$

10.1.3 Τανυστικό γινόμενο τελεστών

Έστω \hat{A} τελεστής στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \hat{B} τελεστής στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 . Ορίζουμε τον τελεστή $\hat{A} \otimes \hat{B}$ στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ από τη δράση του στα διανύσματα $\sum_i |\phi_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle$ ως

$$(\hat{A} \otimes \hat{B}) \sum_i |\phi_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle = \sum_i \hat{A} |\phi_i\rangle \otimes \hat{B} |\psi_i\rangle. \quad (10.10)$$

Από τον παραπάνω ορισμό προκύπτει άμεσα ότι

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(\hat{C} \otimes \hat{D}) = \hat{A}\hat{C} \otimes \hat{B}\hat{D}. \quad (10.11)$$

Προσοχή: χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο \otimes για το τανυστικό γινόμενο χώρων, για τα χωριζόμενα διανύσματα και για το τανυστικό γινόμενο τελεστών. Αυστηρά μιλώντας αυτές είναι τρεις διαφορετικές πράξεις και μόνο *καταχρηστικά* συμβολίζονται με τον ίδιο τρόπο.

Για επιπλέον απλοποίηση του συμβολισμού, θα χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο (\hat{I}) για τον τελεστή της μονάδας στο \mathcal{H}_1 , στο \mathcal{H}_2 και στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Μ' αυτή τη σύμβαση, εξισώσεις της μορφής $\hat{I} = \hat{I} \otimes \hat{I}$ έχουν νόημα.

Ένας τελεστής στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ που μπορεί να γραφτεί ως $\hat{A} \otimes \hat{B}$ καλείται *διαχωρίσιμος*. Κάθε τελεστής \hat{X} στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα διαχωρίσιμων

τελεστών $\hat{X} = \sum_i \hat{A}_i \otimes \hat{B}_i$, όπου \hat{A}_i τελεστές στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \hat{B}_i τελεστές στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 .

Έστω $|n\rangle$ και $|i\rangle$ ορθοκανονικές βάσεις στους χώρους Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 αντίστοιχα και $|n, i\rangle = |n\rangle \otimes |i\rangle$ η αντίστοιχη ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Τότε,

$$\begin{aligned} Tr(\hat{A} \otimes \hat{B}) &= \sum_{n,i} \langle n, i | \hat{A} \otimes \hat{B} | n, i \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle \cdot \sum_i \langle i | \hat{B} | i \rangle = Tr(\hat{A})Tr(\hat{B}) \end{aligned} \quad (10.11)$$

10.2 Κβαντική σύνθεση συστημάτων

10.2.1 Θεμελιώδης κανόνας

Προτού προχωρήσουμε στην παρουσίαση του κανόνα σύνθεσης συστημάτων στην κβαντική θεωρία, ας δούμε πρώτα το αντίστοιχό του στην κλασική θεωρία. Έστω ότι έχουμε δύο συστήματα με καταστατικούς χώρους Γ_1 και Γ_2 . Για παράδειγμα, αν τα δύο συστήματα είναι σωματίδια σε μία διάσταση τα στοιχεία του Γ_1 είναι ζεύγη (q_1, p_1) θέσης και ορμής του σωματιδίου. Αντίστοιχα είναι τα στοιχεία του Γ_2 . Η πιο πλήρης γνώση που μπορούμε να έχουμε για το σύνθετο σύστημα των δυο σωματιδίων είναι να ξέρουμε θέση και ορμή (q_1, p_1) του πρώτου και θέση και ορμή (q_2, p_2) του δεύτερου. Άρα ο καταστατικός χώρος του σύνθετου συστήματος των δύο σωματιδίων αποτελείται από στοιχεία (q_1, q_2, p_1, p_2) , δηλαδή είναι το $\Gamma_1 \times \Gamma_2$.

Συμπεραίνουμε ότι στην κλασική θεωρία ένα σύνθετο σύστημα περιγράφεται από έναν καταστατικό χώρο που είναι το *Καρτεσιανό γινόμενο* $\Gamma_1 \times \Gamma_2 \times \dots \times \Gamma_n$ των καταστατικών χώρων Γ_i των υποσυστημάτων του.

Για να δούμε ποιος είναι ο αντίστοιχος νόμος στην κβαντική θεωρία, θεωρούμε δύο κβαντικά συστήματα που περιγράφονται από χώρους Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 με αντίστοιχες Χαμιλτονιανές \hat{H}_1 και \hat{H}_2 . Έστω E_n^1 και $|n\rangle_1$ οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της \hat{H}_1 και E_n^2 και $|n\rangle_2$ οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της \hat{H}_2 . Αν τα δύο συστήματα δεν αλληλεπιδρούν, περιμένουμε ότι το σύνθετο σύστημα θα περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} στον οποίο θα ορίζεται μία Χαμιλτονιανή \hat{H} , οι ιδιοτιμές της οποίας θα είναι τα αθροίσματα $E_n^1 + E_{n'}^2$ για διάφορες τιμές των n και n' . Αυτή η απαίτηση οφείλεται στη φυσική αρχή ότι η ενέργεια είναι μία προσθετική ποσότητα.

Ο μοναδικός μαθηματικός τρόπος να ικανοποιηθεί αυτή η απαίτηση είναι να θεωρήσουμε μία Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_2 \quad (10.12)$$

στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Τα ιδιοδιανύσματα της \mathcal{H} είναι τα $|n, n'\rangle = |n\rangle \otimes |n'\rangle$, αφού

$$\begin{aligned} \hat{H}|n, n'\rangle &= \hat{H}_1 \otimes \hat{I}|n, n'\rangle + \hat{I} \otimes \hat{H}_2|n, n'\rangle = \hat{H}_1|n\rangle \otimes \hat{I}|n'\rangle + \hat{I}|n\rangle \otimes \hat{H}_2|n'\rangle \\ &= E_n^1|n, n'\rangle + E_{n'}^2|n, n'\rangle = (E_n^1 + E_{n'}^2)|n, n'\rangle. \end{aligned} \quad (10.12)$$

Η Χαμιλτονιανή (10.12) προκύπτει επίσης από την υπόθεση ενός διαχωρίσιμου τελεστή χρονικής εξέλιξης $\hat{U}_t = e^{-it\hat{H}_1} \otimes e^{-it\hat{H}_2}$. Από τον κανόνα του Λάιμπνιτς,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_t &= \hat{H}_1 e^{-it\hat{H}_1} \otimes e^{-it\hat{H}_2} + e^{-it\hat{H}_1} \otimes \hat{H}_2 e^{-it\hat{H}_2} \\ &= (\hat{H}_1 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_2) \hat{U}_t. \end{aligned} \quad (10.12)$$

Οι τελεστές χρονικής εξέλιξης ικανοποιούν $i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_t = \hat{H} \hat{U}_t$, οπότε επιβεβαιώνουμε την Εξ. (10.12).

Καταλήγουμε λοιπόν στο βασικό κβαντικό κανόνα σύνθεσης συστημάτων.

Θεμελιώδης αρχή 6. Ένα σύνθετο σύστημα περιγράφεται από το τανυστικό γινόμενο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ των χώρων Χίλμπερτ \mathcal{H}_i των υποσυστημάτων του.

Η χρήση του τανυστικού γινομένου αυξάνει σημαντικά τις διαθέσιμες καταστάσεις ενός συστήματος σε σύγκριση με το Καρτεσιανό γινόμενο. Ας θεωρήσουμε δυο συστήματα που περιγράφονται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^n . Ο χώρος των καθαρών καταστάσεων για κάθε ένα από αυτά έχει (πραγματική) διάσταση $2(n-1)$. Σε ένα κλασικό σύστημα, η διάσταση του χώρου των καταστάσεων του σύνθετου συστήματος θα ήταν $4(n-1)$. Ο χώρος Χίλμπερτ του σύνθετου συστήματος $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^n = \mathcal{C}^{n^2}$ αντιστοιχεί σε χώρο καθαρών καταστάσεων με διάσταση $2n^2 - 2$, δηλαδή $2n^2 - 2 - 4(n-1) = 2(n-1)^2$ διαστάσεις περισσότερες από το χώρο που θα προέκυπτε από την κλασική σύνθεση υποσυστημάτων.

Αν ένα σύστημα ενός σωματιδίου περιγράφεται από κυματοσυναρτήσεις $\phi_1(x)$, ($x \in \mathbf{R}$) και ένα άλλο σύστημα ενός σωματιδίου περιγράφεται από κυματοσυναρτήσεις $\phi_2(y)$ ($y \in \mathbf{R}$), τότε το σύνθετο σύστημα των δύο σωματιδίων θα περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση $\psi(x, y)$, δηλαδή από μία συνάρτηση του Καρτεσιανού ζεύγους $(x, y) \in \mathbf{R}^2$. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία φυσικά εύλογη ταύτιση $L^2(\mathbf{R}, dx) \otimes L^2(\mathbf{R}, dy) = L^2(\mathbf{R}^2, dxdy)$. Γενικότερα, ισχύει ότι

$$\mathcal{L}^2(\mathbf{R}^n, d^n x) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbf{R}^m, d^m y) = \mathcal{L}^2(\mathbf{R}^{n+m}, d^n x d^m y). \quad (10.13)$$

Έστω σύνθετο σύστημα που αποτελείται από δύο ανεξάρτητα υποσυστήματα. Το ένα υποσύστημα αντιστοιχεί σε χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και σε εξέλιξη με Χαμιλτονιανή \hat{H}_1 και το άλλο σε χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 και σε εξέλιξη με Χαμιλτονιανή \hat{H}_2 . Το σύνθετο σύστημα αντιστοιχεί σε χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Δεδομένου ότι τα υποσυστήματά του είναι ανεξάρτητα, δεν επηρεάζει το ένα την εξέλιξη του άλλου, οπότε ο τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι ίσος με $\hat{U}_t = e^{-it\hat{H}_1} \otimes e^{-it\hat{H}_2}$ όπου \hat{A} . Από τον κανόνα του Λάιμπνιτς

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_t &= \hat{H}_1 e^{-it\hat{H}_1} \otimes e^{-it\hat{H}_2} + e^{-it\hat{H}_1} \otimes \hat{H}_2 e^{-it\hat{H}_2} \\ &= (\hat{H}_1 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_2) \hat{U}_t. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Δεδομένου ότι για οποιοδήποτε τελεστή χρονικής εξέλιξης \hat{U}_t ισχύει ότι $i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_t = \hat{H} \hat{U}_t$, επιβεβαιώνουμε ότι η Χαμιλτονιανή του σύνθετου συστήματος είναι

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_2. \quad (10.14)$$

Για σύνθετο σύστημα που αποτελείται από δύο όμοια υποσυστήματα με χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} το καθένα, είναι βολικός ο συμβολισμός $\hat{A}_1 = \hat{A} \otimes \hat{I}$ και $\hat{A}_2 = \hat{I} \otimes \hat{A}$, για κάθε \hat{A} στο \mathcal{H} . Έτσι, σε ένα σύστημα δύο σωματιδίων, γράφουμε τον τελεστή θέσης του πρώτου σωματιδίου ως $\hat{x}_1 = \hat{x} \otimes \hat{I}$ και του δεύτερου ως $\hat{x}_2 = \hat{I} \otimes \hat{x}$ και ομοίως για τις ορμές.

10.2.2 Εναγκαλισμός

Έστω ο χώρος Χίλμπερτ ενός σύνθετου συστήματος $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Καθαρές καταστάσεις στον \mathcal{H} της μορφής $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$, όπου $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1$ και $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_2$ καλούνται *διαχωρίσιμες*. Καθαρές καταστάσεις που δεν είναι διαχωρίσιμες καλούνται *εναγκαλισμένες* (entangled). Οι εναγκαλισμένες καταστάσεις είναι ένα ιδιότυπο χαρακτηριστικό της κβαντικής θεωρίας, χωρίς ανάλογο στην κλασική φυσική.

Θεωρούμε μία ορθοκανονική βάση $|i\rangle$ στον \mathcal{H}_1 , μία ορθοκανονική βάση $|n\rangle$ στο \mathcal{H}_2 και την ορθοκανονική βάση $|i, n\rangle = |i\rangle \otimes |n\rangle$ στον $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Για κάθε μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ στον $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$,

μετρήσεις που γίνονται μόνο στο \mathcal{H}_1 περιγράφονται από προβολικούς τελεστές της μορφής $\hat{P} \otimes \hat{I}$ και πιθανότητες

$$\begin{aligned} Tr \left[\hat{\rho}(\hat{P} \otimes \hat{I}) \right] &= \sum_{i,n} \langle n, i | \hat{\rho} \hat{P} \otimes \hat{I} | n, i \rangle = \sum_{i,n} \sum_{j,m} \langle n, i | \hat{\rho} | m, j \rangle \langle m, j | \hat{P} \otimes \hat{I} | n, i \rangle \\ &= \sum_{i,n} \sum_{j,m} \langle n, i | \hat{\rho} | m, j \rangle \langle m | \hat{P} | n \rangle \langle n | m \rangle = \sum_{i,j} \langle i | \hat{\rho}_1 | j \rangle \langle j | \hat{P} | i \rangle = Tr(\hat{\rho}_1 \hat{P}). \end{aligned} \quad (10.14)$$

Ορίσαμε το πρώτο μερικό ίχνος της $\hat{\rho}$ ως μία μήτρα πυκνότητας στο \mathcal{H}_1 με στοιχεία πίνακα

$$\langle i | \hat{\rho}_1 | j \rangle = \sum_n \langle i, n | \hat{\rho} | j, n \rangle. \quad (10.15)$$

Η ρ_1 εμπεριέχει την πληροφορία του σύνθετου συστήματος που είναι προσβάσιμη με μετρήσεις στο πρώτο υποσύστημα.

Ομοίως ορίζεται το δεύτερο μερικό ίχνος της $\hat{\rho}$ ως η μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_2$ στο \mathcal{H}_2 , με στοιχεία πίνακα

$$\langle n | \hat{\rho}_2 | m \rangle = \sum_i \langle i, n | \hat{\rho} | i, m \rangle. \quad (10.16)$$

Συχνά γράφουμε $\hat{\rho}_1 = Tr_{\mathcal{H}_2} \hat{\rho}$ και $\hat{\rho}_2 = Tr_{\mathcal{H}_1} \hat{\rho}$. Οι καταστάσεις $\hat{\rho}_1$ και $\hat{\rho}_2$ καλούνται επίσης *ανηγμένες* μήτρες πυκνότητας.

Για καθαρές μήτρες πυκνότητα $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ στο \mathcal{H} ισχύει το εξής. Αν η $|\Psi\rangle$ είναι διαχωρίσιμη (γράφεται ως $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$) τότε τα δύο μερικά ίχνη της $\hat{\rho}$ είναι καθαρές καταστάσεις: $\hat{\rho}_1 = |\phi\rangle\langle\phi|$ και $\hat{\rho}_2 = |\psi\rangle\langle\psi|$. Αν όμως η κατάσταση $|\Psi\rangle$ είναι εναγκαλισμένη, τότε οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας είναι μεικτές καταστάσεις.

Αυτή η παρατήρηση γίνεται πιο ακριβής χάρη το παρακάτω θεώρημα—για την απόδειξη, βλ. ένθετο 10.2.

Θεώρημα 10.1 Ανάλυση κατά Σμιντ (Schmidt). Κάθε διάνυσμα $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ γράφεται ως

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\phi_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle, \quad (10.17)$$

όπου $c_i > 0$, τα διανύσματα $|\phi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, N$ ορίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και τα διανύσματα $|\psi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, N$ ορίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 . Ο ακέραιος N είναι μικρότερος ή ίσος της μικρότερης από τις διαστάσεις των \mathcal{H}_1 και \mathcal{H}_2 και καλείται τάξη κατά Σμιντ του διανύσματος $|\Psi\rangle$.

Αμέσως βλέπουμε ότι αν $N = 1$, τότε η $|\Psi\rangle$ είναι διαχωρίσιμη και αν $N > 1$, η κατάσταση $|\Psi\rangle$ είναι εναγκαλισμένη.

Οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας $\hat{\rho}_1$ και $\hat{\rho}_2$ της $|\Psi\rangle$ είναι .

$$\hat{\rho}_1 = \sum_{i=1}^N c_i^2 |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad \hat{\rho}_2 = \sum_{i=1}^N c_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (10.18)$$

Τα δύο μερικά ίχνη έχουν την ίδια καθαρότητα $\gamma = \sum_{i=1}^N c_i^4$. Η ποσότητα $E := 1 - \gamma$ παίρνει τιμές στο διάστημα $(0, 1]$, και ορίζει ένα μέτρο του εναγκαλισμού της $|\Psi\rangle$, καθώς μηδενίζεται για όλες τις διαχωρίσιμες καταστάσεις.

Αν $N = \dim \mathcal{H}_1 = \dim \mathcal{H}_2$, και μία κατάσταση $|\Psi\rangle$ χαρακτηρίζεται από $c_1 = c_2 = \dots = c_n = \frac{1}{N}$, τα μερικά ίχνη είναι καταστάσεις μέγιστης άγνοιας, δηλαδή οι πιο μεικτές καταστάσεις. Τότε το διάνυσμα $|\Psi\rangle$ καλείται κατάσταση μέγιστου εναγκαλισμού. Για τέτοιες καταστάσεις, $E = 1 - N^{-1}$.

Ένθετο 10.2. Απόδειξη της ανάλυσης κατά Σμιντ

Η ανάλυση κατά Σμιντ είναι ειδική περίπτωση ενός κεντρικού θεωρήματος της γραμμικής άλγεβρας, του αναπτύγματος ιδιόμορφης τιμής.

Θεώρημα 10.2 (Ανάπτυγμα ιδιόμορφης τιμής.) Κάθε μιγαδικός πίνακας $n \times m$ A γράφεται ως $A = U\Sigma V^\dagger$, όπου

- (i) U είναι ένας μοναδιαίος $n \times n$ πίνακας,
- (ii) Σ είναι ένας διαγώνιος $n \times m$ πίνακας, του οποίου τα διαγώνια στοιχεία είναι θετικοί αριθμοί ή μηδέν, και
- (iii) V είναι ένας μοναδιαίος $m \times m$ πίνακας.

Οι μοναδιαίοι πίνακες δεν είναι μοναδικοί, τα διαγώνια στοιχεία του Σ είναι. Τα τελευταία καλούνται ιδιόμορφες τιμές του A .

Έστω δύο ορθοκανονικές βάσεις $|i\rangle$ και $|k\rangle$ στο \mathcal{C}^n και στο \mathcal{C}^m , αντίστοιχα. Κάθε διάνυσμα $|\Psi\rangle \in \mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^m$ γράφεται ως $|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m C_{ik} |i\rangle \otimes |k\rangle$, για κάποιον πίνακα $n \times m$ C_{ik} . Χρησιμοποιούμε το ανάπτυγμα ιδιόμορφης τιμής για τον C , οπότε

$$C_{ik} = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^m U_{ij} \Sigma_{jl} V_{kl}^*. \quad (10.19)$$

Χωρίς απώλεια γενικότητας θεωρούμε ότι $n \leq m$, οπότε ο πίνακας Σ είναι της μορφής

$$\Sigma = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_n & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (10.20)$$

όπου c_1, c_2, \dots, c_n οι ιδιόμορφες τιμές του C . Επιλέγουμε τη διάταξη των c_i έτσι ώστε να είναι τοποθετημένες στη διαγώνιο κατά φθίνουσα σειρά. Αν οι μη-μηδενικές τιμές των c_i είναι N σε αριθμό, τα αθροίσματα ως προς j και l στην Εξ. (10.19) είναι από 1 ως N , οπότε

$$C_{ik} = \sum_{j=1}^N c_j U_{ij} V_{kj}^*.$$

Έτσι παίρνουμε

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m c_j U_{ij} V_{kj}^* |i\rangle \otimes |k\rangle = |\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\phi_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle, \quad (10.20)$$

όπου τα διανύσματα $|\phi_j\rangle = \sum_{i=1}^n U_{ij} |i\rangle$ και $|\psi_j\rangle = \sum_{k=1}^m V_{kj}^* |k\rangle$ ορίζουν ορθοκανονικά σύνολα στο \mathcal{C}^n και στο \mathcal{C}^m αντίστοιχα, αφού οι πίνακες U και V είναι μοναδιαίοι. Άρα αποδείχθηκε το ζητούμενο

10.2.3 Εναγκαλισμός μεικτών καταστάσεων

Η έννοια του κβαντικού εναγκαλισμού επεκτείνεται και σε μεικτές καταστάσεις, όμως σ' αυτήν την περίπτωση υπάρχουν επιπλοκές. Προφανώς οι μήτρες πυκνότητας της μορφής $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ είναι διαχωρίσιμες και άρα κλασικές. Αλλά επίσης, αν πάρουμε μία μίξη από διαχωρίσιμες μήτρες πυκνότητας δεν περιμένουμε να εμφανίσουν κάποια ιδιαίτερα κβαντικά χαρακτηριστικά, δεδομένου ότι η μίξη είναι μία "κλασική" πράξη μεταξύ καταστάσεων.

Με βάση αυτό το σκεπτικό ορίζουμε ως *διαχωρίσιμη* κάθε μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ στο χώρο Χίλμπερτ

$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, που μπορεί να γραφτεί ως

$$\hat{\rho} = \sum_{k=1}^r \lambda_k \hat{\rho}_1^{(k)} \otimes \hat{\rho}_2^{(k)}, \quad (10.21)$$

όπου $\lambda_k \geq 0$ και $\sum_{k=1}^r \lambda_k = 1$. Είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς, ότι η μήτρα πυκνότητας μέγιστης άγνοιας στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ είναι διαχωρίσιμη.

Οποιαδήποτε μήτρα πυκνότητας δεν είναι διαχωρίσιμη καλείται εναγκαλισμένη.

Παρατηρούμε ότι η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_1$ της διαχωρίσιμης κατάστασης (10.21) είναι $\hat{\rho}_1 = \sum_k \lambda_k \hat{\rho}_1^{(k)}$, οπότε

$$\hat{\rho}_1 \otimes \hat{I} - \hat{\rho} = \sum_k \lambda_k \hat{\rho}_1^{(k)} \otimes (\hat{I} - \hat{\rho}_2^{(k)}) \geq 0, \quad (10.22)$$

αφού $\hat{I} - \hat{\rho}_2^{(k)} \geq 0$. Άρα αν μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ δεν ικανοποιεί την ανισότητα (10.22) είναι εναγκαλισμένη.

Η παραβίαση της ανισότητας (10.22) είναι επαρκής, αλλά όχι αναγκαίο κριτήριο εναγκαλισμού: μία κατάσταση που παραβιάζει την (10.22) είναι εναγκαλισμένη, αλλά υπάρχουν εναγκαλισμένες καταστάσεις που δεν την παραβιάζουν.

Ένα άλλο πολυχρησιμοποιούμενο κριτήριο εναγκαλισμού οφείλεται στους Πέρες και Χοροντέκι [169, 170]. Καλείται κριτήριο PPT και διατυπώνεται ως εξής.

Έστω $|m\rangle$ μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 και $|n\rangle$ μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 . Ορίζουμε το μετασχηματισμό μερικής αντιστροφής T_2 μίας μήτρας πυκνότητας $\hat{\rho}$ στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, έτσι ώστε να αντιστρέφει τα στοιχεία πίνακα ως προς τη βάση $|n\rangle$ του \mathcal{H}_2

$$\langle m, n | T_2[\hat{\rho}] | m', n' \rangle = \langle m, n' | \hat{\rho} | m', n \rangle. \quad (10.23)$$

Για μια διαχωρίσιμη μήτρα πυκνότητας (10.21) παίρνουμε

$$T_2[\hat{\rho}] = \sum_{k=1}^r \lambda_k \hat{\rho}_1^{(k)} \otimes [\hat{\rho}_2^{(k)}]^T, \quad (10.24)$$

όπου με το σύμβολο T χαρακτηρίζουμε τον ανάστροφο ενός τελεστή. Ο ανάστροφος μίας μήτρας πυκνότητας εξακολουθεί να είναι μήτρα πυκνότητας, οπότε ο τελεστής $T_2[\hat{\rho}]$ εξακολουθεί να είναι μήτρα πυκνότητας (έχει θετικές ιδιοτιμές) αν η $\hat{\rho}$ είναι διαχωρίσιμη.

Το θέμα είναι ότι αυτή η ιδιότητα δεν ισχύει, εν γένει, για εναγκαλισμένες μήτρες πυκνότητας. Για να το διαπιστώσουμε εξετάζουμε μία καθαρή εναγκαλισμένη κατάσταση $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. Διαλέγουμε διάνυσμα $|\Psi\rangle$ τάξης κατά Σμιντ ίσης με 2, οπότε $|\Psi\rangle = \cos\theta|1\rangle \otimes |a\rangle + \sin\theta|2\rangle \otimes |b\rangle$, όπου τα $|1\rangle, |2\rangle$ ορίζουν ορθοκανονικό σύνολο στο \mathcal{H}_1 , τα $|a\rangle, |b\rangle$ ορθοκανονικό σύνολο στο \mathcal{H}_2 και $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$. Βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \cos^2\theta |1\rangle\langle 1| \otimes |a\rangle\langle a| + \sin^2\theta |2\rangle\langle 2| \otimes |b\rangle\langle b| \\ &+ \sin\theta \cos\theta (|1\rangle\langle 2| \otimes |a\rangle\langle b| + |2\rangle\langle 1| \otimes |b\rangle\langle a|), \end{aligned} \quad (10.24)$$

και άρα

$$\begin{aligned} T_2[\hat{\rho}] &= \cos^2\theta |1\rangle\langle 1| \otimes |a\rangle\langle a| + \sin^2\theta |2\rangle\langle 2| \otimes |b\rangle\langle b| \\ &+ \sin\theta \cos\theta (|1\rangle\langle 2| \otimes |b\rangle\langle a| + |2\rangle\langle 1| \otimes |a\rangle\langle b|). \end{aligned} \quad (10.24)$$

Διαπιστώνουμε ότι το διάνυσμα $|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |b\rangle - |2\rangle \otimes |a\rangle)$ αποτελεί ιδιοδιάνυσμα του $T_2[\hat{\rho}]$ με αρνητική ιδιοτιμή,

$$T_2[\hat{\rho}]|\Phi\rangle = -\sin\theta \cos\theta |\Phi\rangle. \quad (10.25)$$

Εφόσον ο τελεστής $T_2[\hat{\rho}]$ έχει μία αρνητική ιδιοτιμή δεν περιγράφει μήτρα πυκνότητας.

Έτσι οδηγούμαστε στο κριτήριο εναγκαλισμού PPT. Αν για μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}$ στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, ο τελεστής $T_2[\hat{\rho}]$ δεν είναι μήτρα πυκνότητας (έχει έστω μία αρνητική ιδιοτιμή), τότε η κατάσταση $\hat{\rho}$ είναι εναγκαλισμένη.

Το κριτήριο PPT είναι ικανό για να ξεχωρίσει μια εναγκαλισμένη κατάσταση, αλλά γενικά όχι αναγκαίο. Δηλαδή μπορεί να υπάρχουν εναγκαλισμένες καταστάσεις, που δεν ικανοποιούν το κριτήριο εναγκαλισμού. Ωστόσο, στις ειδικές περιπτώσεις των χώρων Χίλμπερτ $\mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2$ και $\mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^3$ το κριτήριο PPT είναι και αναγκαίο.

10.3 Σύστημα δύο κιούμπιτ

Το σύστημα των δύο κιούμπιτ περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2$.

10.3.1 Καταστάσεις μέγιστου εναγκαλισμού

Τα ακόλουθα διανύσματα ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στο χώρο \mathcal{H} .

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle \pm |0, 1\rangle) \quad (10.26)$$

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle \pm |0, 0\rangle). \quad (10.27)$$

Υπολογίζουμε την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας που αντιστοιχεί στα παραπάνω διανύσματα. Εξειδικεύουμε τη σχέση (10.15) για το σύστημα των δύο κιούμπιτ

$$\begin{aligned} \langle 1|\hat{\rho}_1|1\rangle &= 1 - \langle 0|\hat{\rho}_1|0\rangle = \langle 1, 1|\Psi\rangle\langle\Psi|1, 1\rangle + \langle 1, 0|\Psi\rangle\langle\Psi|1, 0\rangle \\ \langle 1|\hat{\rho}_1|0\rangle &= \langle 1, 1|\Psi\rangle\langle\Psi|0, 1\rangle + \langle 1, 0|\Psi\rangle\langle\Psi|0, 0\rangle, \end{aligned} \quad (10.27)$$

και ομοίως για το $\hat{\rho}_2$.

Εφαρμόζοντας τις σχέσεις (10.27) στις τέσσερις καταστάσεις $|\Psi_{\pm}\rangle$ και $|\Phi_{\pm}\rangle$ βρίσκουμε ότι και για τις τέσσερις

$$\langle 1|\hat{\rho}_1|1\rangle = \langle 0|\hat{\rho}_1|0\rangle = \frac{1}{2} \quad \langle 1|\hat{\rho}_1|0\rangle = 0. \quad (10.28)$$

$$\langle 1|\hat{\rho}_2|1\rangle = \langle 0|\hat{\rho}_2|0\rangle = \frac{1}{2} \quad \langle 1|\hat{\rho}_2|0\rangle = 0. \quad (10.29)$$

Αυτό σημαίνει ότι $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}\hat{I}$. Δηλαδή η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας που αντιστοιχεί και στις 4 καταστάσεις $|\Psi_{\pm}\rangle$ και $|\Phi_{\pm}\rangle$ είναι η κατάσταση πλήρους άγνοιας για ένα κιούμπιτ. Άρα οι καταστάσεις $|\Psi_{\pm}\rangle$ και $|\Phi_{\pm}\rangle$ είναι καταστάσεις μέγιστου εναγκαλισμού.

10.3.2 Πιθανότητες

Θα εξετάσουμε τις πιθανότητες που αφορούν την ταυτόχρονη μέτρηση ενός τελεστή $\hat{A} = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ στο πρώτο κιούμπιτ και ενός τελεστή $\hat{B} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ στο δεύτερο κιούμπιτ, όπου \mathbf{m} και \mathbf{n} είναι μοναδιαία διανύσματα.

Οι φασματικοί προβολείς του \hat{A} είναι οι $\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{I} \pm \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ και οι φασματικοί προβολείς του \hat{B} είναι οι $\hat{Q}_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{I} \pm \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$. Οι φασματικοί προβολείς του $\hat{A} \otimes \hat{I}$ είναι $\hat{P}_a \otimes \hat{I}$, όπου $a = \pm 1$, οι φασματικοί προβολείς του $\hat{I} \otimes \hat{B}$ είναι $\hat{I} \otimes \hat{Q}_b$, όπου $b = \pm 1$.

Οι τελεστές $\hat{A} \otimes \hat{I}$ και $\hat{I} \otimes \hat{B}$ μετατίθενται. Άρα η από κοινού πιθανότητα να βρεθεί a στο πρώτο κιούμπιτ και b στο δεύτερο, δεν εξαρτάται από τη σειρά των μετρήσεων και δίνεται από την Εξ. (9.9),

$$\text{Prob}(a, b) = \text{Tr}[\hat{\rho}(\hat{P}_a \otimes \hat{I})(\hat{I} \otimes \hat{Q}_b)] = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_a \otimes \hat{Q}_b), \quad (10.30)$$

για κάθε αρχική κατάσταση $\hat{\rho}$.

Θα υπολογίσουμε τις πιθανότητες $\text{Prob}(a, b)$ για την κατάσταση $\hat{\rho} = |\Psi_{-}\rangle\langle\Psi_{-}|$ της Εξ. (10.26). Βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \text{Prob}(a, b) &= \langle\Psi_{-}|\hat{P}_a \otimes \hat{Q}_b|\Psi_{-}\rangle = \frac{1}{2} \left(\langle 1|\hat{P}_a|1\rangle\langle 0|\hat{Q}_b|0\rangle + \langle 0|\hat{P}_a|0\rangle\langle 1|\hat{Q}_b|1\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle 1|\hat{P}_a|0\rangle\langle 0|\hat{Q}_b|1\rangle - \langle 0|\hat{P}_a|1\rangle\langle 1|\hat{Q}_b|0\rangle \right). \end{aligned} \quad (10.30)$$

Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{P}_{\pm}|0\rangle &= \frac{1}{2}(1 \mp m_3) & \langle 1|\hat{P}_{\pm}|1\rangle &= \frac{1}{2}(1 \pm m_3) & \langle 0|\hat{P}_{\pm}|1\rangle &= \pm\frac{1}{2}(m_1 + im_2) \\ \langle 0|\hat{Q}_{\pm}|0\rangle &= \frac{1}{2}(1 \mp n_3) & \langle 1|\hat{Q}_{\pm}|1\rangle &= \frac{1}{2}(1 \pm n_3) & \langle 0|\hat{Q}_{\pm}|1\rangle &= \pm\frac{1}{2}(n_1 + in_2), \end{aligned}$$

οπότε αντικαθιστώντας στην Εξ. (10.30) παίρνουμε

$$\text{Prob}(+, +) = \text{Prob}(-, -) = \frac{1}{4}(1 - \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) \quad (10.29)$$

$$\text{Prob}(+, -) = \text{Prob}(-, +) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) \quad (10.30)$$

10.3.3 Συσχετισμός

Θα υπολογίσουμε το συσχετισμό $\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n})$ μεταξύ των μετρήσεων στο πρώτο κιούμπιτ που αντιστοιχούν στον τελεστή $\hat{A} = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ και των μετρήσεων στο δεύτερο κιούμπιτ που αντιστοιχούν στον τελεστή $\hat{B} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$,

$$\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) := \text{Cor}(\hat{A} \otimes \hat{I}, \hat{I} \otimes \hat{B}). \quad (10.31)$$

Για τις καταστάσεις μέγιστου εναγκαλισμού, $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A} \otimes \hat{I}) = \text{Tr}(\hat{\rho}_1\hat{A}) = \frac{1}{2}\text{Tr}\hat{A} = 0$ και ομοίως $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{I} \otimes \hat{B}) = 0$. Άρα από την Εξ. (7.34),

$$\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A} \otimes \hat{B}). \quad (10.32)$$

Για την κατάσταση $\hat{\rho} = |\Psi_{-}\rangle\langle\Psi_{-}|$,

$$\begin{aligned} \text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) &= \frac{1}{2} \left(\langle 1|\hat{A}|1\rangle\langle 0|\hat{B}|0\rangle + \langle 0|\hat{A}|0\rangle\langle 1|\hat{B}|1\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle 1|\hat{A}|0\rangle\langle 0|\hat{B}|1\rangle - \langle 0|\hat{A}|1\rangle\langle 1|\hat{B}|0\rangle \right) \end{aligned} \quad (10.32)$$

και υπολογίζοντας τα επιμέρους στοιχεία πίνακα καταλήγουμε ότι

$$\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}. \quad (10.33)$$

Εναλλακτικά μπορούμε να αποδείξουμε την Εξ. (10.33) ως εξής. Από το φασματικό θεώρημα, $\hat{A} = \hat{P}_+ - \hat{P}_-$ και $\hat{B} = \hat{Q}_+ - \hat{Q}_-$. Άρα

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = \hat{P}_+ \otimes \hat{Q}_+ + \hat{P}_- \otimes \hat{Q}_- - \hat{P}_+ \otimes \hat{Q}_- - \hat{P}_- \otimes \hat{Q}_+, \quad (10.34)$$

οπότε παίρνουμε

$$\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = \text{Prob}(+, +) + \text{Prob}(-, -) - \text{Prob}(+, -) - \text{Prob}(-, +). \quad (10.35)$$

Από τις σχέσεις (10.30) καταλήγουμε στο αποτέλεσμα (10.33)

10.3.4 Μικτές καταστάσεις

Μια ενδιαφέρουσα κατηγορία μικτών εναγκαλισμένων καταστάσεων είναι οι καταστάσεις Βέρνερ (Werner) [171]

$$\hat{\rho}_W = \alpha |\Psi_-\rangle\langle\Psi_-| + \frac{1-\alpha}{4} \hat{I}. \quad (10.36)$$

Στη βάση που ορίζεται από τα διανύσματα $|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle$, η μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_W$ αντιστοιχεί στον πίνακα

$$\hat{\rho}_W = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\alpha & -2\alpha & 0 \\ 0 & -2\alpha & 1+\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\alpha \end{pmatrix} \quad (10.37)$$

Ο πίνακας (10.36) έχει ιδιοτιμές $(1+3\alpha)/4$ και $(1-\alpha)/4$ (τριπλή), οπότε οι καταστάσεις Βέρνερ ορίζονται για $-\frac{1}{3} \leq \alpha \leq 1$.

Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας είναι $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} \hat{I}$, οπότε

$$\hat{\rho}_1 \otimes \hat{I} - \hat{\rho}_W = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\alpha & +2\alpha & 0 \\ 0 & +2\alpha & 1-\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\alpha \end{pmatrix}. \quad (10.38)$$

Ο πίνακας $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{I} - \hat{\rho}_W$ είναι πανομοιότυπος με τον πίνακα (10.37) με $\alpha \rightarrow -\alpha$. Άρα οι ιδιοτιμές του είναι $(1-3\alpha)/4$ και $(1+\alpha)/4$ (τριπλή). Και οι δύο ιδιοτιμές είναι μη αρνητικές για $\alpha \leq \frac{1}{3}$. Από το κριτήριο (10.22) προκύπτει ότι οι καταστάσεις Βέρνερ είναι εναγκαλισμένες για $\alpha > \frac{1}{3}$.

10.4 Το θεώρημα του Μπελ

10.4.1 Η ανισότητα του Μπελ

Το θεώρημα του Μπελ (J. Bell) [172] είναι ένα από τα σημαντικότερα αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής. Δείχνει ότι η υπόθεση ότι οι μετρήσεις αποκαλύπτουν προϋπάρχουσες τιμές φυσικών ποσοτήτων οδηγεί σε πειραματικές προβλέψεις διαφορετικές από αυτές τις κβαντικής θεωρίας.

Για να αποδείξουμε το θεώρημα του Μπελ θεωρούμε ένα σύστημα από δύο κιούμπιτ και μετρήσεις που αντιστοιχούν σε τελεστές της μορφής $\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ για κάθε κιούμπιτ, όπου \mathbf{m} μοναδιαίο διάνυσμα.

Θα επιχειρήσουμε να δώσουμε μία περιγραφή αυτού του πειράματος χρησιμοποιώντας κλασικές έννοιες. Έστω ότι οι μετρήσεις σε ένα κιούμπιτ αποκαλύπτουν κάποιες ιδιότητες του κβαντικού συστήματος που βρίσκονται σε ένα βαθύτερο επίπεδο, ενδεχομένως πέρα από τη συνήθη κβαντική θεωρία. Αυτές οι ιδιότητες αντιστοιχούν σε κάποιον καταστατικό χώρο Γ . Τότε η μέτρηση του τελεστή $\hat{A} = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ αντιστοιχεί σε μία συνάρτηση $f[\mathbf{m}](\xi)$, όπου $\xi \in \Gamma$, η οποία εξαρτάται από το \mathbf{m} (τι μέτρηση έγινε) και παίρνει τιμές είτε $+1$ είτε -1 , που ως ιδιοτιμές του \hat{A} αντιστοιχούν στα αποτελέσματα της μέτρησης.

Δεδομένου ότι θα εξετάσουμε μετρήσεις σε ένα ζεύγος από κιούμπιτ, θεωρούμε έναν καταστατικό χώρο Γ_1 για το πρώτο κιούμπιτ και έναν καταστατικό χώρο Γ_2 για το δεύτερο κιούμπιτ, οπότε και δύο κατηγορίες συναρτήσεων $f_{1,2}[\mathbf{m}] : \Gamma_{1,2} \rightarrow \{+1, -1\}$, μία για μετρήσεις σε κάθε κιούμπιτ.

Θεωρούμε μία πηγή που εκπέμπει ζεύγη από κιούμπιτ και κάθε κιούμπιτ μετρείται σε ξεχωριστή μετρητική συσκευή. Έστω ότι στο κιούμπιτ 1 κάνουμε μέτρηση που αντιστοιχεί στο διάνυσμα \mathbf{m}_1 και στο κιούμπιτ 2 μέτρηση που αντιστοιχεί στο διάνυσμα \mathbf{m}_2 . Έστω ότι κάνουμε τις μετρήσεις σε ένα στατιστικό σύνολο με N ζεύγη από κιούμπιτ, και ότι στην k -στη μέτρηση πήραμε αποτέλεσμα $a_k \in \{-1, 1\}$ για το πρώτο κιούμπιτ και $b_k \in \{-1, 1\}$ για το δεύτερο κιούμπιτ. Από τα αποτελέσματα αυτών των μετρήσεων κατασκευάζουμε το συσχετισμό

$$\text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_k b_k \quad (10.39)$$

Η ποσότητα $\text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2)$ εξαρτάται από το είδος των μετρήσεων που έγιναν στα δύο κιούμπιτ, όπως αυτές περιγράφονται από τα μοναδιαία διανύσματα \mathbf{m}_1 και \mathbf{m}_2 . Αν η ποσότητα (10.39) παίρνει μία καλώς ορισμένη τιμή στο όριο $N \rightarrow \infty$, τότε μπορούμε να επιχειρήσουμε να περιγράψουμε τα αποτελέσματα των μετρήσεων χρησιμοποιώντας κλασικές πιθανότητες. Ο καταστατικός χώρος για τα δύο κιούμπιτ είναι $\Gamma_1 \times \Gamma_2$, οπότε το στατιστικό σύνολο των ζευγών που παράγει η πηγή περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας $\rho(\xi_1, \xi_2)$ όπου $(\xi_1, \xi_2) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$.

Στο όριο $N \rightarrow \infty$, η ποσότητα (10.39) αντιστοιχεί στην αναμενόμενη τιμή

$$\text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2) = \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1, \xi_2) f_1[\mathbf{m}_1](\xi_1) f_2[\mathbf{m}_2](\xi_2). \quad (10.40)$$

Παρατηρούμε ότι το να χρησιμοποιήσουμε διαφορετική συνάρτηση για τη μέτρηση σε κάθε κιούμπιτ, υποθέτουμε ότι οι μετρήσεις που γίνονται στα δύο κιούμπιτ είναι ανεξάρτητες η μία από την άλλη: τα αποτελέσματα της μίας δεν μπορούν να επηρεάσουν αιτιακά τα αποτελέσματα της άλλης. Αυτό είναι θεμελιώδης φυσική απαίτηση για να μπορούμε να μιλάμε για ανεξάρτητες μετρήσεις. Ειδικότερα, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι μετρητικές συσκευές βρίσκονται σε πολύ μεγάλη απόσταση μεταξύ τους, ώστε η αιτιακή επίδραση της μίας μέτρησης στην άλλη να αντιστοιχεί σε ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός.

Θεωρούμε ότι με την ίδια πηγή κάνουμε μετρήσεις σε 4 διαφορετικές διατάξεις.

1. Μέτρηση σε ποσότητες που αντιστοιχούν σε μοναδιαία διανύσματα \mathbf{m}_1 και \mathbf{m}_2 και υπολογισμό του συσχετισμού $\text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2)$.
2. Μέτρηση σε ποσότητες που αντιστοιχούν σε μοναδιαία διανύσματα \mathbf{m}_1 και \mathbf{n}_2 και υπολογισμό του συσχετισμού $\text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{n}_2)$.
3. Μέτρηση σε ποσότητες που αντιστοιχούν σε μοναδιαία διανύσματα \mathbf{n}_1 και \mathbf{m}_2 και υπολογισμό του συσχετισμού $\text{Cor}(\mathbf{n}_1, \mathbf{m}_2)$.

4. Μέτρηση σε ποσότητες που αντιστοιχούν σε μοναδιαία διανύσματα \mathbf{n}_1 και \mathbf{n}_2 και υπολογισμό του συσχετισμού $\text{Cor}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$.

Από τα αποτελέσματα των παραπάνω μετρήσεων γράφουμε την ποσότητα

$$\Delta = \text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2) + \text{Cor}(\mathbf{m}_1, \mathbf{n}_2) + \text{Cor}(\mathbf{n}_1, \mathbf{m}_2) - \text{Cor}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2). \quad (10.41)$$

Με δεδομένο ότι και τα 4 πειράματα έγιναν με την ίδια αρχική προετοιμασία του συστήματος (άρα και με την ίδια πυκνότητα πιθανότητας $\rho(\xi_1, \xi_2)$), ισχύει ότι

$$\Delta = \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1, \xi_2) \Phi(\xi_1, \xi_2), \quad (10.42)$$

όπου

$$\Phi = f_1[\mathbf{m}_1]f_2[\mathbf{m}_2] + f_1[\mathbf{m}_1]f_2[\mathbf{n}_2] + f_1[\mathbf{n}_1]f_2[\mathbf{m}_2] - f_1[\mathbf{n}_1]f_2[\mathbf{n}_2]. \quad (10.43)$$

Η συνάρτηση Φ γράφεται ως

$$\Phi = f_1[\mathbf{m}_1](f_2[\mathbf{m}_2] + f_2[\mathbf{n}_2]) + f_1[\mathbf{n}_1](f_2[\mathbf{m}_2] - f_2[\mathbf{n}_2]). \quad (10.44)$$

Οι δυνατές τιμές των ποσοτήτων $f_2[\mathbf{m}_2] \pm f_2[\mathbf{n}_2]$ είναι $-2, 0$ και $+2$. Ωστόσο,

- αν $f_2[\mathbf{m}_2] + f_2[\mathbf{n}_2] = \pm 2$, τότε αναγκαστικά $f_2[\mathbf{m}_2] - f_2[\mathbf{n}_2] = 0$, και
- αν $f_2[\mathbf{m}_2] + f_2[\mathbf{n}_2] = 0$, τότε $f_2[\mathbf{m}_2] - f_2[\mathbf{n}_2] = \pm 2$.

Δηλαδή, αν $|f_2[\mathbf{m}_2] \pm f_2[\mathbf{n}_2]| = 2$, τότε $|f_2[\mathbf{m}_2] \mp f_2[\mathbf{n}_2]| = 0$.

Οπότε

$$\begin{aligned} |\Phi| &\leq |f_1[\mathbf{m}_1]| |f_2[\mathbf{m}_2] + f_2[\mathbf{n}_2]| + |f_1[\mathbf{n}_1]| |f_2[\mathbf{m}_2] - f_2[\mathbf{n}_2]| \\ &= |f_2[\mathbf{m}_2] + f_2[\mathbf{n}_2]| + |f_2[\mathbf{m}_2] - f_2[\mathbf{n}_2]| = 2. \end{aligned} \quad (10.44)$$

Καταλήγουμε ότι η ποσότητα Δ , Εξ. (10.41), η οποία προσδιορίζεται από τα αποτελέσματα των μετρήσεων, ικανοποιεί τη σχέση

$$|\Delta| \leq 2, \quad (10.45)$$

η οποία καλείται *ανισότητα του Μπελ*.

Η ανισότητα του Μπελ προκύπτει από την περιγραφή των μετρήσεων με κλασική θεωρία πιθανοτήτων. Η κβαντική θεωρία δίνει άλλα αποτελέσματα.

Θεωρούμε ότι η προετοιμασία του συστήματος αντιστοιχεί σε μία καθαρή κατάσταση $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, οπότε $\Delta = \langle \Psi | \hat{D} | \Psi \rangle$, όπου

$$\hat{D} = \mathbf{m}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{m}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{m}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{n}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{m}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{n}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (10.46)$$

Για την κατάσταση $|\Psi_-\rangle$, Εξ. (10.26), βρίσκουμε, μέσω της Εξ. (10.33), ότι

$$\Delta = -\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{m}_2 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2. \quad (10.47)$$

Επιλέγουμε τα εξής διανύσματα.

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1 &= (1, 0, 0) & \mathbf{m}_2 &= (\cos \theta, 0, \sin \theta) \\ \mathbf{n}_1 &= (0, 0, 1) & \mathbf{n}_2 &= (\cos \theta, 0, -\sin \theta), \end{aligned}$$

για κάποια γωνία θ .

Για τα παραπάνω διανύσματα, η Εξ. (10.47) γίνεται $|\Delta| = 2|\sin \theta + \cos \theta|$. Η μέγιστη τιμή

$$|\Delta|_{\max} = 2\sqrt{2} > 2, \quad (10.46)$$

επιτυγχάνεται για γωνία $\theta = \pi/4$. Άρα υπάρχουν κβαντικές καταστάσεις που παραβιάζουν τις ανισότητες του Μπελ.

Το ζήτημα είναι ότι οι ανισότητες του Μπελ προκύπτουν από στοιχειώδεις, φαινομενικά εύλογες υποθέσεις. Συγκεκριμένα, υποθέσαμε

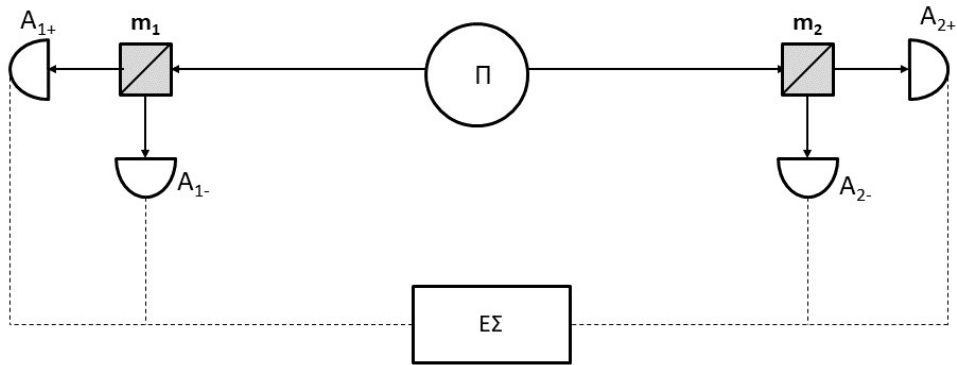
1. Ότι τα κιούμπιτ περιγράφονται από κάποιον καταστατικό χώρο. Αυτός ο καταστατικός χώρος δεν ενυπάρχει μέσα στην κβαντική θεωρία. Αντιστοιχεί στην υπόθεση ότι οι μετρήσεις αποκαλύπτουν τις προϋπάρχουσες ιδιότητες των μικροσκοπικών συστημάτων, οι οποίες ιδιότητες αντιστοιχούν σε έναν καταστατικό χώρο. Αυτή η υπόθεση καλείται συχνά *μικροσκοπικός ρεαλισμός*.
2. Ότι οι μετρήσεις είναι ανεξάρτητες. Δεν υπάρχει κάποια αιτιακή σχέση μεταξύ των μετρητικών συσκευών, έτσι ώστε το αποτέλεσμα της μίας να επηρεάζει το αποτέλεσμα της άλλης. Αυτή η υπόθεση είναι αναγκαία προκειμένου να χρησιμοποιηθεί η σχέση (10.40). Όντως οι δύο μετρητικές συσκευές μπορεί να είναι τοποθετημένες σε οσοδήποτε μεγάλη απόσταση θέλουμε, έτσι ώστε η οποιαδήποτε αλληλεπίδραση μεταξύ τους θα πρέπει να γίνεται με ταχύτητα μεγαλύτερη του φωτός. Αυτή η αρχή καλείται *αρχή της τοπικότητας*.
3. Υποθέτουμε επίσης ότι το στατιστικό σύνολο στο οποίο γίνεται η μέτρηση περιγράφεται από μία πυκνότητα πιθανότητας πάνω στον καταστατικό χώρο.

Βλέπουμε ότι οι προϋποθέσεις για την ισχύ των ανισοτήτων Μπελ είναι πολύ στοιχειώδεις. Η παραβίασή τους σημαίνει ότι η κβαντική θεωρία παραβιάζει είτε την αρχή του μικροσκοπικού ρεαλισμού είτε την αρχή της τοπικότητας, ή, όπως έχει επικρατήσει να λέγεται συνοπτικά, παραβιάζει τον *τοπικό ρεαλισμό*. Γι' αυτό το λόγο και η εκτέλεση πειραμάτων για το αν παραβιάζονται ή όχι οι ανισότητες Μπελ έχει μεγάλη σημασία για την κατανόηση των θεμελίων της κβαντικής θεωρίας και για το τί αυτή μας λέει για τον κόσμο.

10.4.2 Πειράματα

Η πρώτη σειρά πειραμάτων που επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων Bell έγινε από τον Ασπέ (A. Aspect) στις αρχές της δεκαετίας του 1980 [173, 174]. Τα κιούμπιτ σε αυτά τα πειράματα αντιστοιχούσαν στις καταστάσεις πόλωσης φωτονίων. Μία από τις πειραματικές διατάξεις που χρησιμοποιήθηκε περιγράφεται στο Σχ. 9.1. Στο πείραμα καταγράφονται οι συγχρονισμοί ανιχνεύσεων φωτονίων στις δύο ανιχνευτικές διατάξεις. Για κάθε επιλογή των πολώσεων \mathbf{m} και \mathbf{n} μετρούνται οι αριθμοί

1. N_{++} , αριθμός συγχρονισμών A_+ του \mathbf{m} και του A_+ του \mathbf{n} .
2. N_{+-} , αριθμός συγχρονισμών A_+ του \mathbf{m} και του A_- του \mathbf{n} .
3. N_{-+} , αριθμός συγχρονισμών A_- του \mathbf{m} και του A_+ του \mathbf{n} .



Σχήμα 10.1: Σχέδιο πειράματος για την επιβεβαίωση της παραβίασης της ανισότητας του Bell από φωτόνια. Π: πηγή ζευγών φωτονίων. m, n : αναλυτές, που σπάνε τη δέσμη φωτονίων ανάλογα με την προβολή της πόλωσης ενός φωτονίου στην επιλεγμένη κατεύθυνση. A_{\pm} : ανιχνευτές φωτονίων με συγκεκριμένη πόλωση. ΕΣ: επεξεργαστής σήματος από τους ανιχνευτές, ο οποίος υπολογίζει το συσχετισμό.

4. N_{--} , αριθμός συγχρονισμών A_- του m και του A_- του n .

Ο συσχετισμός υπολογίζεται ως

$$\text{Cor}(m, n) = \frac{N_{++} + N_{--} - N_{+-} - N_{-+}}{N_{++} + N_{--} + N_{+-} + N_{-+}}. \quad (10.47)$$

Τα αποτελέσματα ήταν σαφή, ότι οι ανισότητες Μπελ παραβιάζονται. Έκτοτε παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ έχει παρατηρηθεί σε μεγάλο αριθμό πειραμάτων—βλ. Ένθετο 9.2.

Ένθετο 10.4. Πειράματα παραβίασης της ανισότητας του Μπελ

Η μεγαλύτερη πρόκληση στα πειράματα ελέγχου των ανισοτήτων του Μπελ είναι να αποκλείσουν οποιονδήποτε παράγοντα αμφιβολίας για το αποτέλεσμα, όσο απίθανος κι αν είναι αυτός. Το θέμα είναι ότι σε κάθε πείραμα γίνονται αρκετές υποθέσεις επιπλέον της υπόθεσης που ελέγχεται, τόσο ως προς τη διάταξη όσο και ως προς την επεξεργασία των αποτελεσμάτων. Συνήθως αυτές οι υποθέσεις θεωρούνται αθώες, δεν περιμένει κανείς ότι θα επηρεάζουν σημαντικά τα βασικά αποτελέσματα. Ωστόσο, επειδή στα πειράματα τύπου Μπελ, το διακύβευμα είναι μεγάλο, αποδεικνύεται ότι ο κόσμος δεν μπορεί να περιγραφεί από τοπικές ρεαλιστικές θεωρίες, είναι αναγκαίο να γίνουν πειράματα στα οποία δε χρειάζονται τέτοιες πρακτικές υποθέσεις. Αυτές οι επιπλέον πρακτικές υποθέσεις καλούνται *παραθυράκια* (loopholes) των πειραμάτων τύπου Μπελ.

Τα σημαντικότερα παραθυράκια είναι δύο.

1. *Παραθυράκι τοπικότητας.* Υπάρχει το ενδεχόμενο να υπάρχει επικοινωνία μεταξύ των δύο μετρητών των κιούμπιτ με κάποιον τρόπο άγνωστο σε μας. Για να αποκλειστεί αυτό το ενδεχόμενο, πρέπει σε κάθε μέτρηση να ξαναγίνεται η επιλογή των m και n , με τυχαίο τρόπο, και να ολοκληρώνεται η μέτρηση στο ένα κιούμπιτ τόσο γρήγορα ώστε να μην είναι θεωρητικά δυνατό να έχει ληφθεί πληροφορία για τη διάταξη της μέτρησης στο άλλο κιούμπιτ.
2. *Παραθυράκι ανίχνευσης.* Στα πειράματα φωτονίων μετράει κανείς συγχρονισμούς από φωτονικές ανιχνεύσεις. Ωστόσο δεν υπάρχουν τέλει φωτονικοί ανιχνευτές, οπότε πολλά από τα φωτόνια που εκπέμφθηκαν δεν ανιχνεύονται και δεν υπολογίζονται στον υπολογισμό του $\text{Cor}(m, n)$. Πάντα γίνεται η εύλογη υπόθεση ότι τα ανιχνευόμενα φωτόνια αποτελούν αντιπροσωπευτικό δείγμα του συνόλου των εκπεμπόμενων φωτονίων. Θα μπορούσε όμως κάποιος να φανταστεί μία υποκείμενη θεωρία που συσχετίζει την ανιχνευσιμότητα των φωτονίων με κρυμμένες μικροκαταστάσεις του συστήματος. Μια τέτοια θεωρία, παρότι εντελώς έξω από τη λογική της σύγχρονης φυσικής, δεν μπορεί

να αποκλειστεί

Δηλαδή, για να φύγει και η τελευταία αμφιβολία για τη μη ισχύ του τοπικού ρεαλισμού, πρέπει να γίνουν πειράματα στα οποία τα κιούμπιτ να απομακρύνονται το ένα από το άλλο πριν γίνει η μέτρηση, να ανιχνεύονται από ανιχνευτές που θα είναι γρήγοροι αλλά και υψηλής απόδοσης. Παρότι το πρώτο πείραμα που επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων Μπελ έγινε στις αρχές της δεκαετίας του 1980, χρειάστηκε να φτάσει το 2015 για να γίνει το πρώτο πείραμα επιβεβαίωσης της παραβίασης που να κλείνει όλα τα παραθυράκια. Βέβαια, τα πειράματα που έγιναν στο ενδιάμεσο, παρότι ατελή ως προς τα παραθυράκια, έδιναν ήδη εξαιρετική συμφωνία με τις προβλέψεις της κβαντικής θεωρίας.

Παρουσιάζουμε μερικά από τα σημαντικότερα πειράματα.

1. Τα πρώτα πειράματα που καταδεικνύουν παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ ήταν αυτά του Ασπέ [173, 174] στις αρχές της δεκαετίας του 1980, τα οποία έγιναν με κιούμπιτ που αντιστοιχούν στην πόλωση φωτονίων. Στο τελευταίο πείραμα [174], η επιλογή κατεύθυνσης m στους αναλυτές γίνονταν με τυχαίο τρόπο και σε χρονική κλίμακα πολύ μικρότερη από το χρόνο που μεσολαβεί από την εκπομπή ως την ανίχνευση του φωτονίου.
2. Το 1998, η ομάδα του Ζισάν (N. Gisin) στη Γενεύη [175, 176] επιβεβαίωσε τις παραβιάσεις των ανισοτήτων του Μπελ σε διάταξη όπου οι ανιχνευτές απείχαν μεταξύ τους 10km.
3. Πάλι το 1998, η ομάδα του Τσαϊλίνγκερ (A. Zeilinger) στη Βιέννη [177] επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων Μπελ, σε σύστημα φωτονίων με τρόπο που να αποφεύγεται το παραθυράκι της τοπικότητας. Το πέτυχαν θέτοντας σημαντική απόσταση μεταξύ των ανιχνευτών, αλλάζοντας τη διάταξη των αναλυτών γρήγορα και τυχαία σε κάθε μέτρηση και κάνοντας ανεξάρτητη καταγραφή δεδομένων για κάθε ένα από τα δύο κιούμπιτ.
4. Το 2001, η ομάδα του Ουάινλαντ στο Μπάουλντερ του Κολοράντο [178] επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων Μπελ σε σύστημα κιούμπιτ από άτομα Be^+ . Το σημαντικό σ' αυτό το πείραμα είναι ότι μπόρεσε να κλείσει το παραθυράκι ανίχνευσης.
5. Το 2006, η ομάδα του Τσαϊλίνγκερ στη Βιέννη [179] επιβεβαίωσε την παραβίαση μιας γενίκευσης των ανισοτήτων του Μπελ, η οποία απορρίπτει και μία μεγάλη κατηγορία ρεαλιστικών θεωριών που είναι μη-τοπικές, δηλαδή δέχονται σήματα με ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός.
6. Το 2010, η ομάδα του Μαρτίνις (J. M. Martinis) στη Σάντα Μάρμπαρα των ΗΠΑ [180] επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ σε σύστημα συμπτυκνωμένης ύλης, όπου τα κιούμπιτ αντιστοιχούν σε καταστάσεις ρεύματος μιας διόδου Τζόζεφσον. Επιπλέον, το πείραμα πέτυχε να κλείσει το παραθυράκι ανίχνευσης.
7. Το 2013, η ομάδα του Τσαϊλίνγκερ στη Βιέννη [181] επιβεβαίωσε την παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ με φωτόνια κλείνοντας το παραθυράκι ανίχνευσης (όχι όμως το παραθυράκι τοπικότητας).
8. Το 2015, η ομάδα του Χάνσον (R. Hanson) στο Ντελφτ [182] έκανε το πρώτο πείραμα επιβεβαίωσης των ανισοτήτων του Μπελ με κλειστά όλα τα παραθυράκια, σε σύστημα όπου τα δύο κιούμπιτ αντιστοιχούν στα σπιν δύο ηλεκτρονίων σε απόσταση 1,3km.

10.4.3 Σημασία της παραβίασης των ανισοτήτων του Μπελ

Μπορούμε να θεωρήσουμε ως σχεδόν σίγουρο ότι τα πειράματα επιβεβαιώνουν την παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ. Αυτό, σε πρώτη ανάγνωση, σημαίνει ότι ο τοπικός ρεαλισμός δεν μπορεί να ισχύει. Προτού εξετάσουμε τί σημαίνει αυτό, πρέπει πρώτα να δούμε δύο σενάρια που θα μπορούσαν να διασώσουν τον τοπικό ρεαλισμό.

Βασική υπόθεση στην απόδειξη των ανισοτήτων του Μπελ είναι ότι οι κατευθύνσεις των αναλυτών είναι ανεξάρτητες μεταβλητές. Σε κάθε μέτρηση, προσδιορίζονται είτε από κάποια τυχαία φυσική διαδικασία, είτε από κάποιο πρόγραμμα που καλεί μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών είτε από τον ίδιο τον παρατηρητή. Θα μπορούσαμε να σώσουμε τον τοπικό ρεαλισμό υποθέτοντας ότι αυτή η ανεξαρτησία δεν υφίσταται. Για παράδειγμα, θα μπορούσαμε να υποθέσουμε μία υπερ-αιτιοκρατική θεωρία, στην οποία κάθε επιλογή είναι προκαθορισμένη από πριν, έτσι ώστε να μην υπάρχει πραγματική ανεξαρτησία στις κατευθύνσεις των αναλυτών. Σε κάθε πείραμα που έχει γίνει και σε οποιοδήποτε θα γίνει στο μέλλον, οι κατευθύνσεις των αναλυτών είναι προκαθορισμένες από κάποιες αρχικές συνθήκες και είναι μεταξύ τους συζευγμένες. Αλλά, αυτού του είδους η θεωρία είναι ισοδύναμη με

την επίκληση μιας κοσμικής συνωμοσίας, που έχει στόχο να βγάλουμε λάθος συμπέρασμα για τη φυσική. Όπως λέει ο Μπελ [183],

“ένας τέτοιος τρόπος προσδιορισμού των κβαντικών συσχετισμών θα ήταν πολύ πιο παρανοϊκός από κάποιον στον οποίο θα είχαμε αιτιακές επιδράσεις γρηγορότερα από το φως. Φαινομενικά ξεχωριστά κομμάτια του κόσμου θα πρέπει να εμπλέκονται μεταξύ τους με ένα βαθύ και συνωμοτικό τρόπο και μαζί τους θα είναι μπλεγμένη και η δική μας ελεύθερη βούληση.”

Βλέπουμε ότι η απόρριψη του τοπικού ρεαλισμού φαντάζει αναπόφευκτη. Τι θα κρατήσουμε από τα δύο; Την τοπικότητα ή τον ρεαλισμό; Η απόρριψη της τοπικότητας δε φαντάζει ως καλή λύση. Υπάρχει κατ’ αρχάς το πρόβλημα της παραβίασης της ταχύτητας του φωτός, που σημαίνει οποιαδήποτε τέτοια θεωρία πρέπει να συνοδευτεί και από σημαντικές αλλαγές στη θεωρία της σχετικότητας. Πολύ πιο προβληματικό είναι το γεγονός ότι οι παραβιάσεις της ταχύτητας του φωτός που απαιτούνται έχουν έναν πολύ περίεργο χαρακτήρα. Δηλαδή, από τη μία η θεωρία πρέπει σε επίπεδο των παρατηρήσεων να συμφωνεί με την κβαντική θεωρία (η οποία είναι πλήρως συμβατή με τη σχετικότητα και δε δέχεται σήμα με ταχύτητα μεγαλύτερη του φωτός), αλλά από την άλλη πρέπει να υπάρχουν ταχύτητες του φωτός σε υποκβαντικό επίπεδο, οι οποίες δεν μπορούν να ξεφύγουν από αυτό το επίπεδο και να πάνε στο επίπεδο της παρατήρησης. Βεβαίως δεν υπάρχει καμία φυσική εξήγηση γιατί συμβαίνει αυτό, ή καν τί ξεχωριστό έχει το επίπεδο των πειραματικών αποτελεσμάτων.

Πέρα από αυτό, υπάρχουν πειράματα τα οποία αποκλείουν και συγκεκριμένες θεωρίες που δέχονται ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός, αυτές μάλιστα που είναι φυσικά πιο εύλογες με βάση την εμπειρία της κλασικής φυσικής [179]. Η μόνη επαρκώς διατυπωμένη θεωρία που αποδέχεται ρεαλισμό χωρίς τοπικότητα και δεν απορρίπτεται από το πείραμα είναι η λεγόμενη *μηχανική του Μπομ* (D. Bohm) [184], η οποία είναι φτιαγμένη έτσι ώστε να συμφωνεί με τα αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής σε μη-σχετικιστικά συστήματα. Στη θεωρία του Μπομ, σε κάθε σωματίο αντιστοιχεί, πέρα από τους σωματιδιακούς βαθμούς ελευθερίας, και ένα φυσικό κύμα το οποίο περιγράφεται από την εξίσωση του Σρέντινγκερ, όπου το κύμα παίζει το ρόλο οδηγού για την κίνηση του σωματιδίου. Οι υποστηρικτές της θεωρίας του Μπομ τη θεωρούν ως καλό παράδειγμα του πώς θα μπορούσε να φτιαχτεί μία κβαντική θεωρία που να διατηρεί το ρεαλισμό, δεχόμενη ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός. Ωστόσο η θεωρία αυτή πάσχει από τα προβλήματα που περιγράψαμε παραπάνω, στο να προσδιορίσει ενδογενώς τις συνθήκες κάτω από τις οποίες παύουν να εμφανίζονται οι ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός, και επίσης δε γενικεύεται ώστε να καλύψει όλο το εύρος χρήσης της συνήθους κβαντικής θεωρίας.

Με βάση τα παραπάνω, η πιο εύλογη επιλογή, με βάση την τρέχουσα κατανόηση του θέματος, είναι η συνολική άρνηση του μικροσκοπικού ρεαλισμού (με διατήρηση της τοπικότητας), η οποία όπως έχουμε δει σε προηγούμενα κεφάλαια ενισχύεται και από άλλα χαρακτηριστικά της κβαντικής θεωρίας. Η άρνηση του ρεαλισμού σημαίνει ότι η έννοια της “ιδιότητας” ενός συστήματος εν γένει δεν έχει νόημα πιο κάτω από το κλασικό μακροσκοπικό επίπεδο που αντιστοιχεί στις μετρήσεις. Ένα μικροσκοπικό σύστημα δεν έχει ιδιότητες αυτό καθαυτό, ιδιότητες εμφανίζονται μόνο ως αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης του με τη μετρητική συσκευή, και αφορούν τη σύζευξη μικροσκοπικού συστήματος και συσκευής. Γι’ αυτό το λόγο, η λέξη “πραγματικότητα” δεν μπορεί να χρησιμοποιείται για τα μικροσκοπικά όντα, με τον ίδιο τρόπο που χρησιμοποιείται για τα αντικείμενα της καθημερινότητάς μας.

10.4.4 Η ανισότητα του Τσίρελσον

Όπως η κλασική θεωρία πιθανοτήτων θέτει ένα άνω όριο στην ποσότητα $|\Delta|$, Εξ. (10.41), έτσι κάνει και η κβαντική θεωρία. Θυμίζουμε ότι με βάση τον ορισμό, η μέγιστη δυνατή τιμή που μπορεί να πάρει η ποσότητα $|\Delta|$ είναι η τιμή 4. Η υπόθεση ότι το σύστημα περιγράφεται από κλασική θεωρία

πιθανοτήτων μας δίνει $|\Delta| \leq 2$. Ο Τσίρελσον (B. S. Cirel'son) απέδειξε ότι η υπόθεση ότι το σύστημα περιγράφεται από κβαντική θεωρία μας δίνει $|\Delta| \leq 2\sqrt{2}$ [185]. Αυτό σημαίνει ότι τα πειράματα που ελέγχουν τις παραβιάσεις τις ανισότητας του Μπελ, μπορούν να ελέγξουν και για παραβιάσεις της κβαντικής θεωρίας.

Πρόταση 10.3 (Ανισότητα του Τσίρελσον) $|\Delta| \leq 2\sqrt{2}$.

Απόδειξη. Ο τελεστής \hat{D} της Εξ. (10.46) γράφεται

$$\hat{D}^2 = 4\hat{I} + [\mathbf{m}_1 \cdot \hat{\sigma}, \mathbf{n}_1 \cdot \hat{\sigma}] \otimes [\mathbf{m}_2 \cdot \hat{\sigma}, \mathbf{n}_2 \cdot \hat{\sigma}].$$

Η απόδειξη είναι άμεση εφόσον θυμηθείτε ότι $(\mathbf{m} \cdot \hat{\sigma})^2 = |\mathbf{m}|^2 \hat{I}$.

Από την Εξ. (6.12),

$$\hat{D}^2 = 4\hat{I} - 4(\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes (\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2) \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

Άρα

$$|\Delta|^2 = (\langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle)^2 \leq \langle \psi | \hat{D}^2 | \psi \rangle = 4 - 4\langle \psi | (\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes (\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2) \cdot \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle. \quad (10.46)$$

Για αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} και \hat{B} , η ανισότητα Κωσού-Σβαρτς δίνει

$$|\langle \psi | \hat{A} \otimes \hat{B} | \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 \otimes \hat{I} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{I} \otimes \hat{B}^2 | \psi \rangle},$$

και άρα

$$|\langle \psi | (\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes (\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2) \cdot \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle| \leq |\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1| |\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2|. \quad (10.46)$$

Η Εξ. (10.46) γίνεται

$$|\Delta|^2 \leq 4 + 4|\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1| |\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2|. \quad (10.47)$$

Το μέγιστο του $|\mathbf{m}_1 \times \mathbf{n}_1| |\mathbf{m}_2 \times \mathbf{n}_2|$ είναι 1 (για \mathbf{m}_1 κάθετο στο \mathbf{n}_1 και \mathbf{m}_2 κάθετο στο \mathbf{n}_2). Άρα, $|\Delta|^2 \leq 8$, δηλαδή, $|\Delta| \leq 2\sqrt{2}$.

10.4.5 Το θεώρημα του Μπελ χωρίς ανισότητες

Οι ανισότητες του Μπελ χρησιμοποιούν συσχετισμούς που αφορούν μετρήσεις σε ένα στατιστικό σύνολο κβαντικών συστημάτων. Ωστόσο το θεώρημα του Μπελ αποδεικνύεται και χωρίς ανισότητες και χωρίς καμία αναφορά σε στατιστικό σύνολο, ιδανικά μόνο με μετρήσεις ενός μεμονωμένου φυσικού συστήματος. Αυτή η απόδειξη οφείλεται στους Γκρινμπέργκερ (Greenberger), Χορν (Horne) και Τσαϊλίνγκερ [186] και καλείται *θεώρημα GHZ*. Θα παρουσιάσουμε μία πολύ απλή εκδοχή της απόδειξης που οφείλεται στον Μέρμιν (D. Mermin) [187].

Θεωρούμε ένα σύστημα τριών κιούμπιτ, που περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2$. Ορίζουμε τέσσερις τελεστές

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2, \quad \hat{B} = \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2, \quad \hat{C} = \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_1, \quad \hat{D} = \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_1. \quad (10.48)$$

Οι παραπάνω τελεστές μετατίθενται μεταξύ τους. Συγκεκριμένα,

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2^2 = \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I}, \quad \hat{B}\hat{A} = \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2^2 = \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I},$$

και άρα $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Ομοίως βρίσκουμε $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$. Επίσης,

$$\hat{A}\hat{D} = \hat{\sigma}_1^2 \otimes \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = -\hat{I} \otimes \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\sigma}_3, \quad \hat{D}\hat{A} = \hat{\sigma}_1^2 \otimes \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = -\hat{I} \otimes \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\sigma}_3,$$

και άρα $[\hat{A}, \hat{D}] = 0$. Ομοίως βρίσκουμε $[\hat{B}, \hat{D}] = [\hat{C}, \hat{D}] = 0$.
Επίσης βρίσκουμε ότι

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} = \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2^2\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2^2\hat{\sigma}_1^2 = -\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} \quad (10.47)$$

Το θεώρημα GHZ είναι ουσιαστικά η σχέση (10.47). Γράφουμε ως $f_1^{(i)}$ και $f_2^{(i)}$ τις συναρτήσεις που αντιστοιχούν στη μέτρηση των $\hat{\sigma}_1$ και $\hat{\sigma}_2$ στο i κιούμπιτ ($i = 1, 2, 3$), αν το σύστημα περιγράφεται από κάποιον καταστατικό χώρο, και οι οποίες παίρνουν τιμές ± 1 . Τότε στο γινόμενο $\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}$ αντιστοιχεί η συνάρτηση

$$[f_1^{(1)} f_2^{(2)} f_2^{(3)}][f_2^{(1)} f_1^{(2)} f_2^{(3)}][f_2^{(1)} f_2^{(2)} f_1^{(3)}][f_1^{(1)} f_1^{(2)} f_1^{(3)}] = \left(f_1^{(1)} f_1^{(2)} f_1^{(3)} f_2^{(1)} f_2^{(2)} f_2^{(3)} \right)^2 = 1,$$

σε προφανή αντίθεση με την Εξ.(10.47).

Ιδανικά σε μία διαδοχική μέτρηση των \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} και \hat{D} μπορούμε να ξεχωρίσουμε τις προβλέψεις της κβαντομηχανικής (που δίνει ως γινόμενο τους -1) από αυτές μίας ρεαλιστικής θεωρίας (που δίνει ως γινόμενό τους $+1$). Αυτό που απαιτείται είναι να προετοιμαστεί μία κατάσταση που να είναι κοινό ιδιοδιάνυσμα των \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} και \hat{D} . Συμβολίζουμε ως $a = \pm 1$ τις ιδιοτιμές του \hat{A} , ως $b = \pm 1$ τις ιδιοτιμές του \hat{B} και ως $c = \pm 1$ τις ιδιοτιμές του \hat{C} . Γράφουμε ως $|a, b, c\rangle$ τα κοινά ιδιοδιανύσματα των \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} και \hat{D} . Υπάρχουν 2^3 τέτοια ιδιοδιανύσματα τα οποία ορίζουν ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = \mathcal{C}^8$. Καλούνται *καταστάσεις GHZ* και είναι τα ακόλουθα

$$\begin{aligned} |-, -, -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1, 1\rangle + |0, 0, 0\rangle) & |+, +, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1, 1\rangle - |0, 0, 0\rangle) \\ |+, +, -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1, 0\rangle + |0, 0, 1\rangle) & |-, -, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1, 0\rangle - |0, 0, 1\rangle) \\ |+, -, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0, 1\rangle + |0, 1, 0\rangle) & |-, -, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0, 1\rangle - |0, 1, 0\rangle) \\ |-, +, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1, 1\rangle + |1, 0, 0\rangle) & |-, -, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1, 1\rangle - |1, 0, 0\rangle). \end{aligned} \quad (10.44)$$

Αν σε μία από τις παραπάνω καταστάσεις κάνουμε διαδοχικές μετρήσεις των \hat{A} , \hat{B} και \hat{C} παίρνοντας τιμές a , b και c αντίστοιχα, μπορούμε να προβλέψουμε ότι η επόμενη μέτρηση του \hat{D} θα δώσει τιμή $-1/(abc)$. Ενώ η υπόθεση του τοπικού ρεαλισμού δίνει την πρόβλεψη για $1/(abc)$. Έχουμε λοιπόν ένα σαφή διαχωρισμό των προβλέψεων των θεωριών ακόμα και σε ένα μεμονωμένο σύστημα, χωρίς να χρειαστεί να εισάγουμε στατιστικό σύνολο.

Στα πραγματικά πειράματα με μία τριάδα εναγκαλισμένων φωτονίων [188], δε γίνονται τέσσερις διαδοχικές μετρήσεις σε ένα ζεύγος κιούμπιτ, αλλά τέσσερα διαφορετικά πειράματα με την ίδια αρχική κατάσταση, κάθε ένα εκ των οποίων αντιστοιχεί στη μέτρηση ενός εκ των \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} και \hat{D} . Επίσης, λόγω της χαμηλής απόδοσης των ανιχνευτών αναγκαστικά οι υπολογισμοί γίνονται σε επίπεδο στατιστικού συνόλου. Τα μέχρι στιγμής πειράματα αυτού του είδους επιβεβαιώνουν τις προβλέψεις της κβαντομηχανικής.

10.5 Εφαρμογές

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε τρία σημαντικά αποτελέσματα τα οποία διευκρινίζουν τη φύση της κβαντικής σύνθεσης συστημάτων.

10.5.1 Το θεώρημα μη-επικοινωνίας

Το θεώρημα της μη-επικοινωνίας μας λέει ότι είναι αδύνατο να χρησιμοποιήσουμε εναγκαλισμένες καταστάσεις για να μεταφέρουμε πληροφορία ακαριαία.

Έστω δύο παρατηρητές, η Α (λίκη) και ο Β (ασίλης). Η Α έχει τον εξοπλισμό να δρα σε κβαντικά συστήματα που περιγράφονται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_A και ο Β έχει τον εξοπλισμό να δρα σε κβαντικά συστήματα που περιγράφονται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Έστω ότι έχουμε μία πηγή που παράγει ζεύγη συστημάτων, έτσι ώστε το ένα να καταλήγει στην Α και το άλλο στον Β. Η κατάσταση που περιγράφει τα ζεύγη θα είναι μία μήτρα πυκνότητα ρ στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_B$. Η κατάσταση $\hat{\rho}$ γράφεται ως

$$\hat{\rho} = \sum_i \hat{S}_i \otimes T_i, \quad (10.45)$$

για κάποιους τελεστές \hat{S}_i και \hat{T}_i στους χώρους Χίλμπερτ \mathcal{H}_A και \mathcal{H}_B αντίστοιχα.

Θεωρούμε ότι η Α δρα πάνω στο σύστημα που της αντιστοιχεί. Η γενικότερη δυνατή δράση σε μία κατάσταση $\hat{\rho}$ ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} είναι της μορφής

$$\hat{\rho} \rightarrow \sum_a \hat{C}_a \hat{\rho} \hat{C}_a^\dagger, \quad (10.46)$$

όπου \hat{C}_a τελεστές στον \mathcal{H} που ικανοποιούν τη σχέση $\sum_a \hat{C}_a^\dagger \hat{C}_a = 1$ και καλούνται *τελεστές Κράους*. Ο κανόνας της μοναδιαίας χρονικής εξέλιξης αντιστοιχεί σε ένα μοναδιαίο τελεστή Κράους, ενώ ο κανόνας αναγωγής της κατάστασης σε προβολικούς τελεστές Κράους. Για παράδειγμα, όταν το σύστημα υπόκειται σε μία μέτρηση ενός τελεστή $\hat{F} = \sum_a f_a \hat{P}_a$ και στη συνέχεια σε εξέλιξη με μοναδιαίο τελεστή \hat{U} , οι αντίστοιχοι τελεστές Κράους είναι $\hat{C}_a = \hat{U} \hat{P}_a$.

Έστω λοιπόν \hat{C}_a οι τελεστές Κράους που αντιστοιχούν στην επέμβαση της Α στο μικροσκοπικό σύστημα που περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_A . Όταν περιγράφουμε το ζεύγος συστημάτων στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, οι τελεστές Κράους για την επέμβαση της Α γράφονται ως $\hat{C}_a \otimes 1$. Άρα μετά την επέμβαση της Α, το ζεύγος περιγράφεται από την κατάσταση

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \sum_a (\hat{C}_a \otimes 1) \hat{\rho} (\hat{C}_a^\dagger \otimes 1) = \sum_a \sum_i (\hat{C}_a \otimes 1) (\hat{S}_i \otimes \hat{T}_i) (\hat{C}_a^\dagger \otimes 1) \\ &= \sum_a \sum_i \hat{C}_a \hat{S}_i \hat{C}_a^\dagger \otimes \hat{T}_i. \end{aligned} \quad (10.46)$$

Αφού έχει δράσει η Α, ο Β κάνει μία μέτρηση στο σύστημα στο οποίο έχει πρόσβαση. Έστω ότι η μέτρηση του Β αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{Y} = \sum_n y_n \hat{P}_n$ στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_B . Όταν περιγράφουμε το ζεύγος συστημάτων στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, η μέτρηση του Β αντιστοιχεί στον τελεστή $1 \otimes \hat{Y} = \sum_n y_n (1 \otimes \hat{P}_n)$. Οι πιθανότητες για τα ενδεχόμενα της μέτρησης είναι

$$\begin{aligned} \text{Prob}(n) &= \text{Tr}[\hat{\rho}'(1 \otimes \hat{P}_n)] = \sum_i \left(\sum_a \text{Tr}[\hat{C}_a \hat{S}_i \hat{C}_a^\dagger] \cdot \text{Tr}(\hat{T}_i \hat{P}_n) \right) \\ &= \sum_i \left[\text{Tr} \left(\hat{S}_i \sum_a \hat{C}_a^\dagger \hat{C}_a \right) \cdot \text{Tr}(\hat{T}_i \hat{P}_n) \right] = \sum_i \left[\text{Tr}(\hat{S}_i) \cdot \text{Tr}(\hat{T}_i \hat{P}_n) \right], \end{aligned} \quad (10.46)$$

δηλαδή οι πιθανότητες που μετρά ο Β δεν εξαρτώνται από τους τελεστές Κράους \hat{C}_a , δηλαδή από τον τρόπο με τον οποίο έδρασε η Α στο δικό της υποσύστημα.

Συμπεραίνουμε ότι με οποιοδήποτε τρόπο και να δράσει η Α στο δικό της υποσύστημα, δεν μπορεί να μεταφέρει πληροφορία στον Β, ακόμα και αν το σύνθετο σύστημα είναι εναγκαλισμένοι.

10.5.2 Το θεώρημα της μη-αντιγραφής

Η χρήση αντιγραφικών μηχανών είναι κάτι το συνηθισμένο στη σύγχρονη τεχνολογία. Μία αντιγραφική μηχανή δέχεται ως είσοδο ένα φυσικό σύστημα σε μία κατάσταση και παράγει στην έξοδο ένα αντίγραφο χωρίς να καταστρέφει το πρωτότυπο. Το πιο απλό παράδειγμα είναι ένα φωτοτυπικό, το οποίο καταγράφει οποιαδήποτε πληροφορία βρίσκεται πάνω σε μία σελίδα χαρτί και τη μεταφέρει σε μια άλλη σελίδα. Θεωρητικά δεν υπάρχει κανένα όριο στην ακρίβεια που μπορεί να αντιγράψει ένα μηχανήμα σε έναν κόσμο που λειτουργεί με τους κανόνες της κλασικής φυσικής.

Αυτό όμως δεν ισχύει στην κβαντική θεωρία [189, 190]. Έστω ότι εμείς θέλουμε να αντιγράψουμε ένα σύστημα που βρίσκεται σε κατάσταση $|\psi\rangle$ ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} . Πρέπει να έχουμε ένα πανομοιότυπο σύστημα σε κατάσταση $|e\rangle$ σε έναν πανομοιότυπο χώρο Χίλμπερτ (που αντιστοιχεί στο λευκό χαρτί ενός φωτοτυπικού.) Το αντιγραφικό μηχανήμα θα δρα με ένα μοναδιαίο τελεστή \hat{U} στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, όπου

$$\hat{U}(|\psi\rangle \otimes |e\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle. \quad (10.47)$$

Η παραπάνω σχέση θα πρέπει να ισχύει για οποιεσδήποτε καταστάσεις $|\psi\rangle$. Ας θεωρήσουμε δύο καταστάσεις $|\phi_1\rangle$ και $|\phi_2\rangle$, όπου και οι δύο ικανοποιούν τη σχέση (10.47), $\hat{U}(|\phi_{1,2}\rangle \otimes |e\rangle) = |\phi_{1,2}\rangle \otimes |\phi_{1,2}\rangle$. Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο των δύο εξισώσεων κατά μέλη, καταλήγουμε ότι

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = (\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle)^2, \quad (10.48)$$

που σημαίνει ότι $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$ ή $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 1$. Αυτές οι σχέσεις δεν ισχύουν για τυχαίες καταστάσεις, αλλά μόνο για καταστάσεις που ανήκουν σε ένα ορθοκανονικό σύνολο. Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορεί να υπάρξει αντιγραφική μηχανή (μοναδιαίος τελεστής \hat{U}) που να λειτουργεί για οποιοδήποτε σύνολο αρχικών καταστάσεων.

Μπορούμε όμως να κατασκευάσουμε αντιγραφείς περιορισμένης εμβέλειας, δηλαδή αντιγραφείς που λειτουργούν σωστά για ένα εκ των προτέρων καθορισμένο ορθοκανονικό σύνολο καταστάσεων.

10.5.3 Κβαντική τηλεμεταφορά

Ως κβαντική τηλεμεταφορά εννοούμε τη διαδικασία μεταφοράς της κβαντικής κατάστασης από ένα σημείο σε ένα άλλο χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες του κβαντικού εναγκαλισμού.

Θεωρούμε δύο παρατηρητές, την (Α)λίκη και τον (Β)ασίλη, οι οποίοι μοιράζονται ένα ζεύγος εναγκαλισμένων κιούμπιτ στην κατάσταση $|\Phi_+\rangle$, Εξ. (10.27). Το κιούμπιτ που αντιστοιχεί στην Α χαρακτηρίζεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_A και το κιούμπιτ που αντιστοιχεί στον Β χαρακτηρίζεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} και θα γράφουμε την κατάσταση του ζεύγους κιούμπιτ ως $|\Phi_+\rangle_{AB}$.

Πέρα από αυτά τα δύο κιούμπιτ, η Α έχει και ένα άλλο κιούμπιτ C, που αντιστοιχεί σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_C , το οποίο βρίσκεται στην κατάσταση $|\psi\rangle_C = \alpha|0\rangle_C + \beta|1\rangle_C$, όπου α και β μιγαδικοί αριθμοί. Η κατάσταση του συστήματος των τριών κιούμπιτ είναι $|\Phi_+\rangle_{AB} \otimes |\psi\rangle_C$, η οποία γράφεται ως

$$\begin{aligned} |\Phi_+\rangle_{AB} \otimes |\psi\rangle_C &= \frac{1}{2} [|\Phi_+\rangle_{AC} \otimes (\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B) + |\Phi_-\rangle_{AC} \otimes (\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B) \\ &+ |\Psi_+\rangle_{AC} \otimes (\beta|0\rangle_B + \alpha|1\rangle_B) + |\Psi_-\rangle_{AC} \otimes (\beta|0\rangle_B - \alpha|1\rangle_B)]. \end{aligned} \quad (10.48)$$

Στη συνέχεια η Α κάνει μία μέτρηση στα δύο της κιούμπιτ (το Α και το C) που αντιστοιχεί στην ορθοκανονική βάση που ορίζεται από τα διανύσματα $|\Phi_\pm\rangle_{AC}, |\Psi_\pm\rangle_{AC}$. Από τη σχέση (10.48) βλέπουμε ότι τα τέσσερα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης είναι ισοπίθανα, με πιθανότητα ίση με

$\frac{1}{4}$. Σύμφωνα με τον κανόνα αναγωγής της κβαντικής κατάστασης, το σύστημα των τριών κιούμπιτ περιγράφεται από μία από τις παρακάτω καταστάσεις

$$\begin{aligned} |\Phi_+\rangle_{AC} \otimes (\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B), & \quad |\Phi_-\rangle_{AC} \otimes (\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B), \\ |\Psi_+\rangle_{AC} \otimes (\beta|0\rangle_B + \alpha|1\rangle_B), & \quad |\Psi_-\rangle_{AC} \otimes (\beta|0\rangle_B - \alpha|1\rangle_B). \end{aligned} \quad (10.48)$$

Στη συνέχεια η A στέλνει μήνυμα στον B με το αποτέλεσμα της μέτρησης. Ο B ακολουθεί την ακολουθεί διαδικασία

1. Αν το αποτέλεσμα της μέτρησης αντιστοιχεί στο $|\Phi_+\rangle_{AC}$, ο B δεν κάνει τίποτα.
2. Αν το αποτέλεσμα της μέτρησης αντιστοιχεί στο $|\Phi_-\rangle_{AC}$, ο B δρα με το μοναδιαίο τελεστή $\hat{U} = \hat{\sigma}_3$ στο κιούμπιτ του.
3. Αν το αποτέλεσμα της μέτρησης αντιστοιχεί στο $|\Psi_+\rangle_{AC}$, ο B δρα με το μοναδιαίο τελεστή $\hat{U} = \hat{\sigma}_1$ στο κιούμπιτ του.
4. Αν το αποτέλεσμα της μέτρησης αντιστοιχεί στο $|\Psi_-\rangle_{AC}$, ο B δρα με το μοναδιαίο τελεστή $\hat{U} = \hat{\sigma}_2$ στο κιούμπιτ του.

Σε κάθε περίπτωση, στο τέλος αυτής της διαδικασίας, η κατάσταση του συστήματος των τριών κιούμπιτ είναι διαχωρισμένη μεταξύ των δύο κιούμπιτ της A και του ενός κιούμπιτ του B. Η κατάσταση του κιούμπιτ του B είναι ακριβώς η ίδια με την κατάσταση του κιούμπιτ C στην αρχή της διαδικασίας. Δηλαδή η πληροφορία (κατάσταση) του C μεταφέρθηκε στο χώρο χωρίς να υπάρχει ενδιάμεση μεταφορά ύλης. Γι' αυτό το λόγο μιλάμε για *κβαντική τηλεμεταφορά*.

Παρατηρούμε ότι

1. Η τηλεμεταφορά επιτυγχάνεται για οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi\rangle_C$, ακόμα κι όταν αυτή είναι εντελώς άγνωστη.
2. Για να επιτευχθεί τηλεμεταφορά απαιτείται η αποστολή ενός μηνύματος από την A στον B. Το μήνυμα αυτό δεν μπορεί να μεταδοθεί με ταχύτητα μεγαλύτερη από αυτή του φωτός. Άρα και η κβαντική τηλεμεταφορά δεν επιτρέπει τη μετάδοση πληροφορίας πιο γρήγορα από το φως.
3. Η κατάσταση του κιούμπιτ C αντιγράφεται πλήρως στο B, αλλά το ίδιο δεν παραμένει στην αρχική του κατάσταση. Το θεώρημα μη-αντιγραφής δεν παραβιάζεται.
4. Για να επιτευχθεί η τηλεμεταφορά είναι απαραίτητη η ύπαρξη ενός εναγκαλισμένου ζεύγους από κιούμπιτ. Λέμε ότι ο εναγκαλισμός είναι ένας *φυσικός πόρος* που επιτρέπει την τηλεμεταφορά.

Η πρώτη πρόταση για την πραγματοποίηση της κβαντικής τηλεμεταφοράς έγινε το 1993 [191], ενώ το 1997 έγινε το πρώτο επιτυχές πείραμα τηλεμεταφοράς χρησιμοποιώντας φωτονικά κιούμπιτ [192]. Το 2004 έγινε η πρώτη τηλεμεταφορά σε ατομικά κιούμπιτ ατομικών καταστάσεων [193, 194]. Επί του παρόντος, το ρεκόρ ως προς την απόσταση που έχει τηλεμεταφερθεί ένα κιούμπιτ είναι 143 km και επιτεύχθηκε το 2012 με φωτονικά κιούμπιτ [195].

Ερωτήσεις

1. Τι *φυσική* διαφορά έχουν οι χώροι Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ και $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$;
2. Πέρα από την *ενέργεια*, ποιες φυσικές ποσότητες περιμένετε να συμπεριφέρονται προσθετικά σε σύνθετα μη-αλληλεπιδρώντα συστήματα;
3. Έχει νόημα να πει κανείς ότι μία κατάσταση είναι λίγο ή πολύ εναγκαλισμένη;

4. Κάποιος σας λέει "Οι πιθανότητες στην κβαντική θεωρία δηλώνουν ότι έχουμε άγνοια για τις πραγματικές τιμές των φυσικών ποσοτήτων, τις οποίες προσδιορίζουμε μέσω της μέτρησης." Εξηγήστε πώς το θεώρημα του Μπελ καταρρίπτει αυτόν τον ισχυρισμό.
5. Εξηγήστε γιατί η παραβίαση των ανισοτήτων του Μπελ δε σημαίνει "δράση από απόσταση", ή "σήματα πιο γρήγορα από το φως".
6. Εντοπίστε όλα τα λάθη και τις παρανοήσεις στην ακόλουθη αφήγηση.

"...η ιδέα της κοινής λογικής για μια τοπική πραγματικότητα αληθεύει μόνο σε ένα επίπεδο. Το σύνολο της πραγματικότητας, όπως εξηγείται από την κλασική φυσική, πάει πιο βαθιά. Ένας διάσημος μαθηματικός τύπος, γνωστός ως θεώρημα του Μπελ (καθώς αποδείχθηκε από το Ιρλανδό φυσικό Τζον Μπελ) εκφράζει το γεγονός ότι η πραγματικότητα του σύμπαντος πρέπει να είναι μη τοπική. Με άλλα λόγια, όλα τα αντικείμενα και γεγονότα στο σύμπαν είναι συνδεδεμένα μεταξύ τους και αντιδρά το ένα στις αλλαγές κατάστασης του άλλου.

Τι είδος εξήγησης θα ικανοποιούσε την απαίτηση του Μπελ για μια πλήρως ενδοσυνδεδεμένη, μη τοπική πραγματικότητα; Θα έπρεπε να είναι μια κβαντική εξήγηση, γιατί [...] αν η αλλαγή του σπιν σε ένα σωματίο έχει ως αποτέλεσμα μία ίση αλλά αντίθετη αλλαγή στιγμιαία στο συνδεδεμένο μ' αυτό σωματίο στο εξώτερο διάστημα, είναι προφανώς ότι η πληροφορία που πάει από το ένα μέρος στο άλλο κινείται πιο γρήγορα από την ταχύτητα του φωτός. Αυτό δεν επιτρέπεται στη συνήθη πραγματικότητα, ούτε από το Νεύτωνα ούτε από τον Αϊνστάιν."

(D. Chopra, "Quantum Healing", Bantam Books 1989, p. 104).

7. Τί θα σημαίνει αν σε πείραμα τύπου ανισοτήτων Μπελ μετρηθεί $\Delta = 3.1 \pm 0.1$;
8. Γιατί δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί το πρωτόκολλο τηλεμεταφοράς για να σταλθεί μήνυμα με ταχύτητες μεγαλύτερες του φωτός;

Ασκήσεις

1. Έστω σύνθετο σύστημα δύο κιούμπιτ. Θεωρούμε τις καταστάσεις,

$$\begin{aligned} |\theta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + e^{i\theta}|0, 1\rangle) \\ |p\rangle &= \sqrt{p}|1, 1\rangle + \sqrt{1-p}|0, 0\rangle. \end{aligned}$$

Και για τις δύο καταστάσεις, υπολογίστε τις μέσες τιμές και τις τυπικές αποκλίσεις για την ποσότητα που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} = \frac{i}{2}(\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_1)$.

2. Υπολογίστε τις ανηγμένες μήτρες πυκνότητας για τις καταστάσεις $|\psi\rangle = \sqrt{p}|1, 1\rangle + \sqrt{1-p}e^{i\theta}|0, 0\rangle$ ενός συστήματος δύο κιούμπιτ.
3. Υπολογίστε το συσχετισμό $\text{Cor}(\mathbf{m}, \mathbf{n})$ για τις καταστάσεις (10.26, 10.27).
4. Η γενική καθαρή κατάσταση σε σύστημα δύο κιούμπιτ γράφεται ως $|\psi\rangle = a|0, 0\rangle + b|0, 1\rangle + c|1, 0\rangle + d|1, 1\rangle$. (α) Δείξτε ότι η $|\psi\rangle$ είναι διαχωρίσιμη αν $ad - bc = 0$. Αυτό το αποτέλεσμα προτείνει τον ορισμό της *συρροής* (concurrence) ως μέτρο του εναγκαλισμού: $C(\psi) = 2|ad - bc|$. (β) Δείξτε ότι οι καταστάσεις (10.26—10.27) έχουν τη μέγιστη δυνατή συρροή. (γ) Δείξτε ότι $C(\psi) = |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle|^2$, όπου $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2|\psi^*\rangle$ και $|\psi^*\rangle$ το μιγαδικό συζυγές του $|\psi\rangle$.
5. Βρείτε τις ιδιοτιμές και τους φασματικούς προβολείς των τελεστών

$$\begin{aligned} \hat{K}_{\pm} &= \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2 \pm \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_1, \\ \hat{L} &= \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\sigma}_3 \end{aligned}$$

για ένα σύστημα δύο κιούμπιτ.

6. Ένα σύστημα από δύο κιούμπιτ προετοιμάζεται σε κατάσταση

$$|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + e^{i\theta}|0, 1\rangle).$$

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι $\hat{H} = \frac{1}{2}\omega_1\hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I} + \frac{1}{2}\omega_2\hat{I} \otimes \hat{\sigma}_3$. Τη χρονική στιγμή t_1 γίνεται μέτρηση του $\hat{\sigma}_1$ στο πρώτο κιούμπιτ και τη χρονική στιγμή t_2 μέτρηση του $\hat{\sigma}_1$ στο δεύτερο κιούμπιτ. Υπολογίστε τις πιθανότητες για όλα τα δυνατά αποτελέσματα όλων των μετρήσεων.

7. Σύστημα δυο κιούμπιτ χαρακτηρίζεται από τη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{\omega}{2} (\hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_3) + g\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_1$$

Βρείτε τις ιδιοτιμές της ενέργειας, τους αντίστοιχους φασματικούς προβολείς και γράψτε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $e^{-i\hat{H}t}$.

8. Βρείτε τις τιμές του a , για τις οποίες η κατάσταση $a|\Phi_+\rangle\langle\Phi_+| + (1-a)|\Psi_+\rangle\langle\Psi_+|$ είναι διαχωρίσιμη.
 9. (α) Δείξτε ότι στο σύστημα των δύο κιούμπιτ, μπορούμε πάντα να επιλέξουμε βάση ώστε μια καθαρή κατάσταση να γράφεται ως $\cos\frac{\beta}{2}|0, 0\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|1, 1\rangle$, για $0 < \beta < \pi$. (β) Δείξτε ότι για μια τέτοια κατάσταση, η μέγιστη τιμή του $|\Delta|$ είναι $2\sqrt{1 + \sin^2\beta}$. Έτσι επιβεβαιώνετε ότι κάθε κάθε εναγκαλισμένη καθαρή κατάσταση παραβιάζει την ανισότητα του Μπελ.
 10. Υπολογίστε την ποσότητα Δ , Εξ. (10.41) για την κατάσταση Βέρνερ (10.36). Για ποιες τιμές του α παραβιάζονται οι ανισότητες Μπελ;
 11. Έστω σύστημα τριών κιούμπιτ, το οποίο προετοιμάζεται στην κατάσταση

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0, 0\rangle + |1, 1, 1\rangle)$$

Υπολογίστε τις πιθανότητες για όλα τα ενδεχόμενα που αντιστοιχούν στις μετρήσεις του τελεστή $\hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2 \otimes \hat{\sigma}_3$.

12. Ένα γενικότερο μηχάνημα αντιγραφής μπορεί να έχει περισσότερη ελευθερία και να χρησιμοποιεί δύο κόπιες της κατάστασης $|e\rangle$ προκειμένου να πετύχει καλύτερη απόδοση. Έστω λοιπόν ότι μία κατάσταση εισόδου $|\psi\rangle$ αντιγράφεται με βάση το μοναδιαίο μετασχηματισμό $|\psi\rangle \otimes |e\rangle \otimes |e\rangle \rightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes |f\rangle$, για κάποια κατάσταση 'σκουπίδι' που προκύπτει στο τέλος της διαδικασίας και εξαρτάται από το $|\psi\rangle$. Δείξτε ότι το θεώρημα μη-αντιγραφής εξακολουθεί να ισχύει.
 13. Στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^n$ ορίζουμε το πλήρως συμμετρικό διάνυσμα $|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n |i\rangle \otimes |i\rangle$, και οι ισοτροπικές καταστάσεις

$$\hat{\rho}_\lambda = \frac{1-\lambda}{n^2} \hat{I} + \lambda |\Omega\rangle\langle\Omega|. \quad (10.42)$$

(α) Δείξτε ότι η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας είναι $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{n} \hat{I}$. (β) Δείξτε ότι η $\hat{\rho}_\lambda$ είναι εναγκαλισμένη για $\lambda > \frac{1}{n+1}$.

14. Έστω δύο ζευγάρια από κιούμπιτ στην κατάσταση $|\Psi_\beta\rangle \otimes |\Psi_\beta\rangle$, όπου $|\Psi_\beta\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|0, 0\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|1, 1\rangle$, για $0 < \beta < \pi$. Κάνουμε μέτρηση του τελεστή $\hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_3 \otimes \hat{I}$. Βρείτε όλα τα αποτελέσματα τις μέτρησης και τις αντίστοιχες πιθανότητες. Βλέπουμε ότι είναι εφικτό να πάρουμε ένα ζεύγος δύο κιούμπιτ σε κατάσταση μέγιστου εναγκαλισμού με κάποια πιθανότητα, ξεκινώντας από δύο ζεύγη κιούμπιτ με μη-μέγιστο εναγκαλισμό. Αυτή η διαδικασία καλείται απόσταση εναγκαλισμού.
 15. Στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{C}^n \otimes \mathcal{C}^n$ ορίζουμε το πλήρως συμμετρικό διάνυσμα $|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n |i, i\rangle$, και τον τελεστή $\hat{W} = \hat{I} - n|\Omega\rangle\langle\Omega|$. (α) Δείξτε ότι για κάθε διαχωρίσιμη μήτρα πυκνότητας $Tr(\hat{\rho}\hat{W}) \geq 0$. Αυτό το αποτέλεσμα προσφέρει ένα κριτήριο εναγκαλισμού: αν για μία κατάσταση $\hat{\rho}$, $Tr(\hat{\rho}\hat{W}) < 0$, η $\hat{\rho}$ είναι εναγκαλισμένη. (β) Προσδιορίστε τις τιμές του λ για τις οποίες οι ισοτροπικές καταστάσεις (10.42) ικανοποιούν $Tr(\hat{\rho}_\lambda\hat{W}) < 0$. (γ) Θεωρείστε την περίπτωση $n = 2$. Μπορεί το κριτήριο να προσδιορίσει την κατάσταση $|\Psi_-\rangle$ ως εναγκαλισμένη;

Βιβλιογραφία

- Για το τανυστικό γινόμενο και τις ανισότητες Μπελ, βλ. τα κεφ. 8.4 και 9.3 του βιβλίου κβαντομηχανικής του Isham [10]. Μία αναλυτική περιγραφή των ανισοτήτων Μπελ και των συνεπειών τους βρίσκεται στο κεφ. 20 του βιβλίου κβαντομηχανικής του Ballentine [196].
- Για την ποσοτική περιγραφή του κβαντικού εναγκαλισμού, βλ. το άρθρο επισκόπησης των Horodecki [168].
- Το θεώρημα του Μπελ, η ιστορία του, τα σχετικά πειράματα και οι συνέπειές τους περιγράφονται με λεπτομέρεια σε δύο εγκυκλοπαιδικά άρθρα, με τίτλο "Bell's Theorem", του Shimony [197] και των Goldstein et al [198]. Για το θεώρημα GHZ, βλ. το άρθρο του Greenberger, GHZ Theorem and GHZ States, στο Compendium of Quantum Physics [135]. Για μια σύντομη περιγραφή των φιλοσοφικών συνεπειών του θεωρήματος του Μπελ, βλ. το άρθρο του Mermin [199] και τον εξαιρετικό διάλογο του Πέρρες σε στυλ Γαλιλαίου [167]. Συνιστώ επίσης το άρθρο επισκόπησης του Laloë. [200]
- Μία σύντομη ημι-εκλαϊκευμένη περιγραφή της κβαντικής τηλεμεταφοράς είναι στο άρθρο του Sudbury [201]. Επίσης το άρθρο της wikipedia για την κβαντική τηλεμεταφορά είναι ασυνήθιστα καλό και με καλή βιβλιογραφία [202].

Κεφάλαιο 11

Συμμετρία στην κβαντική θεωρία: I. Περιστροφές

Ως τότε πιστεύαμε στην αρχαία θεώρηση του Δημόκριτου “εν αρχή ην το σωματίο”...Αλλά ίσως αυτή η φιλοσοφία ήταν ολοκληρωτικά λάθος... Εν αρχή ην ένας φυσικός νόμος, τα μαθηματικά, η συμμετρία; Ίσως θα πρέπει να προσεγγίσουμε τον Πλάτωνα και να δεχτούμε ότι “εν αρχή ην η συμμετρία”.

B. Χάιζενμπεργκ [203]

11.1 Η κβαντική περιγραφή των συμμετριών

11.1.1 Η έννοια της φυσικής συμμετρίας

Στα προηγούμενα κεφάλαια είδαμε τις βασικές αρχές της κβαντικής θεωρίας και ειδικότερα πώς, αναπαριστώντας φυσικά μεγέθη με τελεστές σε ένα χώρο Χίλμπερτ, μπορούμε να κατασκευάζουμε συστηματικά τις πιθανότητες για οποιαδήποτε πειραματική διάταξη. Ωστόσο αυτές οι αρχές δεν περιγράφουν ούτε ποια είναι τα φυσικά μεγέθη που περιγράφουν τα θεμελιώδη φυσικά συστήματα, ούτε πώς επιλέγουμε το χώρο Χίλμπερτ που περιγράφει ένα φυσικό σύστημα και τους τελεστές που αντιστοιχούν στα φυσικά μεγέθη.

Είδαμε ότι στην ιστορία της κβαντικής θεωρίας κομβικό σημείο ήταν η υπόθεση του Χάιζενμπεργκ ότι οι μεταβλητές για τη θέση και την ορμή ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης (3.6). Αυτή η λογική είναι που δίνει απάντηση στα δύο παραπάνω ερωτήματα, ακόμα και όταν μιλάμε για συστήματα πολύ διαφορετικά από τα σωματίδια που περιέγραψε ο Χάιζενμπεργκ. Απαιτούμε οι τελεστές που αντιστοιχούν σε συγκεκριμένα φυσικά μεγέθη να ικανοποιούν συγκεκριμένες αλγεβρικές σχέσεις, οι οποίες ορίζονται από *απαιτήσεις συμμετρίας*. Πρέπει όμως να δούμε τί εννοούμε ως συμμετρία.

Στην κλασική φυσική έχουμε δύο ειδών γνώση για ένα φυσικό σύστημα, τους νόμους της κίνησης και τις αρχικές συνθήκες. Οι νόμοι της κίνησης καθορίζουν ποιες από όλες τις πιθανές κινήσεις ενός σώματος είναι πραγματοποιήσιμες. Αλλά δεν επαρκούν για να προσδιορίσουμε μοναδικά μια τροχιά. Χρειαζόμαστε και γνώση των αρχικών συνθηκών του συστήματος. Καθώς η Νευτώνεια μηχανική είναι μία ντετερμινιστική θεωρία, η γνώση των νόμων της κίνησης και των αρχικών συνθηκών μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε πλήρως τη συμπεριφορά του φυσικού συστήματος σε κάθε χρονική στιγμή.

Οι αρχικές συνθήκες είναι γενικά χαοτικές και τυχαίες. Μία φωτογραφία των πλανητών στο ηλιακό σύστημα μία τυχαία χρονική στιγμή δεν αποκαλύπτει τίποτε από την απλότητα του νόμου της Παγκόσμιας Έλξης. Θα βλέπαμε απλώς κάποια μεγάλα υλικά συσσωματώματα σκορπισμένα γύρω από τον

Ήλιο, φαινομενικά με τυχαίο τρόπο. Το ίδιο ισχύει για κάθε φυσικό σύστημα που παρατηρούμε στην καθημερινότητα: οι αρχικές συνθήκες εμπεριέχουν όλη την αταξία του κόσμου όπως αυτός αποκαλύπτεται στις αισθήσεις μας. Η σύγχρονη φυσική δεν κατέχει μία θεωρία που να εξηγεί τις αρχικές συνθήκες, μπορεί να τις προσδιορίσει μόνο από το πείραμα και την παρατήρηση.

Σε αντιδιαστολή με τις αρχικές συνθήκες, οι εξισώσεις της κίνησης εμφανίζουν κάποιες κανονικότητες, στις οποίες η σύγχρονη φυσική αναφέρεται ως *συμμετρίες* των φυσικών συστημάτων. Τονίζουμε ότι η έννοια της φυσικής συμμετρίας δεν αναφέρεται συνήθως στον τρόπο κατά τον οποίον εμφανίζεται ένα φυσικό σύστημα στις αισθήσεις μας. Η κανονικότητα ή η απλότητα της κίνησης ενός φυσικού συστήματος δεν συνεπάγεται την ύπαρξη μιας φυσικής συμμετρίας, γιατί μπορεί να οφείλεται στην επιβολή πολύ ειδικών αρχικών συνθηκών. Για παράδειγμα, ένας δορυφόρος μπορεί να κινείται σε μία εξαιρετικά συμμετρική τροχιά (κυκλικού σχήματος για παράδειγμα), αλλά αυτό οφείλεται μόνο στον λεπτό καθορισμό των αρχικών συνθηκών του από τους μηχανικούς που τον σχεδίασαν. Αντίστροφα, μία συμπεριφορά που φαίνεται τελείως χαοτική μπορεί να είναι συμβατή με ένα κανόνα χρονικής εξέλιξης εξαιρετικά υψηλής συμμετρίας. Το δεύτερο είδος συμπεριφοράς είναι πιο μόνιμο και θεμελιώδες στη φύση.

11.1.2 Το θεώρημα του Βίγκνερ

Είδαμε παραπάνω ότι η έννοια της συμμετρίας αφορά τη σταθερότητα διάφορων φυσικών οντοτήτων κάτω από μετασχηματισμούς διαφόρων ειδών. Οπότε για να περιγράψουμε τις συμμετρίες κβαντικά, θα πρέπει να ορίσουμε τον τρόπο με τον οποίο εφαρμόζονται οι μετασχηματισμοί στο χώρο Χίλμπερτ ενός κβαντικού συστήματος. Η προφανής σκέψη είναι να ταυτίσουμε τους μετασχηματισμούς συμμετρίας με τελεστές, δεδομένου ότι κάθε τελεστής \hat{U} μετασχηματίζει ένα διάνυσμα $|\psi\rangle$ σε ένα διάνυσμα $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$. Οι τελεστές αυτοί θα πρέπει να διατηρούν τη βασική δομή του χώρου Χίλμπερτ, το εσωτερικό γινόμενο. Οπότε αν ο τελεστής \hat{A} δρα σε δύο διανύσματα $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$, θα πρέπει να ισχύει

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \quad (11.1)$$

κάτι το οποίο σημαίνει ότι $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$, δηλαδή ο τελεστής \hat{U} πρέπει να είναι μοναδιαίος.

Ένας μοναδιαίος τελεστής \hat{U} μετασχηματίζει μία μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}' = \hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger$ και έναν οποιοδήποτε άλλο τελεστή \hat{A} ως $\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$, έτσι ώστε να διατηρούνται οι πιθανότητες

$$Tr(\hat{\rho}'\hat{A}') = Tr(\hat{\rho}\hat{A}). \quad (11.2)$$

Ωστόσο ο κανόνας ότι οι συμμετρίες αναπαρίστανται από μοναδιαίους τελεστές αποδείχτηκε δεσμευτικός—η απαίτηση (11.1) είναι πιο ισχυρή από ότι χρειάζεται.

Μπορούμε να έχουμε αναπαράσταση συμμετριών και από *αντιγραμμικούς τελεστές*. Ένας αντιγραμμικός τελεστής \hat{S} είναι μια συνάρτηση που σε κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$ ενός χώρου Χίλμπερτ \mathcal{H} αντιστοιχίζει ένα διάνυσμα $\hat{S}|\psi\rangle$, έτσι ώστε

$$\hat{S}(c|\psi\rangle + |\phi\rangle) = c^*\hat{S}|\psi\rangle + \hat{S}|\phi\rangle, \quad (11.3)$$

για κάθε $c \in \mathbb{C}$ και $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$. (Θυμίζουμε ότι ένας γραμμικός τελεστής ικανοποιεί τη σχέση $\hat{S}(c|\psi\rangle + |\phi\rangle) = c\hat{S}|\psi\rangle + \hat{S}|\phi\rangle$.) Από τον ορισμό είναι προφανές ότι το γινόμενο δυο αντιγραμμικών τελεστών είναι γραμμικός τελεστής.

Ο συζυγής τελεστής \hat{S}^\dagger ενός αντιγραμμικού τελεστή \hat{S} ορίζεται από τη σχέση

$$\langle\phi|\hat{S}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{S}^\dagger|\phi\rangle, \quad (11.4)$$

για κάθε $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Αντιμοναδιαίος καλείται ένας αντιγραμμικός τελεστής που ικανοποιεί τη σχέση $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$. Αν $|\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$ και $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$, τότε $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi'|\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger|\phi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = (\langle\phi|\psi\rangle)^*$. Η δράση αντιμοναδιαίων τελεστών δε διατηρεί το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων, αλλά διατηρεί την απόλυτη τιμή του. Για τις φυσικές προβλέψεις αυτό είναι αρκετό δεδομένου ότι στις πιθανότητες της κβαντικής θεωρίας εμφανίζονται όχι οι τιμές των εσωτερικών γινομένων $\langle\phi|\psi\rangle$ καθαυτά, αλλά τα τετράγωνα της απόλυτη τιμής τους $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$.

Ένα σημαντικότατο θεώρημα που απέδειξε ο Βίγκνερ το 1931 [204] επιβεβαιώνει ότι μόνο μοναδιαίοι και αντιμοναδιαίοι τελεστές μπορούν να αναπαραστήσουν συμμετρία.

Πρόταση 11.1 (Θεώρημα Βίγκνερ) Έστω \mathcal{H} μιγαδικός χώρος Χίλμπερτ με εσωτερικό γινόμενο (\cdot, \cdot) . Έστω $S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ μία επί συνάρτηση που ικανοποιεί τη σχέση

$$|(S(\phi), S(\psi))| = |(\phi, \psi)| \quad (11.5)$$

για κάθε $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Τότε η συνάρτηση S είναι της μορφής $S(\psi) = e^{i\phi}\hat{U}\psi$, όπου $e^{i\phi}$ μία μιγαδική φάση και \hat{U} ένας μοναδιαίος ή αντιμοναδιαίος τελεστής.

Το αξιοσημείωτο στο θεώρημα του Βίγκνερ είναι ότι δεν είναι ανάγκη να υποθέσουμε ότι η συνάρτηση S είναι γραμμική (ή αντιγραμμική), αλλά αυτό προκύπτει ως συνέπεια του θεωρήματος.

Στο Κεφ. 11.2 θα παρουσιάσουμε την απόδειξη του θεωρήματος του Βίγκνερ στο C^2 , αφότου έχουμε εισαγάγει βασικές έννοιες για τη συμμετρία των περιστροφών στο χώρο που αποτελούν προϋπόθεση για την απόδειξη. Η απόδειξη για γενικό χώρο Χίλμπερτ προκύπτει επαγωγικά [205].

11.1.3 Παραδείγματα

Ήδη έχουμε συναντήσεις (στο Κεφ. 5.4.1) τους μοναδιαίους τελεστές Βάουλ $\hat{V}(a, b)$ οι οποίοι περιγράφουν τη συμμετρία μετατόπιση της θέσης και της ορμής ενός σωματιδίου κατά μία σταθερά ποσότητα. Συναντήσαμε επίσης το μοναδιαίο τελεστή χρονικής εξέλιξης $e^{-i\hat{H}t}$, ο οποίος αντιστοιχεί στη συμμετρία της μετατόπισης στο χρόνο.

Στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$, ορίζουμε τον τελεστή αντιστροφής χώρου $\hat{\mathbb{P}}$ ως

$$\hat{\mathbb{P}}\psi(x) = \psi(-x). \quad (11.6)$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι ο $\hat{\mathbb{P}}$ είναι αυτοσυζυγής. Επίσης, $\hat{\mathbb{P}}^2\psi(x) = \hat{\mathbb{P}}\psi(-x) = \psi(x)$, δηλαδή $\hat{\mathbb{P}}^2 = \hat{I}$, οπότε ο τελεστής $\hat{\mathbb{P}}$ είναι μοναδιαίος. Ο τελεστής $\hat{\mathbb{P}}$ καλείται και τελεστής ισοτιμίας ή τελεστής πάριτυ (parity).

Στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$, ορίζουμε επίσης τον τελεστή αντιστροφής χρόνου $\hat{\mathbb{T}}$, ως $\hat{\mathbb{T}}\psi(x) = \psi^*(x)$. Από τον ορισμό προκύπτει άμεσα ότι ο $\hat{\mathbb{T}}$ είναι αντιγραμμικός, καθώς και ότι $\hat{\mathbb{T}}^2 = \hat{I}$. Καλείται έτσι, γιατί αν η $\psi(x, t)$ είναι λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$, τότε η $\psi^*(x, t)$ είναι λύση της εξίσωσης

$$i\frac{\partial\psi^*}{\partial(-t)} = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^*, \quad (11.7)$$

δηλαδή της εξίσωσης του Σρέντινγκερ με το χρόνο t μετασχηματισμένο σε $-t$.

Παρατηρούμε ότι $\int dx\psi^*(x)\hat{\mathbb{T}}\phi(x) = \int dx\psi^*(x)\phi^*(x) = \int dx(\hat{\mathbb{T}}\psi)^*(x)\phi(x)$, οπότε από την Εξ. (11.4) βρίσκουμε ότι $\hat{\mathbb{T}}^\dagger = \hat{\mathbb{T}}$. Αυτό σημαίνει ότι η εξίσωση $\hat{\mathbb{T}}^2 = \hat{I}$ γράφεται ως $\hat{\mathbb{T}}\hat{\mathbb{T}}^\dagger = \hat{I}$, οπότε ο $\hat{\mathbb{T}}$ είναι αντιμοναδιαίος.

Στο υπόλοιπο του κεφαλαίου θα εξετάσουμε με λεπτομέρεια τα χαρακτηριστικά μίας θεμελιώδους συμμετρίας που εμφανίζεται σε κβαντικά συστήματα, των περιστροφών στο χώρο. Η συγκεκριμένη συμμετρία είναι μια από τις σημαντικότερες τις κβαντικής θεωρίας. Η κατανόησή της είναι σημαντική τόσο για το ρόλο που παίζει στην περιγραφή βασικών κβαντικών συστημάτων, αλλά και γιατί επιτρέπει την εξοικείωση με μερικές βασικές έννοιες, οι οποίες θα αναπτυχθούν με περισσότερη λεπτομέρεια στο επόμενο κεφάλαιο, όπου οι συμμετρίες θα περιγραφούν με το πιο ακριβές μαθηματικό εργαλείο, τη θεωρία ομάδων.

11.2 Η συμμετρία των περιστροφών

11.2.1 Περιστροφές στο επίπεδο.

Εξετάζουμε πρώτα την περιστροφή στις δύο διαστάσεις. Η περιστροφή ενός διανύσματος $\underline{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ στο επίπεδο κατά γωνία $\theta \in [0, 2\pi)$ αντιστοιχεί σε έναν πίνακα 2×2 ,

$$O(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (11.8)$$

ο οποίος δρα στο \underline{r} ως $\underline{r} \rightarrow O(\theta)\underline{r}$. Εύκολα δείχνεται ότι

$$O(\theta_1)O(\theta_2) = O(\theta_1 + \theta_2) \quad (11.9)$$

καθώς και ότι $O(0) = 1$.

Για τιμές του θ κοντά στο 0, $O(\theta) \simeq 1 + \theta J$, όπου

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_2. \quad (11.10)$$

Παρατηρούμε ότι $e^{\theta J} = e^{i\theta\sigma_2} = \cos \theta 1 + i\sigma_2 \sin \theta = O(\theta)$. Δηλαδή παίρνοντας το εκθετικό του πίνακα J μπορούμε να αναπαράγουμε πλήρως όλα τα στοιχεία του πίνακα περιστροφής $O(\theta)$ με τη χρήση της εκθετικής συνάρτησης. Γι' αυτό το λόγο, ο πίνακας J καλείται *γεννήτορας* των πινάκων περιστροφής $O(\theta)$.

11.2.2 Περιστροφές στο χώρο

Εξετάζουμε τώρα τις περιστροφές στον τρισδιάστατο χώρο. Η περιστροφή ενός διανύσματος $\underline{r} \in \mathbb{R}^3$ αφήνει αναλλοίωτο το μήκος του $\sqrt{\underline{r}^T \underline{r}}$. Οπότε αν η περιστροφή γίνεται μέσω ενός πίνακα 3×3 , O ως

$$\underline{r} \rightarrow \underline{r}' = O\underline{r}, \quad (11.11)$$

θα πρέπει να ισχύει $\underline{r}'^T \underline{r}' = \underline{r}^T O^T O \underline{r} = \underline{r}^T \underline{r}$, οπότε $O^T O = 1$, δηλαδή ο πίνακας O να είναι ορθογώνιος.

Η σχέση $O^T O = 1$, σημαίνει ότι $\det O = \pm 1$. Για την ώρα, θα περιοριστούμε σε πίνακες περιστροφών με $\det O = 1$, και θα εξετάσουμε τους πίνακες με $\det O = -1$ αργότερα.

Είναι εύκολο να κατασκευάσουμε ένα γενικό πίνακα περιστροφής χτίζοντας τον από περιστροφές ως προς καθέναν από τους 3 άξονες ενός Καρτεσιανού πίνακα συντεταγμένων. Συγκεκριμένα, οι

πίνακες

$$O_1(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, O_2(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix},$$

$$O_3(\chi) = \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi & 0 \\ -\sin \chi & \cos \chi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (11.11)$$

περιέχουν ο καθένας έναν υποπίνακα περιστροφής (11.8) στις δύο διαστάσεις και αφήνουν αναλλοίωτα τα μοναδιαία διανύσματα των αξόνων 1, 2, και 3 αντίστοιχα. Ο γενικότερος δυνατός πίνακας περιστροφής γράφεται ως ένα γινόμενο $O_1(\theta)O_2(\phi)O_3(\chi)$ για κάποιες τιμές των γωνιών θ , ϕ και χ .

Αμέσως βρίσκουμε τους γεννήτορες των πινάκων O_1, O_2, O_3 ,

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, J_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.12)$$

και επιβεβαιώνουμε ότι $O_1(\theta) = e^{\theta J_1}$, $O_2(\phi) = e^{\phi J_2}$ και $O_3(\chi) = e^{\chi J_3}$.

Από την Εξ. (11.12) βρίσκουμε ότι $[J_1, J_2] = J_3$, $[J_3, J_1] = J_2$ και $[J_2, J_3] = J_1$, δηλαδή

$$[J_i, J_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} J_k, \quad (11.13)$$

όπου ϵ_{ijk} το πλήρως αντισυμμετρικό σύμβολο (6.5). Οι σχέσεις μετάθεσης (11.13) ορίζουν την *άλγεβρα των περιστροφών*.

11.2.3 Περιστροφή ως προς τυχαίο άξονα

Η σχέση $O^T O = 1$ που ικανοποιεί ένας ορθογώνιος πίνακας O σημαίνει ότι όλες οι ιδιοτιμές λ του O πρέπει να έχουν μέτρο ίσο με τη μονάδα. Ο λόγος είναι ότι στο χώρο C^3 ένας ορθογώνιος πίνακας 3×3 είναι μοναδιαίος, και ως μοναδιαίος έχει ιδιοτιμές με μέτρο μονάδα. Στις 3 διαστάσεις, οι ιδιοτιμές του O δίνονται από τις λύσεις $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $\det(O - \lambda 1)$, το οποίο είναι τρίτης τάξης. Ένα πολυώνυμο τρίτης τάξης έχει πάντα μία πραγματική λύση και δεδομένου ότι $\det O = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$, έχουμε τρία ενδεχόμενα

1. και οι τρεις ιδιοτιμές είναι ίσες με 1.
2. μία ιδιοτιμή είναι ίση με 1 και οι άλλες δύο είναι ίσες με -1 .
3. μία ιδιοτιμή είναι ίση με 1 και οι άλλες δύο είναι μιγαδικές $e^{i\theta}$ για κάποια γωνία θ .

Η πρώτη περίπτωση είναι η τετριμμένη αφού τότε $O = 1$ ενώ η δεύτερη είναι ειδική περίπτωση της τρίτης για $\theta = \pi$.

Έστω \underline{n} το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα του O που αντιστοιχεί σε ιδιοτιμή 1. Δεδομένου ότι όλοι οι συντελεστές του O είναι πραγματικοί και η ιδιοτιμή είναι πραγματική, το \underline{n} έχει συνιστώσες πραγματικούς και γράφεται (n_1, n_2, n_3) . Το γεγονός ότι

$$O \underline{n} = \underline{n}, \quad (11.14)$$

σημαίνει ότι το \underline{n} ορίζει τον άξονα γύρω από τον οποίο γίνεται η περιστροφή. Οι ιδιοτιμές $e^{i\theta}$ του $O \underline{n}$ ορίζουν τη γωνία θ της περιστροφής γύρω από τον άξονα \underline{n} .

Για πολύ μικρή γωνία περιστροφής θ γύρω από τον άξονα \underline{n} , $O = 1 + \theta J_{\underline{n}}$ και η Εξ. (11.14) δίνει

$$J_{\underline{n}}\underline{n} = 0. \quad (11.15)$$

Επίσης, η σχέση $O^T O = 1$ σημαίνει ότι $1 + \theta(J_{\underline{n}} + J_{\underline{n}}^T) = 1$, ή $J_{\underline{n}} = -J_{\underline{n}}^T$, δηλαδή ο $J_{\underline{n}}$ είναι αντισυμμετρικός πίνακας. Δεδομένου ότι ένας αντισυμμετρικός πίνακας 3×3 προσδιορίζεται από τρεις μεταβλητές μπορούμε να τον εκφράσουμε ως $\theta J_{\underline{n}} = \sum_i a_i J_i$, όπου τα J_i δίνονται από την Εξ. (11.12). Αντικαθιστώντας στην Εξ. (11.15) βρίσκουμε ότι $a_1 = n_1, a_2 = -n_2, a_3 = n_3$, οπότε

$$J_{\underline{n}} = \begin{pmatrix} 0 & n_3 & -n_2 \\ -n_3 & 0 & n_1 \\ n_2 & -n_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.16)$$

Οπότε ο πίνακας $O_{\underline{n}}$ περιστροφής γύρω από τον άξονα \underline{n} κατά γωνία θ υπολογίζεται ως $e^{\theta J_{\underline{n}}}$.

Παράδειγμα. Έστω $\underline{n} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 0, -1)$. Τότε από την Εξ. (11.16), $J_{\underline{n}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$. Για να

υπολογίσουμε τον πίνακα $e^{\theta J_{\underline{n}}}$, είναι βολικό να εξετάσουμε τον πίνακα $iJ_{\underline{n}}$ που είναι αυτοσυζυγής στο \mathbf{C}^3 , οπότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε άμεσα το φασματικό θεώρημα. Βρίσκοντας τις ιδιοτιμές $(0, 1, -1)$ και τα ιδιοδιανύσματα του $iJ_{\underline{n}}$ παίρνουμε κατά τα γνωστά

$$iJ_{\underline{n}} = (0) \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2}i & 1 \\ \sqrt{2}i & 2 & \sqrt{2}i \\ 1 & -\sqrt{2}i & 1 \end{pmatrix} + (-1) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2}i & 1 \\ -\sqrt{2}i & 2 & -\sqrt{2}i \\ 1 & \sqrt{2}i & 1 \end{pmatrix},$$

οπότε ο πίνακας $e^{\theta J_{\underline{n}}} = e^{-i\theta(iJ_{\underline{n}})}$ υπολογίζεται

$$e^{\theta J_{\underline{n}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + e^{-i\theta} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2}i & 1 \\ \sqrt{2}i & 2 & \sqrt{2}i \\ 1 & -\sqrt{2}i & 1 \end{pmatrix} + e^{i\theta} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2}i & 1 \\ -\sqrt{2}i & 2 & -\sqrt{2}i \\ 1 & \sqrt{2}i & 1 \end{pmatrix}$$

11.2.4 Αντιστροφή στο χώρο

Μέχρι στιγμής εξετάσαμε περιστροφές που αντιστοιχούν σε ορθογώνιους πίνακες O με $\det O = 1$. Ορίζουμε τον πίνακα αντιστροφής στο χώρο

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.15)$$

ο οποίος αντιστοιχεί σε αντιστροφή ενός διανύσματος ως προς το κέντρο των αξόνων: $\mathcal{P}\underline{r} = -\underline{r}$.

Ο πίνακας \mathcal{P} ικανοποιεί τις σχέσεις $\det \mathcal{P} = -1$ και $\mathcal{P}^2 = 1$. Παρατηρούμε ότι για κάθε ορθογώνιο πίνακα με $\det O = 1$, ο πίνακας $O' = \mathcal{P}O$ έχει $\det O' = -1$. Άρα η χρήση του \mathcal{P} μας επιτρέπει να περιγράψουμε το γενικότερο μετασχηματισμό συμμετρίας ενός ορθογώνιου πίνακα.

Παρότι ο υπολογισμός είναι τετριμμένος, η δράση του \mathcal{P} πάνω στους γεννήτορες J_i

$$\mathcal{P}J_i\mathcal{P} = J_i, \quad (11.16)$$

είναι σημαντική, ιδιαίτερα όταν μεταφερθεί στην κβαντική περιγραφή.

11.2.5 Περιστροφές στις τρεις διαστάσεις και η σφαίρα του Μπλοχ

Στο Κεφ. 7.2.3 δείξαμε ότι κάθε κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\psi\rangle$ στο χώρο Χίλμπερτ αντιστοιχεί σε ένα σημείο της σφαίρας του Μπλοχ, που προσδιορίζεται από το διάνυσμα $\hat{r} = \langle\psi|\hat{\sigma}|\psi\rangle$. Ένας μοναδιαίος μετασχηματισμός $|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}|\psi\rangle$ μετασχηματίζει το διάνυσμα Μπλοχ r στο $r' = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}\hat{U}|\psi\rangle$.

Για κάθε i , ο τελεστής $\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_i\hat{U}$ είναι αυτοσυζυγής με μηδενικό ίχνος, άρα γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των μητρών του Πάουλι,

$$\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_i\hat{U} = \sum_j \Lambda_{ij}\hat{\sigma}_j, \quad (11.17)$$

οπότε $r'_i = \sum_j \Lambda_{ij}r_j$. Δεδομένου ότι το μέτρο του r παραμένει σταθερό, ο πίνακας Λ_{ij} είναι ορθογώνιος. Τον υπολογίζουμε εκπεφρασμένα, πολλαπλασιάζοντας και τα δύο σκέλη της Εξ. (11.17) με $\hat{\sigma}_k$ και παίρνοντας το ίχνος,

$$\Lambda_{ij} = \frac{1}{2}Tr\left(\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_i\hat{U}\hat{\sigma}_j\right). \quad (11.18)$$

Παρατηρούμε ότι αν ο \hat{U} αντιστοιχεί στον πίνακα Λ_{ij} , τότε και κάθε πίνακας της μορφής $e^{i\phi}\hat{U}$ αντιστοιχούν στον Λ_{ij} . Επίσης το γινόμενο $\hat{U}_1\hat{U}_2$ δύο μοναδιαίων τελεστών αντιστοιχεί στο γινόμενο των αντίστοιχων ορθογώνιων πινάκων Λ_1 και Λ_2 —βλ. Άσκηση 11.1.

Επίσης παρατηρούμε ότι $Tr\Lambda = \frac{1}{2}\sum_i Tr\left(\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_i\hat{U}\hat{\sigma}_i\right)$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (6.154) παίρνουμε

$$Tr\Lambda = -2 + |Tr\hat{U}|^2 \geq -2. \quad (11.19)$$

Άρα ο πίνακας αντιστροφής (11.15) που έχει ίχνος -3 δεν αντιστοιχίζεται σε κάποιο μοναδιαίο τελεστή. Δεδομένου ότι ο πολλαπλασιασμός ενός ορθογώνιου πίνακα με τον πίνακα αντιστροφής (11.15) αλλάζει το πρόσημο της ορίζουσας, οι ορθογώνιοι πίνακες Λ_{ij} της Εξ. (11.18) που αντιστοιχίζονται σε μοναδιαίους έχουν θετική ορίζουσα.

Ο μετασχηματισμός αντιστροφής $r \rightarrow -r$ στη σφαίρα του Μπλοχ επιτυγχάνεται μέσω του αντιμοναδιαίου πίνακα (βλ. Άσκ. 11.2)

$$\hat{\mathbb{T}} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c_2^* \\ c_1^* \end{pmatrix}, \quad (11.20)$$

ο οποίος είναι ο τελεστής αντιστροφής χρόνου για κιούμπιτ (βλ. Άσκ. 11.2). Οπότε οι ορθογώνιοι πίνακες με αρνητική ορίζουσα αντιστοιχούν σε αντιμοναδιαίους τελεστές της μορφής $\hat{\mathbb{T}}\hat{U}$ για μοναδιαίο \hat{U} .

Οι ορθογώνιοι μετασχηματισμοί είναι οι γενικότεροι μετασχηματισμοί που διατηρούν το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων στο \mathbf{R}^3 . Η Εξ. (7.26) σημαίνει ότι ο γενικότερος δυνατός μετασχηματισμός στο \mathbf{C}^2 που διατηρεί το μέτρο του εσωτερικού γινομένου, αντιστοιχεί είτε σε μοναδιαίο τελεστή είτε σε γινόμενο μοναδιαίου τελεστή με τον τελεστή $\hat{\mathbb{T}}$ που είναι αντιμοναδιαίος τελεστής. *Αποδείξαμε έτσι το θεώρημα του Βίγκνερ στο \mathbf{C}^2 .*

11.3 Οι τελεστές της στροφορμής

11.3.1 Βασικοί ορισμοί

Επιθυμούμε να μεταφέρουμε την παραπάνω περιγραφή της περιστροφής σε κβαντικά συστήματα. Έστω ένα φυσικό σύστημα που περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Το θεώρημα του Βίγκνερ υποδηλώνει ότι πρέπει να βρούμε μοναδιαίους τελεστές στον \mathcal{H} , οι οποίοι να εκπροσωπούν τους πίνακες περιστροφής.

Αυτό γίνεται ως εξής. Αντιστοιχίζουμε σε κάθε γεννήτορα J_i έναν τελεστή $\frac{1}{i}\hat{J}_i$ όπου ο \hat{J}_i είναι ένας αυτοσυζυγής τελεστής στο \mathcal{H} . Κατ' αυτόν τον τρόπο, η βασική σχέση της άλγεβρας των περιστροφών γράφεται ως

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k. \quad (11.21)$$

Έχοντας ορίσει τους τελεστές \hat{J}_i , κατασκευάζουμε τους μοναδιαίους τελεστές $e^{i\theta\hat{J}_i}$, οι οποίοι αντιστοιχούν σε περιστροφή κατά γωνία θ γύρω από τον άξονα i .

Οπότε αν σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} , ορίσουμε τελεστές \hat{J}_i που να ικανοποιούν την Εξ. (11.21), τότε έχουμε μία πλήρη κβαντική περιγραφή των περιστροφών σε αυτό το σύστημα. Οι τελεστές \hat{J}_i καλούνται *τελεστές στροφορμής*, γιατί μεταφέρουν το κλασικό διανυσματικό μέγεθος της στροφορμής στην κβαντική θεωρία. Στη συνέχεια θα δώσουμε το γενικότερο δυνατό ορισμό τελεστών στροφορμής στην κβαντική μηχανική και θα βρούμε το φάσμα αυτών των τελεστών.

Καταρχάς ορίζουμε τον τελεστή

$$\hat{\mathcal{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2, \quad (11.22)$$

που είναι το κβαντικό ανάλογο του μήκους του "διανύσματος" $(\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$. Ο τελεστής $\hat{\mathcal{J}}^2$ είναι θετικός και ικανοποιεί τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{\mathcal{J}}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (11.23)$$

Γενικά περιμένουμε ότι οι ιδιοτιμές λ του $\hat{\mathcal{J}}^2$ είναι εκφυλισμένες. Αφού ο \hat{J}_3 μετατίθεται με τον $\hat{\mathcal{J}}^2$, έχουν κοινά ιδιοδιανύσματα $|\lambda, m\rangle$, όπου

$$\hat{\mathcal{J}}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle \quad (11.24)$$

$$\hat{J}_3 |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle. \quad (11.25)$$

Θα υποθέσουμε ότι οι τελεστές \hat{J}_i ορίζονται σε ένα χώρο Χίλμπερτ, στον οποίον δεν υπάρχουν διαφορετικά διανύσματα $|\lambda, m\rangle$ (εκτός από διαφορά φάσης) με την ίδια τιμή του λ και του m . Αυτή είναι η απλούστερη περίπτωση, στην οποία μπορούν να αναλυθούν όλες οι υπόλοιπες. Η απόδειξη αυτού του ισχυρισμού απαιτεί θεωρία ομάδων: όπως εξηγούμε στο επόμενο κεφάλαιο, η απουσία εκφυλισμού στα κοινά ιδιοδιανύσματα $|\lambda, m\rangle$ σημαίνει ότι εξετάζουμε μη-αναγωγίμες αναπαραστάσεις της άλγεβρας της στροφορμής.

11.3.2 Αυξητικός και μειωτικός τελεστής

Ορίζουμε τους τελεστές \hat{J}_+ και \hat{J}_- ως

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2. \quad (11.26)$$

Οι δύο αυτοί τελεστές είναι συζυγείς, $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$ και ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης,

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_3 \quad (11.27)$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_3] = -\hat{J}_+ \quad (11.28)$$

$$[\hat{J}_-, \hat{J}_3] = \hat{J}_- \quad (11.29)$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0 \quad (11.30)$$

Επίσης $\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - i[\hat{J}_1, \hat{J}_2]$, και χρησιμοποιώντας την Εξ. (11.22) παίρνουμε

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_3^2 + \hat{J}_3. \quad (11.31)$$

Ομοίως βρίσκουμε ότι

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hat{J}_3. \quad (11.32)$$

Δρούμε τους τελεστές και από τα δύο μέρη της Εξ. (11.28) στο διάνυσμα $|\lambda, m\rangle$. Παίρνουμε $\hat{J}_+ \hat{J}_3 |\lambda, m\rangle - \hat{J}_3 \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = -\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (11.25)

$$\hat{J}_3 \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = (m+1) \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle. \quad (11.33)$$

Από την Εξ. (11.30) αμέσως προκύπτει ότι

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = \hat{J}_+ \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = \lambda \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle. \quad (11.34)$$

Συγκρίνοντας με τις Εξ. (11.24, 11.25), βλέπουμε ότι το κετ $\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{\mathbf{J}}^2$ με ιδιοτιμή λ και του \hat{J}_3 με ιδιοτιμή $m+1$, δηλαδή

$$\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = c_{\lambda m} |\lambda, m+1\rangle, \quad (11.35)$$

για κάποια σταθερά $c_{\lambda m}$. Αυτή η σταθερά υπολογίζεται από κανονικοποίηση του $|\lambda, m+1\rangle$ ως

$$|c_{\lambda m}|^2 = \langle \lambda, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m | \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hat{J}_3 |\lambda, m\rangle = (\lambda - m^2 - m), \quad (11.36)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (11.32). Οπότε καταλήγουμε ότι

$$\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = \sqrt{\lambda - m(m+1)} |\lambda, m+1\rangle. \quad (11.37)$$

Με ανάλογο τρόπο βρίσκουμε ότι

$$\hat{J}_- |\lambda, m\rangle = \sqrt{\lambda - m(m-1)} |\lambda, m-1\rangle. \quad (11.38)$$

11.3.3 Το φάσμα των τελεστών της στροφορμής

Η Εξ. (11.37) σημαίνει ότι θα πρέπει να υπάρχει μία μέγιστη τιμή του m για κάθε λ , δεδομένου ότι για επαρκώς μεγάλο m , ο όρος μέσα στην τετραγωνική ρίζα της Εξ. (11.37) γίνεται αρνητικός. Επιλέγουμε να συμβολίσουμε τη μέγιστη τιμή του m ως j . Για $m = j$ πρέπει να ισχύει $\hat{J}_+ |\lambda, j\rangle = 0$, γιατί αλλιώς η δράση του \hat{J}_+ θα συνεχίσει να δίνει ολοένα και μεγαλύτερες τιμές του m . Άρα καταλήγουμε ότι

$$\lambda = j(j+1). \quad (11.39)$$

Με ακριβώς το ίδιο επιχειρήμα, η Εξ. (11.38) σημαίνει ότι υπάρχει μία ελάχιστη τιμή m_{min} του m , έτσι ώστε $\hat{J}_- |\lambda, m_{min}\rangle = 0$. Αυτό σημαίνει ότι $\lambda = m_{min}(m_{min} - 1)$ και με βάση την Εξ. (11.39) παίρνουμε $m_{min} = -j$. Άρα το m μπορεί να πάρει τις τιμές από $-j$ ως j . Δεδομένου ότι με τον \hat{J}_+

ανεβαίνουμε μία προς μία τις τιμές του m , πρέπει να υπάρξει ένας ακέραιος αριθμός βημάτων N για να πάμε από το $m = -j$ στο $m = j$. Θα ισχύει δηλαδή $-j + N = j$, ή

$$j = \frac{N}{2}, \quad (11.40)$$

δηλαδή το j μπορεί να πάρει ακέραιες και ημιακέραιες τιμές.

Για κάθε τιμή του j έχουμε $2j + 1$ διαφορετικές τιμές του m : $-j, -j + 1, \dots, j - 1, j$. Προφανώς, αν το j είναι ακέραιος, τότε και το m είναι ακέραιος και αν το j είναι ημιακέραιος, τότε και το m είναι ημιακέραιος. Ο ιδιόχωρος με σταθερό j έχει βαθμό εκφυλισμού ίσο με $2j + 1$, δηλαδή ταυτίζεται με το \mathbf{C}^{2j+1} .

Συνοψίζουμε τις βασικές σχέσεις, επιλέγοντας να χρησιμοποιήσουμε το j αντί για το λ ως δείκτη των κερ, δηλαδή αντί για $|\lambda, m\rangle$ γράφουμε $|j, m\rangle$.

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad (11.41)$$

$$\hat{J}_3 |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad (11.42)$$

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \quad (11.43)$$

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (11.44)$$

11.3.4 Περιγραφή με πίνακες

Οι Εξ. (11.41—11.44) ορίζουν πλήρως τους τελεστές της στροφορμής για ένα κβαντικό σύστημα. Είναι όμως χρήσιμο να τους εκφράσουμε σε μορφή πινάκων. Για σταθερό j , τα διανύσματα $|j, m\rangle$ σαρώνουν το χώρο Χίλμπερτ \mathbf{C}^{2j+1} , οπότε μπορούμε να αντιστοιχίσουμε

$$|j, j\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j, j-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots \quad |j, -j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (11.45)$$

Η Εξ. (11.42) σημαίνει ότι ο πίνακας \hat{J}_3 είναι διαγώνιος, οπότε

$$\hat{J}_3 = \begin{pmatrix} j & 0 & \dots & 0 \\ 0 & j-1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & -j \end{pmatrix} \quad (11.46)$$

Η Εξ. (11.43) σημαίνει ότι όλα τα στοιχεία του πίνακα \hat{J}_+ είναι μηδέν, εκτός από αυτά που βρίσκονται στην πρώτη γραμμή πάνω από τη διαγώνιο και παράλληλα σ' αυτή, όπου παίρνουν τις τιμές $c_{j,m} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$. Ομοίως, η Εξ. (11.44) σημαίνει ότι όλα τα στοιχεία του πίνακα \hat{J}_- είναι μηδέν, εκτός από αυτά που βρίσκονται στην πρώτη γραμμή κάτω από τη διαγώνιο και παράλληλα σ' αυτή, όπου παίρνουν τις τιμές $c_{j,-m} = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$. Για παράδειγμα, για $j = \frac{1}{2}$,

$$\hat{J}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.47)$$

Δεδομένου ότι $\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ και $\hat{J}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$ οπότε αμέσως βρίσκουμε ότι

$$\hat{J}_i = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_i, \quad (11.48)$$

όπου $\hat{\sigma}_i$ οι μήτρες του Πάουλι.

Για $j = 1$, έχουμε

$$\hat{J}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (11.49)$$

οπότε καταλήγουμε ότι

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11.50)$$

11.3.5 Περιστροφές κατά 2π

Δεδομένου ότι ο πίνακας \hat{J}_3 είναι διαγώνιος (για κάθε j) μπορούμε αμέσως να γράψουμε το μοναδιαίο τελεστή $e^{i\theta\hat{J}_3}$ που αντιστοιχεί σε περιστροφή κατά θ γύρω από τον άξονα 3,

$$e^{i\theta\hat{J}_3} = \begin{pmatrix} e^{ij\theta} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(j-1)\theta} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-ij\theta} \end{pmatrix}. \quad (11.51)$$

Για $\theta = 2\pi$, υπάρχουν δύο ενδεχόμενα.

Αν ο j είναι ακέραιος, τότε κάθε διαγώνιο στοιχείο στον πίνακα (11.51) είναι της μορφής $e^{i2\pi k}$ για ακέραιο k και άρα ίσο με 1. Οπότε $e^{2\pi i\hat{J}_3} = \hat{I}$ και η περιστροφή κατά 2π δεν αλλάζει το διάνυσμα $|\psi\rangle$ του χώρου Χίλμπερτ στον οποίο δρα.

Αν ο j είναι ημι-ακέραιος, τότε κάθε διαγώνιο στοιχείο στον πίνακα (11.51) είναι της μορφής $e^{i\pi k}$ για περιττό k και άρα ίσο με -1 . Οπότε $e^{2\pi i\hat{J}_3} = -\hat{I}$ και η περιστροφή κατά 2π μετασχηματίζει ένα διάνυσμα $|\psi\rangle$ στο $-|\psi\rangle$. Χρειάζεται μία επιπλέον περιστροφή κατά 2π για να επανέλθει το διάνυσμα στην $|\psi\rangle$.

Η παραδοσιακή έννοια της στροφορμής που αντιστοιχεί σε περιστροφικές κινήσεις σωματιδίων στο χώρο δεν είναι συμβατή με ένα μετασχηματισμό που περιστροφή κατά 2π σου αλλάζει την κατάσταση. Όπως θα δούμε αργότερα, οι περιπτώσεις με j ημι-ακέραιο αντιστοιχούν σε ένα είδος περιστροφής που δεν μπορεί να ιδωθεί ως περιστροφική κίνηση στο χώρο και αυτό είναι το σπιν των σωματιδίων.

11.3.6 Αντιστροφή στο χώρο και στο χρόνο

Αντιστροφή στο χώρο. Με τους παραπάνω ορισμούς, μπορούμε να αναπαραστήσουμε με μοναδιαίους τελεστές όλες τις περιστροφές στο χώρο που αντιστοιχούν σε ορθογώνιους πίνακες O με $\det O = 1$. Για να περιγράψουμε και την αντιστροφή στο χώρο, πρέπει να ορίσουμε ένα μοναδιαίο τελεστή $\hat{\mathbb{P}}$ ο οποίος να αναπαριστά τον πίνακα \mathcal{P} της Εξ. (11.15). Ο $\hat{\mathbb{P}}$ πρέπει να μεταφέρει τις βασικές σχέσεις του \mathcal{P} , δηλαδή να ικανοποιεί

$$\hat{\mathbb{P}}^2 = \hat{I}, \quad (11.52)$$

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{J}_i\hat{\mathbb{P}}^\dagger = \hat{J}_i. \quad (11.53)$$

Η Εξ. (11.52) σημαίνει ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{\mathbb{P}}$ είναι ± 1 , οπότε ο $\hat{\mathbb{P}}$ είναι και αυτοσυζυγής: $\hat{\mathbb{P}} = \hat{\mathbb{P}}^\dagger = \hat{\mathbb{P}}^{-1}$. Η Εξ. (11.53) προκύπτει από την Εξ. (11.16) και σημαίνει ότι $[\hat{\mathbb{P}}, \hat{J}_i] = 0$. Άρα τα κερ $|j, m\rangle$ είναι ιδιοδιανύσματα του $\hat{\mathbb{P}}$,

$$\hat{\mathbb{P}}|j, m\rangle = a_{j,m}|j, m\rangle, \quad (11.54)$$

όπου οι ποσότητες $a_{j,m}$ παίρνουν τιμές ± 1 . Δεδομένου ότι $[\hat{\mathbb{P}}, \hat{J}_\pm] = 0$, έχουμε $\hat{\mathbb{P}}\hat{J}_\pm|j, m\rangle = \hat{J}_\pm\hat{\mathbb{P}}|j, m\rangle$ και άρα $a_{j,m} = a_{j,m+1}$. Συμπεραίνουμε ότι το $a_{j,m}$ δεν εξαρτάται από το m , άρα

$$\hat{\mathbb{P}}|j, m\rangle = a_j|j, m\rangle, \quad (11.55)$$

όπου το a_j να παίρνει τιμές ± 1 . Η ακριβής μορφή των a_j εξαρτάται από το φυσικό σύστημα.

Αντιστροφή στο χρόνο. Στην ως τώρα συζήτηση δεν έχουμε πει κάτι για το συσχετισμό μεταξύ περιστροφής και χρόνου. Ωστόσο διαισθητικά περιμένουμε ότι όταν αντιστρέφεται ο χρόνος, αντιστρέφεται και η περιστροφή, οπότε περιμένουμε ότι ο αντιμοναδιαίος τελεστής αντιστροφής του χρόνου $\hat{\mathbb{T}}$ δρα στους γεννήτορες των περιστροφών ως

$$\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_i\hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{J}_i, \quad (11.56)$$

κάτι που θα επιβεβαιώσουμε σε επόμενο κεφάλαιο.

Η Εξ. (11.56) σημαίνει ότι

$$\hat{\mathbb{T}}\mathbf{J}^2\hat{\mathbb{T}}^\dagger = \sum_{i=1}^3 \hat{\mathbb{T}}\hat{J}_i\hat{\mathbb{T}}^\dagger\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_i\hat{\mathbb{T}}^\dagger = \sum_{i=1}^3 (-\hat{J}_i)(-\hat{J}_i) = \mathbf{J}^2. \quad (11.57)$$

Οι Εξ. (11.56) και (11.57) σημαίνουν ότι $\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_3 = -\hat{J}_3\hat{\mathbb{T}}$ και $\hat{\mathbb{T}}\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}^2\hat{\mathbb{T}}$, οπότε δρώντας στα διανύσματα $|j, m\rangle$ παίρνουμε

$$\hat{J}_3\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = -m\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle \quad \mathbf{J}^2\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = j(j+1)\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle. \quad (11.58)$$

Καταλήγουμε ότι το διάνυσμα $\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle$ είναι κοινό ιδιοδιάνυσμα των \hat{J}_3 και \mathbf{J}^2 με ιδιοτιμές $-m$ και $j(j+1)$ αντίστοιχα. Άρα

$$\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = b_{j,m}|j, -m\rangle \quad (11.59)$$

για κάποιες φάσεις $b_{j,m}$.

Δεδομένου ότι ο $\hat{\mathbb{T}}$ είναι αντιμοναδιαίος, η Εξ. (11.56) σημαίνει ότι $\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_+\hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{J}_-$, ή ισοδύναμα $\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_+ = -\hat{J}_-\hat{\mathbb{T}}$. Δρούμε και τα δύο μέλη αυτής της εξίσωσης στο $|j, m\rangle$ χρησιμοποιώντας την Εξ. (11.59). Παίρνουμε $\hat{\mathbb{T}}\hat{J}_+|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}b_{j,m+1}|j, -m-1\rangle$ και $\hat{J}_-\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}b_{j,m}|j, -m-1\rangle$. Συγκρίνοντας τις εκφράσεις καταλήγουμε ότι $b_{j,m+1} = -b_{j,m}$. Αυτό σημαίνει ότι

$$b_{j,m} = (-1)^{j-m}e^{i\phi_j}, \quad (11.60)$$

όπου η φάση $e^{i\phi_j}$ δεν εξαρτάται από το m . Μπορούμε πάντα να διαλέξουμε $e^{i\phi_j} = 1$, με μια αλλαγή φάσης των διανυσμάτων βάσης $|j, m\rangle$. Αν $e^{i\phi_j} \neq 1$, ορίζουμε $|j, m\rangle' = e^{i\phi_j/2}|j, m\rangle$, οπότε

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle' &= \hat{\mathbb{T}}e^{i\phi_j/2}|j, m\rangle = e^{-i\phi_j/2}\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = e^{-i\phi_j/2}e^{i\phi_j}(-1)^{j-m}|j, -m\rangle \\ &= e^{i\phi_j/2}(-1)^{j-m}|j, -m\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle', \end{aligned}$$

οπότε η φάση $e^{i\phi_j}$ έχει εξαφανιστεί. Καταλήγουμε λοιπόν ότι

$$\hat{\mathbb{T}}|j, m\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle. \quad (11.59)$$

Είναι αξιοσημείωτο ότι $\hat{\mathbb{T}}^2|j, m\rangle = (-1)^{2j}|j, m\rangle$, δηλαδή ότι

$$\hat{\mathbb{T}}^2 = (-1)^{2j}\hat{I}, \quad (11.60)$$

για τις ημιακέραιες τιμές του j , $\hat{\mathbb{T}}^2 = -\hat{I}$. Δηλαδή η διπλή αντιστροφή στο χρόνο δεν επαναφέρει τα συστήματα με ημιακέραιο j στην αρχική τους κατάσταση, αλλά δημιουργεί μια φάση ίση με π (όπως ακριβώς και η περιστροφή κατά 2π).

Ωστόσο δεν γνωρίζουμε καμία φυσική ποσότητα που να αλλάζει κάτω από το μετασχηματισμό $\hat{\mathbb{T}}^2$, οπότε περιμένουμε να μην αλλάζουν και οι πιθανότητες που προκύπτουν από τη δράση του $\hat{\mathbb{T}}^2$ σε ένα διάνυσμα. Αν $|\psi\rangle = c_1|j_1, m_1\rangle + c_2|j_2, m_2\rangle$ όπου j_1 ακέραιο και j_2 ημιακέραιο, τότε $\hat{\mathbb{T}}^2|\psi\rangle = c_1|j_1, m_1\rangle - c_2|j_2, m_2\rangle$ είναι άλλη κατάσταση από την $|\psi\rangle$, που οδηγεί σε διαφορετικές πιθανότητες. Από αυτό καταλήγουμε στη θεώρηση ότι καταστάσεις $|\psi\rangle$ δεν είναι πραγματοποιήσιμες, δηλαδή υπάρχει ένας κανόνας υπερεπιλογής για τις τιμές του $\hat{\mathbb{T}}^2$ [209].

Καταλήγουμε ότι μπορούν να υπάρξουν επαλληλίες μόνο μεταξύ ακέραιων ή μόνο μεταξύ ημιακέραιων τιμών του j .

11.4 Τροχιακή στροφορμή

11.4.1 Βασικοί ορισμοί και ιδιότητες

Για ένα σωματίο που κινείται στις τρεις διαστάσεις ορίζουμε τον τελεστή της τροχιακής στροφορμής ως

$$\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad (11.61)$$

όπου οι διανυσματικοί τελεστές $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ και $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$ στο $L^2(\mathbf{R}^3)$ ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}\hat{I}. \quad (11.62)$$

Χρησιμοποιώντας το αντισυμμετρικό σύμβολο ϵ_{ijk} , η Εξ. (11.61) γράφεται

$$\hat{\ell}_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k. \quad (11.63)$$

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι $[\hat{\ell}_1, \hat{\ell}_2] = i\hat{\ell}_3$ κοκ, δηλαδή ότι οι τελεστές $\hat{\ell}_i$ ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\ell}_k. \quad (11.64)$$

Μια σημαντική ταυτότητα για τον τελεστή $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = \hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}$ είναι η εξής.

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = \hat{\mathbf{r}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (11.65)$$

Είναι αντίστοιχη της διανυσματικής ταυτότητας (6.7), με τη διαφορά ότι εμφανίζεται ένας επιπλέον όρος επειδή οι τελεστές \hat{r} και \hat{p} δε μετατίθενται.

Για να αποδείξουμε την Εξ. (11.65) θα χρησιμοποιήσουμε την ταυτότητα (6.6). Γράφουμε $\hat{\ell}^2 = \sum_{ijklm} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_l \hat{p}_m$. Η Εξ. (6.6) δίνει $\hat{\ell}^2 = \sum_{jklm} (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_l \hat{p}_m$. Ο πρώτος όρος γράφεται $\sum_{jklm} \delta_{jl} \delta_{km} (\hat{x}_j \hat{x}_l \hat{p}_k \hat{p}_m - i \delta_{kl} \hat{x}_j \hat{p}_m) = \hat{r}^2 \hat{p}^2 - i \hat{r} \cdot \hat{p}$, όπου χρειάστηκε μία μετάθεση του \hat{p}_k με το \hat{x}_l για να έρθει σε επιθυμητή μορφή. Ο δεύτερος όρος απαιτεί δύο μεταθέσεις, πρώτα του \hat{p}_m με το \hat{x}_l και μετά του \hat{p}_k με το \hat{x}_l , οπότε προκύπτει $(\hat{r} \cdot \hat{p})^2 - 2i \hat{r} \cdot \hat{p}$. Προσθέτοντας τους δύο όρους καταλήγουμε στην Εξ. (11.65).

11.4.2 Ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές

Από τη γενική θεωρία της στροφορμής ξέρουμε ότι, εφόσον ικανοποιείται η Εξ. (11.63), οι ιδιοτιμές του $\hat{\ell}^2$ είναι της μορφής $\ell(\ell + 1)$ και του $\hat{\ell}_3$ είναι $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$. Ειδικά για την τροχιακή στροφορμή χρησιμοποιούμε το σύμβολο ℓ αντί για j . Εν γένει το ℓ θα μπορούσε να παίρνει και ακέραιες και ημι-ακέραιες τιμές. Ωστόσο, η τροχιακή στροφορμή αντιστοιχεί σε περιστροφές ενός σημειακού σωματιδίου στο φυσικό χώρο και σ' αυτήν την περίπτωση μία περιστροφή του σωματιδίου κατά 2π εξ ορισμού πρέπει να αφήνει το σύστημα αναλλοίωτο. Δεδομένου, ότι περιστροφές κατά 2π για ημι-ακέραιο ℓ αλλάζουν το καταστατικό διάνυσμα κατά -1 , δεν είναι συμβατές με τον ορισμό της τροχιακής στροφορμής. Άρα περιμένουμε ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{\ell}^2$ χαρακτηρίζονται από ακέραιες τιμές του ℓ .

Αυτό θα το επιβεβαιώσουμε λύνοντας εκπεφρασμένα το πρόβλημα ιδιοτιμών. Γράφουμε τους τελεστές $\hat{\ell}_i$ στην αναπαράσταση Σρέντινγκερ, $\hat{\ell}_i = -i \sum_{jk} \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$ και χρησιμοποιούμε τις σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, ϕ) , για $r \geq 0, \theta \in [0, \pi), \phi \in [0, 2\pi)$, που ορίζονται από την Εξ. (Α'.13). Οι παράγωγοι $\frac{\partial}{\partial x_i}$ εκφράζονται ως συνάρτηση των $\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}$ και $\frac{\partial}{\partial \phi}$ μέσω του Ιακωβιανού πίνακα (Α'.14). Αντικαθιστώντας βρίσκουμε ότι

$$\hat{\ell}_1 = i(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}) \quad (11.66)$$

$$\hat{\ell}_2 = i(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}) \quad (11.67)$$

$$\hat{\ell}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (11.68)$$

$$\hat{\ell}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}. \quad (11.69)$$

Παρατηρούμε ότι η ακτινική συντεταγμένη r και η παράγωγός της δεν εμφανίζονται στους τελεστές $\hat{\ell}_i$. Στην ουσία οι τελεστές $\hat{\ell}_i$ δρουν σε συναρτήσεις του θ, ϕ , δηλαδή σε συναρτήσεις που ορίζονται πάνω στη μοναδιαία σφαίρα S^2 . Όντως, ο τελεστής $\hat{\ell}^2$ έχει την ίδια μορφή με τον τελεστή Λαπλάς για τη μοναδιαία σφαίρα, Εξ. (Α'.18). Στο παράρτημα Α δείχνουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Λαπλάς στη σφαίρα είναι οι σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ λύνοντας την εξίσωση Λαπλάς. Εδώ θα πάρουμε το ίδιο αποτέλεσμα χρησιμοποιώντας της βασικές ιδιότητες των τελεστών της στροφορμής.

Καταρχάς ορίζουμε το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_{S^2} = L^2(S^2, \sin \theta d\theta d\phi)$ των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων πάνω σε μία σφαίρα, με το σύνηθες μέτρο ολοκλήρωσης $\sin \theta d\theta d\phi$. Δεδομένου ότι κάθε συνάρτηση $\psi(x_1, x_2, x_3)$ μπορεί να γραφεί με αλλαγή συντεταγμένων ως $\psi(r, \theta, \phi)$ και ότι $d^3x = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ ισχύει ότι

$$L^2(\mathbf{R}^3, d^3x) = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{S^2}, \quad (11.70)$$

όπου χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H}_r αποτελείται από συναρτήσεις $f(r)$ που ικανοποιούν $\int_0^\infty r^2 dr |f(r)|^2 < \infty$ και $f(0) = 0$. Άρα $\mathcal{H}_r = L_D^2(\mathbf{R}^+, r^2 dr)$, όπου ο δείκτης D αναφέρεται στις συνθήκες Ντιρισλέ στο $r = 0$.

Αυτό σημαίνει ότι οι τελεστές $\hat{\ell}_i$ και $\hat{\ell}^2$ γράφονται ως

$$\hat{\ell}_i = \hat{I} \otimes \hat{l}_i \quad (11.71)$$

$$\hat{\ell}^2 = \hat{I} \otimes \hat{l}^2, \quad (11.72)$$

όπου οι τελεστές \hat{l}_i και \hat{l}^2 δίνονται ακριβώς από τις ίδιες σχέσεις (11.66—11.69) με τους $\hat{\ell}_i$ και $\hat{\ell}^2$, αλλά θεωρούμενοι ότι δρουν σε συναρτήσεις $\psi(\theta, \phi)$ και όχι $\psi(r, \theta, \phi)$.

Υπολογίζουμε τους αυξητικούς και μειωτικούς τελεστές,

$$\hat{l}_\pm = e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (11.73)$$

Έστω $|\ell, m\rangle$ τα κοινά ιδιοδιανύσματα των \hat{l}_3 και \hat{l}^2 , και $Y_{\ell m}$ οι συναρτήσεις του θ και ϕ στις οποίες αντιστοιχούν (σφαιρικές αρμονικές). Από τη γενική θεωρία της στροφορμής, ξέρουμε ότι $\hat{l}_+ |\ell, \ell\rangle = 0$, ή ισοδύναμα

$$\frac{\partial Y_{\ell\ell}}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial Y_{\ell\ell}}{\partial \phi} = 0. \quad (11.74)$$

Καθώς η $|\ell, \ell\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα της \hat{l}_3 με ιδιοτιμή ℓ , θα έχουμε $-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell\ell} = \ell Y_{\ell\ell}$, οπότε $Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = e^{i\ell\phi} F_\ell(\theta)$, για κάποια συνάρτηση F_ℓ του θ . Αντικαθιστώντας στην Εξ. (11.74), παίρνουμε τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{dF_\ell}{d\theta} - \ell \cot \theta F_\ell = 0, \quad (11.75)$$

με λύση $F_\ell(\theta) = C_\ell \sin^\ell \theta$, για κάποια σταθερά C_ℓ . Καταλήγουμε ότι

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = C_\ell \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}. \quad (11.76)$$

Η απαίτηση $Y_{\ell\ell}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{\ell\ell}(\theta, \phi)$ οδηγεί στο συμπέρασμα $e^{2\pi i\ell} = 1$, και άρα ο ℓ είναι ακέραιος, όπως αναφέραμε νωρίτερα.

Η σταθερά C_ℓ υπολογίζεται από την απαίτηση $\int \sin \theta d\theta d\phi |Y_{\ell\ell}|^2 = 1$. Η ολοκλήρωση ως προς ϕ δίνει ένα παράγοντα 2π , ενώ με αλλαγή μεταβλητής $\xi = \cos \theta$ παίρνουμε $2\pi |C_\ell|^2 \int_{-1}^1 d\xi (1-\xi^2)^\ell = 1$. Υπολογίζουμε

$$\int_{-1}^1 d\xi (1-\xi^2)^\ell = \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \frac{\ell!}{(k!(\ell-k)!)} \int_{-1}^1 d\xi \xi^{2k} = 2 \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \frac{\ell!}{(2k+1)k!(\ell-k)!}, \quad (11.77)$$

οπότε

$$C_\ell = \sqrt{\sum_{k=1}^{\ell} (-1)^k \frac{k!(2k+1)(\ell-k)}{4\pi\ell!}}. \quad (11.78)$$

Η κατάσταση $|\ell, m\rangle$ υπολογίζεται με διαδοχικές δράσεις του \hat{l}_- στο $|\ell, \ell\rangle$, σύμφωνα με την Εξ. (11.44),

$$|\ell, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 2\ell \cdot \dots \cdot [\ell(\ell+1) - m(m+1)]}} \hat{l}_-^{\ell-m} |\ell, \ell\rangle. \quad (11.79)$$

Οπότε αντικαθιστώντας στην Εξ.(11.76) παίρνουμε μία γενική έκφραση για τις σφαιρικές αρμονικές

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \frac{C_{\ell} e^{i\phi}}{\sqrt{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot [\ell(\ell+1) - m(m+1)]}} \times \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^{\ell-m} e^{i\ell\phi} \sin^{\ell} \theta. \quad (11.79)$$

Η περίπτωση $m = 0$ είναι ιδιαίτερη. Η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{I}_3 |\ell, 0\rangle = 0$ σημαίνει ότι $\frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell 0} = 0$, και άρα ότι η $Y_{\ell 0}$ εξαρτάται μόνο από το θ . Οπότε η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{I}^2 |\ell, 0\rangle = \ell(\ell+1) |\ell, 0\rangle$ βάσει της (11.69) είναι μια διαφορική εξίσωση μόνο για το θ . Θέτοντας $\xi = \cos \theta$, βρίσκουμε ότι στον ιδιόχωρο της μηδενικής ιδιοτιμής του \hat{I}_3 , $\hat{I}^2 = -\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \right]$, δηλαδή ο \hat{I}^2 ταυτίζεται με τον τελεστή Λεζάντρ \hat{L} . Άρα τα ιδιοδιανύσματα του \hat{I}^2 είναι τα πολυώνυμα Λεζάντρ, κανονικοποιημένα στη μονάδα σύμφωνα με την Εξ. (4.17),

$$Y_{\ell 0}(\theta, \phi) = \sqrt{\ell + \frac{1}{2}} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (11.80)$$

Αντιστροφή του χώρου. Ο μετασχηματισμός $r \rightarrow -r$ γραμμένος σε σφαιρικές συντεταγμένες γίνεται $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta$ και $\phi \rightarrow \pi + \phi$. Για να βρούμε τη δράση του τελεστή αντιστροφής του χώρου $\hat{\mathbb{P}}$ στα ιδιοδιανύσματα $|\ell, m\rangle$, αρκεί να υπολογίσουμε τη δράση του στην $|\ell, \ell\rangle$, δεδομένου ότι σύμφωνα με την Εξ. (11.55), οι ιδιοτιμές του $\hat{\mathbb{P}}$ εξαρτώνται μόνο από το ℓ . Από την Εξ. (11.76) παίρνουμε $Y(\pi - \theta, \pi + \phi) = e^{i\ell\pi} Y(\theta, \phi) = (-1)^{\ell} Y(\theta, \phi)$. Καταλήγουμε ότι

$$\hat{\mathbb{P}} |\ell, m\rangle = (-1)^{\ell} |\ell, m\rangle. \quad (11.81)$$

11.5 Σύνθεση στροφορμών

11.5.1 Βασικές ιδιότητες

Έστω ότι έχουμε δύο φυσικά συστήματα: το ένα περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_1 στον οποίο ορίζονται τελεστές στροφορμής ${}^1\hat{J}_i$ και το άλλο από ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_2 στον οποίο ορίζονται τελεστές στροφορμής ${}^2\hat{J}_i$. Θεωρούμε το σύνθετο σύστημα που περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ορίζουμε τους τελεστές

$$\hat{J}_i = {}^1\hat{J}_i \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_i. \quad (11.82)$$

Οι τελεστές \hat{J}_i ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής καθώς

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= [{}^1\hat{J}_i \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_i, {}^1\hat{J}_j \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_j] \\ &= [{}^1\hat{J}_i, {}^1\hat{J}_j] \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes [{}^2\hat{J}_i, {}^2\hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} {}^1\hat{J}_k \otimes \hat{I} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_k \\ &= i \sum_k \epsilon_{ijk} ({}^1\hat{J}_k \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_k) = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \end{aligned} \quad (11.81)$$

Αυτό σημαίνει ότι στο χώρο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, ορίζεται βάση από τα ιδιοδιανύσματα $|J, M\rangle$ των \hat{J}^2 και \hat{J}_3 , που ικανοποιούν τις σχέσεις

$$\hat{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1) |J, M\rangle \quad (11.82)$$

$$\hat{J}_3 |J, M\rangle = M |J, M\rangle. \quad (11.83)$$

Από την άλλη, στον \mathcal{H}_1 ορίζονται τα διανύσματα βάσης $|j_1, m_1\rangle_1$ και στον \mathcal{H}_2 τα διανύσματα βάσης $|j_2, m_2\rangle_2$, οπότε τα διανύσματα $|j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2$ ορίζουν μία βάση στο $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Για να βρούμε πώς σχετίζονται οι περιστροφές στο σύνθετο σύστημα, με τις περιστροφές στα επιμέρους συστατικά του, πρέπει να βρούμε τη σχέση μεταξύ των διανυσμάτων βάσης $|J, M\rangle$ και $|j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2$.

Προσοχή στο συμβολισμό. Οι τελεστές του σύνθετου συστήματος δεν κουβαλούν έξτρα δείκτες, ενώ οι τελεστές του κάθε υποσυστήματος έχουν ένα δείκτη 1 ή 2 που ξεχωρίζει σε ποιο υποσύστημα ανήκουν.

11.5.2 Τριγωνική ανισότητα

Χωρίς απώλεια γενικότητας εξετάζουμε την απλούστερη περίπτωση όπου ο \mathcal{H}_1 χαρακτηρίζεται από μία μοναδική τιμή του j_1 και ο \mathcal{H}_2 χαρακτηρίζεται από μία μοναδική τιμή του j_2 . Οποιαδήποτε πιο σύνθετη περίπτωση αναλύεται στις απλούστερες. Αν αναλύσουμε τους δύο χώρους Χίλμπερτ σε υπόχωρους με διαφορετικές τιμές των j_1 και j_2 , $\mathcal{H}_1 = \bigoplus_{j_1} \mathcal{H}_{j_1}$ και $\mathcal{H}_2 = \bigoplus_{j_2} \mathcal{H}_{j_2}$, θα ισχύει $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \bigoplus_{j_1, j_2} \mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$, οπότε ο υπολογισμός ανάγεται στην εξέταση των απλούστερων τανυστικών γινομένων $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$.

Οπότε θέτουμε, $\mathcal{H}_1 = \mathcal{C}^{2j_1+1}$ και $\mathcal{H}_2 = \mathcal{C}^{2j_2+1}$, οπότε $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{C}^{(2j_1+1)(2j_2+1)}$. Καθώς

$$\begin{aligned} \hat{J}_3 |j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2 &= {}^1\hat{J}_3 |j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2 + |j_1, m_1\rangle_1 \otimes {}^2\hat{J}_3 |j_2, m_2\rangle_2 \\ &= (m_1 + m_2) |j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2, \end{aligned} \quad (11.83)$$

οι αριθμοί m_1 και m_2 προστίθενται στον ορισμό της ολικής τιμής M ,

$$M = m_1 + m_2 \quad (11.84)$$

Αυτό σημαίνει ότι η μέγιστη τιμή του M είναι ίση με $j_1 + j_2$. Δηλαδή κανένα διάνυσμα $|J, M\rangle$, δεν έχει τιμή του M μεγαλύτερη από $j_1 + j_2$, και άρα η μέγιστη τιμή του J είναι ίση με $j_1 + j_2$. Δεδομένου ότι το M αλλάζει προσθαφαιρώντας μόνο ακέραιους αριθμούς, οι δυνατές τιμές του J θα είναι $j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2$ κοκ, μέχρι κάποια ελάχιστη τιμή του J ,

$$J_{min} = j_1 + j_2 - N \quad (11.85)$$

για κάποιον ακέραιο N . Στη συνέχεια αποδεικνύουμε ότι $J_{min} = |j_1 - j_2|$.

Δεδομένου ότι σε κάθε τιμή του J αντιστοιχούν $2J + 1$ διανύσματα βάσης, η διάσταση του $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ δίνεται από το άθροισμα

$$\sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} (2J + 1) = N + 1 + 2 \sum_{n=0}^N (J_{max} - n) = 2J_{max} + 1 + 2J_{max}N - N^2, \quad (11.86)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση άθροισης της αριθμητικής προόδου $\sum_{n=1}^N n = \frac{1}{2}N(N + 1)$. Το παραπάνω άθροισμα πρέπει να ισούται με τη διάσταση του $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, δηλαδή $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, οπότε καταλήγουμε στην εξίσωση

$$N^2 - 2(j_1 + j_2)N + 4j_1j_2 = 0, \quad (11.87)$$

με λύσεις $N_{\pm} = j_1 + j_2 \pm |j_1 - j_2|$. Η λύση N_+ οδηγεί σε $J_{min} < 0$, που δεν είναι αποδεκτή, άρα δεχόμαστε τη λύση N_- , που αντιστοιχεί σε $J_{min} = |j_1 - j_2|$. Καταλήγουμε λοιπόν ότι το J ικανοποιεί την ανισότητα

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (11.88)$$

Η Εξ. (11.88) καλείται τριγωνική ανισότητα για τη σύνθεση των στροφορμών.

Δίνουμε μερικά παραδείγματα: (α) για $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$, οι δυνατές τιμές του J είναι 0 και 1, (β) για $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$, οι δυνατές τιμές του J είναι $\frac{1}{2}$ και $\frac{3}{2}$, (γ) για $j_1 = 2, j_2 = \frac{1}{2}$, οι δυνατές τιμές του J είναι $\frac{3}{2}$ και $\frac{5}{2}$.

Σε επίπεδο χώρων Χίλμπερτ, η τριγωνική ανισότητα σημαίνει ότι.

$$C^{2j_1+1} \otimes C^{2j_2+1} = C^{2|j_1-j_2|+1} \oplus C^{2|j_1-j_2|+3} \oplus \dots \oplus C^{2(j_1+j_2)+1}. \quad (11.89)$$

Είναι χρήσιμο να συμβολίσουμε ως $2j+1$ το χώρο Χίλμπερτ C^{2j+1} που αντιστοιχεί σε τιμή j του σπιν ως $2j+1$. Οπότε, Η Εξ. (11.89) γράφεται ως

$$\underline{2j_1+1} \otimes \underline{2j_2+1} = \underline{2|j_1-j_2|+1} \oplus \underline{2|j_1-j_2|+3} \oplus \dots \oplus \underline{2(j_1+j_2)+1}. \quad (11.90)$$

Με αυτό το συμβολισμό, το παράδειγμα (α) παραπάνω σημαίνει ότι $\underline{2} \otimes \underline{2} = \underline{1} \oplus \underline{3}$, το παράδειγμα (β) ότι $\underline{3} \otimes \underline{2} = \underline{2} \oplus \underline{4}$ και το παράδειγμα (γ) ότι $\underline{5} \otimes \underline{2} = \underline{4} \oplus \underline{6}$.

Η τριγωνική ανισότητα εφαρμόζεται επίσης για την εύρεση των δυνατών τιμών του j σε συστήματα που αποτελούνται από περισσότερα των δύο υποσυστημάτων. Αν έχουμε τρία υποσυστήματα με κβαντικούς αριθμούς j_1, j_2 και j_3 , βρίσκουμε πρώτα τις δυνατές τιμές του κβαντικού αριθμού $j_{1,2}$ των δύο πρώτων μέσω της τριγωνικής ανισότητας. Στη συνέχεια εφαρμόζουμε την τριγωνική ανισότητα για τον κβαντικό αριθμό της ολικής στροφορμής J ως $|j_{1,2} - j_3| \leq J \leq j_{1,2} + j_3$, για κάθε τιμή του $j_{1,2}$.

Για παράδειγμα, έστω $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ και $j_3 = \frac{3}{2}$. Η τριγωνική ανισότητα δίνει $j_{1,2} = 0, 1$. Για $j_{1,2} = 0$, παίρνουμε $J = \frac{3}{2}$. Για $j_{1,2} = 1$ παίρνουμε $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$. Συνολικά οι δυνατές τιμές του J είναι $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$, με την τιμή $J = \frac{3}{2}$ να εμφανίζεται με δύο διαφορετικούς τρόπους. Άρα γράφουμε $\underline{2} \otimes \underline{2} \otimes \underline{4} = \underline{2} \oplus \underline{4} \oplus \underline{4} \oplus \underline{6}$.

Στη συνέχεια θα βρούμε τη σχέση των βάσεων $|J, M\rangle$, και $|j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2$ για ειδικές τιμές των j_1 και j_2 , και θα δώσουμε έναν αλγόριθμο εύρεσής τους για όλες τις δυνατές τιμές των j_1 και j_2 .

11.5.3 Περίπτωση $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$

Από την τριγωνική ανισότητα, οι δυνατές τιμές του J είναι 0 και 1. Με δεδομένη την Εξ. (11.84), ο μοναδικός τρόπος να πάρουμε την κατάσταση με $J = 1, M = -1$ είναι για $m_1 = m_2 = -\frac{1}{2}$. Οπότε

$$|1, -1\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2. \quad (11.91)$$

Στη συνέχεια δρούμε στο $|1, -1\rangle$ με τον αυξητικό τελεστή \hat{J}_+ του σύνθετου συστήματος,

$$\hat{J}_+ = {}^1\hat{J}_+ \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{J}_+. \quad (11.92)$$

Καταρχάς ισχύει ότι

$$\hat{J}_+|1, -1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle. \quad (11.93)$$

Αλλά επίσης

$$\begin{aligned} \hat{J}_+|1, -1\rangle &= {}^1\hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes {}^2\hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 \\ &= \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_2 \end{aligned} \quad (11.93)$$

Εξισώνοντας τις (11.93) και (11.93) βρίσκουμε

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_2 \right). \quad (11.94)$$

Στη συνέχεια δρούμε με το \hat{J}_+ πάνω στο $|1, 0\rangle$, για να βρούμε το $|1, 1\rangle$. Αλλά αυτή η διαδικασία δε χρειάζεται, γιατί για να βρούμε τις τιμές για θετικά απλά γράφουμε $-M, -m_1, -m_2$ αντί για M, m_1, m_2 στις προηγούμενες εκφράσεις. Οπότε

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2. \quad (11.95)$$

Βρήκαμε όλα τα διανύσματα με $J = 1$. Μας μένει να βρούμε το $|0, 0\rangle$ που είναι το μοναδικό διάνυσμα με $J = 0$. Αυτό θα γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός $a \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 + b \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_2$ προκειμένου να ισχύει η Εξ. (11.84). Δεδομένου ότι τα $|0, 0\rangle$ και $|1, 0\rangle$ αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές του \hat{J}^2 , ισχύει ότι $\langle 0, 0 | 1, 0 \rangle = 0$, οπότε $a + b = 0$. Μαζί με τη συνθήκη κανονικοποίησης $|a|^2 + |b|^2 = 1$, παίρνουμε $a = -b = \frac{1}{\sqrt{2}}$, οπότε

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_2 \right). \quad (11.96)$$

Παρατηρούμε ότι αν αλλάξουμε θέση στα κет του 1 και του 2, τα διανύσματα με $J = 1$ μένουν αναλλοίωτα, ενώ το $|0, 0\rangle$ πάει στο $-|0, 0\rangle$.

Χρησιμοποιώντας το συμβολισμό των κιούμπιτ $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |1\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |0\rangle$, το διάνυσμα (11.94) αντιστοιχεί στην κατάσταση $|\Psi_+\rangle$ και το διάνυσμα (11.96) στην κατάσταση $|\Psi_-\rangle$ της Εξ. (10.26). Και οι δύο καταστάσεις είναι μεγίστου εναγκαλισμού. Εν γένει, τα περισσότερα διανύσματα $|J, M\rangle$ αντιστοιχούν σε εναγκαλισμένες καταστάσεις των υποσυστημάτων. Εξάιρεση είναι τα διανύσματα με τις ακραίες τιμές των J, M , όπως τα $|1, \pm 1\rangle$ παραπάνω.

11.5.4 Περίπτωση $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$

Η τριγωνική ανισότητα δίνει $J = \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$. Ξεκινάμε από το διάνυσμα $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$ που είναι διαχωρίσιμο,

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |1, -1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (11.97)$$

Στη συνέχεια δρούμε με το \hat{J}_+ , όπως στην Εξ. (11.92). Παίρνουμε

$$\hat{J}_+ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle. \quad (11.98)$$

Αλλά επίσης ισχύει

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= {}^1\hat{J}_+ |1, -1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + |1, -1\rangle \otimes {}^2\hat{J}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \sqrt{2} |1, 0\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + |1, -1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.98)$$

Εξισώνοντας τις (11.98) και (11.98) παίρνουμε

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (11.99)$$

Τα διανύσματα $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ βρίσκονται αμέσως από συμμετρία,

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \quad (11.100)$$

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \quad (11.101)$$

Πάμε τώρα στα διανύσματα με $J = \frac{1}{2}$. Το διάνυσμα $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός $a|1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + b|1, -1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, με $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Η απαίτηση $\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 0$ δίνει $\sqrt{2}a + b = 0$, οπότε καταλήγουμε ότι $a = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $b = -\sqrt{\frac{2}{3}}$. Άρα

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \quad (11.102)$$

Από συμμετρία βρίσκουμε,

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (11.103)$$

11.5.5 Ο γενικός αλγόριθμος σύνθεσης στροφορών

Με βάση τα παραπάνω παραδείγματα, μπορούμε να περιγράψουμε τη γενική διαδικασία που μας επιτρέπει να κατασκευάζουμε τα διανύσματα $|J, M\rangle$ για γενικά j_1 και j_2 .

1. Ξεκινάμε από την ακραία κατάσταση με $J = j_1 + j_2$ και $M = -(j_1 + j_2)$. Αυτή είναι πάντα διαχωρίσιμη, ίση με $|j_1, -j_1\rangle_1 \otimes |j_2, -j_2\rangle_2$.
2. Δρώντας διαδοχικά με τον αυξητικό τελεστή \hat{J}_+ της Εξ. (11.92) και βρίσκουμε όλα τα διανύσματα με $J = j_1 + j_2$. Χρησιμοποιούμε συμμετρία μεταξύ θετικών και αρνητικών τιμών των M, m_1, m_2 για να συντομεύσουμε τον υπολογισμό.
3. Πάμε στο αμέσως μικρότερο J και υπολογίζουμε την κατάσταση $|J, -J\rangle$ απαιτώντας να είναι κάθετη σε οποιαδήποτε κατάσταση με $M = -J$ έχουμε βρει προηγουμένως.
4. Δρώντας διαδοχικά με τον αυξητικό τελεστή \hat{J}_+ και βρίσκουμε όλα τα διανύσματα με το ίδιο J .
5. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία, ελαττώνοντας το J κατά ένα κάθε φορά μέχρι να φτάσουμε στο $J = |j_1 - j_2|$.

Στο τέλος αυτής της διαδικασίας έχουμε εκφράσει κάθε διάνυσμα $|J, M\rangle$ ως γραμμικό συνδυασμό

$$|J, M\rangle = \sum_m C_{j_1, j_2, m}^{J, M} |j_1, m\rangle \otimes |j_2, M - m\rangle, \quad (11.104)$$

έχοντας προσδιορίσει τις σταθερές $C_{j_1, j_2, m}^{J, M}$ για όλα τα επιτρεπτά J, M, m για τα δεδομένα j_1 και j_2 . Οι σταθερές $C_{j_1, j_2, m}^{J, M}$ καλούνται *συντελεστές Γκλεμπς-Γκορντάν* (Glebsch-Gordan) για τη σύνθεση των στροφορών.

11.5.6 Ο τελεστής του εσωτερικού γινομένου

Σε πολλά προβλήματα μας ενδιαφέρει να βρούμε το αντίστοιχο του εσωτερικού γινομένου μεταξύ των διανυσμάτων της στροφορμής των υποσυστημάτων. Συγκεκριμένα θέλουμε να υπολογίσουμε τον τελεστή του εσωτερικού γινομένου $\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$, ο οποίος ορίζεται ως

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 := \sum_{i=1}^3 {}^1\hat{J}_i \otimes {}^2\hat{J}_i. \quad (11.105)$$

Υπολογίζοντας το $\hat{\mathbf{J}}^2$ για το σύνθετο σύστημα, βρίσκουμε από την Εξ. (11.82),

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = {}^1\hat{\mathbf{J}}^2 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes {}^2\hat{\mathbf{J}}^2 + 2 \sum_{i=1}^3 {}^1\hat{J}_i \otimes {}^2\hat{J}_i, \quad (11.106)$$

οπότε

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{J}}^2 - {}^1\hat{\mathbf{J}}^2 \otimes \hat{I} - \hat{I} \otimes {}^2\hat{\mathbf{J}}^2 \right). \quad (11.107)$$

Οπότε δρώντας στο διάνυσμα $|J, M\rangle$ (για δεδομένα j_1 και j_2) βρίσκουμε ότι

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 |J, M\rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)] |J, M\rangle. \quad (11.108)$$

Καθώς η παραπάνω ιδιοτιμή δεν εξαρτάται από το M , οι καταστάσεις $|J, M\rangle$ ορίζουν έναν ιδιόχωρο του $\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$ διάστασης $(2J+1)$.

Ερωτήσεις

1. Είναι το γινόμενο δύο αντιμοναδιαίων τελεστών αντιμοναδιαίος;
2. Πώς μετασχηματίζονται τα πλάτη μετάδοσης και ανάκλασης ενός σωματιδίου μέσα σε δυναμικό $V(x)$ κάτω από τους τελεστές αντιστροφής του χρόνου $\hat{\mathbb{T}}$ και αντιστροφής του χώρου $\hat{\mathbb{P}}$;
3. Ποιος είναι ο τελεστής περιστροφής κατά γωνία π γύρω από τον άξονα 3 για $j = 2$;
4. Τι θα συμπεράνουμε αν παρατηρηθεί κατάσταση επαλληλίας ακέραιου και ημιακέραιου j ;
5. Γράψτε τους μη-μηδενικούς συντελεστές Γκλεμπς-Γκορντάν που προκύπτουν από τους υπολογισμούς των Κεφ. 11.5.3 και 11.5.4.

Ασκήσεις

1. Αν οι μοναδιαίοι τελεστές \hat{U}_1 και \hat{U}_2 στο \mathcal{C}^2 αντιστοιχούν στους ορθογώνιους πίνακες Λ_1 και Λ_2 στο \mathbf{R}^3 μέσω της Εξ. (11.18), δείξτε ότι ο τελεστής $\hat{U}_1 \hat{U}_2$ αντιστοιχεί στον πίνακα $\Lambda_1 \Lambda_2$. [Χρησιμοποιήστε τη σχέση πληρότητας των μητρών του Πάουλι, Εξ. (6.13).]
2. Για ένα κιούμπι ορίζουμε τον τελεστή αντιστροφής στο χρόνο από την Εξ. (11.20). (α) Δείξτε ότι $\hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{\mathbb{T}}$ και ότι $\hat{\mathbb{T}}^2 = -\hat{I}$. (β) Βρείτε σε τι μετασχηματισμό πάνω στη σφαίρα του Μπλοχ αντιστοιχεί ο $\hat{\mathbb{T}}$. (γ) Δείξτε ότι $\hat{\mathbb{T}}^\dagger \hat{\sigma}_i \hat{\mathbb{T}} = -\hat{\sigma}_i$. (δ) Θεωρείστε Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Δείξτε ότι για να είναι αναλλοίωτη η εξίσωση Σρέντινγκερ κάτω από την αντιστροφή του χρόνου, το διάνυσμα \mathbf{n} πρέπει να μετασχηματίζεται σε $-\mathbf{n}$.
3. Βρείτε τον πίνακα περιστροφής κατά γωνία θ γύρω από τον άξονα με μοναδιαίο διάνυσμα $\underline{n} = (\frac{3}{5}, 0, \frac{-4}{5})$.

4. Δείξτε ότι αν ένας τελεστής μετατίθεται με δύο συνιστώσες της στροφορμής \hat{J}_i , τότε μετατίθεται και με την τρίτη.
5. Δείξτε ότι $Tr \hat{J}_i = 0$ και ότι $Tr(\hat{J}_i \hat{J}_j) = \frac{1}{3}j(j+1)(2j+1)\delta_{ij}$.
6. Υπολογίστε τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή $\hat{\mathbb{T}}$ όπως ορίζεται από την Εξ. (11.59).
7. (α) Δείξτε ότι $[\hat{x}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{x}_k$, $[\hat{p}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{p}_k$. (β) Δείξτε ότι $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = 0$ και ότι $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = 0$.
8. Υπολογίστε όλες τις σφαιρικές αρμονικές με $\ell \leq 2$, από την Εξ. (11.79).
9. Βρείτε τις πιθανότητες για τις δυνατές τιμές των \hat{l}_3 και \hat{l}^2 που αντιστοιχούν στη συνάρτηση $\psi(\theta, \phi) = C \sin \theta \cos \theta \sin \phi$ στη σφαίρα, όπου C σταθερά.
10. Στην κλασική μηχανική ένας στερεός στροφέας έχει Χαμιλτονιανή $H = \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij}^{-1} L_i L_j$, όπου I_{ij} είναι ο τανυστής ροπής αδράνειας και L_i οι συνιστώσες της στροφορμής του. Μπορεί να βρεθεί σύστημα αξόνων στο οποίο ο πίνακας I_{ij} είναι διαγώνιος με ιδιοτιμές I_1, I_2, I_3 , οπότε η κλασική Χαμιλτονιανή γράφεται ως $H = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2I_i} L_i^2$. Ο κβαντικός στερεός στροφέας είναι ένα κβαντικό σύστημα με Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2I_i} \hat{\ell}_i^2,$$

όπου \hat{L}_i οι τελεστές της τροχιακής στροφορμής. Βρείτε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής για την περίπτωση συμμετρικού στροφέα με $I_1 = I_2$.

11. Δείξτε ότι (α) $2 \otimes 2 \otimes 2 = 2 \oplus 2 \oplus 4$, (β) $2 \otimes 2 \otimes 3 = 1 \oplus 3 \oplus 3 \oplus 5$, (γ) $2 \otimes 2 \otimes 2 \otimes 2 = 1 \oplus 1 \oplus 3 \oplus 3 \oplus 3 \oplus 5$.
12. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα $|J, M\rangle$ της ολικής στροφορμής ενός σύνθετου συστήματος που αποτελείται από δύο υποσυστήματα με $j_1 = j_2 = 1$.
13. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα $|J, M\rangle$ της ολικής στροφορμής ενός σύνθετου συστήματος που αποτελείται από δύο υποσυστήματα με $j_1 = \frac{3}{2}$ και $j_2 = \frac{1}{2}$.
14. Σύνθετο σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση με $j_1 = 7, m_1 = -7$ και $j_2 = \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2}$. Ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης της ολικής στροφορμής και ποιες οι αντίστοιχες πιθανότητες;
15. Έστω σύστημα δύο στροφορμών $j_1 = j_2 = j$. Δείξτε ότι η πλήρως αντισυμμετρική κατάσταση

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} |j, m\rangle \otimes |j, -m\rangle \quad (11.108)$$

αντιστοιχεί σε $J = 0$.

16. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα $|J, M\rangle$ της ολικής στροφορμής ενός σύνθετου συστήματος που αποτελείται από τρία υποσυστήματα με $j_1 = j_2 = j_3 = \frac{1}{2}$.
17. Δύο σωματίδια με στροφορμή $j_1 = 1$ και $j_2 = \frac{3}{2}$, αλληλεπιδρούν μέσω μιας Χαμιλτονιανής $\hat{H} = g \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$, όπου g σταθερά. Βρείτε τις τιμές της ενέργειας και τους αντίστοιχους εκφυλισμούς.

Βιβλιογραφία

- Για απλές αποδείξεις του θεωρήματος του Βίγκνερ βλ. το άρθρο του Mouchet [207] και στο παράρτημα του κεφ. 2 στο βιβλίο του Weinberg [208]. Για περισσότερες λεπτομέρειες για τη στροφορμή στην κβαντική μηχανική, συμπεριλαμβανομένων και υπολογισμών των συντελεστών Γλεμπς-Γκορντάν και αντίστοιχων ποσοτήτων, βλ. την κλασική μονογραφία του Edmonds [210].

Κεφάλαιο 12

Συμμετρία στην κβαντική μηχανική: II. Θεωρία ομάδων

Χρειαζόμαστε κάποια υπερμαθηματικά των οποίων οι πράξεις είναι άγνωστες, όπως επίσης και οι ποσότητες μεταξύ των οποίων γίνονται οι πράξεις, και έναν υπερμαθηματικό που δεν ξέρει τι κάνει όταν κάνει αυτές τις πράξεις. Αυτά τα υπερμαθηματικά είναι η Θεωρία Ομάδων.

A. Έντινγκτον[211]

12.1 Βασικές έννοιες θεωρίας ομάδων

Στο Κεφ. 11, εξετάσαμε μερικά παραδείγματα συμμετριών και πώς εμφανίζονται στην κβαντική θεωρία. Σ' αυτό το κεφάλαιο, θα μπούμε σε περισσότερο βάθος στο θέμα της συμμετρίας. Καταρχάς παρατηρούμε ότι η έννοια της συμμετρίας ταυτίζεται με την έννοια του μετασχηματισμού: πρέπει να μπορούμε να περιγράψουμε την περιστροφή ενός αντικειμένου για να πούμε ότι χαρακτηρίζεται από τη συμμετρία των περιστροφών.

Ένας μετασχηματισμός ποτέ δεν είναι μεμονωμένος: πάντα ανήκει σε μία μεγαλύτερη οικογένεια μετασχηματισμών ιδίου τύπου. Μπορούμε να δράσουμε ένα μετασχηματισμό μετά από έναν άλλο και να πάρουμε ένα τρίτο, όπως και μπορούμε να αντιστρέψουμε ένα μετασχηματισμό και να επιστρέψουμε το σύστημα στην αρχική του κατάσταση. Αυτό σημαίνει ότι οι μετασχηματισμοί πρέπει να περιγραφούν από ένα αλγεβρικό αντικείμενο που κουβαλάει την πληροφορία των σχέσεων μεταξύ των μετασχηματισμών. Αυτό το αντικείμενο είναι η ομάδα.

12.1.1 Ορισμοί

Ορισμός 12.1 Ομάδα είναι ένα σύνολο G , στο οποίο ορίζεται μία πράξη που σε δύο στοιχεία $g_1, g_2 \in G$ αντιστοιχίζει ένα άλλο στοιχείο του G , το οποίο θα συμβολίζουμε ως $g_1 g_2$. Η πράξη πρέπει να έχει τις ακόλουθες ιδιότητες.

- (i) Προσεταιριστική ιδιότητα. $g_1(g_2 g_3) = (g_1 g_2)g_3$ για κάθε $g_1, g_2, g_3 \in G$.
- (ii) Μονάδα. Υπάρχει ένα στοιχείο $e \in G$ (η μονάδα), η οποία ικανοποιεί $eg = ge = g$ για κάθε $g \in G$.
- (iii) Υπαρξη αντιστρόφου. Για κάθε $g \in G$, υπάρχει ένα και μοναδικό στοιχείο $g^{-1} \in G$, έτσι ώστε $gg^{-1} = g^{-1}g = e$.

Υποομάδα H μιας ομάδας G είναι κάθε υποσύνολο του G , το οποίο είναι κλειστό ως προς την πράξη της G . Η ίδια η ομάδα G και το μονοσύνολο $\{e\}$ είναι τετριμμένα υποομάδες του G .

Καρτεσιανό γινόμενο δυο ομάδων G και H είναι η ομάδα με στοιχεία που ανήκουν στο $G \times H$ και πράξη οριζόμενη πράξη $(g_1, h_1)(g_2, h_2) = (g_1g_2, h_1h_2)$, για κάθε $g_1, g_2 \in G$ και $h_1, h_2 \in H$.

Αβελιανή ομάδα καλείται κάθε ομάδα στην οποία η πράξη της είναι μεταθετική, $g_1g_2 = g_2g_1$ για κάθε $g_1, g_2 \in G$.

Ομομορφισμός μεταξύ δύο ομάδων G και H καλείται κάθε συνάρτηση $f : G \rightarrow H$ η οποία ικανοποιεί τη σχέση $f(g_1)f(g_2) = f(g_1g_2)$, για κάθε $g_1, g_2 \in G$.

Ισομορφισμός μεταξύ δύο ομάδων G και H καλείται ένας ομομορφισμός που είναι επίσης ένα προς ένα και επί. Δύο ομάδες που συνδέονται με έναν ισομορφισμό έχουν ακριβώς την ίδια δομή ως ομάδες και μπορούν να θεωρηθούν ότι ταυτίζονται.

Μια ομάδα G με αριθμήσιμο πλήθος στοιχείων καλείται *διακριτή*. Αν τα στοιχεία της ομάδας G αντιστοιχούν σε ένα συνεχές σύνολο, τότε η ομάδα G καλείται *συνεχής ομάδα* ή ομάδα Λι (S. Lie). Οι διακριτές και οι συνεχείς ομάδες έχουν τόσο διαφορετικές ιδιότητες που πρέπει να εξεταστούν ξεχωριστά.

Ακολουθούν μερικά παραδείγματα διακριτών ομάδων.

1. Το σύνολο Z των ακέραιων αριθμών είναι ομάδα (Αβελιανή) ως προς τη συνήθη πράξη της πρόσθεσης.
2. Το σύνολο των n -στών ριζών της μονάδας $\{e^{ir\pi/n} | r = 0, 1, \dots, n-1\}$ είναι Αβελιανή ομάδα ως προς το συνήθη πολλαπλασιασμό μιγαδικών. Καλείται κυκλική ομάδα τάξης n και συμβολίζεται ως Z_n .
3. Έστω ότι έχουμε ένα σύνολο A_n με n διαχωρίσιμα στοιχεία. Συμβατικά διαλέγουμε $A_n = \{1, 2, \dots, n\}$. Μία συνάρτηση $\sigma : A_n \rightarrow A_n$ καλείται *μετάθεση* αν είναι ένα προς ένα και επί. Συμβολίζουμε μία μετάθεση σ με ένα διάνυσμα γραμμής με n στοιχεία $(\sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(n))$. Το σύνολο όλων των μεταθέσεων είναι μία ομάδα κάτω από τη σύνθεση συναρτήσεων και συμβολίζεται ως S_n . Η μονάδα είναι η ταυτοτική μετάθεση όπου κάθε στοιχείο του A_n απεικονίζεται στον εαυτό του. Η ομάδα μεταθέσεων S_n περιέχει $n!$ στοιχεία.

Ειδικότερα, η ομάδα S_2 έχει δύο στοιχεία, τη μονάδα $e = (1, 2)$ και το στοιχείο $a = (2, 1)$. Είναι ισομορφική με την ομάδα Z_2 .

Η ομάδα S_3 έχει 6 στοιχεία, τη μονάδα $e = (1, 2, 3)$ και τα στοιχεία $(3, 1, 2)$, $(2, 3, 1)$, $(2, 1, 3)$, $(3, 2, 1)$, $(1, 3, 2)$. Αν ορίσουμε $a = (3, 1, 2)$ και $b = (2, 1, 3)$ παρατηρούμε ότι $(2, 3, 1) = aa = a^2$, $(3, 2, 1) = ab$ και $(1, 3, 2) = a^2b$, δηλαδή τα στοιχεία a και b αρκούν για να ορίσουν όλα τα άλλα του S_3 μέσω πολλαπλασιασμών.

12.1.2 Συνεχείς ομάδες

Στη συνέχεια εξετάζουμε τα σημαντικότερα παραδείγματα συνεχών ομάδων. Χρειαζόμαστε πρώτα κάποιους ορισμούς.

Διάσταση μιας συνεχούς ομάδας G είναι ο αριθμός D των ανεξάρτητων πραγματικών αριθμών που απαιτούνται για να προσδιοριστεί μοναδικά ένα σημείο της ομάδας.

Μια συνεχής ομάδα G καλείται *συνεκτική* αν είναι δυνατόν να πάμε με συνεχή τρόπο από τη μονάδα σε οποιοδήποτε στοιχείο $g \in G$.

Μία συνεχής ομάδα καλείται *συμπαγής* αν τα στοιχεία της αντιστοιχίζονται σε ένα φραγμένο υποσύνολο του \mathbb{R}^n για κάποιο n .

Ακολουθεί η περιγραφή των σημαντικότερων συνεχών ομάδων.

1. Το σύνολο \mathbf{R}^n είναι ορίζει μια Αβελιανή συνεχή ομάδα ως προς τη συνήθη πρόσθεση διανυσμάτων..

2. Η γενική γραμμική ομάδα (general linear group) ως προς τους πραγματικούς $GL(n, \mathbf{R})$ ορίζεται από όλους τους πίνακες $n \times n$ με στοιχεία πραγματικούς αριθμούς που έχουν ορίζουσα διάφορη του μηδενός. Η πράξη της ομάδας είναι ο συνήθης πολλαπλασιασμός πινάκων. Χρειάζονται n^2 πραγματικές μεταβλητές προκειμένου να προσδιοριστεί ένα στοιχείο του $GL(n, \mathbf{R})$, γι' αυτό η διάσταση του $GL(n, \mathbf{R})$ είναι $D = n^2$.

Η ομάδα $GL(n, \mathbf{R})$ δεν είναι συμπαγής γιατί το μέτρο των πινάκων μπορεί να γίνει οσοδήποτε μεγάλο. Επίσης, δεν είναι συνεκτική, γιατί δεν υπάρχει συνεχής τρόπος μετάβασης από το πίνακα της μονάδας που έχει ορίζουσα ίση με 1 σε έναν πίνακα με αρνητική ορίζουσα, αφού η μηδενική τιμή της ορίζουσας έχει αποκλειστεί.

Ομοίως ορίζεται η γενική γραμμική ομάδα ως προς τους μιγαδικούς $GL(n, \mathbf{C})$, η οποία έχει διάσταση $D = 2n^2$. Η ομάδα $GL(n, \mathbf{C})$ είναι μη συμπαγής, αλλά είναι συνεκτική γιατί με τους μιγαδικούς αριθμούς μπορεί κανείς να περάσει από θετική ορίζουσα σε αρνητική χωρίς να χρειαστεί να περάσει από το 0.

3. Οι ειδικές γραμμικές ομάδες (special linear groups) $SL(n, \mathbf{R})$ και $SL(n, \mathbf{C})$ είναι υποομάδες των $GL(n, \mathbf{R})$ και $GL(n, \mathbf{C})$ αντίστοιχα, που περιέχουν πίνακες με ορίζουσα ίση με τη μονάδα. Η ομάδα $SL(n, \mathbf{R})$ έχει διάσταση $D = n^2 - 1$ και η ομάδα $SL(n, \mathbf{C})$ έχει διάσταση $D = 2(n^2 - 1)$. Και οι δύο είναι μη-συμπαγείς και συνεκτικές ομάδες.

4. Η ορθογώνια ομάδα $O(n)$ αποτελείται από όλους τους ορθογώνιους πραγματικούς πίνακες $n \times n$, δηλαδή από πίνακες O που ικανοποιούν τη σχέση $OO^T = 1$.

Η εξίσωση πινάκων $OO^T = 1$ αντιστοιχεί σε $n(n+1)/2$ εξισώσεις πραγματικών αριθμών, n από τα διαγώνια στοιχεία και $\frac{1}{2}(n^2 - n)$ από τα μη διαγώνια. Οπότε η διάσταση της ομάδας $O(n)$ είναι $D = n^2 - n(n+1)/2 = n(n-1)/2$. Η ορθογώνια ομάδα είναι συμπαγής, γιατί η σχέση ορισμού της σημαίνει ότι $\|O\|^2 \leq 1$ και άρα ότι $\|O\| \leq 1$.

Δεδομένου ότι $\det O^T O = (\det O)^2 = 1$, η ορίζουσα ενός ορθογώνιου πίνακα μπορεί να πάρει τιμές ± 1 . Αυτό σημαίνει η ορθογώνια ομάδα είναι μη συνεκτική, και αποτελείται από δύο κομμάτια που δεν ενώνονται συνεχώς και αντιστοιχούν στις δύο δυνατές τιμές της ορίζουσας.

Η ειδική ορθογώνια ομάδα $SO(n)$ είναι το υποσύνολο της $O(n)$ που αποτελείται από πίνακες με ορίζουσα ίση με τη μονάδα. Η διάσταση της ομάδας $SO(n)$ είναι $D = n(n-1)/2$. Η ομάδα $SO(n)$ είναι συμπαγής και συνεκτική.

5. Η απροσδιόριστη ορθογώνια ομάδα $O(p, q)$ είναι το σύνολο όλων των πινάκων $n \times n$, όπου $n = p + q$, οι οποίες ικανοποιούν τη σχέση $O\eta O^T = \eta$, όπου η είναι ο διαγώνιος πίνακας με p στοιχεία ίσα με +1 και q στοιχεία ίσα με -1. Η διάσταση της ομάδας $O(p, q)$ είναι $D = n(n-1)/2$. Η ομάδα $O(p, q)$ είναι μη-συμπαγής και μη συνεκτική.

Η ειδική απροσδιόριστη ορθογώνια ομάδα $SO(p, q)$ είναι το υποσύνολο της $O(p, q)$ που αποτελείται από πίνακες με ορίζουσα ίση με τη μονάδα. Η διάσταση της ομάδας $SO(p, q)$ είναι ίδια με της $O(p, q)$, δηλαδή $D = n(n-1)/2$. Η ομάδα $O(p, q)$ είναι μη-συμπαγής και συνεκτική.

6. Η μοναδιαία ομάδα $U(n)$ αποτελείται από όλους τους μοναδιαίους (μιγαδικούς) πίνακες $n \times n$. Η διάσταση της ομάδας $U(n)$ είναι $D = n^2$. Η μοναδιαία ομάδα είναι συμπαγής (γιατί η σχέση ορισμού της σημαίνει ότι $\|U\| \leq 1$) και συνεκτική.

Η ειδική μοναδιαία ομάδα $SU(n)$ είναι το υποσύνολο της $U(n)$ που αποτελείται από πίνακες με ορίζουσα ίση με τη μονάδα. Η ορίζουσα ενός μοναδιαίου πίνακα έχει μέτρο ίσο με τη μονάδα, δηλαδή αντιστοιχεί σε μία φάση $e^{i\theta}$. Η διάσταση της ομάδας $SU(n)$ είναι $D = n^2 - 1$, δεδομένου ότι

ο ορισμός της ειδικής μοναδιαίας μονάδας ισοδυναμεί με τη συνθήκη $\theta = 0$. Η ομάδα $SU(n)$ είναι συμπαγής και συνεκτική.

7. Η Ευκλείδεια ομάδα E_n ορίζεται από τους μετασχηματισμούς της μορφής $\underline{x} \rightarrow O\underline{x} + \underline{a}$, όπου $\underline{x}, \underline{a} \in \mathbf{R}^n$ και $O \in O(n)$. Η δράση δύο διαδοχικών μετασχηματισμών (O_1, \underline{a}_1) και (O_2, \underline{a}_2) πάνω στο \underline{x} δίνει $O_2O_1\underline{x} + O_2\underline{a}_1 + \underline{a}_2$, οπότε ο νόμος της ομάδας είναι

$$(O_2, \underline{a}_2)(O_1, \underline{a}_1) = (O_2O_1, O_2\underline{a}_1 + \underline{a}_2). \quad (12.1)$$

Η διάσταση της Ευκλείδειας ομάδας είναι $n(n-1)/2 + n = n(n+1)/2$.

Η ομάδα E_n περιγράφεται ισοδύναμα ως μία ομάδα πινάκων. Αποτελείται από πίνακες $(n+1) \times (n+1)$ της μορφής

$$C(O, \underline{a}) = \begin{bmatrix} O & \underline{a} \\ \underline{0} & 1 \end{bmatrix}. \quad (12.2)$$

Αμέσως διαπιστώνεται ότι ο πολλαπλασιασμός πινάκων δίνει την πράξη (12.1).

12.2 Άλγεβρες Λι

12.2.1 Βασικοί ορισμοί

Ένα βασικό χαρακτηριστικό των συνεχών ομάδων είναι ότι η πληροφορία που περιέχουν (ή έστω ένα μεγάλο μέρος της) κωδικοποιείται από τα στοιχεία τους που είναι κοντά στη μονάδα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι σε μία ομάδα Λ μπορεί να οριστεί η έννοια της παραγωγίσιμης και οδηγεί στον ορισμό της άλγεβρας Λι.

Έστω πίνακας A που ανοίγει σε κάποια ομάδα πινάκων G , και ο οποίος βρίσκεται κοντά στον πίνακα της μονάδας 1. Αν χρησιμοποιήσουμε μία πολύ μικρή παράμετρο ϵ για να ποσοτικοποιήσουμε πόσο κοντά ο A είναι στη μονάδα, γράφουμε $A = 1 + \epsilon T$. Καλούμε πίνακες όπως ο T γεννήτορες του G . Θυμίζουμε τους αντίστοιχους ορισμούς γεννητόρων για τις περιστροφές στο χώρο, στο Κεφ. 11.3.

Το γινόμενο δύο πινάκων στη γειτονιά της μονάδας $A_1 = 1 + \epsilon T_1$ και $A_2 = 1 + \epsilon T_2$ είναι

$$A_1A_2 = 1 + \epsilon(T_1 + T_2) + O(\epsilon^2), \quad (12.3)$$

δηλαδή μέχρι πρώτης τάξης σε ϵ ο πίνακας A_1A_2 βρίσκεται επίσης σε απόσταση ϵ από τη μονάδα και έχει γεννήτορα $T_1 + T_2$. Αυτό σημαίνει ότι ο πολλαπλασιασμός πινάκων κοντά στη μονάδα αντιστοιχεί σε πρόσθεση των αντιστοίχων γεννητόρων. Οπότε, η κλειστότητα μιας ομάδας ως προς τον πολλαπλασιασμό πινάκων αντιστοιχεί στην κλειστότητα του συνόλου των γεννητόρων ως προς την πρόσθεση.

Επίσης αν $A = 1 + \epsilon T + O(\epsilon^2) = e^{\epsilon T} + O(\epsilon^2)$, τότε $e^{\lambda T} = 1 + \epsilon \lambda T + O(\epsilon^2)$ για κάθε $\lambda \in \mathbf{R}$, δεδομένου ότι μπορούμε να διαλέξουμε το ϵ οσοδήποτε μικρό. Οπότε το σύνολο των γεννητόρων του G είναι κλειστό και ως το βαθμωτό πολλαπλασιασμό με πραγματικό αριθμό.

Για κάθε δύο πίνακες $A, B \in G$, ο πίνακας ABA^{-1} ανήκει επίσης στο G . Διαλέγοντας ως $B = 1 + \epsilon T$ έναν πίνακα κοντά στη μονάδα, συμπεραίνουμε ότι ο πίνακας ATA^{-1} είναι επίσης γεννήτορας του G . Διαλέγουμε $A = 1 + \epsilon S$ κοντά στη μονάδα, οπότε $A^{-1} = 1 - \epsilon S + O(\epsilon^2)$. Βρίσκουμε ότι

$$ATA^{-1} = 1 + \epsilon(ST - TS) + O(\epsilon^2), \quad (12.4)$$

δηλαδή ο πίνακας $[S, T] = ST - TS$ είναι επίσης γεννήτορας του G . Δηλαδή το σύνολο των γεννητόρων είναι κλειστός ως προς το μεταθέτη πινάκων.

Το σύνολο των γεννητόρων μιας συνεχούς ομάδας G καλείται *άλγεβρα* \mathfrak{L} της ομάδας G και συμβολίζεται ως \mathfrak{g} . Για παράδειγμα, γράφουμε $\mathfrak{sl}(n, \mathbf{C})$, $\mathfrak{o}(n)$ και $\mathfrak{su}(n)$ για τις άλγεβρες \mathfrak{L} των ομάδων $SL(n, \mathbf{C})$, $O(n)$ και $SU(n)$ αντίστοιχα. Μία άλγεβρα \mathfrak{L} \mathfrak{g} είναι ένας διανυσματικός χώρος ως προς τους πραγματικούς, διάστασης ίσης με τη διάσταση D της αντίστοιχης ομάδας G .

Έστω $A = 1 + \epsilon S$ κοντά στη μονάδα. Βάσει της Εξ. (5.67), $e^{\log(1+\epsilon S)} \simeq e^{\epsilon Tr S} = 1$, δηλαδή $Tr S = 0$. Συμπεραίνουμε ότι οι άλγεβρες \mathfrak{L} των ειδικών γραμμικών ομάδων $SL(n, \mathbf{R})$ και $SL(n, \mathbf{C})$ έχουν ως στοιχεία όλους τους πίνακες μηδενικού ίχνους, ως προς τους πραγματικούς και τους μιγαδικούς αντίστοιχα. Επίσης, η συνθήκη ορισμού μίας ορθογώνιας ομάδας $OO^T = 1$ για έναν πίνακα $O = 1 + \epsilon T$ κοντά στη μονάδα δίνει $1 + \epsilon(S + S^T) + O(\epsilon^2) = 1$, δηλαδή $S^T = -S$. Άρα η άλγεβρα \mathfrak{L} $\mathfrak{o}(n)$ αποτελείται από όλους τους αντισυμμετρικούς πίνακες $n \times n$. Η συνθήκη ορισμού της μοναδιαίας ομάδας $UU^\dagger = 1$ για έναν πίνακα $O = 1 + \epsilon T$ κοντά στη μονάδα δίνει $1 + \epsilon(S + S^\dagger) + O(\epsilon^2) = 1$, δηλαδή $S^\dagger = -S$. Άρα η άλγεβρα \mathfrak{L} $\mathfrak{u}(n)$ αποτελείται από όλους τους πίνακες $n \times n$ της μορφής iA , όπου A είναι αυτοσυζυγής πίνακας.

Για κάθε γεννήτορα $T \in \mathfrak{g}$ ορίζεται μία οικογένεια πινάκων $\exp(sT)$, με παράμετρο $s \in \mathbf{R}$. Δεδομένου ότι $\exp(sT) = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + \frac{s}{n}T)^n$ και ο πίνακας $1 + \frac{s}{n}T$ είναι ένα στοιχείο του G που βρίσκεται στη γειτονιά της μονάδας, τότε και ο πίνακας e^{sT} προσεγγίζεται από ένα γινόμενο n πινάκων $1 + \frac{s}{n}T$ που ανήκουν στο G και άρα ανήκει και ο ίδιος στο G . Σε ομάδες G που είναι συμπαγείς και συνεκτικές, όλα τα στοιχεία τους μπορούν να γραφούν στη μορφή e^{sT} . Επιπλέον η ταυτότητα BCH σημαίνει ότι γνωρίζοντας τους μεταθέτες των στοιχείων της άλγεβρας \mathfrak{L} μπορούμε να καθορίσουμε την πράξη της ομάδας G . Υπό αυτήν την έννοια η άλγεβρα \mathfrak{L} συμπυκνώνει την πληροφορία που εμπεριέχεται σε μία συνεχή ομάδα.

Ο μετασχηματισμός $T \rightarrow g^{-1}Tg$, για $g \in G$ και $T \in \mathfrak{g}$ ορίζει τη *συζυγή δράση* της ομάδας G στην άλγεβρα της και συμβολίζεται ως $ad_g(T)$. Μπορούμε ισοδύναμα να γράψουμε

$$ad_g(T) = \frac{d}{ds}(g^{-1}e^{sT}g)|_{s=0}. \quad (12.5)$$

12.2.2 Σταθερές δομές

Αφού η άλγεβρα \mathfrak{L} \mathfrak{g} είναι ένας διανυσματικός χώρος διάστασης D , μπορούμε να διαλέξουμε D γραμμικά ανεξάρτητους γεννήτορες T_a που να ορίζουν βάση, όπου $a = 1, 2, \dots, D$. Οπότε κάθε $S \in G$ γράφεται ως $S = \sum_a c_a T_a$ για κάποιους πραγματικούς αριθμούς c_a . Η επιλογή των T_a είναι εν πολλοίς αυθαίρετη και γίνεται με βάση κριτήρια βολικότητας στους υπολογισμούς.

Δεδομένου ότι μια άλγεβρα \mathfrak{L} είναι κλειστή ως προς το μεταθέτη, ο μεταθέτης δύο διανυσμάτων βάσης $[T_a, T_b]$ πρέπει να γράφεται κι αυτό ως γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων βάσης, οπότε

$$[T_a, T_b] = \sum_c f_{abc} T_c. \quad (12.6)$$

Οι ποσότητες f_{abc} καλούνται *σταθερές δομής* της άλγεβρας \mathfrak{L} \mathfrak{g} . Οι σταθερές είναι αντισυμμετρικές ως προς την εναλλαγή των δύο πρώτων δεικτών: $f_{abc} = -f_{bac}$.

Δεδομένου ότι οι μεταθέτες ικανοποιούν την ταυτότητα Γιακόμπι (κεφ. 5.4.1) $[[T_a, T_b], T_c] + [[T_c, T_a], T_b] + [[T_b, T_c], T_a] = 0$, οι σταθερές δομής ικανοποιούν την ταυτότητα

$$\sum_{d=1}^D \sum_{e=1}^D (f_{abd} f_{dce} + f_{cad} f_{dbe} + f_{bcd} f_{dae}) = 0. \quad (12.7)$$

Από τις σταθερές δομής ορίζουμε ένα συμμετρικό πίνακα $D \times D$

$$w_{ab} = \sum_{c=1}^D \sum_{d=1}^D f_{acd} f_{bdc}, \quad (12.8)$$

ο οποίος καλείται *μετρική Καρτάν* (Cartan) της άλγεβρας $\mathfrak{L}_i \mathfrak{g}$. Η μετρική Καρτάν είναι συμμετρικός πίνακας. Αν ορίσουμε τους πίνακες X_a με στοιχεία

$$(X_a)_{bc} = f_{abc}, \quad (12.9)$$

τότε η Εξ. (12.8) σημαίνει ότι $w_{ab} = \text{Tr}(X_a X_b) = \text{Tr}(X_b X_a) = w_{ba}$.

Χρήσιμος είναι ο ορισμός των τροποποιημένων σταθερών δομής

$$\bar{f}_{abc} = \sum_{d=1}^D f_{abd} w_{dc}, \quad (12.10)$$

οι οποίες είναι ολικά αντισυμμετρικές, καθότι εκτός από τη σχέση $\bar{f}_{abc} = -\bar{f}_{bac}$ ικανοποιούν και τη σχέση

$$\bar{f}_{abc} = -\bar{f}_{acb}. \quad (12.11)$$

Για να αποδείξουμε την Εξ. (12.11), παρατηρούμε ότι η Εξ. (12.7) είναι ισοδύναμη με την ακόλουθη σχέση για τους πίνακες X_a της Εξ. (12.9),

$$[X_a, X_b] = \sum_{c=1}^D f_{abc} X_c. \quad (12.12)$$

Οπότε $\text{Tr}([X_a, X_b] X_c) = \sum_{d=1}^D f_{abd} \text{Tr}(X_d X_c) = \sum_{d=1}^D f_{abd} w_{dc} = \bar{f}_{abc}$. Όστόσο, $\text{Tr}([X_a, X_b] X_c) = \text{Tr}(X_a X_b X_c - X_b X_a X_c) = \text{Tr}(X_c X_a X_b - X_a X_c X_b) = -\text{Tr}([X_a, X_c] X_b) = -\bar{f}_{acb}$. Έτσι προέκυψε η Εξ. (12.11).

12.2.3 Παραδείγματα

Στη συνέχεια, περιγράφουμε μερικές σημαντικές ομάδες χαμηλής διάστασης ($D \leq 3$) καθώς και τις αντίστοιχες άλγεβρες \mathfrak{L}_i .

1. Η ομάδα $SO(2)$. Τα στοιχεία της ομάδας $SO(2)$ είναι πίνακες της μορφής (11.8), οι οποίοι μελετήθηκαν στο Κεφ. 11.2.1. Σημειώνεται ότι η ομάδα $SO(2)$ είναι ισομορφική με την ομάδα $U(1)$, η οποία αντιστοιχεί στις φάσεις $U(\theta) = e^{i\theta}$, για $\theta \in [0, 2\pi)$.

2. Η ομάδα $SO(1, 1)$. Τα στοιχεία της ομάδας $SO(1, 1)$ είναι πίνακες της μορφής

$$O(u) = \begin{pmatrix} \cosh u & \sinh u \\ \sinh u & \cosh u \end{pmatrix}, \quad (12.13)$$

για $u \in \mathbf{R}$. Εύκολα δείχνεται ότι $O(u_1)O(u_2) = O(u_1 + u_2)$ και ότι η μονάδα αντιστοιχεί στο $u = 0$. Για τιμή του u κοντά στο 0, $O(u) = 1 + uK$, όπου

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.14)$$

Η άλγεβρα $\mathfrak{L}_i \mathfrak{so}(1, 1)$ περιέχει όλους τους πίνακες της μορφής λK για $\lambda \in \mathbf{R}$, άρα $\mathfrak{so}(1, 1) = \mathbf{R}$.

Σε αντίθεση με την $SO(2)$, η ομάδα $SO(1, 1)$ είναι μη συμπαγής, γιατί κάθε τιμή του $u \in \mathbf{R}$ αντιστοιχεί σε διαφορετικό πίνακα (u).

3. Η αφινική ομάδα Af_1 αποτελείται από όλους τους πραγματικούς πίνακες 2×2 της μορφής

$$V(a, b) = \begin{pmatrix} e^a & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12.15)$$

για $a, b \in \mathbf{R}$. Η πράξη της ομάδας είναι $V(a_2, b_2)V(a_1, b_1) = V(a_1 + a_2, e^{a_2}b_1 + b_2)$, και η μονάδα αντιστοιχεί σε $a = b = 0$.

Για $a, b \ll 1$ βρίσκουμε τους δύο γεννήτορες

$$K_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12.16)$$

οι οποίοι ικανοποιούν την άλγεβρα \mathfrak{Li} ,

$$[K_1, K_2] = K_2. \quad (12.17)$$

4. Η ομάδα $SO(3)$. Η ομάδα $SO(3)$ αντιστοιχεί στις περιστροφές ενός διανύσματος στον τρισδιάστατο χώρο. Την εξετάσαμε λεπτομερώς στο Κεφ. 11.3.2. Οι γεννήτορες της J_1, J_2, J_3 ορίζονται από την Εξ. (11.12) και ικανοποιούν τη σχέση μετάθεσης $[J_i, J_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} J_k$. Οι σταθερές δομής της άλγεβρας $\mathfrak{so}(3)$ ταυτίζονται με το πλήρες αντισυμμετρικό σύμβολο ϵ_{ijk} .

Η μετρική Καρτάν της $\mathfrak{so}(3)$ υπολογίζεται

$$w_{ij} = \sum_{kl} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jlk} = -2\delta_{ij}. \quad (12.18)$$

5. Η ομάδα $SU(2)$. Η άλγεβρα \mathfrak{Li} $\mathfrak{su}(2)$ αποτελείται από αντι-ερμιτιανούς πίνακες 2×2 με μηδενικό ίχνος και έχει διάσταση $D = 3$. Οι πίνακες $J_i = -\frac{i}{2}\sigma_i$, όπου σ_i είναι οι μήτρες του Πάουλι και $i = 1, 2, 3$, ορίζουν μία βάση στο $\mathfrak{su}(2)$. Από την Εξ. (6.4), βρίσκουμε ότι οι πίνακες J_i ικανοποιούν την Εξ. (11.13), δηλαδή οι άλγεβρες \mathfrak{Li} $\mathfrak{su}(2)$ και $\mathfrak{so}(3)$ ταυτίζονται.

Ωστόσο, οι ομάδες $SU(2)$ και $SO(3)$ δεν είναι ακριβώς ισομορφικές. Η Εξ. (11.18) δείχνει ότι δύο διαφορετικά στοιχεία U και $-U$ του $SU(2)$ αντιστοιχούν σε ένα στοιχείο του $SO(3)$.

6. Η ομάδα $SL(2, \mathbf{R})$. Το γενικό στοιχείο της άλγεβρας \mathfrak{Li} $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{R})$ είναι ένας πραγματικός πίνακας 2×2 με μηδενικό ίχνος. Διαλέγουμε ως βάση της $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{R})$ τους πίνακες

$$K_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, K_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, K_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.19)$$

Βρίσκουμε τις σχέσεις μετάθεσης $[K_1, K_2] = K_3$, $[K_3, K_1] = -K_2$ και $[K_2, K_3] = K_1$, οπότε οι μη μηδενικές σταθερές δομής της $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{R})$ είναι οι $f_{123} = 1$, $f_{312} = -1$, $f_{231} = 1$.

Η μετρική Καρτάν της $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{R})$ είναι

$$w = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (12.20)$$

7. Η ομάδα E_2 . Τα στοιχεία της E_2 αντιστοιχούν σε πίνακες

$$A(\theta, a, b) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & a \\ -\sin \theta & \cos \theta & b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12.21)$$

όπου $\theta \in [0, 2\pi)$, $a, b \in \mathbf{R}$. Θέτοντας $\theta, a, b \ll 1$, βρίσκουμε τους γεννήτορες της άλγεβρας \mathfrak{Li} \mathfrak{e}_2

$$K_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, K_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.22)$$

Οι σχέσεις μετάθεσης είναι

$$[K_1, K_2] = K_2, [K_1, K_3] = K_3, [K_2, K_3] = 0. \quad (12.23)$$

12.3 Αναπαραστάσεις ομάδων

12.3.1 Βασικές έννοιες

Η περιγραφή των συμμετριών όπως δίνεται μέσα από τον ορισμό των ομάδων είναι σε ένα αφηρημένο μαθηματικό επίπεδο. Για να εξετάσουμε πώς οι συμμετρίες εμφανίζονται σε κβαντικά συστήματα, πρέπει να τις αναπαραστήσουμε με τα κατάλληλα αντικείμενα σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Σύμφωνα με το θεώρημα του Βίγκνερ, αυτά τα αντικείμενα είναι μοναδιαίοι ή αντιμοναδιαίοι τελεστές, ενδεχομένως πολλαπλασιασμένοι με μία φάση.

Έτσι οδηγούμαστε στο να ορίσουμε ως *προβολική αναπαράσταση* μίας ομάδας G ως μία συνάρτηση που σε κάθε $g \in G$ αντιστοιχίζει ένα μοναδιαίο ή αντιμοναδιαίο τελεστή $\hat{V}(g)$, έτσι ώστε για κάθε $g_1, g_2 \in G$,

$$\hat{V}(g_1)\hat{V}(g_2) = \hat{V}(g_1g_2)e^{i\phi(g_1, g_2)}, \quad (12.24)$$

όπου $e^{i\phi}$ είναι μια φάση που εξαρτάται από τα g_1 και g_2 . Αν η ομάδα G είναι συνεχής απαιτούμε επιπλέον η απεικόνιση $g \rightarrow \hat{V}(g)$ να είναι συνεχής και διαφορίσιμη.

Το όνομα "προβολική" για την αναπαράσταση χρησιμοποιείται επειδή η φάση απαλείφεται όταν οι τελεστές $\hat{V}(g)$ δρουν σε προβολικούς τελεστές $|\psi\rangle\langle\psi|$.

$$\hat{V}(g_1)\hat{V}(g_2)|\psi\rangle\langle\psi|\hat{V}^\dagger(g_2)\hat{V}^\dagger(g_1) = \hat{V}(g_1g_2)|\psi\rangle\langle\psi|\hat{V}^\dagger(g_1g_2). \quad (12.25)$$

Μπορούμε να αλλάξουμε τους τελεστές $\hat{V}(g)$ κατά μία φάση $\theta(g)$, ορίζοντας $\hat{U}(g) = \hat{V}(g)e^{i\theta(g)}$. Τότε η Εξ. (12.24) γράφεται ως

$$\hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2) = \hat{V}(g_1g_2) \exp[i\phi(g_1, g_2) - \theta(g_1g_2) + \theta(g_1) + \theta(g_2)]. \quad (12.26)$$

Αν η φάση ϕ μπορεί να γραφεί ως $\phi(g_1, g_2) = \theta(g_1g_2) - \theta(g_1) - \theta(g_2)$, για κάποια συνάρτηση $\theta(g)$, τότε μπορεί να απορροφηθεί από τον ορισμό των τελεστών $\hat{U}(g)$, οι οποίοι ικανοποιούν

$$\hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2) = \hat{U}(g_1g_2), \quad (12.27)$$

για κάθε $g_1, g_2 \in G$. Σ' αυτήν την περίπτωση οι τελεστές $\hat{U}(g)$ ορίζουν μία *μοναδιαία* (ή αντιμοναδιαία) *αναπαράσταση* της G στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Προφανείς συνέπειες της Εξ. (12.27) είναι ότι $\hat{U}(e) = \hat{I}$ και $\hat{U}(g^{-1}) = \hat{U}^{-1}(g)$.

Μόνο οι διακριτές ομάδες έχουν αντιμοναδιαίες αναπαραστάσεις. Σε μια συνεχή ομάδα G υπάρχουν στοιχεία της μορφής e^{sT} , για $T \in \mathfrak{g}$ και $s \in \mathbf{R}$. Γράφοντας $\hat{U}(s) = \hat{U}(e^{sT})$, παρατηρούμε ότι $\hat{U}(s) = \hat{U}(\frac{1}{2}s)\hat{U}(\frac{1}{2}s)$, οπότε αν ο $\hat{U}(\frac{1}{2}s)$ είναι αντιμοναδιαίος, ο $\hat{U}(s)$ θα είναι μοναδιαίος. Άρα δεν μπορεί ο $\hat{U}(s)$ να είναι αντιμοναδιαίος για όλες τις τιμές του s . Καθώς αντιμοναδιαίες αναπαραστάσεις εμφανίζονται μόνο σε σχέση με τη συμμετρία χρονικής αντιστροφής, θα δώσουμε έμφαση στις μοναδιαίες αναπαραστάσεις συνεχών ομάδων.

Έστω ότι μια συνεχής ομάδα G διάστασης D που έχει μία μοναδιαία αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Για κάθε $T \in \mathfrak{g}$, ορίζουμε έναν αυτοσυζυγή τελεστή

$$\hat{T} := -i \frac{\partial}{\partial s} \hat{U} [\exp(sT)]_{s=0}. \quad (12.28)$$

ο οποίος καλείται γεννήτορας της αναπαράστασης της G στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Λέμε ότι ο τελεστής $\frac{1}{i}\hat{T}$ αναπαριστά το στοιχείο T της άλγεβρας \mathfrak{L} , κάτι που καταδεικνύεται στο ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 12.2 $e^{is\hat{T}} = \hat{U}(e^{sT})$.

Απόδειξη. Γράφουμε $\hat{U}(s) = \hat{U}[\exp(sT)]$. Υπολογίζουμε το λόγο $\frac{1}{\delta s}[\hat{U}(s+\delta s) - \hat{U}(s)] = \frac{1}{\delta s}[\hat{U}(s+\delta s)\hat{U}^{-1}(s) - \hat{I}]\hat{U}(s)$. Ισχύει ότι $\hat{U}(s+\delta s)\hat{U}^{-1}(s) = \hat{U}[e^{(s+\delta s)T} - e^{-sT}] = \hat{U}[e^{\delta s T}]$, οπότε παίρνοντας το όριο $\delta s \rightarrow 0$ και χρησιμοποιώντας την Εξ. (12.28) βρίσκουμε ότι

$$i\frac{\partial}{\partial s}\hat{U}_s = \hat{T}\hat{U}_s,$$

από το οποίο προκύπτει άμεσα το ζητούμενο.

Έστω μία βάση T_a , $a = 1, \dots, D$ της άλγεβρας \mathfrak{L} . Οι τελεστές \hat{T}_a που ορίζονται σύμφωνα με την Εξ. (12.28) ικανοποιούν

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i \sum_{c=1}^D f_{abc} \hat{T}_c, \quad (12.28)$$

όπου f_{abc} οι σταθερές δομής της \mathfrak{g} . Προσοχή, η μιγαδική μονάδα i εμφανίζεται στην Εξ. (12.28) επειδή η αντιστοίχιση είναι μεταξύ του $\in \mathfrak{g}$ και του τελεστή $\frac{1}{i}\hat{T}$ στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} .

Μια προβολική αναπαράσταση μίας συνεχούς ομάδας δεν οδηγεί σε ακριβή αναπαράσταση της αντίστοιχης άλγεβρας \mathfrak{L} . Ο παράγοντας της φάσης στην Εξ. (12.24) σηματοδοτεί την ύπαρξη ενός επιπλέον όρου που είναι πολλαπλάσιο της μονάδας, έτσι ώστε

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i \sum_{c=1}^D f_{abc} \hat{T}_c + ic_{ab} \hat{I}, \quad (12.29)$$

για κάποια πραγματική σταθερά c . Η Εξ. (12.29) ορίζει μία *κεντρική επέκταση* της άλγεβρας \mathfrak{L} και τα μη μηδενικά στοιχεία του αντισυμμετρικού πίνακα c_{ab} καλούνται *κεντρικά φορτία* της αναπαράστασης.

Το θεώρημα 12.2 μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τη δράση των μοναδιαίων πινάκων $\hat{U}(g)$ πάνω στους γεννήτορες \hat{T} . μας επιτρέπει να γράψουμε $\hat{U}^\dagger(g)e^{is\hat{T}}\hat{U}(g) = \hat{U}(g^{-1}e^{sT}g)$, για κάθε $g \in G$. Παραγωγίζοντας ως προς s και χρησιμοποιώντας την Εξ. (12.5) βρίσκουμε

$$\hat{U}^\dagger(g)e^{is\hat{T}}\hat{U}(g) = \widehat{ad_g T}, \quad (12.30)$$

όπου ως $\widehat{ad_g T}$ συμβολίσαμε το γεννήτορα της αναπαράστασης που αντιστοιχεί στο στοιχείο $ad_g T \in \mathfrak{g}$.

Έστω δύο μοναδιαίες αναπαραστάσεις $\hat{U}_1(g)$ και $\hat{U}_2(g)$ της ομάδας G στους χώρους Χίλμπερτ $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Λέμε ότι οι αναπαραστάσεις $\hat{U}_1(g)$ και $\hat{U}_2(g)$ στον \mathcal{H} είναι *μοναδιαία ισοδύναμες* αν υπάρχει μοναδιαίος τελεστής $\hat{V} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, έτσι ώστε

$$\hat{V}\hat{U}_1(g)\hat{V}^\dagger = \hat{U}_2(g) \quad (12.31)$$

για κάθε $g \in G$.

Αν υπάρχει μοναδιαίος τελεστής μεταξύ δύο χώρων Χίλμπερτ, οι χώροι είναι ισομορφικοί. Αυτό σημαίνει ότι από τα στοιχεία πίνακα του $\hat{U}_1(g)$ μπορούμε να πάρουμε τα στοιχεία πίνακα του $\hat{U}_2(g)$ με μία αλλαγή βάσης. Δύο μοναδιαία ισοδύναμες αναπαραστάσεις περιγράφουν ουσιαστικά το ίδιο φυσικό σύστημα.

12.3.2 Μη αναγώγιμες αναπαραστάσεις

Έστω μοναδιαία αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ μίας ομάδας G σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ καλείται *αναγώγιμη*, αν $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, και σε κάθε υπόχωρο $\mathcal{H}_{1,2}$ ορίζεται μία μοναδιαία αναπαράσταση της G .

Μια *μη-αναγώγιμη* μοναδιαία αναπαράσταση δεν μπορεί να αναλυθεί σε απλούστερες. Περιγράφει το μικρότερο δυνατό κβαντικό σύστημα που φέρει τη συμμετρία που αντιστοιχεί στην G , το άτομο της συμμετρίας.

Θεώρημα 12.3 Λήμμα του Σουρ (*Schur*). Έστω μία μοναδιαία αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ μίας ομάδας G σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Αν ο μόνος αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} που ικανοποιεί τη σχέση $[\hat{A}, \hat{U}(g)] = 0$ για κάθε $g \in G$ είναι της μορφής $\hat{A} = \lambda \hat{I}$, για κάποιο $\lambda \in \mathbf{R}$, η αναπαράσταση είναι μη αναγώγιμη.

Απόδειξη. Έστω ότι υπάρχει αυτοσυζυγής τελεστής \hat{A} που ικανοποιεί τη σχέση $[\hat{A}, \hat{U}(g)] = 0$ για κάθε $g \in G$ και δεν είναι πολλαπλάσιο του \hat{I} . Τότε έχει τουλάχιστον ένα φασματικό προβολέα $\hat{P} \neq \hat{I}$, ο οποίος θα πρέπει επίσης ικανοποιεί τη σχέση $[\hat{P}, \hat{U}(g)] = 0$ για κάθε $g \in G$. Στον υπόχωρο που προβάλλει ο \hat{P} , οι τελεστές $\hat{P}\hat{U}(g)\hat{P}$ ορίζουν μία μοναδιαία αναπαράσταση της ομάδας G , αφού $(\hat{P}\hat{U}(g_1)\hat{P})(\hat{P}\hat{U}(g_2)\hat{P}) = \hat{P}\hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2)\hat{P} = \hat{P}\hat{U}(g_1g_2)\hat{P}$. Άρα η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ είναι αναγώγιμη.

Για μια συνεχή ομάδα G , το λήμμα του Σουρ σημαίνει ότι σε μια αναγώγιμη αναπαράσταση, ο μόνος τελεστής \hat{A} που μετατίθεται με όλους τους γεννήτορες \hat{T} είναι πολλαπλάσιο της μονάδας.

Τελεστής Κάζιμιρ (Casimir) ή απλά Κάζιμιρ, μίας μοναδιαίας αναπαράστασης $\hat{U}(g)$ της ομάδας G καλείται κάθε αυτοσυζυγής τελεστής \hat{K} που ικανοποιεί τη σχέση $[\hat{K}, \hat{U}(g)] = 0$ για κάθε $g \in G$ και δεν είναι πολλαπλάσιο της μονάδας. Σε συνεχή ομάδα ένας τελεστής Κάζιμιρ μετατίθεται με όλους τους γεννήτορες της αναπαράστασης.

Το λήμμα του Σουρ μας λέει ότι μία μη-αναγώγιμη αναπαράσταση αντιστοιχεί σε ιδιόχωρο όλων των τελεστών Κάζιμιρ. Οπότε για να προσδιορίσουμε όλες τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις μίας ομάδας, πρέπει να βρούμε τους τελεστές Κάζιμιρ σε μια πολύ γενική αναπαράσταση της ομάδας¹ και να προσδιορίσουμε τους ιδιόχωρους τους.

Σε μια συνεχή ομάδα, ορίζεται ένας Κάζιμιρ ως τετραγωνική συνάρτηση των γεννητόρων. Έστω ο τελεστής

$$\hat{K} = \sum_{a,b} (w^{-1})_{ab} \hat{T}_a \hat{T}_b, \quad (12.32)$$

όπου w^{-1} ο αντίστροφος πίνακας της μετρικής Καρτάν.

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (12.28) βρίσκουμε ότι

$$[\hat{K}, \hat{T}_a] = i \sum_{bcd} [(w^{-1})_{cd} f_{dab} + (w^{-1})_{db} f_{dac}] \hat{T}_c \hat{T}_b. \quad (12.33)$$

Ο πρώτος όρο εντός της παρένθεσης στην Εξ. (12.33) δίνει

$$\begin{aligned} \sum_d (w^{-1})_{cd} f_{dab} &= - \sum_d f_{adb} (w^{-1})_{cd} = - \sum_{def} f_{ade} w_{ef} (w^{-1})_{fb} (w^{-1})_{cd} \\ &= - \sum_{df} \bar{f}_{adf} (w^{-1})_{fb} (w^{-1})_{cd} = \sum_{df} \bar{f}_{afd} (w^{-1})_{fb} (w^{-1})_{cd} = \sum_{df} \bar{f}_{afd} (w^{-1})_{dc} (w^{-1})_{fb} \\ &= \sum_f f_{afc} (w^{-1})_{fb} = - \sum_d f_{dac} (w^{-1})_{db}, \end{aligned} \quad (12.32)$$

¹Για παράδειγμα, θεωρούμε το χώρο Χίλμπερτ $L^2((G))$ για κάποιο κατάλληλο μέτρο ολοκλήρωσης πάνω στην ομάδα G και ορίζουμε $\hat{U}(g)\psi(g_1) = \psi(gg_1)$ για κάθε $g, g_1 \in G$.

όπου στο τελευταίο βήμα απλά αλλάξαμε το όνομα του δείκτη ως προς τον οποίο αθροίζουμε. Οπότε καταλήγουμε ότι $[\hat{K}, \hat{T}_a] = 0$. Άρα ο τελεστής (12.32) είναι Κάζιμιρ.

Για τις ομάδες $SU(2)$ και $SO(3)$, $\hat{K} = -\frac{1}{2}\hat{J}^2$, όπως είδαμε στο Κεφ. 11.

12.4 Κινηματικές συμμετρίες

12.4.1 Η ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ

Η πρώτη εμφάνιση ομάδας συμμετρίας στην κβαντική μηχανική έγινε με την ίδια την εργασία του Χάιζενμπεργκ που θεμελίωσε την κβαντική θεωρία [36]. Η θεμελιώδης σχέση μετάθεσης (για ένα σωματίο σε μία διάσταση)

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hat{I}, \quad (12.33)$$

σε συνδυασμό με τις τετριμμένες σχέσεις $[\hat{x}, \hat{I}] = [\hat{p}, \hat{I}] = 0$ ορίζουν την αναπαράσταση μίας συνεχούς ομάδας με γεννήτορες \hat{x} , \hat{p} και \hat{I} , η οποία καλείται ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ H_1 . Ένα στοιχείο της ομάδας αντιστοιχεί στον μοναδιαίο τελεστή

$$\hat{U}(a, b, c) = \exp[ia\hat{x} - ib\hat{p} + ic\hat{I}]. \quad (12.34)$$

Η σχέση πολλαπλασιασμού Εξ. (5.21) που είχαμε βρει στο Κεφ. 5.4.2 συνεπάγεται ότι

$$\hat{U}(a_1, b_1, c_1)\hat{U}(a_2, b_2, c_2) = \hat{U}\left[a_1 + a_2, b_1 + b_2, c_1 + c_2 + \frac{1}{2}(a_2b_1 - a_1b_2)\right]. \quad (12.35)$$

Δηλαδή η ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ έχει ως στοιχεία $(a, b, c) \in \mathbf{R}^3$ και πράξη

$$(a_1, b_1, c_1)(a_2, b_2, c_2) = (a_1 + a_2, b_1 + b_2, c_1 + c_2 + \frac{1}{2}(a_2b_1 - a_1b_2)). \quad (12.36)$$

Η n -διάστατη ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ H_n έχει $2n + 1$ γεννήτορες, n τελεστές θέσεις \hat{x}_i , n τελεστές ορμής \hat{p}_i και τη μονάδα \hat{I} (όπου $i = 1, 2, \dots, n$). Οι σχέσεις μετάθεσης είναι

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}\hat{I}, \quad (12.37)$$

και οι αντίστοιχοι τελεστές Βάουλ $\hat{U}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, c) = \exp[i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{x}} - i\mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{p}} + ic\hat{I}]$ ικανοποιούν τις σχέσεις

$$\hat{U}(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, c_1)\hat{U}(\mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, c_2) = \hat{U}\left(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2, c_1 + c_2 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2)\right) \quad (12.38)$$

οι οποίες εύκολα αποδεικνύονται χρησιμοποιώντας την ταυτότητα BCH. Δηλαδή η ομάδα H_n έχει στοιχεία $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, c) \in \mathbf{R}^{2n+1}$ και πράξη

$$(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, c_1)(\mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, c_2) = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2, c_1 + c_2 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2)). \quad (12.39)$$

Όπως έχουμε δει, η πιο συνήθης αναπαράσταση της ομάδας H_n είναι η γνωστή αναπαράσταση Σρέντινγκερ, στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^n, d^n x)$, όπου $\hat{x}_i\psi(\mathbf{x}) = x_i\psi(\mathbf{x})$ και $\hat{p}_i\psi(\mathbf{x}) = -i\frac{\partial}{\partial x_i}\psi(\mathbf{x})$.

Η αναπαράσταση Σρέντινγκερ είναι μη αναγώγιμη. Για να το επιβεβαιώσουμε, εξετάζουμε την περίπτωση $n = 1$, η γενίκευση είναι άμεση. Τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα του τελεστή θέσης \hat{x} στο $L^2(\mathbf{R})$ δεν είναι εκφυλισμένα. Άρα αν ένας τελεστής \hat{A} μετατίθεται με το \hat{x} , μπορεί να γραφεί ως $f(\hat{x})$ για κάποια συνάρτηση f . Οπότε $[\hat{A}, \hat{p}] = [f(\hat{x}), \hat{p}] = if'(\hat{x})$. Ο \hat{A} μετατίθεται και με το \hat{p}

μόνο αν $f' = 0$, δηλαδή αν η f είναι σταθερή. Άρα ο μόνος τελεστής που μετατίθεται με όλους τους γεννήτορες είναι πολλαπλάσιο της μονάδας. Από το λήμμα του Σουρ η αναπαράσταση Σρέντινγκερ είναι μη αναγώγιμη.

Βέβαια η αναπαράσταση Σρέντινγκερ δεν είναι μοναδική. Για παράδειγμα, μπορεί κανείς να θεωρήσει την αναπαράσταση ορμής στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^n, d^n p)$, όπου $\hat{x}\psi(\mathbf{p}) = i\frac{\partial}{\partial p_i}\psi(\mathbf{p})$ και $\hat{p}\psi(\mathbf{p}) = p_i\psi(\mathbf{p})$. Για την ακρίβεια, υπάρχουν άπειρες μοναδιαίες αναπαραστάσεις, οπότε τίθεται το ερώτημα κατά πόσο οι φυσικές προβλέψεις εξαρτώνται από την επιλογή της αναπαράστασης.

Η απάντηση είναι αρνητική (ευτυχώς!) και τεκμηριώνεται από ένα σημαντικό θεώρημα των Στόουν (M. Stone) [78, 79] και φον Νόιμαν [206, 80].

Θεώρημα 12.4 Όλες οι αναπαραστάσεις της ομάδας H_n είναι μοναδιαία ισοδύναμες με την αναπαράσταση Σρέντινγκερ.

Το θεώρημα Στόουν-φον Νόιμαν είναι εξαιρετικά μεγάλης σημασίας γιατί επιβεβαίωσε με αυστηρό τρόπο την πλήρη ισοδυναμία της μηχανικής πινάκων του Χάιζενμπεργκ με την κυματομηχανική του Σρέντινγκερ. Σημαίνει ότι μπορούμε να επιλέγουμε οποιαδήποτε αναπαράσταση της ομάδας H_n μας είναι πιο βολική για ένα δεδομένο υπολογισμό. Τονίζω ότι το θεώρημα Στόουν-φον Νόιμαν αφορά πεπερασμένες τιμές του n . Δεν ισχύει για την ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ με άπειρους γεννήτορες, για την οποία υπάρχουν πολλές αναπαραστάσεις που δεν είναι μοναδιαία ισοδύναμες. Μια σκιαγράφιση της απόδειξης του θεωρήματος Στόουν-φον Νόιμαν δίνεται στο ένθετο 12.1.

Ένθετο 12.1. Απόδειξη του θεωρήματος Στόουν-φον Νόιμαν

Θα δώσουμε μία μη τεχνική απόδειξη του θεωρήματος Στόουν-φον Νόιμαν για $n = 1$. Η γενίκευση για οποιαδήποτε πεπερασμένη τιμή του n είναι άμεση.

Έστω \hat{Q} και \hat{P} τελεστές σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} που ικανοποιούν τη σχέση μετάθεσης $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$. Ισοδύναμα έστω μοναδιαίοι τελεστές $\hat{U}(a, b, c) = \exp[ia\hat{Q} - ib\hat{P} + ic\hat{I}]$ στο \mathcal{H} που ικανοποιούν τον κανόνα πολλαπλασιασμού (12.35). Θα δείξουμε ότι $\mathcal{H} = \bigoplus_r K_r$, όπου σε κάθε υπόχωρο K_r υπάρχει μία μοναδιαία αναπαράσταση της ομάδας H_1 , μοναδιαία ισοδύναμη με την αναπαράσταση Σρέντινγκερ.

Καταρχάς ορίζουμε τους αυξητικούς και μειωτικούς τελεστές $\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})$, $\hat{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P})$, που ικανοποιούν τη σχέση μετάθεσης $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = \hat{I}$. Ορίζουμε τους τελεστές $\hat{V}(w) = \exp(w\hat{A}^\dagger - w^*\hat{A})$ που ταυτίζονται με τους $\hat{U}(a, b, 0)$ για $w = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + ib)$.

Στο Κεφ. 6.2.1 δείξαμε ότι ο μειωτικός τελεστής \hat{a} έχει τουλάχιστον μία μηδενική ιδιοτιμή. Η ανάλυση βασίστηκε αποκλειστικά και μόνο στη σχέση μετάθεσης, οπότε μεταφέρεται άμεσα και στον τελεστή \hat{A} . (Μια πιο αυστηρή απόδειξη απαιτεί έλεγχο των πεδίων ορισμού των τελεστών \hat{A} και \hat{A}^\dagger , ή, καλύτερα, χρήση αποκλειστικά των τελεστών Βάουλ που δεν έχουν προβλήματα ορισμού σε όλα τα βήματα της απόδειξης.)

Έστω L ο ιδιόχωρο του \hat{A} για ιδιοτιμή μηδέν. Διαλέγουμε μία ορθοκανονική βάση στον L , έστω με διανύσματα $|\phi_r\rangle$. Οι $\hat{V}(w)$ ικανοποιούν το ανάλογο της ταυτότητας (6.45), από την οποία προκύπτει ότι

$$\langle \phi_r | \hat{V}(w) | \phi_{r'} \rangle = e^{-\frac{|w|^2}{2}} \langle \phi_r | e^{w\hat{A}^\dagger} | \phi_{r'} \rangle = e^{-\frac{|w|^2}{2}} \langle \phi_r | \phi_{r'} \rangle = e^{-\frac{|w|^2}{2}} \delta_{rr'}. \quad (12.40)$$

Ορίζουμε ως K_r τον υπόχωρο που σαρώνεται από τα διανύσματα $|w, r\rangle = \hat{V}(w)|\phi_r\rangle$ και τους γραμμικούς τους συνδυασμούς για σταθερό r . Η Εξ. (12.40) σημαίνει ότι $\langle w, r | w', r' \rangle = 0$ για $r \neq r'$. Άρα οι υπόχωροι K_r είναι μεταξύ τους ορθογώνιοι.

Σε κάθε K_r ορίζεται μία μοναδιαία αναπαράσταση της H_1 , μέσω των μοναδιαίων τελεστών $\hat{V}_r(z)$,

$$\hat{V}_r(w)|z, r\rangle = e^{\frac{1}{2}(z^*w - w^*z)}|z + w, r\rangle. \quad (12.41)$$

Τα διανύσματα $|z, r\rangle$ για σταθερό r ταυτίζονται με τις σύμφωνες καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή, οι οποίες σαρώνουν το χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R})$ ενώ ο ορισμός (12.41) είναι πλήρως ισοδύναμος με την Εξ. (6.47) που αντιστοιχεί στην αναπαράσταση Σρέντινγκερ. Οι δύο αναπαραστάσεις προκύπτουν άμεσα μοναδιαία ισοδύναμες.

Για να ολοκληρώσουμε την απόδειξη πρέπει να δείξουμε ότι $\oplus_r K_r = \mathcal{H}$. Έστω \hat{E} ο προβολικός τελεστής του $\oplus_r K_r$. Από κατασκευής $\hat{V}^\dagger(w)\hat{E}\hat{V}(w) = \hat{E}$ για κάθε w , απ' όπου προκύπτει ότι $[\hat{A}, \hat{E}] = [\hat{A}^\dagger, \hat{E}] = 0$. Έστω K^\perp ο συμπληρωματικός υπόχωρος του $\oplus_r K_r$. Αν $K^\perp \neq \emptyset$, οι προβολές των \hat{A} και \hat{A}^\dagger στον K^\perp θα ικανοποιούν τις κανονικές σχέσεις μετάθεσης. Άρα θα υπάρχει και ένα διάνυσμα $|\psi\rangle \in K^\perp$ που θα ικανοποιεί $\hat{A}|\psi\rangle = 0$, σε αντίθεση με την αρχική μας υπόθεση.

12.4.2 Κινηματικές συμμετρίες και κανονικός κβαντισμός

Το προφανές ερώτημα που προέκυψε αμέσως μετά τη διατύπωση της θεμελιώδους σχέσης μετάθεσης (12.33) από τον Χάιζενμπεργκ ήταν το “γιατί αυτή η σχέση;” Η θέση και η ορμή είναι παρατηρήσιμες ποσότητες που τις γνωρίζουμε από την κλασική φυσική στο επίπεδο του μακρόκοσμου. Εκεί αντιστοιχούν σε συναρτήσεις πάνω στον καταστατικό χώρο. Γιατί στο επίπεδο της κβαντικής θεωρίας εστιάζουμε σε μία καθαρά αλγεβρική σχέση που ικανοποιούν και, επίσης, πώς μπορούμε να δούμε τη συμμετρία στο επίπεδο της κλασικής φυσικής;

Η πρώτη απόπειρα απάντησης σ' αυτό το ερώτημα έγινε από τον Ντιράκ [212, 49]. Σε ένα κλασικό Χαμιλτόνιο σύστημα που περιγράφεται από έναν καταστατικό χώρο Γ ορίζεται η αγκύλη Πουασόν, με την οποία δύο συναρτήσεις F και G στο Γ αντιστοιχίζονται σε μία συνάρτηση $\{F, G\}$ στο Γ , σύμφωνα με την Εξ. (1.7). Οι αγκύλες Πουασόν (βλ. κεφ. 1.2.2) έχουν ιδιότητες παρόμοιες με το μεταθέτη τελεστών.

Σε καταστατικό χώρο $\Gamma = \mathbf{R}^{2n}$ με στοιχεία (x_i, p_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, οι θεμελιώδεις αγκύλες Πουασόν

$$\{x_i, x_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad (12.42)$$

Η σύγκριση με τις κβαντικές σχέσεις μετάθεσης, Εξ. (12.37), υποδεικνύει τους εξής κανόνες μετάβασης από κλασική σε κβαντική περιγραφή.

1. Οι συναρτήσεις x_i και p_i στο Γ αντιστοιχούν στους τελεστές \hat{x}_i και \hat{p}_i στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} .
2. Κάθε συνάρτηση $f(x_i)$ στο Γ αντιστοιχεί στον τελεστή $f(\hat{x}_i)$ και κάθε συνάρτηση $g(p_i)$ στο Γ αντιστοιχεί στον τελεστή $g(\hat{p}_i)$.
3. Αν οι συναρτήσεις F και G στο Γ αντιστοιχούν σε τελεστές \hat{A} και \hat{B} αντίστοιχα, τότε η συνάρτηση $F + G$ αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{A} + \hat{B}$.
4. Η αγκύλη Πουασόν $\{\cdot, \cdot\}$ στο Γ αντιστοιχεί στο $\frac{1}{i}[\cdot, \cdot]$, όπου $[\cdot, \cdot]$ ο μεταθέτης τελεστών στο \mathcal{H} .

Οι παραπάνω κανόνες είναι εξαιρετικά χρήσιμοι. Για παράδειγμα, επιτρέπουν να προσδιορίσουμε τη Χαμιλτονιανή ενός σωματιδίου ως τελεστή Σρέντινγκερ $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, από την κλασική συνάρτηση Χαμιλτον $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Βεβαίως δε λένε κάτι για την αναπαράσταση συναρτήσεων που περιλαμβάνουν γινόμενα x και p , γιατί αυτοί δεν έχουν μοναδική αντιστοίχιση με τελεστές. Για παράδειγμα η κλασική συνάρτηση xp^2 , μπορεί να αντιστοιχιστεί είτε στον τελεστή $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}^2 + \hat{p}^2\hat{x})$ είτε στον τελεστή $\hat{p}\hat{x}\hat{p}$. Δεν υπάρχει κάποιος γενικός κανόνας επιλογής.

Το πρόβλημα είναι ότι οι κανόνες 1-4 δεν είναι λογικά συνεπείς. Όπως διαπιστώθηκε από τον Γκρούνβολντ (H. J. Groenwold) [213], οδηγούν σε αντίφαση. Στο κλασικό επίπεδο ισχύει η ακόλουθη ταυτότητα

$$\{x^3, p^3\} + \frac{1}{12}\{\{p^2, x^3\}, \{x^2, p^3\}\} = 0. \quad (12.43)$$

Οι κανόνες αντιστοίχισης 1-4 δίνουν ότι

$$\frac{1}{i}[\hat{x}^3, \hat{p}^3] + \frac{1}{12i}\left[\frac{1}{i}[\hat{p}^2, \hat{x}^3], \frac{1}{i}[\hat{x}^2, \hat{p}^3]\right] = -3. \quad (12.44)$$

Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούμε να αναπαραστήσουμε απλές συναρτήσεις στον καταστατικό χώρο όπως η x^3 ή η p^2 με τους αντίστοιχους τελεστές \hat{x}^3 ή \hat{p}^2 , κρατώντας μία συνεπή αντιστοίχιση μεταξύ αγκυλών Πουασόν και μεταθετών τελεστών. Οπότε τίθεται το ερώτημα, ποιος είναι ο σωστός κανόνας αντιστοίχισης κλασικών και κβαντικών ποσοτήτων, ή αν καν υπάρχει τέτοιος κανόνας.

Μία απάντηση είναι να θεωρήσουμε ότι οι Εξ. (12.42) περιγράφουν μία κινηματική *συμμετρία*, η οποία αποτελεί το κοινό σημείο της κλασικής και της κβαντικής περιγραφής.

Στο κλασικό επίπεδο μία συμμετρία υλοποιείται μέσω κανονικών μετασχηματισμών. Κάθε συνάρτηση F στον καταστατικό χώρο, ορίζει μία οικογένεια μετασχηματισμών $(x_a, p_a) \rightarrow (x_a, p_a)(s)$ που προέρχεται από τη λύση των εξισώσεων

$$\frac{\partial x_a(s)}{\partial s} = \{x_a(s), F\}, \quad \frac{\partial p_a(s)}{\partial s} = \{p_a(s), F\}, \quad (12.45)$$

με αρχική συνθήκη $(x_a, p_a)(0) = (x_a, p_a)$. Αυτοί οι μετασχηματισμοί καλούνται μετασχηματισμοί που ορίζονται από μία συνάρτηση F μέσω της αγκύλης Πουασόν καλούνται *κανονικοί* και η συνάρτηση F *γεννήτοράς* τους.

Συμβολίσουμε τον κανονικό μετασχηματισμό που γεννά η συνάρτηση F ως $x_a \rightarrow L_s^F(x_a)$ και $p_a \rightarrow L_s^F(p_a)$. Για $F = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{p}$,

$$L_s^F \mathbf{x} = \mathbf{x} - s\mathbf{b} \quad L_s^F \mathbf{p} = \mathbf{p} - s\mathbf{a}. \quad (12.46)$$

Βλέπουμε ότι η ποσότητα $\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{p}$ είναι γεννήτορας μετατοπίσεων της θέσης και της ορμής. Ο μετασχηματισμός L_s^F κλασικά λειτουργεί ακριβώς με τον ίδιο τρόπο που λειτουργεί ο μετασχηματισμός μέσω τελεστών Βάουλ κβαντικά, Εξ. (5.22). Υπό αυτήν την έννοια η ίδια συμμετρία εμφανίζεται και στην κλασική και στην κβαντική περιγραφή. Αυτή η συμμετρία περιγράφει τα κινηματικά χαρακτηριστικά του συστήματος, δηλαδή ότι κάθε συντεταγμένη θέσης και κάθε συντεταγμένη ορμής μπορεί να πάρει τιμές σε όλο το \mathbf{R} και ότι είναι μεταξύ τους ανεξάρτητες. Ουσιαστικά αυτή η συμμετρία δηλώνει ότι ο κλασικός καταστατικός χώρος είναι γραμμικός.

Η έννοια της κινηματικής συμμετρίας μας προσφέρει μία διαδικασία με την οποία μπορούμε να κατασκευάσουμε την κβαντική θεωρία ενός συστήματος του οποίου γνωρίζουμε την κλασική περιγραφή. Αυτή η διαδικασία καλείται *κβαντισμός* του κλασικού συστήματος.

1. Προσδιορίζουμε την κινηματική συμμετρία της κλασικής περιγραφής: αναγνωρίζουμε μία συνεχή ομάδα G που δρα μέσω κανονικών μετασχηματισμών στον καταστατικό χώρο και εκφράζει τα βασικά γεωμετρικά του χαρακτηριστικά. Η ομάδα G καλείται *κανονική ομάδα* του συστήματος [214]. Η ομάδα Χάιζενμπεργκ-Βάουλ είναι η κανονική ομάδα που σχετίζεται με τους καταστατικούς χώρους της μορφής $\Gamma = \mathbf{R}^{2n}$. Οι γεννήτορες των κανονικών μετασχηματισμών αντιστοιχούν σε συναρτήσεις F_a πάνω στον καταστατικό χώρο, $a = 1, \dots, D$, όπου D η διάσταση της G .
2. Κατασκευάζουμε τις μη-αναγώγιμες μοναδιαίες αναπαραστάσεις της G . Αυτές περιγράφουν τα απλούστερα κβαντικά συστήματα με αυτή τη συμμετρία. Ένας γεννήτορας \hat{T}_a της αναπαραστάσης εκφράζει το φυσικό μέγεθος που περιγράφεται κλασικά από τη συνάρτηση F_a στο Γ .
3. Στην περίπτωση της ομάδας Χάιζενμπεργκ-Βάουλ όλες οι μοναδιαίες αναπαραστάσεις είναι ισοδύναμες. Στη γενική περίπτωση που υπάρχουν διαφορετικές μη-ισοδύναμες αναπαραστάσεις, επιλέγουμε τις κατάλληλες θέτοντας επιπλέον φυσικά κριτήρια (αν υπάρχουν).

Ακολουθώντας αυτή τη διαδικασία μπορούμε να κατασκευάσουμε την κβαντική περιγραφή για συστήματα με μη-γραμμικούς καταστατικούς χώρους, να μεταφέρουμε κλασικούς δεσμούς στην κβαντική θεωρία. Μερικά απλά παραδείγματα κανονικών ομάδων που αντιστοιχούν σε κλασικά συστήματα με μη-γραμμικούς καταστατικούς χώρους δίνονται στο ένθετο 12.2. Θα δούμε αργότερα, ότι για τα απλούστερα κβαντικά συστήματα (σωμάτια), η κανονική ομάδα αντιστοιχεί σε χωροχρονικές συμμετρίες.

Ένθετο 12.2. Παραδείγματα κανονικής ομάδας

Σωμάτιο σε ημιευθεία. Στο Κεφ. 6.6.1 δείξαμε ότι ένα σωμάτιο σε ημιευθεία περιγράφεται κβαντικά στο χώρο Χίλμπερτ $L^2_D(\mathbf{R}^+)$ των τετραγωνικά ολοκληρωσιμων συναρτήσεων ψ στην ημιευθεία που ικανοποιούν

$$\psi(0) = 0. \quad (12.47)$$

Είχαμε δείξει ότι ο τελεστής $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ δεν ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ $L^2_D(\mathbf{R}^+)$, γιατί η δράση του σε μία συνάρτηση που ικανοποιεί τη συνθήκη (12.47) δε μας δίνει μία συνάρτηση που ικανοποιεί την (12.47). Ωστόσο παρατηρούμε ότι ο τελεστής

$$\hat{\pi}\psi(x) = \frac{-i}{2}\left[x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial(x\psi)}{\partial x}\right] = -ix\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{i}{2}\psi \quad (12.48)$$

είναι αυτοσυζυγής και η δράση του σε μία συνάρτηση $\psi(x)$ διατηρεί τη συνθήκη (12.47). (Αν ο \hat{p} οριζόταν, θα γράφαμε $\hat{\pi} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$.) Βρίσκουμε τη σχέση μετάθεσης

$$[\hat{x}, \hat{\pi}] = i\hat{x}, \quad (12.49)$$

που σηματοδοτεί την ύπαρξη μίας άλγεβρας Λι με γεννήτορες \hat{x} και $\hat{\pi}$.

Στη συνέχεια κατασκευάζουμε τους μοναδιαίους τελεστές $\hat{U}(a, b) = e^{ia\hat{x} - ib\hat{\pi}}$ που αναπαριστούν την αντίστοιχη ομάδα. Παρατηρούμε ότι οι συναρτήσεις $\phi(x, a, b) = \hat{U}(a, b)\psi(x)$ είναι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης

$$\frac{\partial}{\partial b}\psi = x\frac{\partial}{\partial x}\psi + \frac{1}{2}\psi - icx\psi, \quad (12.50)$$

όπου $c = a/b$. Κανείς άμεσα επιβεβαιώνει ότι η συνάρτηση $\phi(x, a, b) = e^{b/2+iax}\psi(e^b x)$ είναι λύση της Εξ. (12.50) που ικανοποιεί $\phi(x, 0, 0) = \psi(x)$, οπότε

$$\hat{U}(a, b)\psi(x) = e^{b/2+iax}\psi(e^b x). \quad (12.51)$$

Υπολογίζουμε το γινόμενο

$$\hat{U}(a_1, b_1)\hat{U}(a_2, b_2) = (a_2 + a_1e^{b_2}, b_1 + b_2). \quad (12.52)$$

Αυτό σημαίνει ότι η κανονική ομάδα αποτελείται από ζεύγη $(a, b) \in \mathbf{R}^2$ με πράξη

$$(a_1, b_1)(a_2, b_2) = (a_2 + a_1e^{b_2}, b_1 + b_2), \quad (12.53)$$

και άρα ταυτίζεται με την αφινική ομάδα Af_1 .

Στο επίπεδο της κλασικής μηχανικής, το αντίστοιχο σύστημα περιγράφεται από τον καταστατικό χώρο $\Gamma = \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}$ με στοιχεία (x, p) . Η συνάρτηση $G = ax - bxp$ είναι γεννήτορας των κανονικών μετασχηματισμών $x \rightarrow e^{-sb}x, p \rightarrow p - as$, για κάθε $s \in \mathbf{R}$.

Σωμάτιο σε κύκλο. Στο Κεφ. 6.6.3 δείξαμε ότι ένα σωμάτιο που κινείται σε κύκλο περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $L^2(S^1)$ (για ευκολία θεωρούμε τον κύκλο μοναδιαίο) και ότι σ' αυτό το χώρο Χίλμπερτ ορίζονται οι αυτοσυζυγείς τελεστές

$$\hat{c}\psi(\theta) = \cos\theta\psi(\theta), \quad \hat{s}\psi(\theta) = \sin\theta\psi(\theta), \quad \hat{l}\psi(\theta) = -i\frac{\partial\psi}{\partial\theta}, \quad (12.54)$$

οι οποίοι ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{c}, \hat{\ell}] = -i\hat{s}, \quad [\hat{s}, \hat{\ell}] = i\hat{c}, \quad [\hat{c}, \hat{s}] = 0, \quad (12.55)$$

και άρα ορίζουν μία άλγεβρα Λι.

Ο αντίστοιχος μοναδιαίος τελεστής $\hat{U}(a, b, \phi) = e^{ia\hat{c}+ib\hat{s}+i\phi\hat{\ell}}$ δρα σε μία συνάρτηση ως

$$\hat{U}(a, b, \phi)\psi(\theta) = e^{ia \cos \theta + ib \sin \theta} \psi[(\theta + \phi) \bmod 2\pi] \quad (12.56)$$

Από αυτή τη δράση βρίσκουμε ότι $\hat{U}(a_1, b_1, \phi_1)\hat{U}(a_2, b_2, \phi_2) = \hat{U}(a', b', (\phi_1 + \phi_2) \bmod 2\pi)$, όπου

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (12.57)$$

Η κανονική ομάδα γι' αυτό το σύστημα είναι η Ευκλείδεια ομάδα E_2 .

12.5 Δυναμικές συμμετρίες

12.5.1 Το θεώρημα της Νέτερ

Η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ μίας ομάδας G σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} αντιστοιχεί σε μία δυναμική συμμετρία όταν αφήνει αναλλοίωτη την εξίσωση χρονικής εξέλιξης του συστήματος. Δηλαδή αν το διάνυσμα $|\psi(t)\rangle$ είναι λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ με Χαμιλτονιανή \hat{H} , τότε και τα διανύσματα $\hat{U}(g)|\psi(t)\rangle$ είναι λύσεις της ίδιας εξίσωσης Σρέντινγκερ,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(g)|\psi(t)\rangle = \hat{H} \hat{U}(g)|\psi(t)\rangle, \quad (12.58)$$

για κάθε $g \in G$. Ισοδύναμα $i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(g) \hat{H} \hat{U}(g) |\psi(t)\rangle$. Δεδομένου ότι αυτό πρέπει να ισχύει για κάθε αρχική κατάσταση $|\psi(0)\rangle \in \mathcal{H}$, καταλήγουμε ότι η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ ορίζει μία δυναμική συμμετρία, αν για κάθε $g \in G$

$$\hat{U}^\dagger(g) \hat{H} \hat{U}(g) = \hat{H}, \quad (12.59)$$

ή ισοδύναμα

$$[\hat{U}(g), \hat{H}] = 0. \quad (12.60)$$

Καταλήγουμε ότι η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ ορίζει μία δυναμική συμμετρία, αν η Χαμιλτόνια είναι Κά-ζιμιρ. Στη γενική περίπτωση, που η Χαμιλτόνια δεν είναι τελείως εκφυλισμένη (πολλαπλάσιο της μονάδας), η αναπαράσταση $\hat{U}(g)$ είναι αναγωγίμη.

Έστω $|n\rangle$ η βάση που ορίζεται από τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής \hat{H} και E_n οι αντίστοιχες ιδιοτιμές. Η Εξ. (12.60) σημαίνει ότι $\hat{U}(g) \hat{H} |n\rangle = \hat{H} \hat{U}(g) |n\rangle$, ή ισοδύναμα

$$\hat{H} \hat{U}(g) |n\rangle = E_n \hat{U}(g) |n\rangle. \quad (12.61)$$

Άρα το $\hat{U}(g) |n\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα της \hat{H} με την ίδια ιδιοτιμή E_n . Η αναπαράσταση της $\hat{U}(g)$ αφήνει αναλλοίωτους τους ιδιόχωρους της Χαμιλτονιανής: αν $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_n$, $[\hat{U}(g), \hat{P}_n] = 0$, για κάθε $g \in G$. Συμπεραίνουμε ότι υπάρχει μία μοναδιαία αναπαράσταση της G σε κάθε ιδιόχωρο V_n της Χαμιλτονιανής \hat{H} , η οποία δίνεται από τους τελεστές $\hat{P}_n \hat{U}(g) \hat{P}_n$.

Για συνεχή ομάδα G , η Εξ. (12.59) συνεπάγεται ότι

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \quad (12.62)$$

για όλους τους γεννήτορες \hat{T}_a της αναπαράστασης. Δεδομένου ότι οι γεννήτορες είναι αυτοσυζυγείς τελεστές που αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα μεγέθη, αυτό σημαίνει ότι οι αντίστοιχες κατανομές πιθανοτήτων διατηρούνται στο χρόνο. Έχουμε δηλαδή μία άμεση σύνδεση μεταξύ συμμετρίας και διατηρούμενων ποσοτήτων, ο οποία καλείται *θεώρημα της Νέτερ* (E. Noether).

Θεώρημα της Νέτερ. Αν η Χαμιλτονιανή είναι αναλλοίωτη κάτω από μοναδιαίο μετασχηματισμό μίας συνεχούς ομάδας G , τότε κάθε γεννήτορας της G ορίζει μία διατηρήσιμη ποσότητα.

Αν η ομάδα G δεν είναι συνεχής, παίρνουμε σχέσεις διατήρησης μόνο για αυτοσυζυγείς τελεστές που μπορούν να εκφραστούν ως συναρτήσεις των μοναδιαίων τελεστών $\hat{U}(g)$. Για παράδειγμα, αν οι μετασχηματισμοί πάρτυ $\hat{\mathbb{P}}$ της Εξ. (11.6) αντιστοιχούν σε δυναμική συμμετρία, τότε η σχέση $[\hat{\mathbb{P}}, \hat{H}] = 0$ οδηγεί σε σχέση διατήρησης των κατανομών πιθανοτήτων του τελεστή $\hat{\mathbb{P}}$, αφού ο $\hat{\mathbb{P}}$ είναι και αυτοσυζυγής και μοναδιαίος.

12.5.2 Η συμμετρία της θεμελιώδους κατάστασης

Στα περισσότερα φυσικά συστήματα, η θεμελιώδης κατάσταση $|0\rangle$ δεν είναι εκφυλισμένη. Αυτό σημαίνει ότι αντιστοιχεί στην μονοδιάστατη αναπαράσταση της ομάδας G , δηλαδή οι τελεστές $\hat{U}(g)$ δρουν τετριμμένα,

$$\hat{U}(g)|0\rangle = |0\rangle, \quad (12.63)$$

δηλαδή η θεμελιώδης κατάσταση είναι αναλλοίωτη κάτω από τη συμμετρία.

Για συνεχή ομάδα G διαλέγουμε ένα μοναδιαίο πίνακα $\hat{U}(g) = e^{is\hat{T}_a}$ για κάποιο γεννήτορα \hat{T}_a . Η Εξ. (12.63) γίνεται $e^{is\hat{T}_a}|0\rangle = |0\rangle$. Παραγωγίζοντας ως προς s και θέτοντας $s = 0$, παίρνουμε

$$\hat{T}_a|0\rangle = 0, \quad (12.64)$$

δηλαδή ο γεννήτορας μιας δυναμικής συμμετρίας "καταστρέφει" τη θεμελιώδη κατάσταση.

Ωστόσο αν η $|0\rangle$ είναι εκφυλισμένη, τότε μπορεί να ισχύει $\hat{U}(g)|0\rangle \neq |0\rangle$. Σ' αυτήν την περίπτωση, λέμε ότι το σύστημα χαρακτηρίζεται από *αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας*.

Για να καταλάβουμε τις παραπάνω έννοιες, ας εξετάσουμε μία μακροσκοπική σφαίρα που αποτελείται από κάποιο μέταλλο. Ως κβαντικό σύστημα, περιγράφεται από μία Χαμιλτονιανή \hat{H} που ορίζεται σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} και η οποία περιγράφει την ενδογενή δυναμική του κάθε ατόμου καθώς και την αλληλεπίδρασή μεταξύ των ατόμων. Η Χαμιλτονιανή αυτή είναι αναλλοίωτη ως προς τις περιστροφές στο χώρο, δηλαδή υπάρχει μία αναπαράσταση $\hat{U}(O)$ της ομάδας $SO(3)$ στο \mathcal{H} , έτσι ώστε $[\hat{H}, \hat{U}(O)] = 0$. Στον \mathcal{H} ορίζεται ο τελεστής \hat{M}_i που αντιστοιχεί στις τρεις συνιστώσες της συνολικής μαγνήτισης του συστήματος. Δεδομένου ότι η μαγνήτιση είναι διάνυσμα, πρέπει να περιστρέφεται ανάλογα κάτω από τη δράση των $\hat{U}(O)$

$$\hat{U}^\dagger(O)\hat{M}_i\hat{U}(O) = \sum_j O_{ij}\hat{M}_j. \quad (12.65)$$

Έστω $|0\rangle$ η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος. Αν η κατάσταση δεν είναι εκφυλισμένη τότε $\hat{U}(O)|0\rangle = |0\rangle$. Αν ορίσουμε $m_i = \langle 0|\hat{M}_i|0\rangle$, παίρνοντας την αναμενόμενη τιμή των δύο σκελών την Εξ. (12.65) βρίσκουμε

$$m_i = \sum_j O_{ij}m_j. \quad (12.66)$$

Δεδομένου ότι η Εξ. (12.66) ισχύει για κάθε $O \in SO(3)$, η μόνη λύση είναι $m_i = 0$. Δηλαδή η αναμενόμενη τιμή της μαγνήτισης μηδενίζεται, κάτι που χαρακτηρίζει τα *παραμαγνητικά υλικά*, όπως το αλουμίνιο και το νάτριο, σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες έτσι που να θεωρεί κανείς ότι το σύστημα βρίσκεται στη θεμελιώδη του κατάσταση.

Υπάρχουν όμως και τα *σιδηρομαγνητικά υλικά*, όπως ο σίδηρος και το νικέλιο, τα οποία σε χαμηλές θερμοκρασίες εμφανίζουν αυθόρμητη μαγνήτιση m_i . Εφόσον $m_i \neq 0$, η Εξ. (12.66) δεν ικανοποιείται, άρα η θεμελιώδης κατάσταση είναι εκφυλισμένη. Για την ακρίβεια, η κατεύθυνση της μαγνήτισης $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{m}|}$ είναι αυτό που ξεχωρίζει τις διαφορετικές ιδιοκαταστάσεις ελάχιστης ενέργειας, οπότε υπάρχει μία ιδιοκατάσταση $|\mathbf{n}\rangle$ για κάθε πιθανή κατεύθυνση της μέσης μαγνήτισης. Το κομμάτι του μετάλλου μπορεί να μαγνητιστεί αυθόρμητα προς οποιαδήποτε κατεύθυνση, αυτή που επιλέγεται είναι γενικά από μη επαναλήψιμους παράγοντες (ιστορία του κομματιού, έκθεση σε πολύ ασθενή μη ελεγχόμενα πεδία κοκ) και ως εκ τούτου είναι *αυθόρμητη*. Βεβαίως, οι καταστάσεις ελάχιστης ενέργειας $|\mathbf{n}\rangle$ δεν είναι αναλλοίωτες κάτω από τους μετασχηματισμούς των περιστροφών, αφού $\hat{U}(O)|\mathbf{n}\rangle = |\mathbf{n}\rangle$.

Αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας υπάρχει μόνο σε συστήματα που χαρακτηρίζονται από άπειρους βαθμούς ελευθερίας, όπως τα κβαντικά πεδία, ή συστήματα πολλών σωματιδίων στο λεγόμενο θερμοδυναμικό όριο όπου ο όγκος V και ο αριθμός των σωματιδίων N τείνουν στο άπειρο με το λόγο N/V να μένει σταθερός. Σε συστήματα με πεπερασμένους βαθμούς ελευθερίας, η θεμελιώδης κατάσταση είναι συνήθως μη εκφυλισμένη. Ακόμα και αν η αντίστοιχη κλασική Χαμιλτονιανή έχει πολλές διαφορετικές καταστάσεις ελάχιστης ενέργειας, όπως για παράδειγμα ένας τελεστής Σρέντινγκερ $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$, όπου το δυναμικό έχει πολλά ελάχιστα με ίδια τιμή V_{min} , η κβαντική θεμελιώδης κατάσταση δεν είναι εκφυλισμένη και αντιστοιχεί σε επαλληλία καταστάσεων εντοπισμένων στα διαφορετικά ελάχιστα. Είδαμε ένα παράδειγμα στο Κεφ. 6, στο διπλό πηγάδι δυναμικού δέλτα, όπου η θεμελιώδης κατάσταση είναι μοναδική, παρότι το αντίστοιχο κλασικό σύστημα έχει δύο διαφορετικές καταστάσεις ελάχιστης ενέργειας.

Ερωτήσεις

1. Μπορεί δύο διαφορετικές ομάδες \mathcal{L}_i να έχουν την ίδια άλγεβρα \mathcal{L}_i ;
2. Αν η Χαμιλτονιανή ενός συστήματος είναι αναλλοίωτη κάτω από τη δράση μιας μοναδιαίας αναπαράστασης της ομάδας $SU(n)$, πόσες ανεξάρτητες διατηρήσιμες ποσότητες ορίζονται;
3. Αν ένα κλασικό σύστημα έχει N διαφορετικές καταστάσεις ελάχιστης ενέργειας, τότε και η θεμελιώδης κατάσταση του αντίστοιχου κβαντικού συστήματος έχει N -στο εκφυλισμό. Σωστό ή λάθος;

Ασκήσεις

1. Επιβεβαιώστε τις ιδιότητες συνεκτικότητας και συμπάγειας για τις ομάδες που περιγράφονται στο Κεφ. 12.1.2.
2. Δείξτε ότι οι άλγεβρες \mathcal{L}_i των ομάδων $SL(2, \mathbf{R})$ και $SO(2, 1)$ ταυτίζονται. Δείξτε ότι οι ομάδες είναι σχεδόν ισομορφικές: κάθε στοιχείο του $SO(2, 1)$ αντιστοιχεί σε δύο στοιχεία A και $-A$ του $SL(2, \mathbf{R})$.
3. Έστω σύστημα δύο αρμονικών ταλαντωτών ίδιας συχνότητας, με $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ τους αυξητικούς και μειωτικούς τελεστές, όπου $i = 1, 2$. (α) Δείξτε ότι οι τελεστές $\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1)$, $\hat{J}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1)$, $\hat{J}_3 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)$ είναι γεννήτορες μιας μοναδιαίας αναπαράστασης της $SU(2)$. (β) Δείξτε ότι οι τελεστές $\hat{K}_1 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_2)$, $\hat{K}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_2)$, $\hat{K}_3 = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)$, είναι γεννήτορες μιας μοναδιαίας αναπαράστασης της $SL(2, \mathbf{R})$. (γ) Γράψτε τους Κάζιμιρ των δύο ομάδων συναρτήσει των \hat{a}_i και \hat{a}_i^\dagger .

4. Δείξτε ότι οι τελεστές $\hat{K}_1 = \frac{L}{\pi} \tan\left(\frac{\pi x}{2L}\right)$ και $\hat{K}_2 = -i \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ είναι αυτοσυζυγείς στο $L^2_{\mathcal{D}}([0, L])$ και ότι οι μεταθέτες τους ικανοποιούν την άλγεβρα Λι της αφινικής ομάδας.
5. Ο γραμμικός μετασχηματισμός $(x, p) \rightarrow (ax + bp, cx + dp)$ στο \mathbf{R}^2 είναι κανονικός για $ad - bc = 1$. (α) Προσδιορίστε τους γεννήτορες αυτών των κανονικών μετασχηματισμών. (β) Βρείτε τους μοναδιαίους τελεστές \hat{U} στο $L^2(\mathbf{R})$ που υλοποιούν αυτούς τους μετασχηματισμούς κβαντικά: $\hat{U}^\dagger \hat{x} \hat{U} = a\hat{x} + b\hat{p}$ και $\hat{U}^\dagger \hat{p} \hat{U} = c\hat{x} + d\hat{p}$.
6. Γράψτε όλους τους δυνατούς αυτοσυζυγείς τελεστές που αντιστοιχούν στην κλασική συνάρτηση $F(x) = x^3 p^3$.
7. Αποδείξτε τις Εξ. (12.43) και (12.44).
8. Θεωρείστε σύστημα N μη αλληλεπιδρώντων αρμονικών ταλαντωτών με την ίδια συχνότητα ω . (α) Δείξτε ότι στο χώρο Χίλμπερτ του συστήματος ορίζεται μία μοναδιαία αναπαράσταση της ομάδας $SU(N)$ που αφήνει τη Χαμιλτονιανή αναλλοίωτη. (β) Βρείτε τους γεννήτορες της αναπαράστασης (γ) Ποιες είναι οι διαστάσεις των τριών ιδιοχώρων της Χαμιλτονιανής με τη χαμηλότερη ενέργεια;

Βιβλιογραφία

- Για ημι-εκλαϊκευτικές περιγραφές του πώς χρησιμοποιείται η έννοια της συμμετρίας στη σύγχρονη φυσική βλ. το βιβλίο Particle or Wave του συγγραφέα [4] και το βιβλίο του Zee [215]. Για εισαγωγή στη θεωρία ομάδων με έμφαση στις εφαρμογές της στη φυσική προτείνω τα βιβλία των Jones [216] και Ramond [217]. Για περισσότερες λεπτομέρειες συνιστώ το βιβλίο των Barut και Raczka [218]. Για τον κβαντισμό με την κανονική ομάδα, βλ. το άρθρο του Isham [214]. Μία εναλλακτική μέθοδος είναι γεωμετρικός κβαντισμός [219].

Κεφάλαιο 13

Σωματάρια στις τρεις διαστάσεις

13.1 Ο τελεστής Σρέντινγκερ στις τρεις διαστάσεις

13.1.1 Γενική περιγραφή

Προκειμένου να μελετήσουμε ένα σύνθετο σύστημα, πρέπει να το αναλύσουμε σε απλούστερα. Τα απλούστερα συστήματα στην κλασική φυσική είναι τα *σωματίδια*, δηλαδή σημειακά σώματα που κινούνται στο χώρο. Ένα σωματίδιο περιγράφεται από τρεις συντεταγμένες θέσεις και τρεις ορμές, οπότε ο καταστατικός του χώρος είναι ο \mathbf{R}^6 . Πλέον ξέρουμε ότι αυτή η περιγραφή είναι ανεπαρκής. Όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, ένα σωματάριο περιγράφεται και από έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας που καλείται σπιν και οι οποίοι δεν ταιριάζει με την εικόνα των σημειακών σωματιδίων της κλασικής μηχανικής.

Σε πολλές περιπτώσεις μπορούμε να αγνοήσουμε την ύπαρξη του σπιν, ή να το μελετήσουμε ξεχωριστά από τους υπόλοιπους βαθμούς ελευθερίας. Τότε οι έξι βαθμοί ελευθερίας θέσης και ορμής αρκούν για να περιγράψουν ένα σημειακό σωματάριο. Όταν λέμε σημειακό σωματάριο εννοούμε ότι δεν ενδιαφερόμαστε για την εσωτερική του δομή. Αυτό δε σημαίνει απαραίτητα ότι το σωματάριο είναι πραγματικά στοιχειώδες, αλλά ότι ή ύπαρξη ή όχι εσωτερικής δομής δεν έχει σχέση με το ερώτημα που εξετάζουμε. Για παράδειγμα, όταν μελετούμε την ατομική δομή μπορούμε να αγνοήσουμε την εσωτερική δομή του ατομικού πυρήνα, ή αν μας ενδιαφέρει μόνο η κίνηση ενός ιόντος εντός ενός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου μπορούμε εστιάζουμε μόνο στους βαθμούς ελευθερίας του κέντρου μάζας του ιόντος.

Αν αγνοήσουμε το σπιν, αντιστοιχίζουμε σε κάθε σωματάριο ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} στον οποίον ορίζονται τελεστές που ικανοποιούν τις βασικές σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}\hat{I}, \quad (13.1)$$

όπου $i, j = 1, 2, 3$. Όπως είδαμε στο Κεφ. 12.3, όλες οι αναπαράστασεις των σχέσεων μετάθεσης είναι ισοδύναμες με την αναπαράσταση Σρέντινγκερ, σύμφωνα με την οποία (α) ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} ταυτίζεται με το $L^2(\mathbf{R}^3)$, (β) ο τελεστής θέσης είναι πολλαπλασιαστικός: $\hat{x}_i\psi(\mathbf{r}) = x_i\psi(\mathbf{r})$, και (γ) ο τελεστής ορμής είναι διαφορικός: $\hat{p}_i\psi(\mathbf{r}) = -i\frac{\partial}{\partial x_i}\psi(\mathbf{r})$, όπου $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$.

Για ένα ελεύθερο σωματάριο μάζας m , η Χαμιλτονιανή είναι $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$, ενώ παρουσία ενός δυναμικού $V(\mathbf{r})$, η Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (13.2)$$

είναι ο τρισδιάστατος τελεστής Σρέντινγκερ.

Ο τρισδιάστατος τελεστής Σρέντινγκερ περιγράφει όχι μόνο ένα σωματίο σε εξωτερικό πεδίο αλλά και όλα τα συστήματα δύο σωματιδίων με δυναμικά αλληλεπίδρασης που εξαρτώνται μόνο από τη σχετική θέση $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ των σωματιδίων. Για να το διαπιστώσουμε, εξετάζουμε ένα σύστημα που αποτελείται από δύο σωματία μάζας m_1 και m_2 , που αλληλεπιδρούν μέσω δυναμικού $V(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2)$. Η Χαμιλτονιανή είναι της μορφής

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2), \quad (13.3)$$

όπου $\hat{\mathbf{x}}_a, \hat{\mathbf{p}}_a, a = 1, 2$ οι τελεστές θέσης και ορμής των σωματιδίων. Ορίζουμε τη θέση του κέντρου μάζας $\hat{\mathbf{R}} = (m_1\hat{\mathbf{x}}_1 + m_2\hat{\mathbf{x}}_2)/(m_1 + m_2)$, την ορμή του κέντρου μάζας $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$, τη σχετική θέση $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2$ και την αντίστοιχη ορμή της $\hat{\mathbf{p}} = (m_1\hat{\mathbf{p}}_1 - m_2\hat{\mathbf{p}}_2)/(m_1 + m_2)$. Αμέσως βρίσκουμε ότι το κάθε ζεύγος $\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}$ και $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ ικανοποιεί τις θεμελιώδεις σχέσεις μετάθεσης.

Η Χαμιλτονιανή (13.3) γράφεται ως

$$\hat{H} = \hat{H}_{KM} + \hat{H}_{rel}. \quad (13.4)$$

Στην Εξ. (13.4),

$$\hat{H}_{KM} = \frac{1}{2M} \hat{\mathbf{P}}^2 \quad (13.5)$$

είναι η Χαμιλτονιανή του κέντρου μάζας, που αντιστοιχεί σε ελεύθερο σωματίο μάζας $M = m_1 + m_2$, και

$$\hat{H}_{rel} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (13.6)$$

είναι η Χαμιλτονιανή που περιγράφει τους σχετικούς βαθμούς ελευθερίας του συστήματος των δύο σωματιδίων. Αντιστοιχεί στον τελεστή Σρέντινγκερ για σωματίο μάζας $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Η ποσότητα μ καλείται *ανηγμένη μάζα* του συστήματος των δύο σωματιδίων.

Σε ότι ακολουθεί θα χρησιμοποιούμε εκφράσεις που αφορούν σωματίο σε εξωτερικό δυναμικό, κρατώντας όμως υπόψη ότι τα αποτελέσματα άμεσα μεταφράζονται σε σύστημα δύο σωματιδίων.

13.1.2 Ιδιοκαταστάσεις θετικής και αρνητικής ενέργειας

Αν το δυναμικό $V(\mathbf{r}) \geq 0$ για κάθε r , ο τελεστής Σρέντινγκερ \hat{H} (13.2) είναι θετικός, αφού $\hat{\mathbf{p}}^2 \geq 0$. Με το ίδιο σκεπτικό, αν το δυναμικό έχει ένα κάτω φράγμα V_{min} , τότε $\hat{H} \geq V_{min} \hat{I}$.

Έστω δυναμικό $V(\mathbf{r})$ που μηδενίζεται στο άπειρο: $\lim_{r \rightarrow \infty} V(\mathbf{r}) = 0$, όπου $r = |\mathbf{r}|$. Στη κλασική φυσική, αυτή η απαίτηση σημαίνει ότι ένα σωματίο με θετική ενέργεια μπορεί να βρεθεί στο άπειρο, ενώ ένα σωματίο με αρνητική ενέργεια δεν μπορεί. Το σωματίο με αρνητική ενέργεια δεν μπορεί να ξεφύγει από την περιοχή του χώρου στην οποία το δυναμικό είναι ελκτικό, κινείται σε μία φραγμένη περιοχή του χώρου, οπότε λέμε ότι βρίσκεται σε μια *δέσμια* κατάσταση. Όπως είδαμε στη μελέτη του τελεστή Σρέντινγκερ στη μία διάσταση (Κεφ. 6.3), το ίδιο ισχύει και στην κβαντική θεωρία. Οι θετικές τιμές της ενέργειας αντιστοιχούν σε συνεχές φάσμα και γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις που εκτείνονται ως το άπειρο, ενώ οι αρνητικές τιμές της ενέργειας σε διακριτό φάσμα και ιδιοκαταστάσεις που επειδή είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες μηδενίζονται στο άπειρο. Οστόσο αυτή η διαπίστωση είναι ένας κανόνας που ισχύει για τα περισσότερα δυναμικά με φυσικό ενδιαφέρον και όχι μια ακριβής μαθηματική πρόταση όπως στην κλασική φυσική. Ο λόγος είναι ότι υπάρχουν δυναμικά για τα οποία μπορούν να βρεθούν δέσμιες καταστάσεις θετικής ενέργειας [220, 221]. Αυτές οι καταστάσεις δεν

έχουν κάποιο ανάλογο στην κλασική μηχανική. Ένα παράδειγμα τέτοιας κατάστασης περιγράφεται στο ένθετο 13.1.

Σε κάθε περίπτωση, αν $V(\mathbf{r}) \leq 0$ για κάθε r , όλες οι δέσμιες καταστάσεις αντιστοιχούν σε αρνητικές ενέργειες. Αν υπήρχε ιδιοκατάσταση ψ θετικής ενέργειας $E > 0$, στο όριο που $r \rightarrow \infty$ θα είχαμε $\nabla^2\psi + 2mE\psi = 0$, με λύσεις της μορφής $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, για $|\mathbf{k}| = \sqrt{2mE}$, οι οποίες δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.

Ένθετο 13.1. Δέσμιες καταστάσεις θετικής ενέργειας

Θα κατασκευάσουμε εκπεφρασμένα ένα δυναμικό $V(\mathbf{r})$ το οποίο επιδέχεται δέσμιες καταστάσεις θετικής ενέργειας, ακολουθώντας το σκεπτικό των Νόιμαν και Βίγκνερ [220].

Γράφουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\psi = E\psi$ για τη Χαμιλτονιανή (13.2) ως

$$V = E + \frac{\nabla^2\psi}{2m\psi}, \quad (13.7)$$

και εξετάζουμε λύσεις της μορφής

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\sin kr}{kr} f(r), \quad (13.8)$$

όπου $r = |\mathbf{r}|$ και $E = \frac{k^2}{2m}$. Η ψ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη αν η συνάρτηση $f(r)$ μηδενίζεται στο άπειρο ως r^{-a} για $a > \frac{1}{2}$. Παρατηρούμε, ότι για $f(r) = 1$, η συνάρτηση (13.8) είναι λύση της Εξ. (13.7) για $V = 0$.

Αντικαθιστούμε την Εξ. (13.8) στην Εξ. (13.7) και παίρνουμε

$$V(r) = \frac{1}{m} k \cot(kr) \frac{f'}{f} + \frac{1}{2m} \frac{f''}{f}. \quad (13.9)$$

Για να παραμένει το δυναμικό $V(r)$ φραγμένο, πρέπει η f'/f να μηδενίζεται στους πόλους του $\cot(kr)$, δηλαδή στα σημεία όπου του $\sin(kr) = 0$. Επιλέγουμε τη συνάρτηση

$$f(r) = \frac{1}{C^2 + (2kr - \sin(2kr))^2}, \quad (13.10)$$

όπου C μία σταθερά, η οποία όντως ικανοποιεί αυτήν την ιδιότητα. Η f μηδενίζεται ασυμπτωτικά σαν r^{-2} , οπότε η ψ είναι ολοκληρώσιμη. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (13.9) βρίσκουμε ότι

$$V(r) = -\frac{64C^2k^2 \sin^4(kr)}{m[C^2 + (2kr - \sin(2kr))^2]^2} + \frac{48k^2 \sin^4(kr) - 8k^2[2kr - \sin(2kr)] \sin(2kr)}{m[C^2 + (2kr - \sin(2kr))^2]}. \quad (13.10)$$

Το δυναμικό (13.10) μηδενίζεται στο κέντρο ως $V(r) \sim r^4$. Στο άπειρο συμπεριφέρεται ως $V(r) \sim \sin(kr)/r$, δηλαδή είναι μεγάλης εμβέλειας σαν το δυναμικό Κουλόμπ και αλλάζει περιοδικά πρόσημο.

Καταλήγουμε ότι η τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση (13.8) για f που δίνεται από την Εξ. (13.10) είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή Σρέντινγκερ για το δυναμικό (13.10 με θετική ιδιοτιμή.

13.1.3 Κατάσταση ελάχιστης ενέργειας

Όπως αναφέραμε στο Κεφ. 8.2.1, το φάσμα της Χαμιλτονιανής ενός συστήματος πρέπει να είναι φραγμένο από κάτω, δηλαδή υπάρχει μία κατάσταση ελάχιστης ενέργειας. Είναι ένα ιδιαίζον και πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό της κβαντικής θεωρίας, ότι κάτω φράγμα υπάρχει ακόμα και για δυναμικά που δεν είναι φραγμένα από κάτω. Θυμίζουμε το δυναμικό Κουλόμπ $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ στο άτομο του

υδρογόνου. Κλασικά δεν υπάρχει κατάσταση ελάχιστης ενέργειας, γιατί η ενέργεια τείνει στο $-\infty$ για $r \rightarrow 0$. Αυτός ήταν ο λόγος που το αρχικό μοντέλο του Ράδερφορντ για το άτομο ήταν προβληματικό.

Μπορούμε να προσδιορίσουμε τα δυναμικά που επιτρέπουν Χαμιλτονιανή είναι φραγμένη χρησιμοποιώντας την ακόλουθη ανισότητα.

Πρόταση 13.1 (Ανισότητα του Χάρντι (Hardy)) Για κάθε $|\psi\rangle \in L^2(\mathbf{R}^3)$,

$$\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \psi | \hat{r}^{-2} | \psi \rangle. \quad (13.11)$$

Απόδειξη. Καταρχάς γράφουμε $\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle = - \int d^3x \psi^* \nabla^2 \psi = - \int d^3x \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi) + \int d^3x |\nabla \psi|^2$. Ο πρώτος από τους δυο όρους, βάσει του θεωρήματος του Γκάους, ισούται με το επιφανειακό ολοκλήρωμα $-\int_{S_\infty} d^2\sigma \cdot (\psi^* \nabla \psi)$ σε μια δισδιάστατη επιφάνεια S_∞ στο άπειρο. Καθώς τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις μηδενίζονται στο άπειρο, αυτός ο όρος είναι μηδέν. Οπότε $\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle = \int d^3x |\nabla \psi|^2$.

Γράφουμε $\psi(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r})/\sqrt{r}$. Για να είναι συνάρτηση ψ τετραγωνικά ολοκληρώσιμη πρέπει να ισχύει $g(0) = g(\infty) = 0$. Στη συνέχεια, υπολογίζουμε

$$|\nabla \psi|^2 = \frac{1}{4} \frac{|\psi|^2}{r^2} + \frac{|\nabla g|^2}{r} - \frac{\partial_r |g|^2}{2r^2}.$$

Σε σφαιρικές συντεταγμένες, $d^3x = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$. Η ολοκλήρωση του τελευταίου όρου στην παραπάνω εξίσωση δίνει τιμή ανάλογη του $\int_0^\infty dr \frac{\partial |g|^2}{\partial r} = g(\infty) - g(0) = 0$. Οπότε, $\int d^3x [|\nabla \psi|^2 - \frac{1}{4} \frac{|\psi|^2}{r^2}] \geq \int d^3x \frac{|\nabla g|^2}{r} \geq 0$ και καταλήγουμε στο ζητούμενο.

Η ανισότητα του Χάρντι σημαίνει ότι $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq \langle \psi | \frac{1}{8m} \hat{r}^{-2} + V(\hat{r}) | \psi \rangle$. Η Χαμιλτονιανή \hat{H} είναι φραγμένη από κάτω αν η ποσότητα $V(\mathbf{r}) + \frac{1}{8mr^2}$ έχει ένα ελάχιστο, δηλαδή αν υπάρχει σταθερά V_0 , ώστε

$$V(\mathbf{r}) \geq -\frac{1}{8mr^2} + V_0. \quad (13.11)$$

Για τιμές του r κοντά στο μηδέν, η σταθερά V_0 συνεισφέρει αμελητέα στο δεξιό όρο της Εξ. (13.11). Οπότε για να είναι φραγμένη η ενέργεια από κάτω απαιτείται το δυναμικό να απειρίζεται στο $r \rightarrow 0$ πιο αργά από r^{-2} . Το δυναμικό Κουλόμπ ικανοποιεί αυτή τη συνθήκη. Δεδομένου ότι οι δυνάμεις Κουλόμπ είναι οι κυρίαρχες στο επίπεδο της ατομικής φυσικής, θα μπορούσαμε να πούμε ότι η ανισότητα του Χάρντι προσφέρει μία πρώτη εξήγηση γιατί τα άτομα είναι ευσταθή.

Μια φραγμένη από κάτω Χαμιλτονιανή \hat{H} ικανοποιεί $\hat{H} \geq V_0 \hat{I}$, οπότε η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης E_0 ικανοποιεί πάντα $E_0 \geq V_0$. Για παράδειγμα, για το δυναμικό Κουλόμπ $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi r}$, το ελάχιστο της συνάρτησης $V(r) + \frac{1}{8mr^2}$ επιτυγχάνεται για $r = \pi/(Ze^2m)$ και είναι ίσο με $V_0 = -\frac{Z^2 e^4 m}{8\pi^2}$ που είναι μεν αρκετά μικρότερο από την πραγματική τιμή (3.42) (κατά έναν παράγοντα 4) αλλά πιάνει τη σωστή τάξη μεγέθους. Μία ανισότητα που βελτιώνει σημαντικά την ανισότητα Χάρντι δίνεται στο Ένθετο 13.2.

Μία σημαντική ιδιότητα των τελεστών Σρέντινγκερ είναι ότι η θεμελιώδης κατάστασή τους είναι μη εκφυλισμένη. Αυτό εκφράζεται μέσω του ακόλουθου θεωρήματος.

Θεώρημα 13.2 Έστω ότι ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει μία θεμελιώδη κατάσταση. Τότε αυτή είναι μοναδική και η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση $\psi_0(\mathbf{r})$ είναι θετική.

Στο Κεφ. 13.2, δίνεται η απόδειξη για σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά. Για την απόδειξη σε γενικά δυναμικά, ο αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει στα [224, 84].

Ένθετο 13.2. Ανισότητα Σομπόλεφ και εφαρμογές της

Θα αποδείξουμε την ανισότητα Σομπόλεφ (C. Σόβολεφ) [222], η οποία προσφέρει ένα κάτω όριο στην κινητική ενέργεια ενός σωματιδίου που είναι πιο αυστηρό από αυτό της ανισότητας Χάρντντ.

Ανισότητα Σομπόλεφ: Για κάθε $\psi \in L^2(\mathbf{R}^3)$, $\|\nabla\psi\|^2 \geq K_s \|\psi^3\|^{2/3}$, όπου $K_s = 3(\pi/2)^{4/3} \simeq 5,48$. Ισοδύναμα,

$$\int d^3x |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 \geq K_s \left[\int d^3x |\psi(\mathbf{r})|^6 \right]^{1/3}, \quad (13.12)$$

Θα αποδείξουμε την ανισότητα βρίσκοντας το κάτω όριο του συναρτησιακού

$$K(\psi) = \frac{\|\nabla\psi\|^2}{\|\psi^3\|^{2/3}}. \quad (13.13)$$

Η ελαχιστοποίηση χρησιμοποιεί μεθόδους λογισμού μεταβολών—βλ. για παράδειγμα, Κεφ. 2 του [2]. Βρίσκουμε ότι

$$\delta K = \frac{\delta(\|\nabla\psi\|^2) - \frac{1}{3} \frac{\|\nabla\psi\|^2}{\|\psi^3\|^{2/3}} \delta(\|\psi^3\|^2)}{\|\psi^3\|^{2/3}}. \quad (13.14)$$

Η συνθήκη $\delta K = 0$ σημαίνει ότι $\delta(\|\nabla\psi\|^2) = g\delta(\|\psi^3\|^2)$, όπου $g = \frac{\|\nabla\psi\|^2}{\|\psi^3\|^{2/3}} > 0$. Μεταβάλλοντας το ψ^* παίρνουμε $\delta(\|\nabla\psi\|^2) = \int d^3x (\nabla\delta\psi^*) \cdot (\nabla\psi) = -\int d^3x \delta\psi^* \nabla^2\psi$ και $\delta(\|\psi^3\|^2) = 3 \int d^3x \delta\psi^* |\psi|^2\psi$. Οπότε η συνθήκη $\delta K = 0$ δίνει $\int d^3x \delta\psi^* (-\nabla^2\psi - g|\psi|^4\psi) = 0$.

Η παραπάνω σχέση ισχύει για κάθε $\delta\psi^*$, οπότε καταλήγουμε ότι η ελαχιστοποίηση του $K(\psi)$ επιτυγχάνεται για λύσεις της διαφορικής εξίσωσης

$$\nabla^2\psi + g|\psi|^4\psi = 0. \quad (13.15)$$

Η Εξ. (13.15) προσδιορίζει τα τοπικά ελάχιστα της $K(\psi)$. Αποδεικνύεται ότι το απόλυτο ελάχιστο είναι θετικό και σφαιρικά συμμετρικό [223], οπότε η Εξ. (13.15) γίνεται $\psi'' + \frac{2}{r}\psi' + g\psi^5 = 0$, όπου ο τόνος σημαίνει παραγωγή ως προς r . Η λύση $\psi_0(r) = (g+r^2)^{-1/2}$ είναι παντού πεπερασμένη και μηδενίζεται στο άπειρο. (Δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, αλλά αυτό δε δημιουργεί πρόβλημα στην ανισότητα.) Υπολογίζουμε

$$\|\nabla\psi_0\|^2 = 4\pi \int_0^\infty dr \frac{r^4}{(g+r^2)^3} = \frac{3\pi^2}{4\sqrt{g}}, \quad \|\psi_0^3\|^2 = 4\pi \int_0^\infty dr \frac{r^2}{(g+r^2)^3} = \frac{\pi^2}{4g^{3/2}}. \quad (13.16)$$

Βρίσκουμε $K_s := K(\psi_0) = 3(\pi/2)^{4/3}$, οπότε προκύπτει η ανισότητα (13.12).

Εφαρμόζουμε την ανισότητα (13.12) στον τελεστή Σρέντινγκερ \hat{H} στις τρεις διαστάσεις:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq \frac{K_s}{2m} \left(\int d^3x \rho_\psi^3(\mathbf{r}) \right)^{1/3} + \int d^3x \rho_\psi(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) := \mathcal{E}(\rho_\psi), \quad (13.17)$$

όπου $\rho_\psi = |\psi|^2$. Για να βρούμε ένα κάτω φράγμα στη Χαμιλτονιανή, ελαχιστοποιούμε το $\mathcal{E}(\rho)$ για όλα τα θετικά ρ που ικανοποιούν τη συνθήκη κανονικοποίησης $\int d^3x \rho = 1$. Χρησιμοποιούμε τη μέθοδο πολλαπλασιαστών Λαγκράνζ: αναζητούμε το ελάχιστο του συναρτησιακού $\mathcal{E}_1(\rho) := \mathcal{E}(\rho) + \lambda(\int d^3x \rho - 1)$ για κάποια σταθερά λ . Η συνθήκη $\delta\mathcal{E}_1 = 0$ δίνει

$$\int \delta\rho [K_s \rho^2 + 2m\kappa^2(V + \lambda)], \quad (13.18)$$

όπου $\kappa = (\int d^3x \rho^3)^{1/3}$. Άρα η δεξιά πλευρά ελαχιστοποιείται για

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \kappa \sqrt{\frac{2m}{K_s}} \sqrt{-\lambda - V(\mathbf{r})} & V(\mathbf{r}) < -\lambda \\ 0 & V(\mathbf{r}) \geq -\lambda \end{cases} \quad (13.19)$$

Οι σταθερές κ, λ προσδιορίζονται από τις συνθήκες $\int d^3x \rho_0 = 1, \int d^3x \rho_0^3 = \kappa^3$, ενώ το κάτω όριο (13.17) γίνεται $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq \mathcal{E}(\rho_0) = -\lambda$.

Για δυναμικό Κουλόμπ $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi r}$, γράφουμε $R = \frac{Ze^2}{4\pi\lambda}$ και υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa^3} \int d^3x \rho_0^3 &= \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{K_s^{3/2}} \left(\frac{Ze^2}{4\pi} \right)^{3/2} \int_0^R r^2 (r^{-1} - R^{-1})^{3/2} = \frac{Z^{3/2} \sqrt{\pi} e^3 (2mR)^{3/2}}{32K_s^{3/2}} = 1 \\ &\rightarrow R = \frac{4(2/\pi)^{1/3} K_s}{Ze^2 m} = \frac{6\pi}{Ze^2 m} \rightarrow \lambda = \frac{Z^2 e^4 m}{24\pi^2} \end{aligned} \quad (13.19)$$

Καταλήγουμε ότι

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq -\frac{Z^2 e^4 m}{24\pi^2} = \frac{4}{3} E_1, \quad (13.20)$$

όπου E_1 είναι η ακριβής ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης, όπως δίνεται από την Εξ. (3.42).

13.2 Σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά: γενικές ιδιότητες

13.2.1 Η Χαμιλτονιανή

Η περίπτωση που το δυναμικό $V(r)$ είναι σφαιρικά συμμετρικό αξίζει ιδιαίτερη μνεία, τόσο λόγω της χαρακτηριστικής συμμετρίας του συστήματος, όσο και επειδή συχνά χρησιμοποιείται ως πρώτη προσέγγιση για τη μοντελοποίηση συστημάτων όπως άτομα και πυρήνες. Στο Κεφ. 3.2.3 με αφορμή το άτομο του υδρογόνου, είχαμε κάνει μια πρώτη μελέτη αυτού του προβλήματος, τώρα επανερχόμαστε με λεπτομέρειες.

Οι τελεστές $\hat{\ell}_i$ της τροχιακής στροφορμής μετατίθενται τόσο με το $\hat{\mathbf{p}}^2$ όσο και με το $\hat{\mathbf{r}}^2$. Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού οι τελεστές $\hat{\ell}_i$ είναι γεννήτορες περιστροφών στο χώρο, και οι τελεστές $\hat{\mathbf{p}}^2$ και $\hat{\mathbf{r}}^2$ αντιστοιχούν σε βαθμωτά μεγέθη, που δεν μεταβάλλονται κάτω από περιστροφές.

Αυτό σημαίνει ότι για κάθε τελεστή Σρέντινγκερ

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{r}), \quad (13.21)$$

με σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό, όπου $\hat{r} = \sqrt{\hat{\mathbf{r}}^2}$, ισχύει ότι

$$[\hat{H}, \hat{\ell}_i] = 0. \quad (13.22)$$

Η Εξ. (13.22) σημαίνει ότι οι τελεστές της τροχιακής στροφορμής είναι διατηρήσιμες ποσότητες, δηλαδή οι πιθανότητες για μία μέτρηση τους δεν εξαρτάται από τη στιγμή που γίνεται η μέτρηση. Επίσης σημαίνει ότι η Χαμιλτονιανή (13.22) είναι αναλλοίωτη κάτω από τις περιστροφές που γεννούν οι τελεστές της στροφορμής. Γι' αυτό λέμε ότι το σύστημα χαρακτηρίζεται από σφαιρική συμμετρία.

Γράφουμε την Εξ. (11.65) ως

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{r}^{-2} [(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - i(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})] + \hat{r}^{-2} \hat{\ell}^2. \quad (13.23)$$

Παρατηρούμε ότι ο τελεστής $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i r \sum_i \frac{x_i}{r} \frac{\partial}{\partial x_i} = -i r \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x_i} = -i r \frac{\partial}{\partial r}$ είναι καθαρά ακτινικός. Το ίδιο ισχύει για τον τελεστή $\hat{r}^{-2} [(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})]$

$$\hat{r}^{-2} [(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - i(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = -\frac{\partial}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}. \quad (13.24)$$

Χρησιμοποιούμε την έκφραση (11.70) σύμφωνα με την οποία ο χώρος Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^3)$ γράφεται ως τανυστικό γινόμενο για να γράψουμε $\hat{r}^{-2}[(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = \hat{\Pi}_r \otimes \hat{I}$, όπου ο τελεστής

$$\hat{\Pi}_r = -\frac{\partial}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}. \quad (13.25)$$

ορίζεται στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_r .

Χρησιμοποιώντας μαζί και την Εξ. (11.72) γράφουμε τη Χαμιλτονιανή (13.21) ως

$$\hat{H} = \left[\frac{1}{2m} \hat{\Pi}_r + V(\hat{r}) \right] \otimes \hat{I} + \frac{1}{2m} \hat{r}^{-2} \otimes \hat{\mathbf{l}}^2. \quad (13.26)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις του \mathcal{H} της μορφής είναι της μορφής $|\Psi\rangle \otimes |\ell, m\rangle$, όπου οι $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_r$ ικανοποιούν

$$\left[\frac{1}{2m} \hat{\Pi}_r + V(\hat{r}) + \frac{\ell(\ell+1)}{2m} \hat{r}^{-2} \right] |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (13.27)$$

είναι ιδιοδιανύσματα του τελεστή

$$\hat{H}_\ell = \frac{1}{2m} \hat{\Pi}_r + V(\hat{r}) + \frac{\ell(\ell+1)}{2m} \hat{r}^{-2} \quad (13.28)$$

που ορίζεται στο \mathcal{H}_r . Στη συνέχεια θα αναπαριστούμε τα ιδιοδιανύσματα του \hat{H}_ℓ ως $|E, \ell\rangle$.

Στην αναπαράσταση της θέσης, ορίζουμε $R_{E,\ell}(r) := \langle r | E, \ell \rangle$, οπότε η Εξ. (13.27) γίνεται

$$-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 R_{E,\ell}}{\partial r^2} - \frac{1}{mr} \frac{\partial R_{E,\ell}}{\partial r} + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell} = E R_{E,\ell}, \quad (13.29)$$

και ταυτίζεται με την Εξ. (3.32). Ουσιαστικά, χάρη στη σφαιρική συμμετρία, αναγάγαμε ένα τρισδιάστατο πρόβλημα ιδιοτιμών στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^3)$ σε ένα μονοδιάστατο πρόβλημα ιδιοτιμών στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_r των ακτινικών κυματοσυναρτήσεων.

Οι συναρτήσεις $R_{E,\ell}(r)$ πρέπει να μηδενίζονται στο $r = 0$. Θεωρούμε δυναμικό $V(r)$ το οποίο απειρίζεται πιο αργά από το $\frac{1}{r^2}$ κοντά στο $r = 0$, οπότε μπορεί να αγνοηθεί για $r \rightarrow 0$ σε σχέση με τον όρο $\ell(\ell+1)/r^2$. Οπότε θέτοντας $R_{E,\ell} \sim r^\alpha$ για κάποια $\alpha > 0$, στην Εξ. (13.29), βρίσκουμε ότι $\alpha(\alpha+1) = \ell(\ell+1)$, που αποδέχεται ως μόνη θετική λύση την $\alpha = \ell$. Άρα απαιτούμε οι λύσεις της Εξ. (13.29) να συμπεριφέρονται ως $R_{E,\ell} \sim r^\ell$ για $r \rightarrow 0$.

13.2.2 Διακριτό φάσμα

Για να βρούμε το διακριτό φάσμα της Χαμιλτονιανής (13.21) απαιτούμε να μηδενίζονται οι συναρτήσεις $R_{E,\ell}$ για $r \rightarrow \infty$. Η χρήση της συνάρτησης $u_{E,\ell} = r R_{E,\ell}$ φέρνει την Εξ. (13.29) σε μορφή μονοδιάστατης εξίσωσης του Σρέντινγκερ,

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2 u_{E,\ell}}{dr^2} + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_{E,\ell}(r) = E u_{E,\ell}(r), \quad (13.30)$$

με ενεργό δυναμικό $V_{eff}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)$.

Αυτό σημαίνει ότι για σταθερό ℓ , οι ιδιοσυναρτήσεις της (13.30) δεν είναι εκφυλισμένες (Θεώρημα 6.3). Επίσης το θεώρημα σύγκρισης (6.4) σημαίνει ότι μπορούμε να απαριθμήσουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της Εξ. (13.30) από έναν ακέραιο $n_r = 0, 1, 2, \dots$, έτσι ώστε η n_r -στη διεγερμένη ιδιοσυνάρτηση να έχει n_r κόμβους.

Είναι βολικό να ορίσουμε έναν ακέραιο $n = n_r + \ell + 1$, έτσι ώστε $n > \ell$. Συμβολίζουμε τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής ως $E_{n,\ell}$. Το θεώρημα σύγκρισης σημαίνει ότι η ενέργεια αυξάνει με το n_r , οπότε

$$E_{n+1,\ell} > E_{n,\ell}. \quad (13.31)$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας $E_{n,\ell}$ δεν εξαρτώνται από τον κβαντικό αριθμό m των σφαιρικών αρμονικών, και δεδομένου ότι υπάρχουν $2\ell + 1$ διαφορετικές τιμές του m για κάθε τιμή του ℓ , ο εκφυλισμός $g(E_{n,\ell})$ της ιδιοτιμής $E_{n,\ell}$ ικανοποιεί

$$g(E_{n,\ell}) \geq 2\ell + 1. \quad (13.32)$$

Για το δυναμικό Κουλόμπ, είδαμε ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας εξαρτώνται μόνο από το n και όχι από το ℓ , που σημαίνει ότι έχει εκφυλισμό $g(E_n) = n^2$. Αυτός ο εκφυλισμός οφείλεται στην ύπαρξη μίας επιπλέον συμμετρίας της Χαμιλτονιανής πέρα από την περιστροφική συμμετρία—βλ.Κεφ. 13.3.

Παρατηρούμε ότι οι τελεστές \hat{H}_ℓ της Εξ. (13.28) ικανοποιούν $\hat{H}_{\ell+1} - \hat{H}_\ell = \frac{\ell+1}{m} \hat{r}^{-2} \geq 0$. Σύμφωνα με το θεώρημα 5.16, η n -στη ιδιοτιμή του $\hat{H}_{\ell+1}$ θα είναι μεγαλύτερη από τη n -στη ιδιοτιμή του \hat{H}_ℓ . Άρα από δύο ιδιοτιμές της ενέργειας με την ίδια τιμή του n_r αυτή με τη μεγαλύτερη τιμή του ℓ είναι μεγαλύτερη. Κατά συνέπεια,

$$E_{n+1,\ell+1} > E_{n,\ell}. \quad (13.33)$$

Η Εξ. (13.33) σημαίνει ότι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας πάντα αντιστοιχεί στην ελάχιστη τιμή του ℓ , $\ell = 0$. Από το θεώρημα 6.3, ξέρουμε ότι ο τελεστής \hat{H}_ℓ δεν έχει εκφυλισμένες ιδιοτιμές. Άρα η θεμελιώδης κατάσταση έχει ενέργεια $E_{1,0}$ και δεν είναι εκφυλισμένη.

Από το θεώρημα 6.4, η κυματοσυνάρτηση $u_{1,0}$ της θεμελιώδης κατάστασης του \hat{H}_ℓ δεν έχει κόμβους, και αφού είναι πραγματική, μπορεί να επιλεγθεί θετική. Από την Εξ. (11.76) βλέπουμε ότι η Y_{00} είναι ίση με μία θετική σταθερά. Άρα η κυματοσυνάρτηση $\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{1,0}(r) Y_{00}(\theta, \phi)$ της θεμελιώδους κατάστασης του τελεστή Σρέντινγκερ είναι θετική. Μ' αυτόν τον τρόπο αποδείξαμε το θεώρημα 13.2 για την ειδική περίπτωση των σφαιρικά συμμετρικών δυναμικών.

Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο σωματιδίων συχνά περιγράφονται από ένα κεντρικό δυναμικό που είναι ελκτικό για όλα τα $r < r_0$ για κάποια σταθερά r_0 . Η συμπεριφορά των ιδιοτιμών για πολλά δυναμικά αυτής της μορφής περιγράφεται από το ακόλουθο θεώρημα [225]. Αν $\nabla^2 V(r) < 0$ για κάθε $r > 0$,

$$E_{n,\ell} \leq E_{n,\ell+1}, \quad (13.34)$$

ενώ αν $\nabla^2 V(r) > 0$ για κάθε $r > 0$, τότε

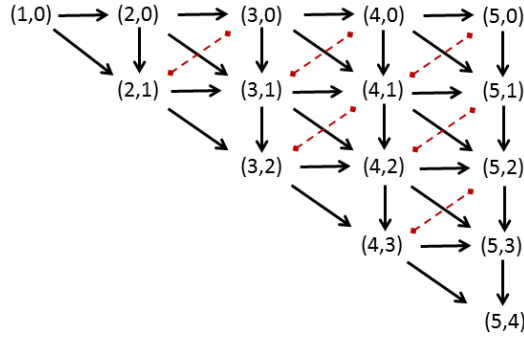
$$E_{n,\ell} \geq E_{n,\ell+1}. \quad (13.35)$$

Για ελκτικό δυναμικό που απειρίζεται ως $-\frac{1}{r^a}$ στο $r \rightarrow 0$, ισχύει η περίπτωση (13.34) αν $a < 1$ και η περίπτωση (13.35) αν $a > 1$. Η πρώτη περίπτωση είναι πιο συνήθης, δεδομένου ότι σημαίνει δυναμικό που απειρίζεται πιο αργά από το δυναμικό Κουλόμπ.

Αν ισχύει η ανισότητα (13.34), οι ανισότητες (13.31, 13.33) δίνουν τις ακόλουθες σχέσεις για τη διάταξη των ιδιοτιμών της ενέργειας.

$$E_{n,\ell} < E_{n+1,\ell} < E_{n+1,\ell+1} \quad (13.36)$$

$$E_{n,\ell} < E_{n,\ell+1} < E_{n+1,\ell+1}. \quad (13.37)$$



Σχήμα 13.1: Η διάταξη των πρώτων ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής για ένα γενικό σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό που ικανοποιεί την Εξ.(13.34). Ένα βελάκι από το (n, ℓ) στο (n', ℓ') σημαίνει ότι $E_{n,\ell} < E_{n',\ell'}$. Οι διακεκομμένες κόκκινες γραμμές δίνουν τα κενά της διάταξης, δηλαδή ζεύγη ιδιοτιμών των οποίων η διάταξη αλλάζει από δυναμικό σε δυναμικό.

Οι παραπάνω ανισότητες δεν αρκούν για να διατάξουν όλες τις ιδιοτιμές. Ειδικότερα, δεν υπάρχει κάποια γενική σχέση μεταξύ του $E_{n+1,\ell}$ και του $E_{n,\ell+1}$. Η διάταξη των πρώτων ιδιοτιμών της ενέργειας δίνεται στο Σχ. 11.1.

Ο αριθμός N_ℓ των δέσμιων λύσεων της Εξ. (13.30) με στροφορμή ℓ προσδιορίζεται από την ανισότητα του Μπάργκμαν [89, 90] (ανάλογο του Θεωρ. 6.7 για τον τελεστή Σρέντινγκερ στη μία διάσταση).

Θεώρημα 13.3 Για σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό $V(r)$ που ικανοποιεί $\lim_{|r \rightarrow \infty} V(r) = 0$,

$$N_\ell < \frac{1}{2\ell + 1} I_V, \quad (13.38)$$

όπου $I_V := \int_0^\infty dr r V_-(r)$ και όπου V_- το αρνητικό μέρος του δυναμικού $V_-(r) := \max\{0, -V(r)\}$.

Για επαρκώς μεγάλο ℓ , το n_ℓ είναι μικρότερο της μονάδας και αφού είναι ακέραιος πρέπει να μηδενίζεται. Ορίζουμε ως ℓ_{max} τη μέγιστη τιμή του ℓ για την οποία το δεξί σκέλος της Εξ. (13.38) είναι μεγαλύτερο της μονάδας, $\ell_{max} = \frac{1}{2}(I_V - 1)$. Οπότε ο συνολικός αριθμός N_- δέσμιων καταστάσεων του τρισδιάστατου τελεστή Σρέντινγκερ είναι

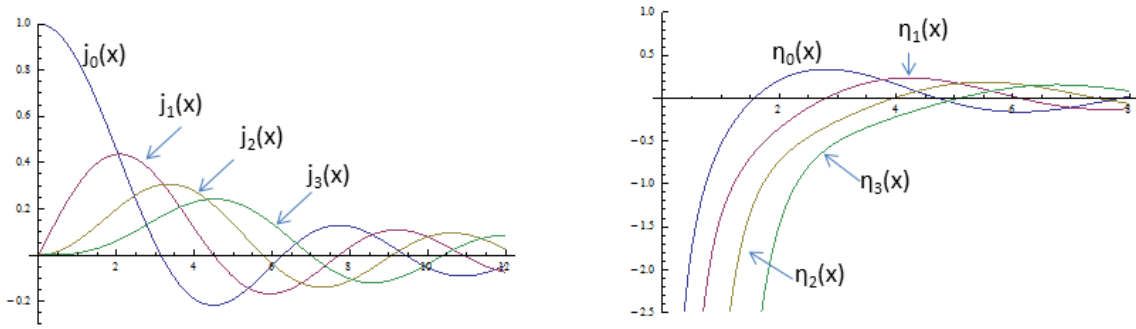
$$N_- := \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} (2\ell + 1) N_\ell \leq \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} I_V = (\ell_{max} + 1) I_V = \frac{1}{2} I_V (I_V + 1) \quad (13.39)$$

Παρατηρούμε ότι για επαρκώς ασθενές δυναμικό, μπορεί να ισχύει $I_V < 1$, οπότε $N_- < 1$ και άρα $N_- = 0$, δηλαδή να μην υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις.

Η ανισότητα Μπάργκμαν δεν είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για το δυναμικό Κουλόμπ, αφού γι' αυτό $I_V = \infty$. Για το δυναμικό Γιουκάβα $V(r) = -ge^{-\mu r}/r$, $g, \mu > 0$ που ταυτίζεται με το δυναμικό Κουλόμπ στο όριο $\mu \rightarrow 0$, βρίσκουμε $I_V = g/\mu$ και άρα $N_- \leq \frac{g(g+\mu)}{2\mu^2}$.

13.2.3 Συνεχές φάσμα

Οι τελεστές Σρέντινγκερ έχουν και συνεχές φάσμα, το οποίο περιγράφει την κίνηση του σωματιδίου όταν το δυναμικό δεν μπορεί να το εντοπίσει σε μία πεπερασμένη περιοχή του χώρου. Σ' αυτήν την περίπτωση δεν περιοριζόμαστε σε λύσεις της Εξ. (13.29) που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, αλλά αναζητούμε λύσεις που αντιστοιχούν σε γενικευμένα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής.



Σχήμα 13.2: Σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσσελ πρώτου και δευτέρου τύπου.

Θα εξετάσουμε δυναμικά μικρής εμβέλειας, δηλαδή δυναμικά $V(r)$ που πρακτικά μηδενίζονται για $r > r_0$, όπου r_0 η εμβέλεια του δυναμικού.

Εφόσον μελετάμε το συνεχές φάσμα, θεωρούμε $E \geq 0$. Είναι βολικό να χρησιμοποιήσουμε τη μεταβλητή $k > 0$, όπου $E = \frac{k^2}{2m}$. Για $r > r_0$, η Εξ. (13.29) γράφεται

$$x^2 \frac{d^2 R_{k,\ell}}{dx^2} + 2x \frac{dR_{k,\ell}}{dx} + [x^2 - \ell(\ell + 1)] R_{k,\ell} = 0, \quad (13.40)$$

όπου $x = kr$. Η Εξ. (13.40) είναι μία γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης, γνωστή ως συνάρτηση Μπέσσελ (Bessel). Αποδέχεται ως λύση τις σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσσελ πρώτου τύπου $j_\ell(x)$ και δεύτερου τύπου $\eta_\ell(x)$, οι οποίες ορίζονται από τις σχέσεις

$$j_\ell(x) = (-1)^\ell x^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x}, \quad \eta_\ell(x) = (-1)^\ell x^{\ell+1} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\cos x}{x} \quad (13.41)$$

Οι συναρτήσεις Μπέσσελ πρώτου τύπου ικανοποιούν $j_0(0) = 1$ και $j_\ell(0) = 0$ για $\ell \geq 1$, ενώ οι δεύτερου τύπου $\eta_\ell(0) = -\infty$. Για $x \rightarrow \infty$ τείνουν και οι δύο στο μηδέν. Είναι κανονικοποιημένες έτσι ώστε η Ρουσκιανή τους να ικανοποιεί

$$j_\ell(x)n'_\ell(x) - j'_\ell(x)\eta_\ell(x) = \frac{1}{x^2} \quad (13.42)$$

Αναλυτικές εκφράσεις των πρώτων σφαιρικών συναρτήσεων Μπέσσελ δίνονται στον πίνακα 13.1 και γραφικές παραστάσεις στο Σχ. 13.2.

Οπότε, η γενική λύση της Εξ. (13.40) είναι

$$R_{k,\ell}(r) = A_\ell(k)j_\ell(kr) + B_\ell(k)\eta_\ell(kr). \quad (13.43)$$

Για γενικό δυναμικό, η Εξ. (13.40) ισχύει μόνο για $r > r_0$. Ωστόσο για ελεύθερο σωματίο ($V(r) = 0$), η Εξ. (13.40) ισχύει για κάθε $r \geq 0$, και άρα και οι λύσεις (13.43) ισχύουν για κάθε $r \geq 0$. Ωστόσο, για $r = 0$, η συνάρτηση η_ℓ απειρίζεται, οπότε ο αντίστοιχος όρος στην Εξ. (13.43) δεν είναι φυσικά αποδεκτός. Άρα για ελεύθερο σωματίο, η αποδεκτή λύση της (13.40) είναι

$$R_{k,\ell}(r) = A_\ell(k)j_\ell(kr). \quad (13.44)$$

Οι σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσσελ για μεγάλες τιμές του ορίσμάτος τους συμπεριφέρονται ως

$$j_\ell(x) \simeq \frac{\sin(x - \frac{\ell\pi}{2})}{x}, \quad \eta_\ell(x) \simeq -\frac{\cos(x - \frac{\ell\pi}{2})}{x}. \quad (13.45)$$

Αυτή η ασυμπτωτική συμπεριφορά προκύπτει από την Εξ. (13.41), καθώς ο κυρίαρχος όρος είναι αυτός που αντιστοιχεί στην επαναλαμβανόμενη δράση του διαφορικού τελεστή μόνο στον όρο της τριγωνομετρικής συνάρτησης. Οποιαδήποτε δράση πάνω στον x^{-1} δίνει όρο που πέφτει πιο γρήγορα στο άπειρο από το x^{-1} . Έτσι για το $j_\ell(x)$ παίρνουμε έναν όρο $x^{-1} \frac{d^\ell \sin x}{dx^\ell}$, ο οποίος άμεσα διαπιστώνεται ότι ταυτίζεται με την Εξ. (13.45). Ομοίως και για το $\eta_\ell(x)$.

Άρα για γενικό δυναμικό στο όριο $r \rightarrow \infty$, οι συναρτήσεις $R_{k,\ell}(r)$ περιέχουν έναν όρο

$$A_\ell(k) \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) - B_\ell(k) \cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) = C_\ell(k) \left[\cos \delta_\ell \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \sin \delta_\ell \cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \right] = C_\ell(k) \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell(k)\right). \quad (13.45)$$

συναρτήσεις των σταθερών

$$C_\ell(k) = \sqrt{A_\ell(k)^2 + B_\ell(k)^2}, \quad (13.46)$$

$$\delta_\ell(k) = -\tan^{-1}[B_\ell(k)/A_\ell(k)]. \quad (13.47)$$

Οι ποσότητες $\delta_\ell(k)$ καλούνται *φασικές μετατοπίσεις*. Δεδομένου ότι για ελεύθερο σωματίο $\delta_\ell = 0$, οι φασικές μετατοπίσεις εμπεριέχουν την πληροφορία για το κατά πόσο εκτρέπεται ένα σωματίο από την ελεύθερη διάδοση λόγω της παρουσίας του δυναμικού.

Καταλήγουμε ότι για $r > r_0$,

$$R_{k,\ell}(r) = C_\ell(k) \frac{\cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(kr)}{kr}. \quad (13.48)$$

και ότι ασυμπτωτικά

$$R_{k,\ell}(r) = C_\ell(k) \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell(k)\right)}{kr}. \quad (13.49)$$

Οι γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις $R_{k,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ συμβολίζονται ως ένα κεν $|k, \ell, m\rangle$ ή ισοδύναμα $|E, \ell, m\rangle$. Οι σταθερές $C_\ell(k)$ στην Εξ. (13.49) επιλέγονται ώστε να ισχύει η σχέση κανονικοποίησης

$$\langle E, \ell, m | E', \ell', m' \rangle = \delta(E - E') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (13.50)$$

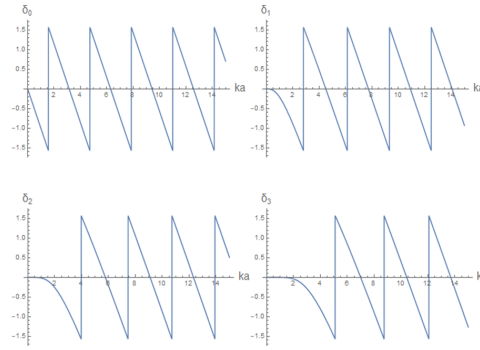
Θα επανέρθουμε στις γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις $|E, \ell, m\rangle$ σε επόμενο κεφάλαιο, όπου θα εξετάσουμε τη σκέδαση σε σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό.

ℓ	$j_\ell(x)$	$\eta_\ell(x)$
0	$\frac{\sin x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x}$
1	$\frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$
2	$\left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\sin x}{x} - \frac{3 \cos x}{x^2}$	$-\left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\cos x}{x} - \frac{3 \sin x}{x^2}$
3	$3\left(\frac{5}{x^3} - \frac{2}{x}\right) \frac{\sin x}{x} - \left(\frac{15}{x^2} - 1\right) \frac{\cos x}{x}$	$-3\left(\frac{5}{x^3} - \frac{2}{x}\right) \frac{\cos x}{x} - \left(\frac{15}{x^2} - 1\right) \frac{\sin x}{x}$

Πίνακας 13.1: Οι πρώτες σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσσελ πρώτου και δευτέρου τύπου

Παράδειγμα 13.1. Το απλούστερο δυναμικό που επιτρέπει αναλυτικό υπολογισμό των μετατοπίσεων φάσης είναι το δυναμικό σκληρής σφαίρας,

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r \geq 0 \end{cases}, \quad (13.51)$$



Σχήμα 13.3: Οι μετατοπίσεις φάσης δ_ℓ της Εξ. (13.52) ως συνάρτηση του ka/π , για $\ell = 0, 1, 2, 3$.

όπου $a > 0$. Γι' αυτό το δυναμικό $R_{k,\ell}(r) = 0$ για $r < a$, ενώ ισχύει η Εξ. (13.43) για $r \geq a$. Απαιτώντας συνέχεια στο $r = a$, παίρνουμε $\cos \delta_\ell j_\ell(ka) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(ka) = 0$, και άρα

$$\tan \delta_\ell(k) = \frac{j_\ell(ka)}{\eta_\ell(ka)}. \tag{13.52}$$

Από τον πίνακα 13.1, βρίσκουμε αμέσως ότι $\delta_0(k) = (-ka) \bmod (\pi)$. Γραφικές παραστάσεις των μετατοπίσεων φάσης για μεγαλύτερες τιμές του ℓ δίνονται στο Σχ. 13.3.

13.3 Σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά: ακριβείς λύσεις

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τις ιδιότητες του τελεστή Σρέντινγκερ για επιλεγμένα σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά. Ήδη έχουμε εξετάσει το δυναμικό Κουλόμπ στο Κεφ. 3.2. Θα το επανεξετάσουμε με μία εναλλακτική θεώρηση που τονίζει τις επιπλέον συμμετρίες που το χαρακτηρίζουν. Προηγουμένως θα εξετάσουμε τον ισοτροπικό αρμονικό ταλαντωτή και το δυναμικό Μορς (Morse) που περιγράφει διατομικά μόρια.

13.3.1 Ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής

Ο ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής χαρακτηρίζεται από δυναμικό

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - \frac{3}{2}\omega, \tag{13.53}$$

όπου αφαιρέσαμε τη σταθερά $\frac{3}{2}\omega$ προκειμένου η θεμελιώδης κατάσταση να έχει ενέργεια 0.

Ο τρισδιάστατος ισοτροπικός ταλαντωτής αντιστοιχεί σε σύστημα τριών μονοδιάστατων ταλαντωτών με την ίδια συχνότητα, έναν για κάθε κατεύθυνση του χώρου. Τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής μπορούν να γραφούν ως $|n_1, n_2, n_3\rangle$, όπου $n_i = 0, 1, 2, \dots$. Οι ιδιοτιμές είναι

$$E_N = N\omega \tag{13.54}$$

όπου $N = n_1 + n_2 + n_3$. Για να βρούμε το βαθμό εκφυλισμού $g(N)$ πρέπει να προσδιορίσουμε όλες τις δυνατές τριάδες ακεραίων (n_1, n_2, n_3) με άθροισμα N . Αυτό σημαίνει ότι για κάθε $n_1, n_2 + n_3 = N - n_1$, η οποία εξίσωση ικανοποιείται από $N - n_1 + 1$ ζεύγη (n_2, n_3) . (Το n_2 παίρνει τιμές

$0, 1, \dots, N - n_1$, ενώ το n_3 προσδιορίζεται πλήρως από την ισότητα. Άρα ο βαθμός εκφυλισμού είναι

$$\begin{aligned} g(N) &= \sum_{n_1=0}^N (N+1-n_1) = (N+1)^2 - \sum_{n_1=0}^N n_1 \\ &= (N+1)^2 - \frac{1}{2}N(N+1) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \end{aligned} \quad (13.54)$$

Εναλλακτικά, βρίσκουμε τις ιδιοτιμές λύνοντας τη διαφορική εξίσωση (13.30). Χρησιμοποιώντας τις αδιάστατες μεταβλητές $\xi = \sqrt{m\omega r}$ και $\epsilon = E/\omega$, η Εξ. (13.30) γράφεται

$$u'' + \left(2\epsilon + 3 - \xi^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) u = 0, \quad (13.55)$$

όπου ο τόνος σημαίνει παραγωγή ως προς ξ . Για μεγάλες τιμές του ξ παίρνουμε προσεγγιστικά $u'' - \xi^2 u = 0$, η οποία επιδέχεται την προσεγγιστική λύση $u \simeq e^{-\xi^2/2}$. Για ξ κοντά στο μηδέν, $u'' \simeq \ell(\ell+1)/\xi^2 u$. Η λύση που είναι συμβατή με τη συνθήκη $u(0) = 0$ είναι η $u \sim \xi^{\ell+1}$. Δοκιμάζουμε λύση της μορφής $u(\xi) = \xi^{\ell+1} e^{-\xi^2/2} f(\xi)$, οπότε η Εξ. (13.55) γίνεται

$$f'' + 2\left(\frac{\ell+1}{\xi} - \xi\right)f' + 2(\epsilon - \ell)f = 0. \quad (13.56)$$

Λύνουμε αυτή τη διαφορική εξίσωση, γράφοντας το f σε μορφή σειράς $f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n$, οπότε $f' = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)c_{n+1}\xi^n$ και $f'' = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)c_{n+2}\xi^n$. Η Εξ. (13.56) γίνεται

$$\frac{2\ell+1}{\xi}c_1 + \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n [c_{n+2}(n+2)(n+2\ell+3) - 2c_n(n-\epsilon+\ell)] = 0. \quad (13.57)$$

απ' όπου παίρνουμε $c_1 = 0$ και την αναδρομική σχέση

$$c_{n+2} = \frac{2(n-\epsilon+\ell)}{(n+2)(n+2\ell+3)}c_n. \quad (13.58)$$

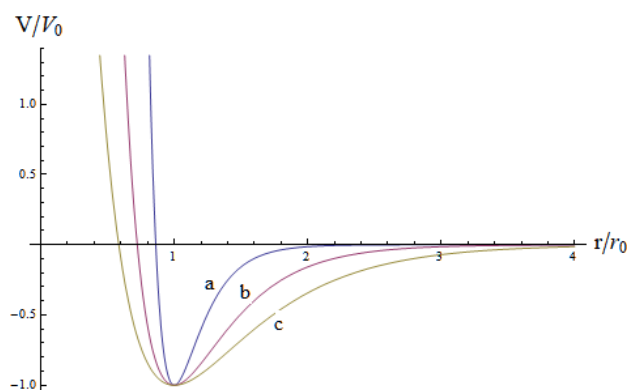
Βλέπουμε ότι $c_n = 0$ για περιττό n . Για άρτιο n , η σειρά ορίζει ένα πολυώνυμο (και άρα τετραγωνικά ολοκληρώσιμη λύση), αν υπάρχει άρτιος $n = 2n_r$, $n_r = 0, 1, 2, \dots$ έτσι ώστε $c_{2n_r+2} = 0$, δηλαδή $2n_r - \epsilon + \ell = 0$. Έτσι παίρνουμε την Εξ. (13.54) για $N = 2n_r + \ell$.

Χρησιμοποιώντας τον κβαντικό αριθμό $n = n_r + \ell + 1$, που χαρακτηρίζει τα σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά, οι ιδιοτιμές τις ενέργειας γράφονται

$$E_{n,\ell} = \omega[2(n-1) - \ell]. \quad (13.59)$$

Στον ισοτροπικό αρμονικό ταλαντωτή, $E_{n,\ell} > E_{n,\ell+1}$. Αυτό είναι συνέπεια της ανισότητας (13.35), δεδομένου ότι $\nabla^2 V(r) = 3m\omega^2 > 0$. Επίσης παρατηρούμε ότι όταν η ιδιοτιμή της ενέργειας αντιστοιχεί σε άρτιο N , τότε και το ℓ είναι άρτιο, ενώ αν αντιστοιχεί σε περιττό N τότε και το ℓ είναι περιττό.

Ο εκφυλισμός του ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή είναι πολύ μεγαλύτερος από $2\ell + 1$. Αυτό οφείλεται στην ύπαρξη συμμετριών επιπλέον αυτής των περιστροφών. Όντως, η Χαμιλτονιανή είναι αναλλοίωτη κάτω από την ομάδα $SU(3)$ —βλ. Άσκ. 12.7.



Σχήμα 13.4: Το δυναμικό Μορς για διαφορετικές τιμές του λόγου a/r_0 : (α) $a/r_0 = 0, 2$, (β) $a/r_0 = 0, 4$, (γ) $a/r_0 = 0, 6$.

13.3.2 Δυναμικό Μορς

Όπως αναφέραμε στο Κεφ. 13.1.1, ο τελεστής Σρέντινγκερ περιγράφει και συστήματα δύο σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μέσω ενός κεντρικού δυναμικού. Σε πολλά συστήματα εμφανίζονται δυναμικά $V(r)$ με την ακόλουθη συμπεριφορά. (α) $V(r) \rightarrow 0$ για $r \rightarrow \infty$, (β) $V(r) \rightarrow \infty$ για $r \rightarrow 0$, και (γ) υπάρχει ένα απόλυτο ελάχιστο του δυναμικού για $r = r_0$ με $V(r_0) = 0$. Τέτοια δυναμικά περιγράφουν, για παράδειγμα, την αλληλεπίδραση δύο σωματιδίων σε ένα διατομικό μόριο.

Εδώ θα εξετάσουμε ένα δυναμικό αυτής της μορφής, το δυναμικό του Μορς (Morse) [226], για το οποίο μπορεί να βρεθεί ακριβής λύση του προβλήματος ιδιοτιμών. Το δυναμικό Μορς είναι της μορφής

$$V(r) = V_0[e^{-2(r-r_0)/a} - 2e^{-(r-r_0)/a}], \quad (13.60)$$

όπου V_0, a, r_0 είναι θετικές σταθερές. Το δυναμικό (13.60) παίρνει την ελάχιστη τιμή $-V_0$ για $r = r_0$. Για τιμές του r κοντά στο r_0 , το δυναμικό συμπεριφέρεται ως $V(r) = -V_0 + \frac{V_0}{a^2}(r - r_0)^2$, δηλαδή αντιστοιχεί σε αρμονικό ταλαντωτή συχνότητας

$$\omega_0 = \frac{\sqrt{2V_0/m}}{a}, \quad (13.61)$$

όπου m είναι η μάζα του σωματιδίου (η ανηγμένη μάζα σε ένα διατομικό μόριο).

Παρατηρούμε ότι $V(0) = V_0(e^{2r_0/a} - e^{r_0/a})$, δηλαδή το δυναμικό δεν απειρίζεται για $r = 0$, οπότε δεν ικανοποιεί τις συνθήκες που θέσαμε νωρίτερα. Ωστόσο αν $r_0/a \gg 1$, η τιμή του $V(0)$ είναι πολύ μεγάλη και άρα οι δέσμιες καταστάσεις δεν επηρεάζονται σημαντικά από η συμπεριφορά του δυναμικού κοντά στο 0.

Η Εξ. (13.30) για το δυναμικό $V(r)$ (13.60) είναι ακριβώς επιλύσιμη για $\ell = 0$. Με την αλλαγή μεταβλητών

$$z = \lambda e^{-(r-r_0)/a}, \quad (13.62)$$

όπου $\lambda = \sqrt{2mV_0}a$, η Εξ. (13.30) γίνεται

$$u'' + \frac{1}{z}u' + \left(\frac{2\lambda}{z} - 1 - \frac{\kappa^2}{z^2}\right)u = 0. \quad (13.63)$$

Στην Εξ. (13.63) θεωρήσαμε δέσμιες καταστάσεις ($E < 0$) και ορίσαμε $\kappa^2 = \sqrt{2m|E|}a$. Ο τόνος συμβολίζει παραγωγή ως προς z .

Η συνάρτηση u μηδενίζεται για $r = 0$, ή ισοδύναμα για $z = e^{r_0/a}$. Για $r_0/a \gg 1$, μπορούμε να θεωρήσουμε προσεγγιστικά ότι η u μηδενίζεται για $z \rightarrow \infty$, με σφάλμα της τάξης του $e^{-r_0/a}$ που είναι αμελητέο. Για μεγάλες τιμές του z , η Εξ. (13.63) γίνεται $u'' - u = 0$, με λύσεις $u = e^{\pm z}$. Κρατάμε τη λύση e^{-z} , έτσι ώστε η u να μηδενίζεται για $z \rightarrow \infty$.

Για z κοντά στο μηδέν, η Εξ. (13.63) γίνεται $u'' + \frac{1}{z}u' - \frac{\kappa^2}{z^2}u = 0$. Δοκιμάζουμε λύση της μορφής $u \rightarrow z^s$ και βρίσκουμε $s = \pm\kappa$. Αποδεκτή είναι μόνο η λύση $s = \kappa$, προκειμένου να ισχύει ότι $u(0) = 0$.

Γράφουμε $u(z) = z^\kappa e^{-z} f(z)$ για κάποια συνάρτηση $f(z)$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (13.63) βρίσκουμε

$$f'' + \left(-2 + \frac{2\kappa + 1}{z}\right) + \frac{2}{z}(\lambda - \kappa - \frac{1}{2})f = 0. \quad (13.64)$$

Γράφοντας τη συνάρτηση f ως σειρά $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$, η Εξ. (13.63) γίνεται

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+1)(2\kappa + n + 1)c_{n+1} + 2(\lambda - \kappa - n - \frac{1}{2})c_n \right] z^{n-1} = 0, \quad (13.65)$$

η οποία δίνει μία αναδρομική σχέση για τους συντελεστές c_n ,

$$c_{n+1} = 2 \frac{n + \kappa - \lambda + \frac{1}{2}}{(n+1)(2\kappa + n + 1)} c_n. \quad (13.66)$$

Για να είναι η συνάρτηση u τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, πρέπει η f να είναι πολυωνυμική. Δηλαδή πρέπει να υπάρχει μη-αρνητικός ακέραιος n_r , για τον οποίον $c_{n_r+1} = 0$, ή ισοδύναμα

$$\kappa = \lambda - \frac{1}{2} - n_r. \quad (13.67)$$

Η Εξ. (13.67) δίνει τις ιδιοτιμές της ενέργειας,

$$\begin{aligned} E_{n_r} &= -\frac{1}{2ma^2} \left(\sqrt{2mV_0}a - (n_r + \frac{1}{2}) \right)^2 \\ &= -V_0 + \omega_0(n_r + \frac{1}{2}) - g(n_r + \frac{1}{2})^2. \end{aligned} \quad (13.68)$$

Στην τελευταία έκφραση θέσαμε $g = (2ma^2)^{-1}$. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας για $\ell = 0$ αντιστοιχούν σε έναν αρμονικό ταλαντωτή για τις ταλαντώσεις γύρω από το r_0 συν έναν αναρμονικό όρο.

Ο κβαντικός αριθμός n_r δεν μπορεί να πάρει οσοδήποτε μεγάλες ακέραιες τιμές. Καθώς $\kappa \geq 0$, η Εξ. (13.67) έχει λύσεις μόνο εφόσον $n_r + \frac{1}{2} \leq \lambda$. Άρα ο τελεστής Σρέντινγκερ έχει

$$N_0 = \left[\lambda - \frac{1}{2} \right] \quad (13.68)$$

δέσμιες καταστάσεις για $\ell = 0$, όπου $[x]$ σημαίνει το ακέραιο μέρος του πραγματικού αριθμού x .

Στον πίνακα 13.2 δίνονται τιμές για τις παραμέτρους του δυναμικού Μορς που ταιριάζουν με τη φασματοσκοπία συγκεκριμένων διατομικών μορίων.

Μόριο	$V_0(\text{eV})$	$r_0(\text{Å})$	$a(\text{Å})$	$\omega_0(\text{eV})$	$g(\text{meV})$	N_0
H_2	4,8	0,7	0,49	0,54	15,6	16
HCl	4,6	1,1	0,46	0,37	7,4	24
I_2	1,6	3,4	0,68	0,027	0,11	115

Πίνακας 13.2: Οι παράμετροι του δυναμικού Μορς για διάφορα μόρια.

Ένθετο 13.3. Προσεγγιστική λύση του δυναμικού Μορς για $\ell > 0$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών για το δυναμικό Μορς δεν έχει ακριβή λύση για $\ell > 0$. Ωστόσο υπάρχει μία απλή προσέγγιση που είναι ιδιαίτερα αποτελεσματική για τις τιμές των παραμέτρων που αντιστοιχούν σε διατομικά μόρια. Γράφουμε το ενεργό δυναμικό $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2}$ της Εξ. (13.30) ως συνάρτηση της μεταβλητής z της Εξ. (13.62),

$$V(z) = gz^2 - \omega_0 z + \frac{\ell(\ell+1)}{2m[r_0 - a \log(z/\lambda)]^2}. \quad (13.69)$$

Το σημείο ισοροπίας $r = r_0$ αντιστοιχεί σε $z = \lambda$. Αναπτύσσουμε τον όρο που εξαρτάται από το ℓ ως σειρά Τέυλορ γύρω από το $z = \lambda$ και κρατάμε μόνο τετραγωνικούς όρους. Παίρνουμε

$$V(z) \simeq gz^2 - \omega_0 z + \frac{\ell(\ell+1)}{2mr_0^2} \left[1 + \frac{2a}{\lambda r_0} (z - \lambda) + \frac{(3a^2 - ar_0)}{\lambda^2 r_0^2} (z - \lambda)^2 \right], \quad (13.70)$$

Το δυναμικό (13.70) γράφεται $V(z) = \Delta_\ell + \bar{g}_\ell z^2 - \bar{\omega}_\ell z$, όπου

$$\Delta_\ell = \frac{\ell(\ell+1)}{2mr_0^2} \left(1 - \frac{3a}{r_0} + \frac{3a^2}{r_0^2} \right) \quad (13.71)$$

$$\bar{\omega}_\ell = \omega_0 - \frac{2\ell(\ell+1)a}{m\lambda r_0^2} \left(1 - \frac{3a}{2r_0} \right) \quad (13.72)$$

$$\bar{g}_\ell = g - \frac{\ell(\ell+1)a}{2m\lambda^2 r_0^2} \left(1 - \frac{3a}{r_0} \right). \quad (13.73)$$

Η Εξ. (13.30) για $\ell > 0$ δίνει

$$u'' + \frac{1}{z}u' + \left(\frac{\bar{\omega}_\ell}{gz} - \frac{\bar{g}_\ell}{g} - \frac{|E - \Delta_\ell|}{gz^2} \right) u = 0 \quad (13.74)$$

Κάνοντας αλλαγή μεταβλητής σε $\bar{z} = \frac{\bar{g}_\ell}{g}z$, η Εξ. (13.64) παίρνει ακριβώς τη μορφή (13.63), αλλά με την αντικατάσταση $\lambda \rightarrow \bar{\lambda}_\ell$ και $\kappa \rightarrow \bar{\kappa}_\ell$, όπου

$$\bar{\lambda}_\ell = \frac{\bar{\omega}_\ell}{2\bar{g}_\ell}, \quad \bar{\kappa}_\ell = \sqrt{\frac{|E - \Delta_\ell|}{\bar{g}_\ell}}. \quad (13.75)$$

εφόσον $\Delta_\ell < |E|$.

Αυτό σημαίνει ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας προέρχονται από το ανάλογο της Εξ.(13.67),

$$\bar{\kappa}_\ell = \bar{\lambda}_\ell - \frac{1}{2} - n_r, \quad (13.76)$$

που σημαίνει ότι

$$E_{n_r, \ell} = -\frac{\bar{\omega}_\ell^2}{4\bar{g}_\ell} + \Delta_\ell + \bar{\omega}_\ell \left(n_r + \frac{1}{2} \right) - \bar{g}_\ell \left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (13.77)$$

13.3.3 Αλγεβρική περιγραφή του ατόμου του υδρογόνου.

Το 1926 και λίγο πριν την ανάπτυξη της εξίσωσης του Σρέντινγκερ, ο Πάουλι υπολόγισε το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου με τη μηχανική πινάκων του Χάιζενμπεργκ [234]. Στην ουσία ο Πάουλι χρησιμοποίησε μια συμμετρία της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου, πέρα από τη σφαιρική συμμετρία, για να συνδέσει το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου με τις μοναδιαίες αναπαραστάσεις της ομάδας $SO(3)$. Η ύπαρξη της επιπλέον αυτής συμμετρίας εξηγεί γιατί ο εκφυλισμός των ιδιοτιμών του ατόμου του υδρογόνου είναι μεγαλύτερος του $2\ell + 1$.

Στην κλασική μηχανική, η Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στο ελκτικό δυναμικό Κουλόμπ είναι $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{a}{r}$. Η επιπλέον συμμετρία σχετίζεται με το διάνυσμα Ρούνγκε-Λεντς (Runge-Lenz)

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{p} \times \boldsymbol{\ell}}{m} - a \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (13.78)$$

Το διάνυσμα \mathbf{A} ικανοποιεί $\{H, \mathbf{A}\} = 0$ και ως εκ τούτου ορίζει τρεις διατηρήσιμη ποσότητα για το δυναμικό Κουλόμπ, πέρα από τις τρεις συνιστώσες της στροφορμής.

Στην κβαντική θεωρία ορίζουμε τους τελεστές Ρούνγκε-Λεντς

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2m} \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} (\hat{p}_j \hat{\ell}_k + \hat{\ell}_k \hat{p}_j) - a \hat{x}_i \hat{r}^{-1}. \quad (13.79)$$

όπου $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ είναι το διάνυσμα της στροφορμής. Εύκολα αποδεικνύουμε ότι

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} = 0. \quad (13.80)$$

Η Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \alpha \hat{r}^{-1}$ ικανοποιεί τις σχέσεις μετάθεσης $[\hat{x}_i, \hat{H}] = i \hat{p}_i / m$, $[\hat{p}_i, \hat{H}] = -i \hat{x}_i \hat{r}^{-3}$, $[\hat{\ell}_i, \hat{H}] = 0$. Χρησιμοποιώντας αυτές τις σχέσεις, βρίσκουμε ότι

$$[\hat{H}, \hat{A}_i] = 0. \quad (13.81)$$

Η Εξ. (13.81) σημαίνει ότι το διάνυσμα Ρούνγκε-Λεντς είναι διατηρούμενη ποσότητα για το δυναμικό Κουλόμπ, όπως είναι και το διάνυσμα της στροφορμής $\hat{\boldsymbol{\ell}}$. Μπορούμε λοιπόν να εξετάσουμε τις αλγεβρικές ιδιότητες των $\hat{\ell}_i$ και \hat{A}_i περιοριζόμενοι στον ιδιόχωρο V_E της Χαμιλτονιανής που αντιστοιχεί σε ενέργεια E . Αντικαθιστώντας την Εξ. (11.63) στην Εξ. (13.79) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \hat{A}_i &= \left(\hat{x}_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \hat{x}_i \right) - \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{2m} \hat{p}_i - a \hat{x}_i \hat{r}^{-1} \\ &= (\hat{x}_i \hat{H} + \hat{H} \hat{x}_i) - \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{2m} \hat{p}_i + \alpha \hat{x}_i \hat{r}^{-1} \\ &= -\frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{2m} \hat{p}_i + (E + \alpha \hat{r}^{-1}) \hat{x}_i, \end{aligned} \quad (13.80)$$

όπου στο τελευταίο βήμα πήραμε την προβολή στον υπόχωρο V_E , οπότε αντικαταστήσαμε $\hat{H} \rightarrow E \hat{I}$.

Η Εξ. (13.80) διευκολύνει τον υπολογισμό των σχέσεων μετάθεσης

$$[\hat{A}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{A}_k \quad (13.81)$$

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -\frac{2iE}{m} \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\ell}_k. \quad (13.82)$$

Επίσης βρίσκουμε ότι

$$\hat{A}^2 = \alpha^2 \hat{I} + \frac{2E}{m} (\hat{\ell}^2 + \hat{I}). \quad (13.83)$$

Περιοριζόμαστε στον ιδιόχωρο V_E της Χαμιλτονιανής \hat{H} με $E < 0$. Ορίζουμε τους τελεστές

$$\hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{\ell} - \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \hat{A}), \quad \hat{T} = \frac{1}{2} (\hat{\ell} + \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \hat{A}). \quad (13.84)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (13.81) και (13.82) βρίσκουμε ότι

$$[\hat{S}_i, \hat{T}_j] = 0, \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{S}_k, \quad [\hat{T}_i, \hat{T}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{T}_k. \quad (13.85)$$

Οι παραπάνω σχέσεις σημαίνουν ότι στο V_E υπάρχουν δύο ανεξάρτητες αναπαραστάσεις της ομάδας $SO(3)$, μία με γεννήτορες \hat{S}_i και μία με γεννήτορες \hat{T}_i . Η Εξ. (13.80) σημαίνει ότι

$$\hat{S}^2 = \hat{T}^2 = \frac{1}{4} (\hat{\ell}^2 + \frac{m}{2|E|} \hat{A}^2) \quad (13.86)$$

οπότε οι δύο αναπαραστάσεις έχουν την ίδια διάσταση. Γράφουμε λοιπόν $\hat{S}^2 = \hat{T}^2 = s(s+1)\hat{I}$, όπου το s παίρνει δυνατές τιμές $0, \frac{1}{2}, 1, \dots$. Οπότε έχουμε μία αναπαράσταση της ομάδας $SO(3) \times SO(3)$ στο V_E , η οποία θα είναι μη αναγώγιμη, αφού δεν υπάρχει μη τετριμμένος τελεστής να μετατίθεται με τα \hat{S}_i και τα \hat{T}_i . Άρα, η διάσταση του V_E (ο εκφυλισμός της ενέργειας) είναι $(2s+1)^2$.

Ο συνδυασμός της Εξ. (13.83) με την Εξ. (13.86) δίνει

$$\hat{S}^2 = \left(-1 + \frac{\alpha^2 m}{2|E|} \right) \hat{I}. \quad (13.87)$$

και άρα

$$E = -\frac{\alpha^2 m}{2n^2}, \quad (13.88)$$

όπου ο ακέραιος $n = 2s + 1$ παίρνει τιμές $1, 2, 3, \dots$. Καταλήξαμε στη συνήθη έκφραση για τις ιδιοτιμές και τον εκφυλισμό τους $g(E) = n^2$ για το ελκτικό δυναμικό Κουλόμπ.

13.4 Αλληλεπίδραση σωματιδίων με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο

13.4.1 Η ελάχιστη αντικατάσταση

Στην κλασική μηχανική, η κίνηση ενός σωματιδίου κάτω από τη δράση ενός εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού (ΗΜ) πεδίου (\mathbf{E}, \mathbf{B}) καθορίζεται από τις δυνάμεις Λόρεντς, Εξ. (1.13). Στην κβαντική θεωρία δεν υπάρχουν δυνάμεις ως θεμελιώδεις έννοιες καθώς η χρονική εξέλιξη δίνεται από τη Χαμιλτονιανή. Αυτό σημαίνει ότι η αλληλεπίδραση ενός σωματιδίου με ένα εξωτερικό ΗΜ πεδίο περιγράφεται μέσω της προσθήκης επιπλέον όρων στη Χαμιλτονιανή.

Ο βασικός κανόνας για την προσθήκη των όρων αλληλεπίδρασης (εφόσον θεωρούμε το σωματίο σημειακό και αγνοούμε το σπιν) είναι η λεγόμενη *ελάχιστη αντικατάσταση*, η οποία δουλεύει ιστορικά προήλθε από τον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό της κλασικής μηχανικής. Λειτουργεί ως εξής. Έστω σωματίο μάζας m και φορτίου q που κινείται εντός ενός ΗΜ πεδίου (\mathbf{E}, \mathbf{B}) . Στην εξίσωση $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2$ που περιγράφει ελεύθερο σωματίο αντικαθιστούμε

- τη Χαμιλτονιανή \hat{H} με $\hat{H} = q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t)$, όπου $\phi(\mathbf{r}, t)$ το ηλεκτρικό δυναμικό,
- την ορμή $\hat{\mathbf{p}}$ με τον τελεστή $\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$, όπου $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ είναι το μαγνητικό δυναμικό.

Τα ΗΜ δυναμικά σχετίζονται με τα πεδία (\mathbf{E}, \mathbf{B}) μέσω της Εξ. (1.18),

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Οπότε η Χαμιλτονιανή για ένα σωματίο εντός ΗΜ πεδίου γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t))^2 + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (13.88)$$

Η σχέση μετάθεσης $[\hat{p}_i, \hat{A}_j] = -i\frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i}$ σημαίνει ότι $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - i\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}$, οπότε και ο τετραγωνικός όρος στην Εξ. (13.88) γράφεται

$$(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 - 2q\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + iq\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} + q^2 A^2. \quad (13.89)$$

Είναι γνωστό ότι δύο διαφορετικά ΗΜ δυναμικά δίνουν τις ίδιες τιμές για τα πεδία \mathbf{E} και \mathbf{B} , αν σχετίζονται ένα μετασχηματισμό βαθμίδας (1.19). Αυτή η ιδιότητα μας επιτρέπει να επιβάλουμε *αυθαίρετα* μία επιπλέον συνθήκη στα διανυσματικά δυναμικά, η οποία να περιορίζει τις δυνατές μορφές του. Διαλέγουμε τη *βαθμίδα Κουλόμπ*, σύμφωνα με την οποία περιοριζόμαστε σε δυναμικά που ικανοποιούν $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Η Χαμιλτονιανή απλοποιείται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + q\phi - \frac{q}{m} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}^2 \quad (13.90)$$

Με την εξαίρεση του όρου $-\frac{q}{m} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ που είναι γραμμικός ως προς την ορμή, οι υπόλοιποι όροι στην Εξ.(13.90) αντιστοιχούν σε έναν τελεστή Σρέντινγκερ με δυναμικό $V_{eff} = q\phi + \frac{q^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}^2$.

Είναι ενδιαφέρουσα η μορφή που παίρνει ο όρος $-\frac{q}{m} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ για $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$, δηλαδή για δυναμικό που αντιστοιχεί σε ομογενές και σταθερό εξωτερικό πεδίο \mathbf{B} . Βρίσκουμε ότι $\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}$. Χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$ η οποία ισχύει και για τελεστές εφόσον δεν αλλάζει η σειρά τους.

Καταλήγουμε ότι για σταθερό και ομογενές μαγνητικό πεδίο, η Χαμιλτονιανή (13.90) περιέχει έναν όρο

$$\hat{V} = -\frac{q}{2m} \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}, \quad (13.91)$$

σύζευξης με την στροφορμή. Αυτός ο όρος είναι αντίστοιχος της κλασικής ενέργειας αλληλεπίδρασης μεταξύ διπόλου και μαγνητικού πεδίου $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$, όπου $\boldsymbol{\mu}$ η μαγνητική ροπή. Η αναλογία σημαίνει ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση η μαγνητική ροπή πρέπει να οριστεί ως $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{q}{2m} \hat{\boldsymbol{\ell}}$.

13.4.2 Σωματίο σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο

Έστω σταθερό ηλεκτρικό πεδίο της μορφής $\mathbf{E} = (\mathcal{E}, 0, 0)$, το οποίο αντιστοιχεί σε ηλεκτρικό δυναμικό $\phi = -\mathcal{E}x_1$ και μαγνητικό δυναμικό $\mathbf{A} = 0$. Οι κατευθύνσεις 2 και 3 συνεισφέρουν τετριμμένα, οπότε μπορούμε να περιοριστούμε σε μία διάσταση. Ο τελεστής Χάμιλτον είναι

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - q\mathcal{E}\hat{x}. \quad (13.92)$$

Η Χαμιλτονιανή (13.92) είναι δεν είναι φραγμένη από κάτω εφόσον το x μπορεί να πάρει οσοδήποτε μεγάλες θετικές τιμές. Οπότε είναι αφύσικη, εκτός αν θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο εκτείνεται σε περιορισμένη περιοχή του χώρου.

Είναι πιο εύκολο να βρούμε τις (γενικευμένες) ιδιοσυναρτήσεις της δουλεύοντας στην αναπαράσταση της ορμής, δηλαδή θεωρώντας κυματοσυναρτήσεις $\phi(p)$, με τον τελεστή της ορμής να δρα πολλαπλασιαστικά, $\hat{p}\phi(p) = p\phi(p)$, και τον τελεστή της θέσης διαφορικά, $\hat{x} = i\frac{\partial}{\partial p}$. Τότε η εξίσωση ιδιοτιμών για την \hat{H} γράφεται

$$-iq\mathcal{E}\frac{d}{dp}\phi_E = \left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\phi_E, \quad (13.93)$$

η οποία έχει λύση $\phi_E(p) = Ce^{\frac{i}{q\mathcal{E}}(Ep - \frac{p^3}{6m})}$. Οι συναρτήσεις ϕ_E ορίζουν κεν $|E\rangle$, έτσι ώστε $\langle p|E\rangle = \phi_E(p)$. Η σταθερά C προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\langle E'|E\rangle = \delta(E - E'). \quad (13.94)$$

Υπολογίζουμε $\langle E'|E\rangle = \int dp \phi_{E'}^*(p)\phi_E(p) = |C|^2 \int dp e^{\frac{ip}{q\mathcal{E}}(E-E')}$ $= |C|^2 q\mathcal{E} 2\pi \delta(E - E')$, οπότε $C = 1/\sqrt{2\pi q\mathcal{E}}$ και

$$\phi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi q\mathcal{E}}} e^{\frac{i}{q\mathcal{E}}(Ep - \frac{p^3}{6m})} \quad (13.95)$$

Υπολογίζουμε τα στοιχεία μήτρας του τελεστή χρονικής εξέλιξης στη βάση της ορμής

$$\begin{aligned} \langle p'|e^{-i\hat{H}t}|p\rangle &= \int dE \langle p'|E\rangle \langle E|p\rangle e^{-iEt} = \frac{1}{2\pi q\mathcal{E}} e^{i\frac{p'^3 - p^3}{6mq\mathcal{E}}} \int dE e^{iE(\frac{p' - p}{q\mathcal{E}} - t)} \\ &= \frac{1}{q\mathcal{E}} \delta\left(\frac{p' - p}{q\mathcal{E}} - t\right) e^{i\frac{p'^3 - p^3}{6mq\mathcal{E}}} = \delta(p' - p - q\mathcal{E}t) e^{i\frac{p'^3 - p^3}{6mq\mathcal{E}}}. \end{aligned} \quad (13.95)$$

Βλέπουμε ότι ο τελεστής χρονικής εξέλιξης μεταβάλλει την αρχική ορμή p κατά $q\mathcal{E}t$ (όπως και στην κλασική θεωρία), αλλά επίσης δημιουργεί και γρήγορες αλλαγές της φάσης (που δεν έχουν κλασικό ανάλογο). Για να το επιβεβαιώσουμε, εξετάζουμε την εξέλιξη μιας αρχικής κατάστασης ψ_0 στην αναπαράσταση της ορμής,

$$\langle p|\psi_t\rangle = \int dp' \langle p|e^{-i\hat{H}t}|p'\rangle \langle p'|\psi_0\rangle = e^{i\frac{(p - q\mathcal{E}t)^3 - p^3}{6mq\mathcal{E}}} \langle p - q\mathcal{E}t|\psi_0\rangle, \quad (13.96)$$

οπότε η κατανομή πιθανοτήτων ως προς την ορμή τη χρονική στιγμή t είναι

$$p_t(p) = |\langle p|\psi_t\rangle|^2 = |\langle p - q\mathcal{E}t|\psi_0\rangle|^2, \quad (13.97)$$

ταυτίζεται με την αρχική κατανομή πιθανοτήτων $p_0(p) = |\langle p|\psi_0\rangle|^2$ μετατοπισμένη κατά $q\mathcal{E}t$.

13.4.3 Σωματίο σε ομογενές μαγνητικό πεδίο

Έστω μαγνητικό πεδίο της μορφής $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Το μαγνητικό πεδίο δεν επηρεάζει την κίνηση του σωματιδίου κατά μήκος του άξονά του, οπότε μπορούμε να περιοριστούμε στην εξέταση της κίνησης στο επίπεδο $x_1 - x_2$. Θεωρούμε λοιπόν ένα δισδιάστατο σύστημα στο χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^2)$. Είναι βολικό να επιλέξουμε το διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A} = (0, Bx_1, 0)$.

Η Χαμιλτονιανή (13.90) δίνει

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) - \frac{qB}{m}\hat{x}_1\hat{p}_2 + \frac{q^2}{2m}B^2\hat{x}_1^2 = \frac{1}{2m}\hat{p}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(\hat{x}_1 - \frac{1}{m\omega_c}\hat{p}_2\right)^2,$$

όπου $\omega_c = \frac{qB}{m}$. Παρατηρούμε ότι στον άξονα 1 η κίνηση είναι ενός αρμονικού ταλαντωτή συχνότητας ω_c και κέντρο που εξαρτάται από το \hat{p}_2 . Ο μόνος ρόλος της ορμής \hat{p}_2 είναι να προσδιορίζει το κέντρο των ταλαντώσεων στον άξονα 1. (Αν είχαμε κρατήσει και την κατεύθυνση x_3 θα είχαμε απλά έναν επιπλέον όρο κινητικής ενέργειας ελεύθερου σωματίου για τον άξονα 3.)

Αυτή η περιγραφή είναι συνεπής με την κλασική συμπεριφορά σωματιδίων σε μαγνητικό πεδίο, τα οποία ακολουθούν κυκλική τροχιά συχνότητας ω_c στο επίπεδο κάθετο στη διεύθυνση του πεδίου. Η συχνότητα ω_c καλείται *συχνότητα κυκλότρου*.

Αν δράσουμε τη Χαμιλτονιανή σε ένα διάνυσμα $|\psi\rangle \otimes |k\rangle$, όπου k είναι γενικευμένο ιδιοδιάνυσμα του \hat{p}_2 παίρνουμε

$$\hat{H}(|\psi\rangle \otimes |k\rangle) = \left[\frac{1}{2m}\hat{p}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(\hat{x}_1 - \frac{k}{m\omega_c}\right)^2 \right] |\psi\rangle \otimes |k\rangle \quad (13.97)$$

Τα διανύσματα $|\psi\rangle \otimes |k\rangle$ είναι ιδιοδιανύσματα της \hat{H} , αν τα $|\psi\rangle$ αντιστοιχούν στα ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$ ενός αρμονικού ταλαντωτή μετατοπισμένα κατά $\frac{k}{m\omega_c}$ ως προς τη θέση. Ο τελεστής μετατόπισης θέσης κατά a είναι $e^{ia\hat{p}}$, οπότε $|\psi\rangle = e^{-i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}}|n\rangle$.

Καταλήγουμε ότι οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής (13.97) είναι $E_n = \omega_c(n + \frac{1}{2})$, για $n = 0, 1, 2, \dots$, με γενικευμένα ιδιοδιανύσματά

$$|n, k\rangle = e^{-i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}}|n\rangle \otimes |k\rangle. \quad (13.98)$$

Δεδομένου ότι η ενέργεια δεν εξαρτάται από το k που έχει άπειρες δυνατές τιμές, οπότε το σύστημα χαρακτηρίζεται από εκφυλισμό *άπειρης τάξης*. Οι απειροδιάστατοι ιδιόχωροι της ενέργειας s' αυτό το σύστημα καλούνται *επίπεδα Λαντάου* (Landau).

Το φασματικό θεώρημα για τη Χαμιλτονιανή \hat{H} δίνει

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \int dk \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) e^{-i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}}|n\rangle\langle n| e^{i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}} \otimes |k\rangle\langle k| = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \hat{P}_n \quad (13.99)$$

όπου

$$\hat{P}_n = \int dk e^{-i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}}|n\rangle\langle n| e^{i\frac{k}{m\omega_c}\hat{p}} \otimes |k\rangle\langle k| \quad (13.100)$$

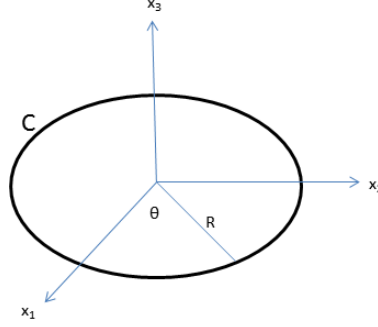
οι προβολικοί τελεστές που προβάλλουν στα επίπεδα Λαντάου.

Μπορούμε να κάνουμε πεπερασμένο το βαθμό εκφυλισμού των επιπέδων Λαντάου παίρνοντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες ως προς x_1 και x_2 . Έστω L η περίοδος. Η ορμή k είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $2\pi/L$: $k = j\frac{2\pi}{L}$, όπου $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Η μετατόπιση του κέντρου των ταλαντώσεων $\frac{k}{m\omega_c}$ δεν μπορεί να είναι (σε απόλυτη τιμή) μεγαλύτερη από την περίοδο L , κάτι που σημαίνει ότι

$$|j| \leq \frac{m\omega_c}{2\pi} A := j_{max}, \quad (13.101)$$

όπου $A = L^2$ το εμβαδόν της επιφάνειας. Ο βαθμός εκφυλισμού g είναι ισούται με τον αριθμό όλων των τιμών του j που είναι μικρότερες από j_{max} , δηλαδή ισούται με $2j_{max} + 1$. Για μακροσκοπικές επιφάνειες $j_{max} \gg 1$, οπότε

$$g \simeq 2j_{max} = \frac{m\omega_c}{\pi} A. \quad (13.102)$$


 Σχήμα 13.5: Δακτύλιος ακτίνας R στο επίπεδο $x_1 - x_2$.

13.4.4 Κίνηση σε δακτύλιο εντός μαγνητικού πεδίου

Στη συνέχεια, εξετάζουμε την εξέλιξη ενός σωματιδίου μάζας m και φορτίου q που είναι περιορισμένο να κινείται εντός ενός δακτυλίου μέσα σε μαγνητικό πεδίο, βλ. Σχ. 13.5. Για παράδειγμα, μπορεί να θεωρήσει κανείς την κίνηση ηλεκτρονίων εντός ενός κυκλικού αγωγού με αμελητέα αντίσταση.

Έστω κυκλικός δακτύλιος C ακτίνας R στο επίπεδο $x_1 - x_2$. Θεωρούμε μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} κατεύθυνση 3, κάθετο στο δακτύλιο, το οποίο εξαρτάται μόνο από την ακτινική συνιστώσα r . Επιλέγουμε μαγνητικό δυναμικό $\mathbf{A} = A_\theta(r)\mathbf{e}_\theta$, όπου \mathbf{e}_θ το μοναδιαίο διάνυσμα που αντιστοιχεί στη γωνιακή συντεταγμένη θ .

Υπολογίζουμε τη μαγνητική ροή $\Phi = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$ στο δίσκο που έχει ως σύνορο το δακτύλιο C . Χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Στόουκς παίρνουμε ως $\Phi = \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = A_\theta(R)2\pi R$ και άρα

$$A_\theta(R) = \frac{\Phi}{2\pi R}. \quad (13.103)$$

Η θέση ενός ηλεκτρονίου προσδιορίζεται πλήρως από τη γωνία θ , οπότε η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-\frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} - qA_\theta \right)^2 = -\frac{1}{2mR^2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i\frac{q\Phi}{2\pi} \right)^2. \quad (13.104)$$

Για να επιλύσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\psi(\theta) = E\psi(\theta)$, γράφουμε $\psi(\theta) = e^{i\frac{q\Phi}{2\pi}\theta}\chi(\theta)$, οπότε

$$\frac{d^2\chi}{d\theta^2} + 2mR^2E\chi = 0. \quad (13.105)$$

Οι λύσεις της Εξ. (13.105) είναι $\chi(\theta) = e^{\pm i\sqrt{2mR^2E}\theta}$, άρα οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής είναι

$$\psi_E(\theta) = C \exp \left[i \left(\pm \sqrt{2mR^2E} + \frac{q\Phi}{2\pi} \right) \theta \right]. \quad (13.106)$$

Η απαίτηση $\psi(2\pi) = \psi(0)$ σημαίνει ότι $\pm \sqrt{2mR^2E} + \frac{q\Phi}{2\pi} = n$ για κάποιον ακέραιο n . Άρα το φάσμα της Χαμιλτονιανής είναι διακριτό, με ιδιοτιμές

$$E_n = \frac{1}{2mR^2} \left(n - \frac{q\Phi}{2\pi} \right)^2, \quad (13.107)$$

για $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\psi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\theta}. \quad (13.108)$$

Παρατηρούμε ότι η θεμελιώδης κατάσταση δεν αντιστοιχεί σε $n = 0$, αλλά στον ακέραιο n_0 που βρίσκεται πιο κοντά στην ποσότητα $\frac{q\Phi}{2\pi}$. Επίσης είναι αξιοσημείωτο ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας εξαρτώνται μόνο από τη συνολική μαγνητική ροή μέσα από το δίσκο, χωρίς να παίζει κανέναν ρόλο αν το μαγνητικό πεδίο είναι μηδενικό πάνω στο δακτύλιο. Καταλήγουμε στο εξής αξιοσημείωτο συμπέρασμα.

Το ΗΜ πεδίο επηρεάζει κβαντικά συστήματα ακόμα και σε περιοχές όπου $\mathbf{E} = \mathbf{B} = 0$.

13.4.5 Η διπολική προσέγγιση

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η περίπτωση που ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα προσπίπτει πάνω σε άτομα ή μόρια. Εξετάζουμε τη δράση του κύματος πάνω σε ένα ηλεκτρόνιο του μορίου. Για ευκολία θεωρούμε ότι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται εντός ενός μέσου δυναμικού $V_0(\mathbf{r})$ που καθορίζεται από τα άλλα ηλεκτρόνια και τους ατομικούς πυρήνες (βλ. Κεφ 16.4). Κατ' αυτόν τον τρόπο μπορούμε να το περιγράψουμε απουσία του ΗΜ κύματος από τον τελεστή Σρέντινγκερ $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0(\hat{\mathbf{r}})$, ο οποίος έχει ιδιοτιμές E_n και ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$.

Το ηλεκτρομαγνητικό κύμα περιγράφεται από ένα διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, το οποίο μπορεί να αναλυθεί σε επίπεδα κύματα ως

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - ikt}, \quad (13.109)$$

όπου $k = |\mathbf{k}|$.

Για ασθενές πεδίο, ο κυρίαρχος όρος αλληλεπίδρασης στη Χαμιλτονιανή είναι $\hat{V}(t) = -\frac{q}{m} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ikt} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}$. Αυτός ο όρος απλοποιείται στην περίπτωση που το μήκος κύματος του ΗΜ κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τις διαστάσεις του μικροσκοπικού συστήματος. Αυτό ισχύει για παράδειγμα για την ακτινοβολία στο οπτικό φάσμα (και σε μικρότερες συχνότητες) σε σύγκριση με άτομα ή μικρά μόρια: το μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι στις εκατοντάδες νανόμετρα, ενώ τα τυπικά μεγέθη των ατόμων είναι κλάσματα του νανόμετρου. Αν σ' αυτήν την περίπτωση θεωρήσουμε ότι το άτομο ή το μόριο είναι εντοπισμένο στην αρχή των αξόνων, $|\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}| \ll 1$, οπότε μπορούμε να προσεγγίσουμε $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1$. Αυτή η προσέγγιση καλείται *διπολική προσέγγιση*.

Ο όρος αλληλεπίδρασης γράφεται ως

$$\hat{V}(t) = -\frac{q}{m} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ikt} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (13.110)$$

Είναι χρήσιμο να υπολογίσουμε τα στοιχεία πίνακα του \hat{V} στη βάση $|n\rangle$,

$$\langle n | \hat{V}(t) | n' \rangle = -\frac{q}{m} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ikt} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \langle n | \hat{\mathbf{p}} | n' \rangle. \quad (13.111)$$

Δεδομένου ότι $\hat{p} = -im[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0]$, βρίσκουμε ότι $\langle n | \hat{p} | n' \rangle = -im \langle n | \hat{\mathbf{r}} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{\mathbf{r}} | n' \rangle = im(E_n - E_{n'}) \langle n | \hat{\mathbf{r}} | n' \rangle$. Άρα

$$\langle n | \hat{V}(t) | n' \rangle = -i(E_n - E_{n'}) \sum_{\mathbf{k}} e^{-ikt} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{d}_{nn'}, \quad (13.112)$$

όπου ως $\mathbf{d}_{nn'} = \langle n | q\mathbf{r} | n' \rangle$ γράφουμε τα στοιχεία πίνακα που αντιστοιχούν στη διπολική ροπή της μετάβασης.

Αν οι συχνότητες του ΗΜ κύματος είναι κοντά σε μία συχνότητα μετάβασης μεταξύ δύο σταθμών $|n'\rangle$ και $|n\rangle$ με $E_{n'} < E_n$, τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση δύο επιπέδων και να γράψουμε ως $|n'\rangle := |0\rangle$ και $|n\rangle := |1\rangle$. Τότε, $\langle 0|\hat{V}(t)|0\rangle = \langle 1|\hat{V}(t)|1\rangle = 0$ και

$$\langle 1|\hat{V}(t)|0\rangle = -i\omega\mathbf{A}(0, t) \cdot \mathbf{d}, \quad (13.113)$$

όπου $\omega = E_n - E_{n'}$ και $\mathbf{d} = \mathbf{d}_{nn'}$. Μπορούμε πάντα να διαλέξουμε τη φάση των $|n\rangle$ και $|n'\rangle$, έτσι ώστε το διάνυσμα $-i\mathbf{d}$ να είναι πραγματικό, και άρα να γράψουμε τον όρο αλληλεπίδρασης ως

$$\hat{V}(t) = \omega\mathbf{A}(0, t) \cdot \mathbf{d} \hat{\sigma}_1, \quad (13.114)$$

δηλαδή ειδική περίπτωση του όρου αλληλεπίδρασης της Εξ. (8.95) για $gf(t) := \omega\mathbf{A}(0, t) \cdot \mathbf{d}$.

13.5 Συμμετρία βαθμίδας στην κβαντική θεωρία

13.5.1 Μετασχηματισμοί βαθμίδας

Γνωρίζουμε ότι στον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} και το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} παραμένουν ίδια αν τα αντίστοιχα δυναμικά ϕ και \mathbf{A} μετασχηματιστούν ως

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial f}{\partial t} \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad (13.115)$$

για κάποια βαθμωτή συνάρτηση $f(\mathbf{r}, t)$. Οι μετασχηματισμοί (13.115) καλούνται *μετασχηματισμοί βαθμίδας*. Αποτελούν μία συμμετρία του κλασικού ηλεκτρομαγνητισμού, υπό την έννοια ότι οι φυσικές προβλέψεις της θεωρίας πρέπει να μένουν αναλλοίωτες κάτω από τους μετασχηματισμούς βαθμίδας.

Για να εξακολουθεί να ισχύει αυτή η ιδιότητα στη κβαντική θεωρία, πρέπει να συμπληρώσουμε τις Εξ. (13.115) με μία εξίσωση για το μετασχηματισμό βαθμίδας της κβαντικής κατάστασης $|\psi\rangle$. Αυτή αντιστοιχεί σε μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}|\psi\rangle. \quad (13.116)$$

Βρίσκουμε ότι,

$$e^{-iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}\hat{\mathbf{p}}e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)} = \hat{\mathbf{p}} - q\nabla f(\hat{\mathbf{r}}, t), \quad (13.117)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση μετάθεσης $[\hat{\mathbf{p}}, e^{iqf}] = qe^{iqf}\nabla f$. Αυτό σημαίνει ότι

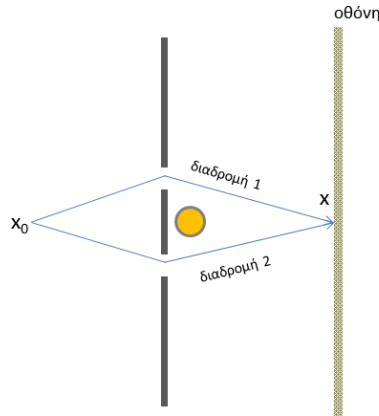
$$e^{-iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)} = \hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}', \quad (13.118)$$

Επίσης ο τελεστής της θέσης παραμένει αναλλοίωτος κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας,

$$e^{-iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}\hat{\mathbf{r}}e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)} = \hat{\mathbf{r}}. \quad (13.119)$$

Έστω $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi\rangle$ \hat{H} είναι η Χαμιλτονιανή της Εξ. (13.88) για δυναμικά \mathbf{A} και ϕ . Γράφουμε $|\psi'(t)\rangle = e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}|\psi\rangle$. Ισχύει ότι,

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = e^{iqf(\hat{\mathbf{r}}, t)}\left(i\frac{\partial}{\partial t} - q\frac{\partial f}{\partial t}\right)|\psi(t)\rangle. \quad (13.120)$$



Σχήμα 13.6: Το πείραμα Αχαρόνοφ-Μπομ. Η παρουσία ενός σωληνοειδούς με μαγνητικό πεδίο επηρεάζει την εικόνα συμβολής στο πείραμα των δύο σχισμών, ακόμα και αν τα σωματρία διασχίζουν μόνο περιοχές που το μαγνητικό πεδίο B είναι μηδέν.

Από τις Εξ. (13.118—13.120) καταλήγουμε ότι

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = \hat{H}'|\psi'(t)\rangle, \quad (13.121)$$

όπου η Χαμιλτονιανή \hat{H}' δίνεται από την Εξ. (13.88) γραμμένη ως προς τα μετασχηματισμένα δυναμικά A' και ϕ' , σύμφωνα με την Εξ. (13.115). Άρα οι μετασχηματισμοί βαθμίδας αφήνουν αναλλοίωτη την εξέλιξη του σωματιδίου εντός του ΗΜ πεδίου.

Σύμφωνα με την Εξ. (13.117), η ορμή \hat{p} μεταβάλλεται με τρόπο που να επηρεάζεται το φάσμα της και άρα οι πιθανότητες που αντιστοιχούν σε μετρήσεις της. Αντίθετα, η Εξ. (13.118), σημαίνει ότι η γενικευμένη ορμή $\hat{\pi} = \hat{p} - qA$ δε μεταβάλλεται κάτω από το μετασχηματισμό βαθμίδας: η αλλαγή του μαγνητικού δυναμικού εξισορροπείται από το μοναδιαίο μετασχηματισμό $e^{iqf(\vec{r},t)}$. Αυτό σημαίνει ότι παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, η φυσικά μετρήσιμη ποσότητα δεν είναι η ορμή \hat{p} αλλά η γενικευμένη ορμή $\hat{\pi}$. Δηλαδή, η ύπαρξη της συμμετρίας βαθμίδας μας επιφέρει περιορισμούς στο ποιοι τελεστές είναι αποδεκτοί ως παρατηρήσιμες ποσότητες.

Οι συνιστώσες της γενικευμένης ορμής $\hat{\pi}$ δε μετατίθενται μεταξύ τους. Βρίσκουμε ότι $[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = iq(\frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{A}_i}{\partial x_j})$. Αμέσως βρίσκουμε ότι $[\hat{\pi}_1, \hat{\pi}_2] = iq\hat{B}_3$ κοκ.

Καταλήγουμε ότι λόγω της συμμετρίας βαθμίδας, οι βασικές σχέσεις μετάθεσης στην κβαντική θεωρία παρουσία εξωτερικού ΗΜ πεδίου γίνονται

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{\pi}_j] = i\delta_{ij}, \quad [\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = iq \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{B}_k. \quad (13.122)$$

13.5.2 Φαινόμενο Μπομ-Αχαρόνοφ

Στον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, τα πεδία δυναμικού δεν έχουν φυσική σημασία, επειδή δε μένουν αναλλοίωτα κάτω από τους μετασχηματισμούς βαθμίδας. Αυτό οδηγεί στην άποψη ότι μόνο τα πεδία B και E είναι φυσικά παρατηρήσιμες ποσότητες. Κάτι τέτοιο δεν ισχύει στην κβαντική θεωρία, όπως κατέδειξαν οι Αχαρόνοφ (Y. Aharonov) και Μπομ (D. Bohm) το 1959 [227].

Θεωρούμε τη διάταξη του Σχ. 13.6, που αποτελείται από μία πηγή φορτισμένων σωματιδίων, ένα πέτασμα με δύο σχισμές και μία οθόνη πίσω από το πέτασμα. Ένα μακρύ σωληνοειδές τοποθετείται κάθετα στο επίπεδο του σχήματος, έτσι ώστε στο εσωτερικό του σωληνοειδούς υπάρχει μαγνητικό

πεδίο, αλλά το πεδίο είναι μηδέν έξω από το σωληνοειδές. Το σωληνοειδές τοποθετείται ακριβώς πίσω από το πέτασμα, έτσι ώστε να μην είναι προσβάσιμο σε όσα σωματάρια περνούν από τις σχισμές.

Έστω $\Psi^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ για αυτό το σύστημα, όταν το σωληνοειδές δε διαρρέεται από ρεύμα (και άρα το μαγνητικό πεδίο είναι παντού μηδέν), για δεδομένες αρχικές συνθήκες. Ξέρουμε ότι για \mathbf{r} πάνω στο πέτασμα, η κυματοσυνάρτηση γράφεται ως άθροισμα δύο όρων $\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_2^{(0)}(\mathbf{r}, t)$, όπου ο $\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ αντιστοιχεί σε διάδοση του κύματος από την πρώτη σχισμή και ο $\Psi_2^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ αντιστοιχεί σε διάδοση του κύματος από τη δεύτερη σχισμή.

Έστω ότι ανοίγουμε το ρεύμα, έτσι ώστε να δημιουργηθεί μαγνητικό πεδίο εντός του σωληνοειδούς. Το δυναμικό A δε μηδενίζεται παντού έξω από σωληνοειδές παρότι $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$. Για οποιαδήποτε διαδρομή γ που περιβάλλει τον κύλινδρο $\oint_{\gamma} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi$, όπου Φ είναι η μαγνητική ροή στο σωληνοειδές. Εφόσον $\Phi \neq 0$, το μαγνητικό δυναμικό πρέπει να παίρνει μη μηδενικές τιμές σε κάθε διαδρομή που περικλείει το σωληνοειδές.

Ωστόσο, δεδομένου ότι $\mathbf{B} = 0$, σε κάθε περιοχή που δεν περικλείει το σωληνοειδές μπορούμε να διαλέξουμε βαθμίδα έτσι ώστε $\mathbf{A} = \nabla f$ για κάποια βαθμωτή συνάρτηση f . Ας εξετάσουμε τη λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ που αντιστοιχεί σε διάδοση του κύματος από την πρώτη σχισμή. Αυτή είναι διάφορη του μηδενός σε μία περιοχή που δεν περικλείει το σωληνοειδές, οπότε μπορεί να γραφεί ως μετασχηματισμός βαθμίδας $e^{iqf_1(\mathbf{r}, t)}\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t)$. Για \mathbf{r} πάνω στο πέτασμα, η συνάρτηση $f_1(x) = \int_{c_1} d\mathbf{r} \cdot \nabla f_1 = \int_{c_1} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}$, όπου c_1 μία καμπύλη όπως η διαδρομή 1 στο σχήμα. Ομοίως, η λύση της εξίσωσης $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ που αντιστοιχεί σε διάδοση του κύματος από την πρώτη σχισμή γράφεται ως $e^{iqf_2(\mathbf{r}, t)}\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t)$, για $f_2 = \int_{c_2} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}$ όπου c_2 μία καμπύλη όπως η διαδρομή 2 στο σχήμα.

Έτσι η λύση της εξίσωσης του Σρέντινγκερ γράφεται ως

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{iqf_1(\mathbf{r}, t)}\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t) + e^{iqf_2(\mathbf{r}, t)}\Psi_2^{(0)}(\mathbf{r}, t) \quad (13.123)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας στην οθόνη $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ εξαρτάται από τη φάση $\exp[iq(f_1 - f_2)] = \exp[iq \int_{\gamma} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}]$, όπου γ είναι η διαδρομή που σχηματίζεται από το \mathbf{r}_0 στο \mathbf{r} μέσω του c_1 και από το \mathbf{r} στο \mathbf{r}_0 μέσω του c_2 . Δεδομένου ότι η διαδρομή γ περικλείει το σωληνοειδές θα ισχύει ότι $\int_{\gamma} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \Phi$, οπότε η φάση γίνεται $e^{iq\Phi}$. Άρα η πυκνότητα πιθανότητας πάνω στο πέτασμα γίνεται

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\Psi_2^{(0)}(\mathbf{r}, t)|^2 + 2Re \left[e^{iq\Phi} \Psi_1^{(0)}(\mathbf{r}, t) \Psi_2^{(0)*}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (13.124)$$

Δηλαδή η μορφή συμβολής εξαρτάται από τη μαγνητική ροή μέσα στο σωληνοειδές παρότι τα σωματάρια διασχίζουν μόνο περιοχές στις οποίες το μαγνητικό πεδίο είναι μηδενικό. Αυτή η πρόβλεψη έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά [228]. Επιβεβαιώνεται το συμπέρασμα του Κεφ. 13.4.4, ότι το ΗΜ επιδρά σε κβαντικά συστήματα ακόμα και αν αυτά περιορίζονται σε περιοχές με μηδενικές τιμές των εντάσεων \mathbf{E} και \mathbf{B} .

Ερωτήσεις

1. Ισχύει η ανισότητα Χάρντι για σωματάρια που κινείται σε δύο διαστάσεις;
2. Εξηγείστε γιατί στις τρεις διαστάσεις ο τελεστής Σρέντινγκερ για ένα ασθενές ελκτικό δυναμικό μπορεί να μην έχει δέσμιες καταστάσεις; Σε τί έγκειται η διαφορά από τον τελεστή Σρέντινγκερ στη μία διάσταση;
3. Ποια προσέγγιση χρησιμοποιήσαμε για την εύρεση των ιδιοτιμών του τελεστή Σρέντινγκερ για το δυναμικό Μορς για $\ell = 0$; Είναι δικαιολογημένη για τα μόρια του Πίνακα 13.2;
4. Σχεδιάστε το κλασικό διάνυσμα Ρούνγκε-Λεντς στο χώρο για ένα σωματάρια σε κυκλική τροχιά.

5. Πώς δικαιολογείται η ελάχιστη αντικατάσταση;
6. Μπορεί να υπάρχει εκφυλισμός στις ενεργειακές στάθμες (13.107);
7. Γράψτε τη σχέση αβεβαιότητας (κατά Κέναρντ-Ρόμπινσον) για δύο διαφορετικές συνιστώσες της γενικευμένης ορμής παρουσία σταθερού μαγνητικού πεδίου. Μπορείτε να δώσετε μία ποιοτική αιτιολόγησή της;

Ασκήσεις

1. (α) Δείξτε ότι για οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση $|\psi\rangle$ του τελεστή Σρέντινγκερ ισχύει ότι $\langle\psi|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = 0$. (β) Δείξτε ότι αν το δυναμικό είναι κεντρικό, $\langle\psi|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = 0$. (γ) Δείξτε ότι για κεντρικό δυναμικό η ανισότητα του Χάρντι δίνει $\Delta p \Delta r \geq \frac{1}{2}$, όπου Δp και Δr η τυπική απόκλιση στο μέτρο της ορμής και της θέσης αντίστοιχα.
2. Αποδείξτε το λεγόμενο θεώρημα βίριαλ για τον τελεστή Σρέντινγκερ $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, όπου $\hat{T} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2$ ο τελεστής κινητικής ενέργειας. Για κάθε ιδιοδιάνυσμα $|\psi\rangle$ του \hat{H}

$$\langle\psi|2\hat{T} - \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla V(\hat{\mathbf{r}})|\psi\rangle = 0.$$

Γράψτε τη μορφή που παίρνει η παραπάνω έκφραση για δυναμικά της μορφής $V(r) = a/r^n$.

3. Βρείτε ένα κάτω όριο στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης του τελεστή Σρέντινγκερ για δυναμικό (α) $V(r) = kr^{-a}$, όπου k σταθερά και $0 < a < 2$ και (β) $V(r) = V_0 \log(r/r_0)$, όπου V_0, r_0 σταθερές.
4. Τι δυναμικό απαιτείται έτσι ώστε η θεμελιώδης κατάσταση ενός τελεστή Σρέντινγκερ (στις τρεις διαστάσεις) να είναι της μορφής e^{-ar^λ} για $a, \lambda > 0$;
5. Δείξτε ότι ο τρισδιάστατος τελεστής Σρέντινγκερ με δυναμικό δέλτα $V(\mathbf{r}) = -\lambda\delta^3(\mathbf{r})$ για $\lambda > 0$, δεν είναι φραγμένος από κάτω. (Υπόδειξη: Δείξτε ότι η αναμενόμενη τιμή $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ μπορεί να πάρει οσοδήποτε μικρές τιμές, υπολογίζοντας την για μια οικογένεια συναρτήσεων επικεντρωμένη γύρω από το $\mathbf{r} = 0$, π.χ. για Γκαουσιανές.)
6. Έστω σωματίο σε δυναμικό σφαιρικού κουτιού,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r \geq R. \end{cases}$$

- (α) Δείξτε ότι οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής είναι $E_{n,\ell} = \frac{z_{n,\ell}^2}{2mR^2}$, όπου $z_{n,\ell}$ είναι η n -στή θετική λύση της εξίσωσης $j_\ell(x) = 0$. (β) Βρείτε (είτε αριθμητικά, είτε γραφικά, είτε από πίνακα) τις τιμές των $z_{n,\ell}$ και διατάξτε τις ιδιοτιμές $E_{n,\ell}$ μέχρι και $n = 4$.
7. (α') Δείξτε ότι οι σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσελ j_ℓ , όπως ορίζονται από τις Εξ. (13.41), ικανοποιούν τις ταυτότητες

$$j_{\ell+1}(x) + j_{\ell-1}(x) = \frac{2\ell+1}{x} j_\ell(x)$$

$$j'_\ell(x) = \frac{\ell}{x} j_\ell(x) - j_{\ell+1}(x),$$

και ομοίως για τις $\eta_\ell(x)$.

- (β') Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω ιδιότητες, επιβεβαιώστε ότι οι j_ℓ και η_ℓ αποτελούν λύσεις της εξίσωσης Μπέσελ, (13.40).

(γ') Δείξτε ότι για $x \rightarrow 0$, $j_\ell(x) \simeq \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell$ και $\eta_\ell(x) \simeq -\frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} x^{-(\ell+1)}$.

(δ') Αποδείξτε την Εξ. (13.42).

8. Υπολογίστε τις μετατοπίσεις φάσης δ_ℓ της Εξ.(13.52) στο όριο $ka \rightarrow 0$.

9. Έστω σωματίο σε τετραγωνικό δυναμικό

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & r < a \\ 0 & r \geq a. \end{cases},$$

όπου $a, V_0 > 0$. (α) Βρείτε την αλγεβρική εξίσωση που προσδιορίζει τη μετατόπιση φάσης $\delta_0(k)$ απαιτώντας συνέχεια της ακτινικής ιδιοσυνάρτησης $u(r)$ και της πρώτης παραγώγου της στο $r = a$. (β) Δείξτε ότι στο όριο χαμηλών ενεργειών

$$\delta_0(k) = ka \left(\frac{\tanh(K_0 a)}{K_0 a} - 1 \right),$$

όπου $K_0 = \sqrt{2mV_0}$.

10. Υπολογίστε την κατανομή πιθανοτήτων για το μέτρο της ορμής για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου.

11. (α) Έστω \hat{H}_λ μία Χαμιλτονιανή που εξαρτάται από μία παράμετρο λ και $|\psi_\lambda\rangle$ ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E_λ . Αποδείξτε την ταυτότητα Φάυνμαν-Χέλμαν:

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} = \langle \psi_\lambda | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \psi_\lambda \rangle.$$

(β) Χρησιμοποιείστε την παραπάνω ταυτότητα για τον τελεστή Σρέντινγκερ \hat{H} με δυναμικό Κουλόμπ $V(r) = -\alpha/r$, για να δείξετε ότι

$$\langle n, \ell, m_\ell | \hat{r}^{-1} | n, \ell, m_\ell \rangle = \frac{\alpha m}{n^2} \quad (13.118)$$

$$\langle n, \ell, m_\ell | \hat{r}^{-2} | n, \ell, m_\ell \rangle = \frac{\alpha^2 m^2}{(\ell + \frac{1}{2}) n^3}, \quad (13.119)$$

όπου $|n, \ell, m_\ell\rangle$ τα ιδιοδιανύσματα του \hat{H} .

12. (α) Δείξτε ότι για τα ιδιοδιανύσματα $|n, \ell, m_\ell\rangle$ του τελεστή Σρέντινγκερ \hat{H} με δυναμικό Κουλόμπ $V(r) = -\alpha/r$, ισχύει η σχέση του Κράμερς

$$\frac{\nu + 1}{n^2} \langle \hat{r}^\nu \rangle - (2\nu + 1) \alpha \langle \hat{r}^{\nu-1} \rangle + \frac{\nu \alpha^2}{4} [(2\ell + 1)^2 - \nu^2] \langle \hat{r}^{\nu-2} \rangle,$$

για κάθε δύναμη ν . (β) Εξειδικεύστε για $\nu = -1$. Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα της παραπάνω άσκησης δείξτε ότι

$$\langle n, \ell, m_\ell | \hat{r}^{-3} | n, \ell, m_\ell \rangle = \frac{\alpha^3 m^3}{n^3 \ell (\ell + \frac{1}{2}) (\ell + 1)}. \quad (13.119)$$

13. Έστω ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής και $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας, $i = 1, 2, 3$. (α) Δείξτε ότι $\hat{\ell}_i = -i \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k$. (β) Δείξτε ότι $\hat{\ell}^2 = -\hat{B}^\dagger \hat{B} + \hat{N}^2 - \hat{N}$, όπου $\hat{B} = \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{a}}$ και $\hat{N} = \hat{\mathbf{a}}^\dagger \cdot \hat{\mathbf{a}}$. (γ) Υπολογίστε τους μεταθέτες μεταξύ των τελεστών \hat{B}, \hat{B}^\dagger και \hat{N} .

14. Υπολογίστε τον μέγιστο αριθμό των δέσμιων καταστάσεων για το δυναμικό Μορς με $\ell = 0$ και συγκρίνετέ το με την Εξ. (13.68).

15. Η θεμελιώδης κατάσταση του τελεστή Σρέντινγκερ για το δυναμικό Μορς αντιστοιχεί σε $u_0(z) = C z^{\lambda - \frac{1}{2}} e^{-z}$. (α) Υπολογίστε τη σταθερά z επεκτείνοντας την περιοχή ολοκλήρωσης του z στο $(0, \infty)$. (β) Υπολογίστε τη μέση τιμή $\langle z \rangle$. Σε τι τιμή του r αντιστοιχεί; (γ) Εκτιμήστε το κλάσμα της ολικής πιθανότητας που περιέχεται στην αφύσικη περιοχή $r < 0$.

16. Ένα δυναμικό που επιτρέπει τη μελέτη των ταλαντώσεων διατομικών μορίων είναι το δυναμικό Κράτσερ (Kratzer),

$$V(r) = V_0 \left(\frac{a^2}{r^2} - \frac{2a}{r} \right),$$

όπου $V_0, a > 0$. (α) Δείξτε ότι το δυναμικό έχει ελάχιστη τιμή $-V_0$ στο σημείο $r = a$ και υπολογίστε τη συχνότητα των ταλαντώσεων γύρω από το σημείο ισορροπίας. (β) Δείξτε ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$E_{n_r, \ell} = -\frac{V_0^2 a^2 m}{(n_r + \lambda_\ell + 1)^2},$$

με εκφυλισμό $2\ell + 1$, όπου $\lambda_\ell = \sqrt{V_0 a^2 + (\ell + \frac{1}{2})^2} - \frac{1}{2}$. (γ) Πόσες δέσμες καταστάσεις έχει ο τελεστής Σρέντινγκερ; (δ) Το δυναμικό Κράτσερ ή το δυναμικό Μορς δίνει πιο αξιόπιστη περιγραφή των διατομικών μορίων;

17. Θεωρείστε την ακτινική εξίσωση Σρέντινγκερ (13.29) για το άτομο του υδρογόνου. Δείξτε ότι με την αντικατάσταση $r \rightarrow b\rho^2$, $u \rightarrow \sqrt{\rho}\psi$, όπου b σταθερά, η εξίσωση για το ψ ως συνάρτηση του ρ ταυτίζεται με την ακτινική εξίσωση του Σρέντινγκερ για ισοτροπικό αρμονικό ταλαντωτή, για κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων. Δείξτε την αντιστοιχία μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων των δύο αυτών συστημάτων.
18. Αποδείξτε τις Εξ. (13.81), (13.82) και (13.83).
19. Δείξτε ότι οι εξισώσεις Χάμιλτον για την κλασική Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στην Εξ. (13.88) αντιστοιχούν σε εξέλιξη υπό την επίδραση της δύναμης Λόρεντς (1.13).
20. Φορτισμένο σωματίο βρίσκεται εντός στατικού σφαιρικά συμμετρικού ηλεκτρικού δυναμικού $\phi(r)$ και ομογενούς μαγνητικού πεδίου \hat{B} . Το πεδίο είναι ασθενές έτσι ώστε να μπορεί να αγνοηθεί ο τετραγωνικός όρος \hat{A}^2 . (α) Δείξτε ότι τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής δεν εξαρτώνται από το \mathbf{B} . (β) Γράψτε πώς μεταβάλλονται οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής από την παρουσία του μαγνητικού πεδίου. (γ) Βρείτε τον εκφυλισμό των ιδιοτιμών για τις περιπτώσεις που το ϕ αντιστοιχεί σε δυναμικό Κουλόμπ και σε ισοτροπικό αρμονικό ταλαντωτή.
21. Δείξτε ότι οι γενικευμένες ιδιοκαταστάσεις $|E\rangle$ για την κίνηση σωματιδίου μέσα σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο, Εξ. (13.95), στην αναπαράσταση της θέσης γράφονται ως

$$\langle x|E\rangle = \left(\frac{4m^2}{q\mathcal{E}} \right)^{1/6} \text{Ai} \left[(2mq\mathcal{E})^{1/3} \left(x + \frac{E}{q\mathcal{E}} \right) \right], \quad (13.118)$$

όπου $\text{Ai}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{itz - i\frac{t^3}{3}}$ είναι η *συνάρτηση του Αίρι (Airy)*.

22. Εξετάστε την εξέλιξη μιας αρχικής Γκαουσιανής κατάστασης $\psi_0(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)$ κάτω από σταθερό ηλεκτρικό πεδίο. Βρείτε την κατανομή πιθανοτήτων ως προς τη θέση και υπολογίστε την εξέλιξη της τυπικής απόκλισης $(\Delta x)^2$ στο χρόνο.
23. (α) Δείξτε ότι οι λύσεις $\psi(\mathbf{r}, t)$ της εξίσωσης Σρέντινγκερ με τη Χαμιλτονιανή (13.88) ικανοποιούν την εξίσωση συνέχειας $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}$, όπου

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* - 2iq\mathbf{A}|\psi|^2) \quad (13.119)$$

το ρεύμα πιθανότητας παρουσία μαγνητικού πεδίου. (β) Δείξτε ότι το ρεύμα πιθανότητας \mathbf{J} είναι αναλλοίωτο κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας.

24. Υπολογίστε τα διαγώνια στοιχεία $\langle x_1, x_2 | \hat{P}_n | x_1, x_2 \rangle$ των προβολικών τελεστών στα επίπεδα Λαντάου, Εξ. (13.100), στη βάση της θέσης και δείξτε ότι δεν εξαρτώνται από τα x_1 και x_2 .

25. Θεωρείστε ένα μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ και σωματίδια περιορισμένα στο επίπεδο $x_1 - x_2$. Χρησιμοποιείτε την έκφραση $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ για το μαγνητικό δυναμικό. Δεδομένου ότι οι τελεστές $\hat{\pi}_1$ και \hat{x}_2 μετατίθενται, έχουν ένα κοινό σύνολο από γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις $|k_1, x_2\rangle$, έτσι ώστε $\hat{\pi}_1|k_1, x_2\rangle = k_1|k_1, x_2\rangle$ και $\hat{x}_2|k_1, x_2\rangle = x_2|k_1, x_2\rangle$. (α) Υπολογίστε τις $|k_1, x_2\rangle$ στην αναπαράσταση της θέσης. (β) Υπολογίστε τις κοινές γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις $|x_1, k_2\rangle$ των \hat{x}_1 και $\hat{\pi}_2$ στην αναπαράσταση θέσης. (γ) Βρείτε το εσωτερικό γινόμενο $\langle k_1, x_2|x_1, k_2\rangle$.
26. Υπολογίστε μέτρο $|d|$ των στοιχείων πίνακα της διπολικής ροπής για όλες τις μεταβάσεις από $n = 2$ σε $n = 1$ για το άτομο του υδρογόνου.

Βιβλιογραφία

- Για περισσότερες λεπτομέρειες για την εξίσωση Σρέντινγκερ σε 3 διαστάσεις, βλ. το κεφ. 6 των Galindo και Pascual [229].
- Για το φαινόμενο Αχαρόνοφ-Μπομ, βλ. το βιβλίο των Peskin και Tomonura [230] και των Aharonov-Rohrlich [231].

Κεφάλαιο 14

Σωματία με σπιν

Σήμερα διάβασα την καινούρια σου εργασία και είναι βέβαιο ότι εγώ είμαι αυτός που χαίρεται περισσότερο γι' αυτήν, όχι μόνο γιατί η κομπίνα που έκανες είναι ασύλληπτη, αλλά γιατί με την εισαγωγή ηλεκτρονίων με τέσσερις βαθμούς ελευθερίας σπας κάθε ρεκόρ παράνοιας σε σύγκριση με οτιδήποτε μ' έχεις κατηγορήσει στο παρελθόν.

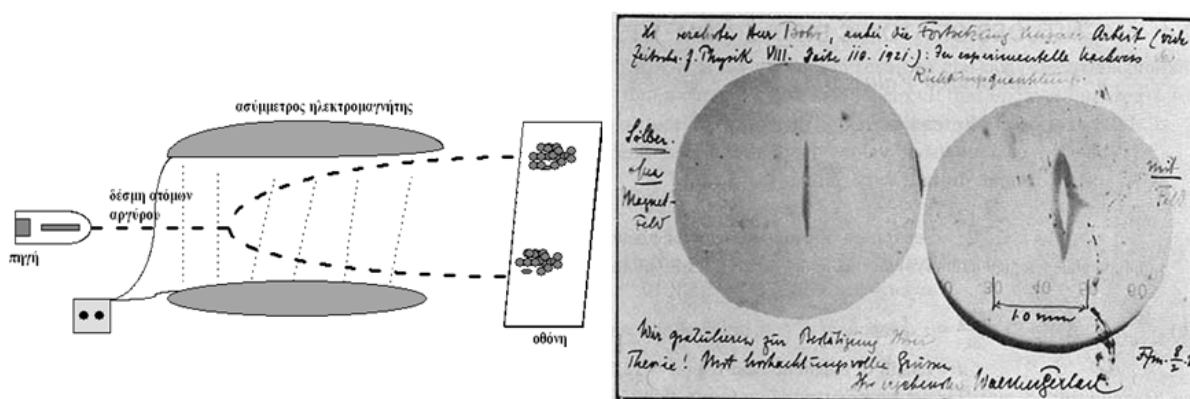
Από κάρτα του Χάιζενμπεργκ στον Πάουλι [232]

14.1 Η εισαγωγή του σπιν

Η εισαγωγή της έννοιας του σπιν ξεκίνησε από τις μελέτες της δομής του ατόμου με βάση το μοντέλο του Μπορ, πριν από τη διατύπωση της ώριμης κβαντικής θεωρίας. Εκείνη την εποχή γίνονταν πολλές προσπάθειες να εξηγηθεί η δομή των ατόμων στη βάση τριών κβαντικών αριθμών (ανάλογων των n, ℓ, m που είδαμε σε σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά). Ο Πάουλι πρότεινε ότι μπορεί να υπάρξει το πολύ ένα ηλεκτρόνιο για κάθε τριπλέτα κβαντικών αριθμών, μια πρόταση που έγινε γνωστή ως απαγορευτική αρχή, και την οποία θα δούμε με λεπτομέρεια στο επόμενο κεφάλαιο. Η απαγορευτική αρχή δεν ταίριαζε πλήρως με τα δεδομένα, υπήρχαν διπλάσια ηλεκτρόνια από τον αριθμό των επιτρεπτών τριάδων κβαντικών αριθμών. Ο Πάουλι πρότεινε ότι υπάρχει ακόμα ένας κβαντικός αριθμός ο οποίος παίρνει μόνο δύο δυνατές τιμές [233]. Αλλά δεν μπορούν παρά να υπάρχουν μόνο τρεις κβαντικοί αριθμοί που να σχετίζονται με την κίνηση ενός ηλεκτρονίου στο τρισδιάστατο χώρο. Οπότε ο τέταρτος κβαντικός αριθμός δεν αναφέρεται σε αυτές τις κινήσεις, αλλά σε κάποια «εσωτερική» ιδιότητα του ηλεκτρονίου, ότι κι αν σημαίνει αυτό. Αυτός ήταν ο αριθμός που αργότερα ονομάστηκε σπιν.

Η φυσική σημασία του σπιν ήταν τότε ένα αίνιγμα. Εμφανίστηκε ως μία υποθετική ποσότητα, για να ισοσκελίσει τους όχι και πολύ ακριβείς υπολογισμούς στη βάση της παλιάς κβαντικής θεωρίας. Ωστόσο, όπως συνειδητοποιήθηκε αργότερα, είχε ήδη παρατηρηθεί λίγα χρόνια πριν, σε ένα πείραμα που είχαν κάνει οι Στερν (O. Stern) και Γκέρλαχ (W. Gerlach) [235].

Οι Στερν και Γκέρλαχ είχαν μελετήσει την κίνηση ατόμων αργύρου εντός ενός *ανομοιογενούς* μαγνητικού πεδίου. Θεωρούσαν ότι αυτό το πείραμα θα τους επέτρεπε να αποδείξουν πειραματικά κάτι που πίστευαν ως μία πολύ σημαντική συνέπεια της θεωρίας του Μπορ, που την αποκαλούσαν κβαντισμό του χώρου. Περίμεναν να δουν τη δέσμη των ατόμων του αργύρου να διασπάται σε δύο διαχωρίσιμα κομμάτια, και όντως αυτό ακριβώς παρατήρησαν στο πείραμά τους. Εκ των υστέρων, μπορούμε να πούμε ότι η ερμηνεία των αποτελεσμάτων τους ήταν τελείως λάθος. Αλλά αυτό δεν έχει ιδιαίτερη σημασία. Αυτό που μετράει είναι ότι η δέσμη παρατηρήθηκε να διασπάται στα δύο,



Σχήμα 14.1: Το πείραμα των Στερν και Γκέρλαχ. Αριστερά: Σχηματική περιγραφή του πειράματος. Μια δέσμη ατόμων Ag που περνά μέσα από ένα ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο διασπάται σε δύο πλήρως διαχωρισμένες δέσμες. Δεξιά: Μία κάρτα που έστειλε ο Στερν στον Μπορ με μία φωτογραφία τους σπασίματος τη δέσμης. Αριστερά είναι το ίχνος της δέσμης στην οθόνη απουσία μαγνητικού πεδίου και δεξιά παρουσία αυτού.

γιατί (όπως έγινε κατανοητό αργότερα) αυτό το φαινόμενο αποτελεί άμεση πειραματική απόδειξη της ύπαρξης του σπιν.

Η σωστή ερμηνεία αυτού του απρόσμενου αποτελέσματος δόθηκε τελικά από τους Χάουντςμιτ (S. Goudsmit) και Ούλενμπεκ (G. E. Uhlenbeck) [236]. Πρότειναν ότι το ηλεκτρόνιο έχει έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας που μπορεί να πάρει μόνο δύο τιμές και ότι αυτός ο βαθμός ελευθερίας ουσιαστικά καθιστά το ηλεκτρόνιο μαγνητικό δίπολο. Όταν το ηλεκτρόνιο βρεθεί εντός ενός μαγνητικού πεδίου, το δίπολο μπορεί να προσανατολιστεί είτε παράλληλα είτε αντιπαράλληλα στο πεδίο. Το βασικό κίνητρο των Χάουντςμιτ και Ούλενμπεκ ήταν να εξηγήσουν κάποιες φαινομενικές ασυνέπειες στα φασματοσκοπικά δεδομένα του ατόμου του υδρογόνου και δεν ασχολήθηκαν άμεσα με το πείραμα των Στερν-Γκέρλαχ. Ωστόσο τα αποτελέσματά τους προσέφεραν μία απλή ερμηνεία για αυτό. Υπεύθυνο για τη διάσπαση της δέσμης είναι το ηλεκτρόνιο στην εξωτερη στιβάδα του ατόμου του Ag. Η "δύναμη" που ασκείται από το μαγνητικό πεδίο στο δίπολο εξαρτάται από την κατεύθυνση του διπόλου. Καθώς υπάρχουν μόνο δύο δυνατές τέτοιες κατευθύνσεις, υπάρχουν μόνο δύο διαφορετικοί τρόποι με τους οποίους μπορεί να δράσει το μαγνητικό πεδίο στο άτομο και κατά συνέπεια δύο δυνατές διαδρομές για τα άτομα της δέσμης—ακριβώς ότι παρατηρήθηκε στο πείραμα.

Αυτός ο νέος κβαντικός αριθμός ήταν σχεδόν πανομοιότυπος με αυτόν που είχε προτείνει ο Πάουλι. Μια προφανής ερμηνεία για τη μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου είναι ότι οφείλεται σε αυτοπεριστροφή: μια αυτοπεριστρεφόμενη κατανομή φορτίου είναι ένα μαγνητικό δίπολο. Αυτή η ερμηνεία θα σήμαινε ότι το ηλεκτρόνιο θα είχε πεπερασμένη ακτίνα, έστω r_0 , γιατί ένα σημειακό σωματίο δεν αυτοπεριστρέφεται. Δεδομένου ότι το ηλεκτρόνιο είναι σίγουρα μικρότερο από τον πυρήνα, ήδη από τη δεκαετία του 1920 μπορούσε κανείς να εκτιμήσει ότι το $r_0 < 10^{-15}m$. Για να έχει το ηλεκτρόνιο στροφορμή λόγω αυτοπεριστροφής της τάξης του \hbar , θα έπρεπε να αυτοπεριστρέφεται με επιφανειακή ταχύτητα $\frac{\hbar}{m_e r_0} > 10^{12}m/s$, δηλαδή μεγαλύτερη του φωτός. Η ερμηνεία του σπιν ως αυτοπεριστροφή δε δουλεύει.

Η σημερινή κατανόηση είναι ότι το σπιν είναι ένας βαθμός ελευθερίας για τα σωματίδια που έχει τις ίδιες συμμετρίες με την αυτοπεριστροφή, αλλά δεν είναι αυτοπεριστροφή. Το σπιν αντιστοιχεί σε στροφορμή, αλλά δεν αντιστοιχεί με κάποια μεταβλητή γωνιακής ταχύτητας ή ροπής αδράνειας όπως στη συνήθη αυτοπεριστροφή. Περιγράφει μία ενδογενή στροφικότητα των σωματιδίων, ακόμα και αυτών που δεν έχουν εσωτερική δομή. Προκύπτει ως συνέχεια της θεμελιώδους φυσικής συμμε-

σωμάτιο	ηλεκτρόνιο	πρωτόνιο	νετρόνιο	κουάρκ	πυρήνας ${}^4\text{He}$	πυρήνας ${}^{39}\text{K}$	άτομο ${}^3\text{He}$	άτομο ${}^4\text{He}$
σπιν s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	0

Πίνακας 14.1: Σπιν σωματιδίων, στοιχειωδών και σύνθετων

τριάς που αντιστοιχεί σε περιστροφή στο χώρο¹.

14.2 Η κβαντική περιγραφή του σπιν

14.2.1 Ολική στροφορμή και σπιν

Η περιγραφή του σπιν σχετίζεται με το μικρό παράδοξο της κβαντικής περιγραφής των στροφορμών που συναντήσαμε στο κεφ. 11. Ενώ μπορούμε να έχουμε αναπαραστάσεις της άλγεβρας των στροφορμών με κβαντικό αριθμό ολικής στροφορμής j ημιακέραιο, η τροχιακή στροφορμή δέχεται μόνο ακέραιες τιμές του j . Η ύπαρξη του σπιν υποδεικνύει ότι οι αναπαραστάσεις με ημιακέραιο j έχουν μεγάλη φυσική σημασία.

Σύμφωνα με τον Πάουλι, το σπιν είναι ένας επιπλέον βαθμός ελευθερίας που χαρακτηρίζει ένα σωματίο, πέρα από τις θέσεις και τις ορμές που αντιστοιχούν στην κίνηση του σωματιδίου στο χώρο. Όπως είδαμε οι κινήσεις στο χώρο περιγράφονται πλήρως από το χώρο Χίλμπερτ $L^2(\mathbf{R}^3)$, οπότε για να εισάγουμε έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας για το σπιν θα πρέπει να θεωρήσουμε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{V}_s για αυτό το βαθμό ελευθερίας. Έτσι ο συνολικός χώρος Χίλμπερτ θα είναι $L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathcal{V}_s$.

Ο συσχετισμός του σπιν με την περιστροφή σημαίνει ότι ο \mathcal{H}_s θα περιέχει μία αναπαράσταση της άλγεβρας των περιστροφών. Ειδικά για το σπιν, συμβολίζουμε με \hat{s}_i τους γεννήτορες της άλγεβρας των περιστροφών, οπότε θα ικανοποιούν

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{s}_k. \quad (14.1)$$

Άρα ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{V}_s του σπιν δέχεται μία ορθοκανονική βάση από διανύσματα $|s, m_s\rangle$ που ικανοποιούν τις σχέσεις $\hat{s}^2|s, m_s\rangle = s(s+1)|s, m_s\rangle$ και $\hat{s}_3|s, m_s\rangle = m_s|s, m_s\rangle$. Ο αριθμός s μπορεί να είναι ακέραιος ή ημιακέραιος, και το m_s παίρνει τιμές $-s, -s+1, \dots, s-1, s$. Καλείται *σπιν του σωματιδίου*².

Το σπιν s είναι ενδογενές χαρακτηριστικό ενός σωματιδίου, ακριβώς όπως και η μάζα του. Παίρνει μία καθορισμένη τιμή για κάθε σωματίο, η οποία είναι μέρος της ταυτότητας αυτού του σωματιδίου και δεν μπορεί να αλλάξει.

Στον πίνακα 14.1 δίνονται οι τιμές του s για διάφορα σωματία. Παρατηρούμε, ότι τα βασικά συστατικά του ατόμου, τα ηλεκτρόνια, τα πρωτόνια και τα νετρόνια έχουν σπιν $s = \frac{1}{2}$.

Με δεδομένο ότι το s είναι σταθερό για ένα σωματίο, ισχύει ότι $\mathcal{V}_s = \mathcal{C}^{2s+1}$, οπότε ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει ένα σημειακό σωματίο με σπιν s είναι ο $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathcal{C}^{2s+1}$. Σ' αυτό το χώρο Χίλμπερτ ορίζεται ο τελεστής της ολικής στροφορμής

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\ell} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{s}. \quad (14.2)$$

¹Είναι αξιοσημείωτο ότι το σπιν ως ενδογενή στροφορμότητα ενός σωματιδίου δεν είναι αποκλειστικά κβαντική έννοια. Ορίζεται και στην κλασική μηχανική στα πλαίσια της μελέτης της συμμετρίας των περιστροφών [237], αν και η 'ανακάλυψη' του κλασικού σπιν ήταν μεταγενέστερη της εισαγωγής του από την κβαντική θεωρία. Η κύρια διαφορά είναι ότι οι τιμές του κλασικού σπιν είναι συνεχείς και όχι διακριτές.

²Προσοχή, καταχρηστικά καλείται συχνά σπιν του σωματιδίου και ο αριθμός m_s που αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές της συνιστώσας \hat{s}_3 , υπονοώντας ότι για ένα συγκεκριμένο τύπο σωματιδίου μόνο αυτό είναι μεταβλητή, ενώ το s είναι σταθερά.

Για να αποφύγουμε τη σύγχυση, όταν περιγράψουμε σωματίο με σπιν θα αναφερόμαστε στους κβαντικούς αριθμούς της τροχιακής στροφορμής ως (ℓ, m_ℓ) και της ολικής στροφορμής ως (j, m_j) .

Η Εξ. (14.2) γράφεται ως

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \quad (14.3)$$

όπου ορίζουμε $\hat{L}_i = \hat{\ell}_i \otimes \hat{I}$ και $\hat{S}_i = \hat{I} \otimes \hat{s}_i$. Με τον ίδιο τρόπο γράφουμε $\hat{P}_i = \hat{p}_i \otimes \hat{I}$ και $\hat{X}_i = \hat{x}_i \otimes \hat{I}$, για να δηλώσουμε τους τελεστές της ορμής και της θέσης, όπως ορίζονται στο \mathcal{H}_s .

Συνοψίζοντας, στα πλαίσια της μη-σχετικιστικής φυσικής, ένα σωματίο μάζας m και σπιν s περιγράφεται στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathcal{C}^{2s+1}$, στον οποίον ορίζονται οι σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0, \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0, \quad [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\delta_{ij}, \quad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k. \quad (14.4)$$

Η Εξ. (14.4) μαζί με την Εξ. (14.3) αποτελούν τις *θεμελιώδεις σχέσεις της μη-σχετικιστικής κβαντομηχανικής*.

14.2.2 Βάσεις στον \mathcal{H}_s

Για οποιαδήποτε βάση $|n\rangle$ στον $L^2(\mathbf{R}^3)$ ορίζουμε τη βάση $|n, m_s\rangle = |n\rangle \otimes |m_s\rangle$ στο \mathcal{H}_s . Η τιμή του s δεν αναφέρεται ως δείκτης στο κετ μια και είναι σταθερά. Το ίδιο ισχύει για γενικευμένες βάσεις στον $L^2(\mathbf{R}^3)$, όπως της θέσης $|\mathbf{r}\rangle$ και της ορμής $|\mathbf{k}\rangle$. Δηλαδή, ορίζουμε γενικευμένα διανύσματα $|\mathbf{r}, m_s\rangle$ ή $|\mathbf{k}, m_s\rangle$ στο \mathcal{H}_s .

Αν χρησιμοποιούμε τη βάση $|n, \ell, m_\ell\rangle$ για σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά στο $L^2(\mathbf{R}^3)$, τότε θα γράφουμε τη βάση στο \mathcal{H}_s ως $|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$.

Εναλλακτικά, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη θεωρία σύνθεσης στροφορμών ώστε να ορίσουμε μία βάση που εξαρτάται από τους κβαντικούς αριθμούς m_j της ολικής στροφορμής. Η τριγωνική ανισότητα δίνει ότι για δεδομένο ℓ οι δυνατές τιμές του j είναι $j_\pm = \ell \pm \frac{1}{2}$. Οπότε για κάθε τιμή του ℓ , υπάρχουν $2j_+ + 1 = 2\ell + 2$ διανύσματα με ολική στροφορμή j_+ και άλλα $2j_- + 1 = 2\ell$ με ολική στροφορμή j_- , συνολικά $2(2\ell + 1)$ όσα απαιτούνται για μια βάση στο $\mathcal{C}^{2\ell+1} \otimes \mathcal{C}^2$. Άρα μπορούμε να χρησιμοποιούμε τη βάση $|n, \ell, j, m_j\rangle$ που προσδιορίζεται από τα ιδιοδιανύσματα των τελεστών της ολικής στροφορμής \hat{J}^2 και \hat{J}_3 .

Στην αναπαράσταση Σρέντινγκερ περιγράφουμε τα στοιχεία του \mathcal{H}_s ως κυματοσυναρτήσεις με δείκτη m_s και να γράφουμε $\psi_{m_s}(\mathbf{r})$. Επίσης μπορούμε να τα αναπαριστούμε ως διανύσματα στήλης

$$\begin{pmatrix} \psi_s(\mathbf{r}) \\ \psi_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \dots \\ \psi_{-s}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (14.5)$$

Κυματοσυναρτήσεις της μορφής $\psi(\mathbf{r})_{c_{m_s}}$ αντιστοιχούν σε χωριζόμενα διανύσματα του \mathcal{H}_s . Για αυτές τις καταστάσεις μηδενίζεται ο συσχετισμός μεταξύ ορμής και σπιν $\text{Cor}(P_i, S_j)$. Αντίθετα ο συσχετισμός ορμής και σπιν είναι μη-μηδενικός σε εναγκαλισμένα διανύσματα του \mathcal{H}_s .

14.2.3 Το σπιν σύνθετων σωματιδίων

Το σπιν δεν ορίζεται μόνο σε στοιχειώδη σωματίια, αλλά και σε σύνθετα. Έστω δύο σωματίια μάζας m_1 και m_2 και σπιν s_1 και s_2 που αλληλεπιδρούν μέσω ενός κεντρικού δυναμικού $V(|\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2|)$. Στο

Κεφ. 13.1 δείξαμε ότι η Χαμιλτονιανή του συστήματος γράφεται ως $\hat{H} = \hat{H}_{KM} + \hat{H}_{rel}$, όπου \hat{H}_{KM} είναι η Χαμιλτονιανή του κέντρου μάζας που περιγράφει ελεύθερο σωματίο μάζας $M = m_1 + m_2$, και \hat{H}_{rel} είναι η Χαμιλτονιανή που περιγράφει τους σχετικούς βαθμούς ελευθερίας.

Όταν περιγράφουμε το σύνθετο σύστημα ως ένα σωματίο, εξετάζουμε μόνο τον όρο \hat{H}_{KM} , δηλαδή εστιάζουμε στους βαθμούς ελευθερίας που περιγράφουν το κέντρο μάζας του. Οι υπόλοιποι βαθμοί ελευθερίας είναι *εσωτερικοί* του σύνθετου σωματιδίου. Θεωρούμε ότι αυτοί οι βαθμοί ελευθερίας είναι παγωμένοι, δηλαδή αντιστοιχούν σε μία ιδιοκατάσταση της \hat{H}_{rel} , συνήθως τη θεμελιώδη.

Η ολική στροφορμή του συστήματος είναι ίση με

$$\hat{J} = \hat{L}_{KM} + \hat{L}_{rel} + \hat{S}_1 + \hat{S}_2, \quad (14.6)$$

όπου $\hat{L}_{KM} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ η τροχιακή στροφορμή του κέντρου μάζας, $\hat{L}_{rel} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ η τροχιακή στροφορμή των εσωτερικών βαθμών ελευθερίας και \hat{S}_1, \hat{S}_2 τα σπιν των επιμέρους σωματιδίων.

Εφόσον το σύνθετο σύστημα αντιμετωπίζεται ως σωματίο, η στροφορμή του είναι η \hat{L}_{KM} . Η σύγκριση της Εξ. (14.6) με την Εξ. (14.3) μας δίνει ότι το σπιν του σύνθετου σωματιδίου είναι

$$\mathbf{S} = \hat{L}_{rel} + \hat{S}_1 + \hat{S}_2. \quad (14.7)$$

Βλέπουμε ότι το σπιν του σύνθετου σωματιδίου εξαρτάται όχι μόνο από τα σπιν των συστατικών σωματιδίων, αλλά και από την σχετική τροχιακή στροφορμή αυτών. Αν οι εσωτερικοί βαθμοί ελευθερίας είναι στη θεμελιώδη κατάσταση, θα έχουμε $\ell_{rel} = 0$, οπότε $\mathbf{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$. Ωστόσο μία διέγερση των εσωτερικών βαθμών ελευθερίας μπορεί να τους φέρει σε κατάσταση με $\ell_{rel} > 0$, οπότε η τιμή του \mathbf{S}^2 μπορεί να αλλάξει. Συνήθως, όταν μιλάμε για σπιν ενός σύνθετου σωματιδίου, αναφερόμαστε στην τιμή του s που αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση των εσωτερικών του βαθμών ελευθερίας³. Αυτή προσδιορίζεται όταν κανείς λάβει υπόψη αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σπιν στη Χαμιλτονιανή.

Η Εξ. (14.7) σημαίνει ότι αν ξέρουμε τα σπιν s_1 και s_2 των συστατικών ενός σύνθετου σωματιδίου, σίγουρα μπορούμε να αποφανθούμε για το αν το σπιν του σύνθετου σωματιδίου είναι ακέραιο ή ημιακέραιο. Το ℓ_{rel} είναι πάντα ακέραιο, οπότε το σπιν του σύνθετου σωματιδίου s είναι ακέραιο αν $s_1 + s_2$ είναι ακέραιο και ημιακέραιο αν $s_1 + s_2$ είναι ημιακέραιο. Αυτό βεβαίως γενικεύεται και σε σύνθετα σωματίδια που αποτελούνται από N συστατικά με σπιν s_i . Το ολικό σπιν είναι ακέραιο ή ημιακέραιο αν το $\sum_{i=1}^N s_i$ είναι ακέραιο ή ημιακέραιο αντίστοιχα.

14.3 Αλληλεπίδραση σωματιδίων με σπιν με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο

14.3.1 Ο γυρομαγνητικός λόγος

Εν γένει το σπιν δεν αλληλεπιδρά άμεσα με τους υπόλοιπους βαθμούς ελευθερίας ενός σωματιδίου. Συμπεριφέρεται ως μαγνητικό δίπολο και ως τέτοιο μπορεί να αλληλεπιδράσει μόνο με το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} . Αυτή η αλληλεπίδραση αντιστοιχεί σε έναν όρο που πρέπει να προστεθεί στη Χαμιλτονιανή (13.88). Έτσι παίρνουμε τη Χαμιλτονιανή για αλληλεπίδραση ενός σωματιδίου φορτίου q , μάζας m και σπιν s με το ΗΜ πεδίο (\mathbf{E}, \mathbf{B}) ,

³Σε μεγάλο βαθμό το πότε αποκαλούμε μια διεγερμένη κατάσταση των εσωτερικών βαθμών ελευθερίας άλλο σωματίο είναι θέμα σύμβασης του εκάστοτε κλάδου. Στην ατομική και πυρηνική φυσική, δεν αποκαλούμε μία διεγερμένη κατάσταση ενός ατόμου ή ενός πυρήνα με άλλο όνομα από τη θεμελιώδη. Μιλάμε για διεγερμένο άτομο ή για διεγερμένο πυρήνα του ίδιου στοιχείου. Αντίθετα, στη σωματιδιακή φυσική είθισται να αναφερόμαστε στις διεγερμένες καταστάσεις σύνθετων σωματιδίων ως άλλα σωματίδια, για παράδειγμα κάποιες διεγερμένες καταστάσεις των σωματιδίων ρ καλούνται σωματίδια ρ .

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A} \right)^2 + q\phi - \gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (14.8)$$

Παρατηρούμε ότι ο πρόσθετος όρος $-\gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ στην Εξ. (14.8) είναι αντίστοιχος του όρου (13.91) της σύζευξης ενός σταθερού μαγνητικού πεδίου με την τροχιακή στροφορμή αλλά με διαφορετική πολλαπλασιαστική σταθερά.

Η σταθερά γ καλείται *γυρομαγνητικός λόγος* του σωματιδίου, και παίρνει διαφορετική τιμή για κάθε σωματίδιο. Ειδικότερα, μπορεί να πάρει μη μηδενικές τιμές ακόμα και σε ουδέτερα σωματίδια ($q = 0$). Για φορτισμένα σωματίδια είναι χρήσιμος ο ορισμός του *παράγοντα* g

$$g = \frac{2m}{q} \gamma, \quad (14.9)$$

έτσι ώστε για ομογενές μαγνητικό πεδίο, η Εξ. (14.8) να περιέχει έναν όρο αλληλεπίδρασης διπόλου $-\frac{q}{2m} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + g\mathbf{S})$, που αντιστοιχεί σε μία διπολική ροπή

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{q}{2m} (\mathbf{L} + g\mathbf{S}). \quad (14.10)$$

Ειδικά για το ηλεκτρόνιο, η ποσότητα $\frac{e}{2m}$ που εμφανίζεται στον όρο αλληλεπίδρασης διπόλου καλείται *μαγνητόνη του Μπορ*, συμβολίζεται ως μ_B και ορίζει τη βασική κλίμακα διπολικής ροπής στο επίπεδο του ατόμου.

Ο γυρομαγνητικός λόγος σε σύνθετα σωματίδια υπολογίζεται από τη δομή τους και από τις τιμές του γυρομαγνητικού λόγου των συστατικών τους. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα ένα σύστημα δύο σωματιδίων με σπιν s_1 και s_2 και γυρομαγνητικούς λόγους γ_1 και γ_2 . Έστω $s > 0$ το σπιν του σύνθετου σωματιδίου και γ ο γυρομαγνητικός του λόγος.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος εμφανίζει ένα όρο $-\gamma_1 \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_1 - \gamma_2 \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$. Δεδομένου ότι θεωρούμε το σύστημα ως σωματίο, αυτός ο όρος θα γράφεται ως $-\gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}$. Άρα

$$\gamma \hat{\mathbf{S}} = \gamma_1 \hat{\mathbf{S}}_1 + \gamma_2 \hat{\mathbf{S}}_2. \quad (14.11)$$

Υψώνοντας στο τετράγωνο παίρνουμε ότι $\gamma^2 \hat{\mathbf{S}}^2 = \gamma_1^2 \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \gamma_2^2 \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\gamma_1 \gamma_2 \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$. Αν η θεμελιώδης κατάσταση των εσωτερικών βαθμών ελευθερίας έχει μηδενική τροχιακή στροφορμή, $\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$, οπότε το γινόμενο $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$ δίνεται από την Εξ. (11.108). Καταλήγουμε ότι

$$\gamma^2 = \gamma_1 \gamma_2 + (\gamma_1 - \gamma_2) \frac{\gamma_1 s_1 (s_1 + 1) - \gamma_2 s_2 (s_2 + 1)}{s(s + 1)}. \quad (14.12)$$

Σε στοιχειώδη σωματίδια, η τιμή του γ προσδιορίζεται από πρώτες αρχές, αλλά αυτό απαιτεί σχετική περιγραφή στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας πεδίου. Για το ηλεκτρόνιο, η τιμή του παράγοντα g (συμβολίζεται ως g_e) είναι πολύ κοντά στο 2. Για την ακρίβεια η πειραματικά μετρούμενη τιμή είναι $g_e = 2.00231930436153(53)$ και συμφωνεί με τη θεωρητική πρόβλεψη σε περισσότερα από 10 σημαντικά ψηφία, κάτι που καθιστά την πρόβλεψη του g_e την πιο ακριβή επιβεβαιωμένη πρόβλεψη στην ιστορία της φυσικής.

14.3.2 Εξήγηση του πειράματος Στερν-Γκέρλαχ

Η Εξ. (14.8) εξηγεί τα παρατηρούμενα στο πείραμα Στερν-Γκέρλαχ. Θυμίζουμε ότι το πείραμα αφορούσε τη διάδοση ατόμων Ag μέσα σε ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο, $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = (0, 0, B(\mathbf{x}))$. Τα άτομα

Αg είναι ουδέτερα ($q = 0$) και χαρακτηρίζονται από σπιν $s = \frac{1}{2}$ και μη μηδενική τιμή του γυρομαγνητικού λόγου. Η Χαμιλτονιανή (14.8) γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \gamma B(\hat{X}) \hat{S}_3. \quad (14.13)$$

Οι εξισώσεις εξέλιξης της ορμής κατά Χάιζενμπεργκ δίνουν

$$\frac{d}{dt} \hat{P}_i = i\gamma [B(\hat{X}), \hat{P}_i] \hat{S}_3 = -\gamma \frac{\partial B}{\partial x_i}(\hat{X}) \hat{S}_3. \quad (14.14)$$

Στους υπόχωρους \mathcal{H}_\pm με σταθερό $m_s = \pm \frac{1}{2}$, η Εξ. (14.14) γίνεται

$$\frac{d}{dt} \hat{P}_i = \mp \frac{\gamma}{2} \frac{\partial B}{\partial x_i}(\hat{X}), \quad (14.15)$$

δηλαδή η ορμή εξελίσσεται με δύο διαφορετικούς τρόπους, έναν για κάθε τιμή του m_s . Συνέπεια αυτού είναι το σπάσιμο της αρχικής δέσμης σε δύο υποδέσμες, εφόσον η κατεύθυνση κίνησης είναι κατεύθυνση ανομοιογένειας του μαγνητικού πεδίου.

14.3.3 Μετάπτωση Λάρμορ

Για να κατανοήσουμε τη σημασία του γυρομαγνητικού λόγου εξετάζουμε την περίπτωση ενός ηλεκτρικά ουδέτερου σωματιδίου μέσα σε μαγνητικό πεδίο, οπότε οι βαθμοί ελευθερίας της θέσης και της ορμής δεν αλληλεπιδρούν με το πεδίο. Έτσι εξετάζουμε ξεχωριστά την επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο σπιν. Οπότε περιοριζόμαστε στο χώρο Χίλμπερτ \mathbf{C}^{2s+1} και στη Χαμιλτονιανή $\hat{H} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ για σταθερό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} . Είναι ευκολότερο να χρησιμοποιήσουμε την εικόνα του Χάιζενμπεργκ, οπότε η εξίσωση χρονικής εξέλιξης για τον τελεστή του σπιν είναι

$$\dot{\hat{s}}_i = i[\hat{H}, \hat{s}_i] = -i\gamma \sum_j B_j [\hat{s}_j, \hat{s}_i] = -\gamma \sum_{jk} \epsilon_{ijk} B_j \hat{s}_k, \quad (14.16)$$

ή ισοδύναμα

$$\dot{\hat{\mathbf{s}}} = -\gamma \mathbf{B} \times \hat{\mathbf{s}}. \quad (14.17)$$

Για να λύσουμε την Εξ. (14.17) επιλέγουμε $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, οπότε παίρνουμε $\dot{\hat{s}}_1 = \gamma B \hat{s}_2$, $\dot{\hat{s}}_2 = -\gamma B \hat{s}_1$, $\dot{\hat{s}}_3 = 0$. Χρησιμοποιώντας τα $\hat{s}_\pm = \hat{s}_1 \pm i\hat{s}_2$ παίρνουμε

$$\dot{\hat{s}}_\pm = \mp i\gamma B \hat{s}_\pm \quad \dot{\hat{s}}_3 = 0, \quad (14.18)$$

με λύση

$$\hat{s}_\pm(t) = \hat{s}_\pm(0) e^{\mp i\gamma B t}, \quad \hat{s}_3(t) = \hat{s}_3(0). \quad (14.19)$$

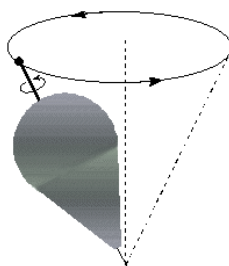
Ισοδύναμα,

$$\hat{s}_1(t) = \hat{s}_1(0) \cos(\gamma B t) + \hat{s}_2(0) \sin(\gamma B t), \quad (14.20)$$

$$\hat{s}_2(t) = -\hat{s}_1(0) \sin(\gamma B t) + \hat{s}_2(0) \cos(\gamma B t), \quad (14.21)$$

$$\hat{s}_3(t) = \hat{s}_3(0). \quad (14.22)$$

δηλαδή το διάνυσμα του σπιν περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του μαγνητικού πεδίου με συχνότητα $\omega = \gamma B$.



Σχήμα 14.2: Μετάπτωση ενός αυτοπεριστρεφόμενου σώματος στην κλασική φυσική. Ο άξονας αυτοπεριστροφής της σβούρας σαρώνει έναν κώνο γύρω από τον κατακόρυφο άξονα.

Η παραπάνω χρονική εξέλιξη του σπιν καλείται *μετάπτωση Λάρμορ* (Larmor). Το κλασικό ανάλογο της μετάπτωσης είναι η αυτοπεριστροφή μιας σβούρας. Το όνομα "γυρομαγνητικός λόγος" για το γ είναι προφανές ετυμολογικά, εφόσον εκφράζεται ως ω/B .

Βεβαίως, σε αντίθεση με την κλασική μετάπτωση, η γωνία θ που σχηματίζει το σπιν με τον άξονα κατανέμεται πιθανοκρατικά. Για κλασικά διανύσματα s και B , η γωνία θ ικανοποιεί $\cos \theta = \frac{s \cdot B}{|s||B|}$. Ορίζουμε έναν τελεστή συνημιτόνου για την κβαντική περιγραφή της γωνίας θ

$$\widehat{\cos \theta} = \frac{\mathbf{B} \cdot \hat{s}}{\sqrt{s(s+1)}B} = \frac{\hat{s}_3}{\sqrt{s(s+1)}}, \quad (14.23)$$

ο οποίος έχει $(2s+1)$ ιδιοτιμές ίσες με $m_s/\sqrt{s(s+1)}$. Ο τελεστής $\widehat{\cos \theta}$ μετατίθεται (τετριμμένα) με τη Χαμιλτονιανή $-\gamma \mathbf{B} \cdot \hat{s}$. Αυτό σημαίνει ότι η κατανομή πιθανοτήτων για τη "γωνία μετάπτωσης" δεν εξαρτάται από το χρόνο.

14.3.4 Επαγόμενες αλληλεπιδράσεις

Στην αλληλεπίδραση του σπιν με το μαγνητικό πεδίο, το μαγνητικό πεδίο μπορεί να προέρχεται από κάποιο άλλο δίπολο (που μπορεί να προέρχεται από σπιν ή τροχιακή στροφορμή). Αυτό έχει ως συνέπεια την εμφάνιση όρων *επαγόμενης αλληλεπίδρασης* μεταξύ στροφορμών. Αυτοί οι επαγόμενοι όροι υπολογίζονται από πρώτες αρχές, αλλά ο υπολογισμός απαιτεί μία πλήρη σχετικιστική περιγραφή των σωματιδίων, την οποία θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο.

Για ένα φορτισμένο σωματίο μάζας m , σπιν s και με παράγοντα που κινείται σε σφαιρικά συμμετρικό ηλεκτρικό δυναμικό $\phi(r)$, εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή ένας όρος

$$\hat{V}_{LS} = \frac{\gamma}{2mq} \hat{r}^{-1} \phi'(\hat{r}) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (14.24)$$

που καλείται *σύζευξη LS* ή *σύζευξη σπιν-τροχιάς*. Παρότι υπάρχουν ημι-ποιοτικά επιχειρήματα πώς μπορεί να αποδειχθεί αυτή η έκφραση από τον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, ο παράγοντας $\frac{1}{2}$ δεν μπορεί να εξηγηθεί παρά μόνο στα πλαίσια της σχετικιστικής φυσικής [238].

Στον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, η ενέργεια αλληλεπίδρασης δύο διπόλων με μαγνητικές ροπές μ_1 και μ_2 είναι [5]

$$E = -\frac{1}{4\pi r^3} [3(\mu_1 \cdot \mathbf{n})(\mu_2 \cdot \mathbf{n}) - \mu_1 \cdot \mu_2], \quad (14.25)$$

όπου r η απόσταση των δύο διπόλων και \mathbf{n} το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση που ενώνει τα δίπολα.

Στην κβαντική θεωρία εμφανίζεται ένας αντίστοιχος όρος αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων όπου η διπολική ροπή εκφράζεται μέσω των τελεστών (14.10) και άρα γράφεται συναρτήσεις τόσο των τροχιακών στροφορμών \hat{L}_1 και \hat{L}_2 των σωματιδίων όσο και των σπιν τους \hat{S}_1 και \hat{S}_2 .

14.3.5 Η εξίσωση του Πάουλι

Η πολύ καλή προσέγγιση $g = 2$ που ισχύει για το ηλεκτρόνιο δικαιολογήθηκε από τον Πάουλι στη βάση μιας πιο θεμελιώδους Χαμιλτονιανής που ισχύει ειδικά για στοιχειώδη σωματάρια με σπιν $\frac{1}{2}$.

Θυμίζουμε ότι για $s = \frac{1}{2}$, ο βαθμός ελευθερίας του σπιν αντιστοιχεί στο C^2 . Χρησιμοποιώντας τις μήτρες του Πάουλι ορίζουμε στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ τον τελεστή

$$\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{i=1}^3 \hat{K}_i \otimes \hat{\sigma}_i. \quad (14.26)$$

για κάθε τριάδα τελεστών $\hat{K}_i, i = 1, 2, 3$, του $L^2(\mathbf{R}^3)$. Βρίσκουμε

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 &= \sum_{ij} \hat{K}_i \hat{K}_j \otimes \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \sum_{ij} \hat{K}_i \hat{K}_j \otimes (\delta_{ij} \hat{I} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k) \\ &= \hat{\mathbf{K}}^2 \otimes \hat{I} + \frac{i}{2} \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} [\hat{K}_i, \hat{K}_j] \otimes \hat{\sigma}_k \end{aligned} \quad (14.26)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (6.4).

Ο Πάουλι πρότεινε την εξής Χαμιλτονιανή για το ηλεκτρόνιο που αλληλεπιδρά με ηλεκτρομαγνητικό πεδίο (που τώρα φέρει το όνομά του)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}]^2 + q\phi \quad (14.27)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (13.122), η Εξ. (14.26) δίνει

$$[(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}]^2 = (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 \otimes \hat{I} + q \sum_i B_i \otimes \hat{s}_i, \quad (14.28)$$

όπου $\hat{s}_i = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_i$. Οπότε η Χαμιλτονιανή του Πάουλι γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A})^2 + q\phi - \frac{q}{m} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (14.29)$$

Συγκρίνοντας με την Εξ. (14.8) βρίσκουμε ότι $\gamma = q/m$, οπότε $g = 2$. Όπως θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο, η Εξ. (14.27) προκύπτει ως μη-σχετικιστικό όριο της εξίσωσης Ντιράκ, που προσφέρει μία πιο θεμελιώδη περιγραφή του ηλεκτρονίου, σύμφωνα με τις συμμετρίες της ειδικής σχετικότητας.

14.4 Η συμμετρία της μη-σχετικιστικής φυσικής

14.4.1 Ομάδα Γαλιλαίου

Η θεμελιώδης συμμετρία της μη-σχετικιστικής φυσικής προέρχεται από την αντίληψη του απόλυτου χρόνου και χώρου της Νευτώνειας θεωρίας. Βασίζεται στην ύπαρξη μίας ειδικής κατηγορίας

συστημάτων αναφοράς, των αδρανειακών συστημάτων, στα οποία ισχύουν οι τρεις νόμοι του Νεύτωνα. Οι μετασχηματισμοί μεταξύ αδρανειακών συστημάτων που διατηρούν τους νόμους του Νεύτωνα ορίζουν την ομάδα Γαλιλαίου⁴.

Ένα αδρανειακό σύστημα αναφοράς O περιγράφει ένα φυσικό γεγονός από μία τετράδα αριθμών, το χρόνο t και από ένα διάνυσμα θέσης $\underline{r} = (x_1, x_2, x_3)$ ως προς ένα ορθογώνιο σύστημα αξόνων. Ένα άλλο αδρανειακό σύστημα O' χαρακτηρίζεται από άλλη τιμή του χρόνου t' και συνιστώσες (x'_1, x'_2, x'_3) του διανύσματος θέσης. Οι μετασχηματισμοί Γαλιλαίου μεταξύ του O' και O είναι οι εξής.

1. Χωρική μετατόπιση: $(t', x'_i) = (t, x_i + a_i)$, όπου $a_i \in \mathbf{R}$. (μεταφορά της αρχής του συστήματος συντεταγμένων)
2. Χρονική μετατόπιση: $(t', x'_i) = (t + \tau, x_i)$, όπου $\tau \in \mathbf{R}$.
3. Περιστροφή: $(t', x') = (t, (Ox)_i)$, όπου $O \in SO(3)$ και συμβολίσουμε $(Ox)_i = \sum_j O_{ij}x_j$. (η αρχή του συστήματος συντεταγμένων παραμένει σταθερή).
4. Ώθηση: $(t', x') = (t, x_i + v_it)$, όπου $v_i \in \mathbf{R}$. (κίνηση με σταθερή σχετική ταχύτητα).

Η ομάδα Γαλιλαίου Gal αναπαρίσταται από ένα πίνακα 5×5 με 10 ανεξάρτητες μεταβλητές

$$G(\underline{a}, \tau, \underline{v}, O) = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & O_{13} & v_1 & a_1 \\ O_{21} & O_{22} & O_{23} & v_2 & a_2 \\ O_{31} & O_{32} & O_{33} & v_3 & a_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \tau \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (14.30)$$

Άμεσα βρίσκουμε ότι δράση του $G(\underline{a}, \tau, \underline{v}, O)$ σε ένα διάνυσμα στήλης δίνει τους προαναφερθέντες νόμους μετασχηματισμού,

$$G(O, \underline{v}, \underline{a}, \tau) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ t \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (Ox)_1 + v_1t + a_1 \\ (Ox)_2 + v_2t + a_2 \\ (Ox)_3 + v_3t + a_3 \\ t + \tau \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (14.31)$$

Ο νόμος σύνθεσης της ομάδας υπολογίζεται μέσω πολλαπλασιασμού πινάκων

$$G(O_2, \underline{v}_2, \underline{a}_2, \tau_2)G(O_1, \underline{v}_1, \underline{a}_1, \tau_1) = G(O_2O_1, \underline{v}_2 + \underline{v}_1, O_2\underline{a}_1 + \underline{a}_2 + v_2\tau_1, \tau_1 + \tau_2). \quad (14.32)$$

Η ομάδα Γαλιλαίου έχει δέκα γεννήτορες, τρεις γεννήτορες περιστροφών J_i , τρεις γεννήτορες ωθήσεων C_i , τρεις γεννήτορες χωρικών μετατοπίσεων P_i και ένα γεννήτορα χρονικών μετατοπίσεων H .

⁴Η παρούσα διατύπωση με όρους αδρανειακών συστημάτων είναι σύγχρονη, ωστόσο η ρίζα της ιδέας βρίσκεται στο περιβόητο "καράβι του Γαλιλαίου", ένα πείραμα σκέψης που περιέγραψε ο Γαλιλαίος το 1632, στο βιβλίο του "Διάλογος περί των δύο κύριων συστημάτων του κόσμου"[239]. Σύμφωνα με αυτό το πείραμα, αν βρεθείς σε μια κλειστή καμπίνα σε ένα πλοίο, παρατηρείς ακριβώς τα ίδια, είτε το πλοίο είναι ακίνητο είτε κινείται με σταθερή ταχύτητα.

Οι αντίστοιχοι πίνακες υπολογίζονται εύκολα από τον πίνακα (14.30)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{J} &= \begin{pmatrix} 0 & \theta_3 & -\theta_2 & 0 & 0 \\ -\theta_3 & 0 & \theta_1 & 0 & 0 \\ \theta_2 & -\theta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{v} \cdot \mathbf{C} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{P} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & H &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14.32)$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω εκφράσεις βρίσκουμε τις σχέσεις μετάθεσης για την άλγεβρα Λι της ομάδας Γαλιλαίου

$$[J_i, J_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} J_k, \quad [C_i, J_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} C_k, \quad [P_i, J_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} P_k, \quad [H, J_i] = 0, \quad (14.33)$$

$$[C_i, C_j] = 0, \quad [C_i, P_j] = 0, \quad [C_i, H] = P_i, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [P_i, H] = 0. \quad (14.34)$$

14.4.2 Αναπαραστάσεις της ομάδας Γαλιλαίου

Σε μία μοναδιαία αναπαράσταση της ομάδας Γαλιλαίου Gal, οι γεννήτορες αντιστοιχίζονται σε αυτοσυζυγείς τελεστές $\hat{J}_i, \hat{C}_i, \hat{P}_i$ και \hat{H} , οι οποίοι ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad [\hat{C}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{C}_k, \quad [\hat{P}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{P}_k, \quad [\hat{H}, \hat{J}_i] = 0, \quad (14.35)$$

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j] = 0, \quad [\hat{C}_i, \hat{P}_j] = 0, \quad [\hat{C}_i, \hat{H}] = i \hat{P}_i, \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0, \quad [\hat{P}_i, \hat{H}] = 0. \quad (14.36)$$

Εξετάζουμε το ενδεχόμενο να αναπαραστήσουμε την ομάδα Γαλιλαίου στο χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathcal{C}^{(2s+1)}$ για ένα σωματίο με σπιν s και μάζα m . Υπάρχουν δυο προφανείς ταυτίσεις, του \hat{P}_i με τον τελεστή της ορμής και του \hat{J}_i με τον τελεστή της στροφορμής. Η προφανής επιλογή για το γεννήτορα των μετατοπίσεων στο χρόνο είναι $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2$. (Η παρουσία οποιουδήποτε μη τετριμμένου δυναμικού σπάει τη συμμετρία μετατόπισης στο χώρο.) Επιλέγοντας $\hat{C}_i = m \hat{X}_i$, παρατηρούμε ότι ικανοποιούνται όλες οι σχέσεις μετάθεσης (14.35–14.36) εκτός της $[\hat{C}_i, \hat{P}_j] = 0$. Στη θέση της παίρνουμε $[\hat{C}_i, \hat{P}_j] = im \delta_{ij} \hat{I}$. Ωστόσο η διαφορά είναι ένα πολλαπλάσιο του \hat{I} , οπότε παίρνουμε μία κεντρική επέκταση της άλγεβρα Λι της ομάδας Γαλιλαίου—βλ. Εξ. (12.29), με τη μάζα του σωματιδίου να ορίζει το κεντρικό φορτίο της επέκτασης. Αυτό σημαίνει ότι στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_s ορίζεται μία *προβολική αναπαράσταση της ομάδας Γαλιλαίου*.

Μπορούμε να βρούμε μοναδιαία αναπαράσταση της Gal; Η απάντηση δόθηκε από τον Μπάργκμαν (Bargmann) το 1954 και ήταν αρνητική [240]. Η ομάδα Γαλιλαίου δεν επιδέχεται από τη φύση της μοναδιαίες αναπαραστάσεις. Άρα δεν έχουμε άλλη επιλογή από το να χρησιμοποιήσουμε προβολικές αναπαραστάσεις της Gal, και άρα με άλγεβρα Λι που περιέχει την κεντρική επέκταση $[\hat{C}_i, \hat{P}_j] = im \delta_{ij} \hat{I}$. Βέβαια αυτή η κεντρική επέκταση δεν είναι τίποτε άλλο από τις κανονικές σχέσεις μετάθεσης, που αντιστοιχούν στην ομάδα Βάουλ-Χάιζενμπεργκ H_3 .

Οι βασικές μεταθέσεις του Χάιζενμπεργκ προκύπτουν από την απαίτηση της ύπαρξης μίας προβολικής αναπαράστασης της ομάδας Γαλιλαίου στο χώρο Χίλμπερτ που περιγράφει ένα σύστημα σωματιδίων.

Δεχόμενοι ότι η αναπαράσταση της Gal πρέπει να είναι προβολική, με κεντρική επέκταση που να αντιστοιχεί στη μάζα m , οι Εξ. (14.35—14.36) γράφονται ως

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad [\hat{C}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{C}_k, \quad [\hat{P}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{P}_k, \quad [\hat{H}, \hat{J}_i] = 0, \quad (14.37)$$

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j] = 0, \quad [\hat{C}_i, \hat{P}_j] = im\delta_{ij}\hat{I}, \quad [\hat{C}_i, \hat{H}] = i\hat{P}_i, \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0, \quad [\hat{P}_i, \hat{H}] = 0. \quad (14.38)$$

Οι Εξ. (14.35—14.36) ορίζουν την άλγεβρα Μπάργκμαν, η οποία έχει 11 γεννήτορες, τους 10 της ομάδας Γαλιλαίου και τη μονάδα \hat{I} . Προσδιορίζουμε τις μη-αναγωγίμες αναπαραστάσεις μέσω των τελεστών Κάζιμρ. Υπάρχουν δύο. Ο πρώτος είναι

$$\hat{K}_1 = m\hat{H} - \frac{\mathbf{P}^2}{2}. \quad (14.39)$$

Αυτό σημαίνει ότι σε μία μη-αναγωγίμη αναπαράσταση της Gal, $\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + E_0\hat{I}$, όπου E_0 σταθερά που αντιστοιχεί στην ελάχιστη ενέργεια. Η ύπαρξη αυτής της σταθεράς αντανακλά το γεγονός ότι δεν υπάρχει απόλυτη κλίμακα ενεργειών στη μη-σχετικιστική φυσική. Επίσης παρατηρούμε ότι για φυσικές αναπαραστάσεις $m > 0$, αλλιώς η Χαμιλτονιανή δεν είναι φραγμένη από κάτω.

Ο δεύτερος τελεστής Κάζιμρ είναι

$$\hat{K}_2 = \hat{\mathbf{W}}^2, \quad (14.40)$$

όπου

$$\hat{\mathbf{W}} = -m\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{C}} \times \hat{\mathbf{P}} \quad (14.41)$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι $[\hat{W}_i, \hat{W}_j] = \frac{i}{m} \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{W}_k$, οπότε οι τελεστές $m\hat{W}_i$ ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής. Άρα σε μία μη-αναγωγίμη αναπαράσταση, ο τελεστής $\hat{\mathbf{W}}^2$ παίρνει σταθερή τιμή $m^2 s(s+1)$, όπου το s μπορεί να πάρει τιμές $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Επιπλέον, το θεώρημα Στόουν-φον Νόιμαν εξασφαλίζει ότι η υποομάδα που ορίζεται από τους τελεστές \hat{C}_i, \hat{P}_i και \hat{I} έχει μία και μοναδική αναπαράσταση για δεδομένη τιμή του m . Καταλήγουμε, ότι η γενικότερη μη-αναγωγίμη αναπαράσταση της άλγεβρας Μπάργκμαν για $m > 0$, χαρακτηρίζεται από τρεις σταθερές (m, E_0, s) και ότι περιγράφει σωματίο με σπιν στον χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_s , εφόσον ταυτίσουμε τον τελεστή $\hat{\mathbf{C}}$ με τον τελεστή $m\hat{\mathbf{X}}$.

Η έννοια του σπιν ως ενδογενής περιγραφή ενός σωματιδίου προκύπτει ως συνέπεια της απαίτησης ότι ένα φυσικό σύστημα πρέπει να φέρει μία αναπαράσταση της ομάδας Gal των χωροχρονικών συμμετριών της μη-σχετικιστικής φυσικής.

Η σταθερότητα του σπιν s είναι συνέπεια της ταύτισης της έννοιας του σωματιδίου (το απλούστερο φυσικό σύστημα) με μη-αναγωγίμες αναπαραστάσεις της ομάδας Gal (το απλούστερο σύστημα που επιδεικνύει τη συμμετρία).

14.4.3 Αντιστροφή χώρου και χρόνου

Επιστρέφοντας στο φορμαλισμό του Κεφ. 14.3.1, παρατηρούμε ότι η αντιστροφή του χρόνου $(t, x_i) \rightarrow (-t, x_i)$ αντιστοιχεί στον πίνακα 5×5 ,

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (14.42)$$

Η δράση του \mathcal{T} στους γεννήτορες (14.32) υπολογίζεται άμεσα

$$\mathcal{T}J_i\mathcal{T}^{-1} = J_i, \quad \mathcal{T}C_i\mathcal{T}^{-1} = -C_i, \quad \mathcal{T}P_i\mathcal{T}^{-1} = P_i, \quad \mathcal{T}H\mathcal{T}^{-1} = H. \quad (14.43)$$

Η αντιστροφή του χώρου $(t, x_i) \rightarrow (t, -x_i)$ αντιστοιχεί στον πίνακα 5×5 ,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (14.44)$$

Η δράση του \mathcal{P} στους γεννήτορες (14.32) υπολογίζεται άμεσα

$$\mathcal{P}J_i\mathcal{P}^{-1} = J_i, \quad \mathcal{P}C_i\mathcal{P}^{-1} = -C_i, \quad \mathcal{P}P_i\mathcal{P}^{-1} = -P_i, \quad \mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H. \quad (14.45)$$

Για να περιγράψουμε κβαντικά τους μετασχηματισμούς \mathcal{T} και \mathcal{P} , πρέπει τους αναπαραστήσουμε με μοναδιαίους ή αντιμοναδιαίους τελεστές στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_s —όπου ορίζεται μία προβολική μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας Γαλιλαίου—έτσι ώστε να μεταφέρονται οι σχέσεις (14.43) και (14.45).

Εξετάζουμε πρώτα την περίπτωση της αντιστροφής του χρόνου. Έστω ότι αναπαρίσταται με κάποιον μοναδιαίο τελεστή $\hat{\mathbb{T}}$. Η Εξ. (14.43) σημαίνει ότι για το γεννήτορα \hat{H} ,

$$\hat{\mathbb{T}} \frac{1}{i} \hat{H} \hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\frac{1}{i} \hat{H}, \quad (14.46)$$

δηλαδή $\hat{\mathbb{T}} \hat{H} \hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{H}$.

Αλλά αυτός ο μετασχηματισμός μεταφέρει κάθε θετική ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής στην ακριβώς αντίθετή της. Άρα δεν μπορεί να οριστεί σε Χαμιλτονιανή που έχει κάτω φράγμα και όχι άνω φράγμα, όπως η Χαμιλτονιανή του ελεύθερου σωματίου. Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούμε να αναπαραστήσουμε την αντιστροφή του χρόνου με μοναδιαίο τελεστή. Αντιθέτως αν ο τελεστής $\hat{\mathbb{T}}$ είναι αντιμοναδιαίος, η Εξ. (14.46) δίνει

$$\hat{\mathbb{T}} \hat{H} \hat{\mathbb{T}}^\dagger = \hat{H} \quad (14.47)$$

οπότε δεν υπάρχει κανένα πρόβλημα με το φάσμα της Χαμιλτονιανής.

Δεχόμενοι ότι ο τελεστής $\hat{\mathbb{T}}$ είναι αντιμοναδιαίος, οι Εξ. (14.43) δίνουν

$$\hat{\mathbb{T}} \hat{J}_i \hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{J}_i \quad (14.48)$$

$$\hat{\mathbb{T}} \hat{C}_i \hat{\mathbb{T}}^\dagger = \hat{C}_i \quad (14.49)$$

$$\hat{\mathbb{T}} \hat{P}_i \hat{\mathbb{T}}^\dagger = -\hat{P}_i. \quad (14.50)$$

Με αντίστοιχα επιχειρήματα δείχνουμε ότι η αντιστροφή στο χρόνο αντιστοιχεί σε μοναδιαίο (και όχι αντιμοναδιαίο) τελεστή στο \mathcal{H}_s , οπότε οι Εξ. (14.45) δίνουν

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{J}_i\hat{\mathbb{P}}^\dagger = \hat{J}_i \quad (14.51)$$

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{C}_i\hat{\mathbb{P}}^\dagger = -\hat{C}_i \quad (14.52)$$

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{P}_i\hat{\mathbb{P}}^\dagger = -\hat{P}_i \quad (14.53)$$

$$\hat{\mathbb{P}}\hat{H}\hat{\mathbb{P}}^\dagger = \hat{H}. \quad (14.54)$$

Τέλος, λαμβάνοντας υπόψη την ανάλυση του Κεφ. 11.3.6, γράφουμε τη δράση των τελεστών $\hat{\mathbb{T}}$ και $\hat{\mathbb{P}}$ στην αναπαράσταση Σρέντινγκερ

$$\hat{\mathbb{T}}\psi_{m_s}(\mathbf{r}) = (-1)^{s-m_s}\psi_{s-m_s}^*(\mathbf{r}), \quad (14.55)$$

$$\hat{\mathbb{P}}\psi_{m_s}(\mathbf{r}) = \varpi\psi_{m_s}(-\mathbf{r}), \quad (14.56)$$

όπου η ποσότητα ϖ παίρνει τιμές ± 1 και προέρχεται από τη δράση του $\hat{\mathbb{P}}$ στα ιδιοδιανύσματα του σπιν. Είναι το αντίστοιχο του a_j της Εξ. (11.55). Η τιμή του ϖ είναι μία ενδογενής ιδιότητα του κάθε τύπου σωματιδίου, η οποία καλείται *ενδογενής πάριτυ*.

Η ισοδύναμη δράση των $\hat{\mathbb{T}}$ και $\hat{\mathbb{P}}$ στα κετ της βάσης της ορμής $|\mathbf{p}, m_s\rangle$ είναι

$$\hat{\mathbb{T}}|\mathbf{p}, m_s\rangle = (-1)^{s-m_s}|-\mathbf{p}, s - m_s\rangle, \quad (14.57)$$

$$\hat{\mathbb{P}}|\mathbf{p}, m_s\rangle = \varpi|-\mathbf{p}, m_s\rangle. \quad (14.58)$$

Ερωτήσεις

1. Σε πόσες υποδέσμες διασπάται μία δέσμη σωματιδίων σε ένα πείραμα τύπου Στερν-Γκέρλαχ αν το σπιν τους είναι ίσο με s ;
2. Πώς αλλάζει το σπιν ενός σύνθετου σωματιδίου αν διεγείρουμε τους εσωτερικούς του βαθμούς ελευθερίας;
3. Μπορεί να υπάρξει επαλληλία καταστάσεων ενός σωματιδίου με διαφορετική τιμή του s ;
4. Μπορεί ένα ουδέτερο σωματίο να έχει γυρομαγνητικό λόγο διάφορο από το μηδέν;
5. Μπορεί ένα σωματίο με μηδενικό σπιν να έχει γυρομαγνητικό λόγο διάφορο από το μηδέν;
6. Πόσο πρέπει να είναι το μέτρο του μαγνητικού πεδίου, έτσι ώστε ο όρος διπολικής αλληλεπίδρασης για ένα ηλεκτρόνιο να είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με τις ενεργειακές ιδιοτιμές στο άτομο του υδρογόνου; Συγκρίνετε με τα $100T$ που είναι η τάξη μεγέθους των ισχυρότερων μαγνητικών πεδίων που κατασκευάζονται στο εργαστήριο.
7. Πώς θα περιγράφατε ένα σύνθετο σωματίο ως μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας Γαλιλαίου;
8. Η μετάβαση από μία ιδιοκατάσταση της ενέργειας του ατόμου του υδρογόνου με παράλληλη εκπομπή φωτονίου είναι εφικτή μόνο αν οι ιδιοκαταστάσεις διαφέρουν κατά $\Delta\ell = \pm 1$. Πόση είναι η ενδογενής πάριτυ ενός φωτονίου;

Ασκήσεις

1. Θεωρείστε ένα σωματίο με σπιν s που εξελίσσεται στην εικόνα του Χάιζενμπεργκ σύμφωνα με την Εξ. (14.17). (α) Για $s = \frac{1}{2}$, μεταβείτε στην εικόνα του Σρέντινγκερ και βρείτε τη μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}(t)$ για γενική αρχική μήτρα πυκνότητας $\hat{\rho}_0$. (β) Για $s = 1$ το σπιν βρίσκεται αρχικά στην ιδιοκατάσταση της \hat{s}_1 με θετική ιδιοτιμή. Έστω ότι τη χρονική στιγμή t γίνεται μέτρηση της \hat{s}_1 . Ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα και ποιες οι αντίστοιχες πιθανότητες;

2. Βρείτε τις λύσεις της Εξ. (14.17) για ένα μαγνητικό παλμό $\mathbf{B} = (0, 0, \beta\delta(t - t_0))$. Δείξτε ότι επιλέγοντας κατάλληλες τιμές του β μπορούμε να περιστρέψουμε το διάνυσμα του σπιν κατά οποιαδήποτε γωνία ως προς τον άξονα 3.
3. Έστω δύο ίδια σωματίδια με σπιν $s = \frac{1}{2}$ και γυρομαγνητικό λόγο γ ακινητοποιημένα σε απόσταση a . Θεωρείστε ότι η μαγνητική τους ροπή προέρχεται αποκλειστικά από το σπιν. Γράψτε την κβαντική Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στην κλασική έκφραση διπολικής αλληλεπίδρασης (14.25). Υπολογίστε τα διανύσματα και τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής.
4. Σύστημα δύο ουδέτερων σωματιδίων με σπιν $s = \frac{1}{2}$ και ίσους γυρομαγνητικούς λόγους γ βρίσκεται εντός σταθερού μαγνητικού πεδίου \mathbf{B} . Η συνολική Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι $\hat{H} = -\gamma\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_1 - \gamma\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + a\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$, όπου a είναι σταθερά. Υπολογίστε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα τις ενέργειας. Υπολογίστε την πιθανότητα μία μέτρηση του συνολικού σπιν πάνω στη θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος να δώσει τιμή που αντιστοιχεί σε $s = 1$.
5. Σύστημα πρωτονίου-νετρονίου αλληλεπιδρά μέσω δυναμικού που εξαρτάται από το σπιν $\hat{V} = V_0(\hat{r}) + \lambda V_0(\hat{r})\hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_n$, όπου λ σταθερά, \hat{r} η σχετική θέση των δύο σωματιδίων και $V_0(r)$ κεντρικό δυναμικό. Θεωρείστε ότι τα δύο σωματίδια έχουν ίσες μάζες m . Γράψτε τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής συναρτήσεως των ιδιοτιμών $E_{n,\ell}$ του τελεστή Σρέντινγκερ για δυναμικό $V_0(r)$.
6. Θεωρείστε σωματίο με σπιν $\frac{1}{2}$ και γυρομαγνητικό λόγο $\gamma > 0$ σε χρονοεξαρτώμενο μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0)$, όπου B_0 και B_1 σταθερές. (α) Δείξτε ότι οι ιδιοτιμές της χρονοεξαρτημένης Χαμιλτονιανής για το σωματίο είναι $-\gamma(B_0 \pm B_1)$ και υπολογίστε τα στιγμιαία ιδιοδιανύσματα $|\pm, t\rangle$. (β) Γράψτε την κατάσταση ως γραμμικό συνδυασμό $c_+(t)|+, t\rangle + c_-(t)|-, t\rangle$ και δείξτε ότι τα c_{\pm} ικανοποιούν μια ένα σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με σταθερούς συντελεστές. Βρείτε τη γενική λύση και επιβεβαιώστε την εμφάνιση μίας συχνότητας $\Omega = \sqrt{(\gamma B_0 - \frac{1}{2}\omega)^2 + \gamma^2 B_1^2}$. (γ) Θεωρείστε αρχική κατάσταση $|+\rangle$ για $t = 0$ και δείξτε ότι η πιθανότητα να μετρηθεί το \hat{s}_3 με τιμή $-\frac{1}{2}$ τη χρονική στιγμή είναι

$$\text{Prob}(-, t) = \left(\frac{gB_1}{\Omega} \right)^2 \sin^2 \Omega t,$$

(δ) Υπολογίστε τη μέση πιθανότητα $\text{Prob}(-, t)$ ως προς το χρόνο και επιβεβαιώστε ότι μεγιστοποιείται $\omega = \frac{1}{2}\gamma B_0$.

Αυτό το φαινόμενο καλείται *συντονισμός σπιν*. Μεταβάλλοντας τη συχνότητα ω έως ότου να πετύχουμε συντονισμό μπορούμε να μετρήσουμε το γυρομαγνητικό λόγο g ενός σωματιδίου. Συγκρίνετε την ανάλυση με αυτή των ταλαντώσεων Ράμπι στο Κεφ. 8.4.4.

7. Αποδείξτε ότι οι τελεστές (14.39) και (14.40) είναι Κάζιμιρ.

Βιβλιογραφία

- Για την ιστορία της ανακάλυψης του σπιν βλ. τη σχετική ομιλία του Goudsmit [241], το άρθρο του Giulini [242] και το βιβλίο του Tomonaga [243].

Κεφάλαιο 15

Συστήματα πολλών σωματιδίων

Ένα ηλεκτρόνιο δεν μπορεί ποτέ να έχει άλλοθι.

Χ. Βάουλ [244]

15.1 Ταυτοτικά σωματρία

15.1.1 Η συμμετρία εναλλαγής

Στο Κεφ. 10 είδαμε ότι ένα σύνθετο κβαντικό σύστημα περιγράφεται από το τανυστικό γινόμενο των χώρων Χίλμπερτ των συστατικών του. Εδώ θα εξετάσουμε μία επιπλοκή σ' αυτόν τον κανόνα, σε σύνθετα συστήματα που χαρακτηρίζονται από μία σημαντική συμμετρία, τη συμμετρία *εναλλαγής ταυτόσημων σωματιδίων*.

Καταρχάς εξηγούμε την έννοια των ταυτοτικών σωματιδίων. Έστω δύο σωματρία με ταυτόσημα χαρακτηριστικά, μάζα m και σπιν s . Πώς μπορούμε να τα ξεχωρίσουμε; Στην κλασική μηχανική, όπως και σε οποιαδήποτε αιτιοκρατική θεωρία, τα σωματρία διαχωρίζονται από την ιστορία τους. Αν ξεχωρίσουμε ένα σωματριο σε μία συγκεκριμένη χρονική στιγμή, μπορούμε να παρακολουθήσουμε τη χρονική του εξέλιξη και να το εντοπίσουμε πάλι σε μία επόμενη χρονική στιγμή. Σε αιτιοκρατικές θεωρίες η ταυτοποίηση ενός σωματιού δε χάνεται ποτέ, γιατί μπορούμε να ακολουθήσουμε την κίνηση του με όση ακρίβεια θέλουμε.

Η κβαντική μηχανική δεν είναι αιτιοκρατική. Ακόμα κι αν έχουμε ξεχωρίσει αρχικά δύο σωματρία, αν τα αφήσουμε κινηθούν ελεύθερα και έρθουν κοντά το ένα στο άλλο, είναι αδύνατο να ξεχωρίσουμε ποιο είναι ποιο. Κάθε «σημάδι» που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για τη διάκριση ενός σωματιδίου, σε σχέση με μία προηγούμενη μέτρηση, είναι καταδικασμένο να χαθεί πλήρως. Καταλήγουμε ότι δύο σωματρία με τα ίδια βασικά χαρακτηριστικά δεν μπορούν να διαχωριστούν, οπότε τα λέμε *ταυτοτικά*.

Το ότι δεν μπορούμε να ξεχωρίσουμε δυο σωματρία σημαίνει ότι υπάρχει μία συμμετρία στο σύστημα: οι φυσικές προβλέψεις της θεωρίας παραμένουν οι ίδιες αν μεταθέσουμε αυτά τα σωματρία. Έστω ότι ένα σωματριο περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Το σύστημα δύο σωματιδίων περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}^2 = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. Αν τα διανύσματα $|a\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στο \mathcal{H} , τα διανύσματα $|a, b\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στο \mathcal{H}^2 . Ορίζουμε το μοναδιαίο τελεστή \hat{V} μετάθεσης των δύο σωματιδίων, ως

$$\hat{V}|a, b\rangle = |b, a\rangle. \quad (15.1)$$

Δεδομένου ότι $\hat{V}^2|a, b\rangle = \hat{V}|b, a\rangle = |a, b\rangle$, ισχύει ότι $\hat{V}^2 = \hat{I}$, οπότε οι ιδιοτιμές του \hat{V} είναι $+1$ και -1 , οπότε ο \hat{V} εκτός από μοναδιαίος είναι και αυτοσυζυγής.

Ορίζουμε τα συμμετρικά και αντισυμμετρικά διανύσματα βάσης

$$|a, b\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a, b\rangle + |b, a\rangle) \quad |a, b\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a, b\rangle - |b, a\rangle). \quad (15.2)$$

Αμέσως βρίσκουμε ότι

$$\hat{V}|a, b\rangle_S = |a, b\rangle_S \quad \hat{V}|a, b\rangle_A = -|a, b\rangle_A. \quad (15.3)$$

Συμπεραίνουμε ότι τα συμμετρικά διανύσματα $|a, b\rangle_S$ ορίζουν τον *συμμετρικό υπόχωρο* \mathcal{H}_S^2 , που είναι ο ιδιόχωρος του \hat{V} για την ιδιοτιμή $+1$. Τα αντισυμμετρικά διανύσματα $|a, b\rangle_A$ ορίζουν τον *αντισυμμετρικό υπόχωρο* \mathcal{H}_A^2 , που είναι ο ιδιόχωρος του \hat{V} για την ιδιοτιμή -1 . Θα γράψουμε τους προβολικούς τελεστές αυτών των δύο υπόχωρων ως \hat{P}_S και \hat{P}_A αντίστοιχα.

Το φασματικό θεώρημα σημαίνει ότι $\mathcal{H}^2 = \mathcal{H}_S^2 \oplus \mathcal{H}_A^2$ ή ισοδύναμα $\hat{P}_S + \hat{P}_A = \hat{I}$. Άρα,

$$\hat{V} = \hat{P}_S - \hat{P}_A \quad (15.4)$$

Αν είναι αδύνατος ο διαχωρισμός των δύο σωματιδίων, τότε οι καταστάσεις $|\psi\rangle$ και $\hat{V}|\psi\rangle$ στο \mathcal{H}^2 θα πρέπει να οδηγούν στις ίδιες πιθανότητες για κάθε μέτρηση. Άρα οι φυσικές ποσότητες αντιστοιχούν σε αυτοσυζυγείς τελεστές \hat{A} στο \mathcal{H}^2 που ικανοποιούν τη σχέση $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{V}^\dagger\hat{A}\hat{V}|\psi\rangle$ για κάθε $|\psi\rangle$. Αυτό σημαίνει ότι $\hat{V}^\dagger\hat{A}\hat{V} = \hat{A}$, ή

$$[\hat{A}, \hat{V}] = 0. \quad (15.5)$$

Η συνθήκη (15.5) πρέπει να ισχύει ειδικά και για τη Χαμιλτονιανή \hat{H} του συστήματος των δύο σωματιδίων, δηλαδή $[\hat{H}, \hat{V}] = 0$.

Για οποιονδήποτε τελεστή \hat{A} στο \mathcal{H}^2 ισχύει ότι $\hat{A} = (\hat{P}_S + \hat{P}_A)\hat{A}(\hat{P}_S + \hat{P}_A) = \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S + \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_A + \hat{P}_A\hat{A}\hat{P}_S + \hat{P}_A\hat{A}\hat{P}_A$. Παρατηρούμε ότι $\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S\hat{V} = \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S(\hat{P}_S - \hat{P}_A) = \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S = \hat{V}\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S$, οπότε $[\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S, \hat{V}] = 0$. Ομοίως βρίσκουμε ότι $[\hat{P}_A\hat{A}\hat{P}_A, \hat{V}] = 0$ και ότι $[\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_A, \hat{V}] = -2\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_A$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (15.5) παίρνουμε $\hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_A + \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_A = 0$, δηλαδή

$$\hat{A} = \hat{P}_S\hat{A}\hat{P}_S + \hat{P}_A\hat{A}\hat{P}_A. \quad (15.6)$$

Έστω $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_S^2$, $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_A^2$ και $|\psi\rangle = |\phi\rangle + |\chi\rangle$, διάνυσμα επαλληλίας των δύο υπόχωρων. Η αναμενόμενη τιμή του \hat{A} είναι $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle + \langle\chi|\hat{A}|\chi\rangle$, δηλαδή μηδενίζονται όλοι οι όροι που αναμιγνύουν συνεισφορές από τους δύο υπόχωρους.

Καταλήγουμε ότι συνέπεια της συμμετρίας εναλλαγής είναι ότι οι *επαλληλίες μεταξύ του συμμετρικού και του αντισυμμετρικού υπόχωρου του \mathcal{H}^2 δεν είναι παρατηρήσιμες*. Η συμμετρία εναλλαγής οδηγεί σε έναν κανόνα *υπερεπιλογής* για τα συστήματα ταυτοτικών σωματιδίων.

15.1.2 Το αξίωμα της συμμετροποίησης και το θεώρημα σπιν-στατιστικής

Η ύπαρξη ενός κανόνα υπερεπιλογής για τα ταυτοτικά σωματάρια αποδείχθηκε πολύ ασθενής συνθήκη για να περιγράψει σωστά τα φυσικά συστήματα. Χρειάζεται μια πολύ ισχυρότερη απαίτηση, που καλείται *συνθήκη συμμετροποίησης*. Σύμφωνα με αυτή τη συνθήκη, ένα ζεύγος δύο σωματιδίων περιγράφεται *αποκλειστικά* από διανύσματα είτε μόνο του \mathcal{H}_S^2 είτε μόνο του \mathcal{H}_A^2 . Η συνθήκη συμμετροποίησης δεν μπορεί να δικαιολογηθεί από τους βασικούς κανόνες της κβαντικής θεωρίας και πρέπει να εισαχθεί ως ένα επιπλέον αξίωμα [246].

Αξίωμα συμμετροποίησης (για δύο σωματίδια). Ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει ένα σύστημα δύο ταυτόσημων σωματιδίων είναι είτε ο συμμετρικός υπόχωρος \mathcal{H}_S^2 είτε ο αντισυμμετρικός υπόχωρος \mathcal{H}_A^2 . Η επιλογή του υπόχωρου είναι ίδια για όλα τα σωματίδια του ίδιου τύπου.

Τα σωματίδια που περιγράφονται με τον αντισυμμετρικό υπόχωρο καλούνται *φερμιόνια* (από τον Ε. Φέρμι) και αυτά που περιγράφονται με τον συμμετρικό υπόχωρο καλούνται *μποζόνια* (από τον Σ. Μποζε). Δηλαδή το σύστημα δύο φερμιονίων περιγράφεται από καταστατικά διανύσματα $|\psi\rangle$ για τα οποία ισχύει $\hat{V}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ και το σύστημα δύο μποζονίων περιγράφεται από καταστατικά διανύσματα $|\psi\rangle$ για τα οποία ισχύει $\hat{V}|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Το ποια σωματίδια είναι μποζόνια και ποια φερμιόνια προσδιορίζεται από το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα σπιν-στατιστικής. Σωματίδια με ακέραιο σπιν s είναι μποζόνια και σωματίδια με ημι-ακέραιο σπιν είναι φερμιόνια.

Η αναγκαιότητα του θεωρήματος σπιν-στατιστικής ήταν σαφής ήδη από τη δεκαετία του 1920 προκειμένου να εξηγηθεί η ύπαρξη ευσταθών ατόμων, ωστόσο η πρώτη απόδειξή του έγινε το 1942 από τον Πάουλι [245]. Η απόδειξη του Πάουλι χρησιμοποιούσε την βασική αρχή της σχετικότητας, ότι δεν υπάρχει σήμα με ταχύτητα μεγαλύτερη από αυτή του φωτός, καθώς και βασικές αρχές της κβαντικής θεωρίας πεδίου.

Αν κανείς περιοριστεί στη μη-σχετικιστική φυσική, το θεώρημα σπιν-στατιστικής δεν μπορεί να αποδειχθεί. Έχουν υπάρξει αποδείξεις του που ισχύουν και για μη σχετικιστικά συστήματα [247], αλλά αυτές χρησιμοποιούν αρχές ή υποθέσεις πέρα από τις βασικές αρχές της κβαντικής θεωρίας. Οι επιπλέον αυτές υποθέσεις σχετίζονται με την ιδιότητα που έχουμε δει, ότι, μία περιστροφή κατά 2π σε σωματίο με σπιν s αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό του καταστατικού διανύσματος με $(-1)^{2s}$. Οπότε το θεώρημα σπιν-στατιστικής είναι ισοδύναμο με την πρόταση ότι μία εναλλαγή μεταξύ των δύο σωματιδίων είναι ισοδύναμη με την περιστροφή ενός εκ των δύο κατά 2π .

Στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_s που περιγράφει σωματίδια με σπιν s τα κερ $|\mathbf{r}, m\rangle$ ορίζουν μία γενικευμένη βάση, όπου \mathbf{r} η θέση και m η ιδιοτιμή της τρίτης συνιστώσας του σπιν (αυτή που συμβολίζουμε συνήθως m_s). Στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_s^2 δύο σωματιδίων με σπιν s ορίζεται μία γενικευμένη βάση από τα κερ $|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, m_1, m_2\rangle = |\mathbf{r}_1, m_1\rangle \otimes |\mathbf{r}_2, m_2\rangle$. Οπότε για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_s^2$ γράφουμε τις "κυματοσυναρτήσεις"

$$\psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, m_1, m_2 | \psi \rangle, \quad (15.7)$$

όπου γράψαμε συμβατικά τις συνεχείς μεταβλητές ως όρισμα συνάρτησης και τις διακριτές μεταβλητές ως δείκτη διανύσματος. Προφανώς, για μποζόνια ισχύει ότι $\psi_{m_2 m_1}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ και για φερμιόνια $\psi_{m_2 m_1}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Τονίζουμε ότι η εναλλαγή αφορά και τους δύο δείκτες ταυτόχρονα, όχι τον καθένα ξεχωριστά. Για παράδειγμα, ένα φερμιόνιο μπορεί να έχει κυματοσυνάρτηση που είναι συμμετρική ως προς εναλλαγή των \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 , αρκεί να είναι αντισυμμετρική ως προς εναλλαγή των m_1 και m_2 .

Για την περίπτωση όπου $s = \frac{1}{2}$, χρησιμοποιούμε τα αποτελέσματα του Κεφ. 11.5.3. Για ολικό σπιν $s = 1$ του σύνθετου συστήματος, η κατάσταση του σπιν είναι συμμετρική ως προς τη μετάθεση των δύο βαθμών ελευθερίας, ενώ για ολικό σπιν $s = 0$ είναι αντισυμμετρική. Καταλήγουμε ότι αν το σύνθετο σύστημα έχει ολικό σπιν $s = 0$, η κυματοσυνάρτηση είναι συμμετρική ως προς τις χωρικές μεταβλητές: $\psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Αν το σύνθετο σύστημα έχει ολικό σπιν $s = 1$, η κυματοσυνάρτηση είναι αντισυμμετρική ως προς τις χωρικές μεταβλητές $\psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_{m_1 m_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$.

15.1.3 Συστήματα N σωματιδίων

Στη συνέχεια, γενικεύουμε την προηγούμενη συζήτηση σε σύστημα N σωματιδίων. Αν \mathcal{H} ο χώρος Χίλμπερτ του ενός σωματιδίου, ορίζουμε

$$\mathcal{H}^N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ φορές}}. \quad (15.8)$$

Έστω ότι τα διανύσματα $|a\rangle$ ορίζουν μία ορθοκανονική βάση στο \mathcal{H} . Τα διανύσματα

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle := |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle \otimes \dots \otimes |a_N\rangle$$

ορίζουν μία βάση στο \mathcal{H} . Συμβολίζουμε ως $P(a_1, a_2, \dots, a_N)$ μία μετάθεση των a_1, a_2, \dots, a_N και ως $\text{sgn}(P)$ το πρόσημο της μετάθεσης: $\text{sgn}(P) = 1$ αν η μετάθεση είναι άρτια και $\text{sgn}(P) = -1$ αν είναι περιττή. Ορίζουμε τα συμμετροποιημένα και αντισυμμετροποιημένα διανύσματα βάσης

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |P(a_1, a_2, \dots, a_N)\rangle \quad (15.8)$$

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sgn}(P) |P(a_1, a_2, \dots, a_N)\rangle, \quad (15.9)$$

όπου το άθροισμα εκτείνεται ως προς όλες (συνολικά $N!$) τις δυνατές μεταθέσεις των a_1, a_2, \dots, a_N . Από τον ορισμό, οποιαδήποτε εναλλαγή a_i με a_j δίνει ένα πρόσημο $+1$ στο $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_S$ και ένα πρόσημο -1 στο $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A$. Παρατηρούμε ότι το $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A$ μηδενίζεται αν δύο οποιαδήποτε a_i και a_j είναι ίσα μεταξύ τους, αφού σ' αυτήν την περίπτωση η εναλλαγή τους δίνει $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A = -|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A$.

Για παράδειγμα, τα συμμετροποιημένα και αντισυμμετροποιημένα διανύσματα βάσης για $N = 3$ είναι

$$|a_1, a_2, a_3\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{6}} [|a_1, a_2, a_3\rangle + |a_3, a_1, a_2\rangle + |a_2, a_3, a_1\rangle + |a_1, a_3, a_2\rangle + |a_2, a_1, a_3\rangle + |a_3, a_2, a_1\rangle]$$

$$|a_1, a_2, a_3\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{6}} [|a_1, a_2, a_3\rangle + |a_3, a_1, a_2\rangle + |a_2, a_3, a_1\rangle - |a_1, a_3, a_2\rangle - |a_2, a_1, a_3\rangle - |a_3, a_2, a_1\rangle]$$

Ο υπόχωρος του \mathcal{H}^N που σαρώνεται από τα διανύσματα $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_S$ καλείται *πλήρως συμμετρικός υπόχωρος* και συμβολίζεται ως \mathcal{H}_S^N . Ο υπόχωρος του \mathcal{H}^N που σαρώνεται από τα διανύσματα $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A$ καλείται *πλήρως αντισυμμετρικός υπόχωρος* και συμβολίζεται ως \mathcal{H}_A^N .

Για κάθε τελεστή \hat{A} στον \mathcal{H} ορίζουμε τον τελεστή $\hat{A}^{(N)}$ στο \mathcal{H}^N ως

$$\hat{A}^{(N)} = \hat{A} \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{A} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + \dots + \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{A} \quad (15.8)$$

Από κατασκευή ο $\hat{A}^{(N)}$ παραμένει αναλλοίωτος κάτω από οποιαδήποτε μετάθεση των σωματιδίων και άρα είναι καλώς ορισμένος τόσο στο συμμετρικό υπόχωρο \mathcal{H}_S^N όσο και στον αντισυμμετρικό υπόχωρο \mathcal{H}_A^N .

Ορίζουσα Σλίτερ. Έστω δύο διαφορετικές βάσεις $|a\rangle$ και $|n\rangle$ στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Ορίζουν δύο διαφορετικές βάσεις $|a_1, \dots, a_N\rangle$ και $|n_1, \dots, n_N\rangle$ στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}^N . Επίσης, σύμφωνα με τις εξισώσεις (15.8—15.9) ορίζουν διαφορετικές βάσεις στο συμμετρικό και αντισυμμετρικό υπόχωρο του \mathcal{H}^N .

Έστω $|a_1, \dots, a_N\rangle_A$ η βάση που ορίζεται από την προβολή των διανυσμάτων βάσης $|a_1, \dots, a_N\rangle$ στον αντισυμμετρικό υπόχωρο \mathcal{H}_A^N . Υπολογίζουμε το εσωτερικό γινόμενο

$$\langle n_1, \dots, n_N | a_1, \dots, a_N \rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \langle n_1 | a_1 \rangle & \langle n_1 | a_2 \rangle & \dots & \langle n_1 | a_N \rangle \\ \langle n_2 | a_1 \rangle & \langle n_2 | a_2 \rangle & \dots & \langle n_2 | a_N \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle n_N | a_1 \rangle & \langle n_N | a_2 \rangle & \dots & \langle n_N | a_N \rangle \end{vmatrix} \quad (15.9)$$

Η ορίζουσα στην Εξ. (15.9) προέρχεται από τα -1 που οφείλονται στις περιττές μεταθέσεις στην Εξ. (15.9). Καλείται ορίζουσα του Σλέιτερ (Slater). Η απόδειξη της Εξ. (15.9) προκύπτει άμεσα από τον ορισμό για $N = 2$ και γενικεύεται επαγωγικά για οποιοδήποτε N . Σημειώνεται ότι οι παραπάνω σχέσεις ισχύουν ακόμα και αν οι βάσεις $|a\rangle$ και $|n\rangle$ είναι γενικευμένες.

Διάσταση των υπόχωρων. Όπως έχουμε πει, ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} για ένα σωματίο είναι απειροδιάστατος, ωστόσο κάποιες φορές είναι χρήσιμο να περιοριζόμαστε σε κάποιο υπόχωρό του πεπερασμένης διάστασης. Σ' αυτές τις περιπτώσεις μπορούμε να θεωρήσουμε ότι $\mathcal{H} = \mathcal{C}^d$, για κάποιον ακέραιο d . Οπότε τα a_i στην Εξ. (15.8) παίρνουν τιμές $1, 2, \dots, d$. Εξ ορισμού, $\dim \mathcal{H}^N = d^N$.

Η διάσταση του \mathcal{H}_S^N είναι ίση με τον αριθμό των γραμμικώς ανεξάρτητων διανυσμάτων $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_S$. Αυτός ισούται με τον αριθμό των δυνατών τρόπων που μπορούμε να κατανεύσουμε N μη διαχωρίσιμα αντικείμενα σε d θέσεις, οπότε

$$\dim \mathcal{H}_S^N = \frac{(N + d - 1)!}{N!(d - 1)!}. \quad (15.10)$$

Η διάσταση του \mathcal{H}_A^N είναι ίση με τον αριθμό των γραμμικώς ανεξάρτητων διανυσμάτων $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_A$. Αυτός ισούται με τον αριθμό των δυνατών τρόπων που μπορούμε να κατανεύσουμε N μη διαχωρίσιμα αντικείμενα σε d θέσεις έτσι ώστε να μην υπάρχει πάνω από ένα αντικείμενο σε μία θέση. Για $N > d$ δεν υπάρχει κανένας τρόπος να μην βάλουμε δύο αντικείμενα στην ίδια θέση, οπότε τότε $\dim \mathcal{H}_A^N = 0$. Για $N \leq d$,

$$\dim \mathcal{H}_A^N = \frac{d!}{N!(d - N)!}. \quad (15.11)$$

Αυτό σημαίνει ότι αν ο χώρος Χίλμπερτ ενός φερμιονίου είχε πεπερασμένη διάσταση d , τότε θα υπήρχε πεπερασμένος αριθμός N σωματιδίων στο σύμπαν, $N \leq d$.

Με βάση τους παραπάνω ορισμούς, το αξίωμα συμμετροποίησης για N σωματία γράφεται.

Αξίωμα συμμετροποίησης (για N σωματία). Ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει ένα σύστημα N ταυτόσημων σωματιδίων είναι είτε ο πλήρως συμμετρικός υπόχωρος \mathcal{H}_S^N (μποζόνια) είτε ο πλήρως αντισυμμετρικός υπόχωρος \mathcal{H}_A^N (φερμιόνια). Η επιλογή ανάμεσα στο \mathcal{H}_S^N και στο \mathcal{H}_A^N είναι ίδια για όλα τα σωματία του ίδιου τύπου.

Προφανώς, το θεώρημα σπιν-στατιστικής δε μεταβάλλεται όταν έχουμε N σωματία.

Γενική περίπτωση. Η γενικότερη δυνατή περίπτωση είναι να έχουμε ένα σύνθετο σύστημα που αποτελείται από φερμιόνια r διαφορετικών τύπων και από μποζόνια s διαφορετικών τύπων. Θα χρησιμοποιήσουμε το δείκτη $a = 1, 2, \dots, r$ για να αριθμήσουμε τα είδη φερμιονίων (για παράδειγμα, επιλέγουμε $a = 1$ για ηλεκτρόνια, $a = 2$ για πρωτόνια κοκ) και το δείκτη $b = 1, 2, \dots, s$ για να αριθμήσουμε τα διαφορετικά είδη μποζονίων. Θεωρούμε ότι ένα φερμιόνιο τύπου a περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}_a και ένα μποζόνιο τύπου b από το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{K}_b .

Έστω σύστημα που αποτελείται από N_a φερμιόνια τύπου a για κάθε a και M_b μποζόνια τύπου b για κάθε b . Ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει το συνολικό σύστημα είναι

$$(\mathcal{H}_1)_A^{N_1} \otimes (\mathcal{H}_2)_A^{N_2} \otimes (\mathcal{H}_r)_A^{N_r} \otimes (\mathcal{K}_1)_S^{M_1} \otimes (\mathcal{K}_2)_S^{M_2} \otimes \dots \otimes (\mathcal{K}_s)_S^{M_s}. \quad (15.12)$$

Δηλαδή χρησιμοποιούμε τον κανόνα του συνδυασμού συστημάτων μέσω τανυστικού γινομένου και παίρνουμε συμμετρικούς ή αντισυμμετρικούς συνδυασμούς καταστατικών διανυσμάτων *μόνο για τα σωματίδια ίδιου τύπου*, και πάντα σύμφωνα με το θεώρημα σπιν στατιστικής.

15.2 Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων ταυτοτικών σωματιδίων

15.2.1 Η θεμελιώδης κατάσταση

Θα εξετάσουμε συστήματα N μη-αλληλεπιδρώντων ταυτοτικών σωματιδίων. Η έκφραση "μη-αλληλεπιδρώντων" σημαίνει ότι η Χαμιλτονιανή στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H}^N είναι της μορφής

$$\hat{H} = \hat{h} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{h} \otimes \dots \otimes \hat{I} + \dots + \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{h}, \quad (15.13)$$

όπου \hat{h} η Χαμιλτονιανή στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} του ενός σωματιδίου.

Έστω ότι η Χαμιλτονιανή \hat{h} έχει διακριτό φάσμα. Επιλέγουμε μια βάση $|n\rangle$ από ιδιοδιανύσματα της \hat{h} , $\hat{h}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$. Θεωρούμε ότι ο ακέραιος $n = 0, 1, 2, \dots$ διατάσσει τις ιδιοτιμές $\epsilon_0 \leq \epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots$. Θεωρούμε ότι μία εκφυλισμένη ιδιοτιμή με βαθμό εκφυλισμού g εμφανίζεται g διαδοχικές φορές μέσα στη σειρά ϵ_n .

Από τους ορισμούς (15.8, 15.9), τα διανύσματα $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_S$ και $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_A$ είναι ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής (15.13),

$$\hat{H}|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_S = \left(\sum_{i=1}^N \epsilon_{n_i} \right) |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_S \quad (15.14)$$

$$\hat{H}|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_A = \left(\sum_{i=1}^N \epsilon_{n_i} \right) |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_A. \quad (15.15)$$

Βλέπουμε ότι οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής δεν εξαρτώνται από τη σειρά των n_1, n_2, \dots, n_N . Αυτό σημαίνει βεβαίως ότι η Χαμιλτονιανή \hat{H} προβάλλεται χωρίς πρόβλημα στους υπόχωρους $\mathcal{H}_{S,A}^N$.

Μποζόνια. Εξετάζουμε πρώτα την περίπτωση των μποζονίων. Έστω ότι η θεμελιώδης κατάσταση του ενός σωματιδίου ($|0\rangle$) δεν είναι εκφυλισμένη. Τότε η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας των N μποζονίων είναι η $|0, 0, \dots, 0\rangle_S$ με αντίστοιχη ενέργεια $E_0 = N\epsilon_0$.

Αν η θεμελιώδης κατάσταση του ενός σωματιδίου έχει εκφυλισμό g_0 , τότε η θεμελιώδης κατάσταση N μποζονίων έχει εκφυλισμό $\frac{(N+g_0-1)!}{N!(g_0-1)!}$. Αυτός ο εκφυλισμός είναι ίσος με τη διάσταση του \mathcal{H}_S^N , για $\mathcal{H} = \mathcal{C}^{g_0}$, δηλαδή όταν περιορίζουμε το \mathcal{H} στον ιδιόχωρο της ϵ_0 .

Φερμιόνια. Στην περίπτωση φερμιονίων, δεν μπορεί να επαναλαμβάνεται κανένας ακέραιος n_i , λόγω αντισυμμετρίας. Αυτή η πρόταση είναι γνωστή ως *απαγορευτική αρχή του Πάουλι*. Πρωτοδιατυπώθηκε στα πλαίσια ατομικών μοντέλων και αποτέλεσε τη βασική ιδέα πάνω στην οποία χτίστηκε η γενικότερη θεωρία ταυτοτικών σωματιδίων.

Η απαγορευτική αρχή του Πάουλι σημαίνει, ότι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας σε ένα σύστημα N φερμιονίων είναι η $|0, 1, 2, \dots, N-1\rangle_A$, δηλαδή αντιστοιχεί στις μικρότερες τιμές του ακεραίου N . Η αντίστοιχη ενέργεια είναι ίση με

$$E_0 = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n. \quad (15.16)$$

Ορίζουμε την *ενέργεια Φέρμι* ϵ_F ως τη μέγιστη τιμή της ενέργειας ϵ που εμφανίζεται στο άθροισμα (15.16), δηλαδή $\epsilon_F = \epsilon_{N-1}$.

Όταν ο αριθμός N των σωματιδίων είναι μεγάλος, η ενέργεια E_0 είναι πολύ μεγαλύτερη από την απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών ιδιοτιμών $\epsilon_n - \epsilon_{n-1}$ της ενέργειας του ενός σωματιδίου. Σ' αυτήν την περίπτωση μπορούμε να πάρουμε το συνεχές όριο, χρησιμοποιώντας την έννοια της συνάρτησης αριθμού καταστάσεων $\Omega(\epsilon)$ που δίνει τον αριθμό των ιδιοδιανυσμάτων της \hat{h} με ενέργεια μικρότερη της ϵ —βλ. Κεφ. 6.6.3. Η συνάρτηση $\Omega(\epsilon)$ προσδιορίζεται πλήρως από το φάσμα της Χαμιλτονιανής \hat{h} . Η ενέργεια Φέρμι ϵ_F προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης

$$\Omega(\epsilon_F) = N. \tag{15.17}$$

Αφού πάρουμε το συνεχές όριο για τις ενέργειες, ορίζουμε την πυκνότητα καταστάσεων $g(\epsilon) = \frac{d\Omega}{d\epsilon}$ και αντικαθιστούμε το άθροισμα \sum_n ως προς τις ιδιοτιμές της ενέργειας από το ολοκλήρωμα $\int d\epsilon g(\epsilon)$. Έτσι, η Εξ. (15.16) γίνεται

$$E_0 = \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_F} g(\epsilon)\epsilon d\epsilon. \tag{15.18}$$

15.2.2 Παράδειγμα: Αρμονικοί ταλαντωτές

Έστω σύστημα N αρμονικών ταλαντωτών συχνότητας ω . Οι ιδιοτιμές της ενέργειας για έναν αρμονικό ταλαντωτή είναι $\epsilon_n = n\omega$, για $n = 0, 1, 2, \dots$. Για ευκολία, αγνοούμε τους βαθμούς ελευθερίας του σπιν και το θεώρημα σπιν-στατιστικής.

Μποζόνια. Για N μποζονικούς αρμονικούς ταλαντωτές, η θεμελιώδης κατάσταση $|0, 0, \dots, 0\rangle_S$ έχει ενέργεια 0. Οι διεγερμένες ιδιοκαταστάσεις έχουν ενέργεια $K\omega$ για κάποιο ακέραιο $K = \sum_{i=1}^N n_i$ και ο βαθμός εκφυλισμού τους είναι ίσως με τον αριθμό των διαφορετικών N -άδων ακεραίων $n_i, i = 1, 2, \dots, N$ που έχουν άθροισμα K . Οι πρώτες ενεργειακές στάθμες δίνονται στον ακόλουθο πίνακα.

Στάθμη	Ενέργεια	Ιδιοδιανύσματα	Εκφυλισμός
1η	0	$ 0, 0, 0, \dots, 0\rangle_S$	1
2η	ω	$ 1, 0, 0, \dots, 0\rangle_S$	1
3η	2ω	$ 1, 1, 0, \dots, 0\rangle_S$ $ 2, 0, 0, \dots, 0\rangle_S$	2
4η	3ω	$ 1, 1, 1, 0, \dots, 0\rangle_S$ $ 2, 1, 0, \dots, 0\rangle_S$ $ 3, 0, 0, \dots, 0\rangle_S$	3

Φερμιόνια. Για N φερμιονικούς αρμονικούς ταλαντωτές η θεμελιώδης κατάσταση $|0, 1, 2, \dots, N\rangle$ έχει ενέργεια

$$E_0 = \omega (0 + 1 + 2 + \dots + N - 1) = \frac{1}{2}N(N - 1)\omega. \tag{15.19}$$

Οι διεγερμένες στάθμες έχουν ενέργεια $E_0 + k\omega$, όπου $k = 1, 2, 3, \dots$ και ο βαθμός εκφυλισμού τους είναι ίσως με τον αριθμό των διαφορετικών N -άδων ακεραίων $n_i, i = 1, 2, \dots, N$, *διάφορων μεταξύ τους* που έχουν άθροισμα $\frac{1}{2}N(N - 1) + k$. Οι πρώτες ενεργειακές στάθμες δίνονται στον ακόλουθο πίνακα.

Στάθμη	Ενέργεια	Ιδιοδιανύσματα	Εκφυλισμός
1η	E_0	$ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-2, N-1\rangle_S$	1
2η	$E_0 + \omega$	$ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-2, N\rangle_S$	1
3η	$E_0 + 2\omega$	$ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-2, N+1\rangle_S$ $ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-1, N\rangle_S$	2
4η	$E_0 + 3\omega$	$ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-2, N+2\rangle_S$ $ 0, 1, 2, \dots, N-3, N-1, N+1\rangle_S$ $ 0, 1, 2, \dots, N-2, N-1, N\rangle_S$	3

15.2.3 Παράδειγμα: ιδανικό αέριο φερμιονίων

Έστω σύστημα N μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων σπιν s , τα οποία ικανοποιούν περιοδικές συνοριακές συνθήκες σε κύβο ακμής L . Οι ιδιοτιμές της ενέργειας του ενός σωματιδίου ορίζονται από μία τριάδα ακεραίων $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, ως

$$\epsilon_{\mathbf{n}} = \frac{2\pi^2}{mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \frac{2\pi^2}{mL^2}\mathbf{n}^2, \quad (15.20)$$

όπου γράψαμε συνοπτικά $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$. Για κάθε τριάδα ακεραίων υπάρχει εκφυλισμός ίσος με $2s + 1$, αφού οι ενέργειες δεν εξαρτώνται από το σπιν.

Για να βρούμε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης του συστήματος των N φερμιονίων, υπολογίζουμε τη συνάρτηση αριθμού καταστάσεων

$$\Omega(\epsilon) = (2s + 1) \sum_{\mathbf{n}, |\mathbf{n}| < a} 1, \quad (15.21)$$

όπου $a^2 = m\epsilon L^2 / (2\pi^2)$. Για $m\epsilon L^2 / \pi^2 \gg 1$ μπορούμε να αντικαταστήσουμε το άθροισμα από ολοκλήρωμα, εφόσον η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών επιπέδων π^2 / L^2 είναι πολύ μικρότερη της ενέργειας ϵ . Παίρνουμε,

$$\Omega(\epsilon) = (2s + 1) \int_{|\mathbf{n}| < a} d^3n = (2s + 1) \frac{4\pi}{3} a^3 = (2s + 1) \frac{V}{6\pi^2} (2m\epsilon)^{3/2}, \quad (15.22)$$

όπου $V = L^3$ ο όγκος του κουτιού και χρησιμοποίησαμε το γεγονός ότι η εξίσωση $|\mathbf{n}| < a$ περιγράφει το εσωτερικό μιας σφαίρας ακτίνας a . Οπότε η ενέργεια Φέρμι, ως λύση της $\Omega(\epsilon_F) = N$, είναι

$$\epsilon_F = \frac{1}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{(2s + 1)} \frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (15.23)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων είναι

$$g(\epsilon) = (2s + 1) \frac{V}{4\pi^2} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon}. \quad (15.24)$$

Χρησιμοποιούμε την Εξ. (15.18). Η ελάχιστη ενέργεια $\epsilon_0 = \frac{2\pi^2}{mL^2}$ ενός σωματιδίου είναι πολύ μικρότερη της ενέργειας Φέρμι, οπότε μπορούμε να θέσουμε $\epsilon_0 = 0$. Βρίσκουμε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης

$$\begin{aligned} E_0 &= (2s + 1) \frac{V}{4\pi^2} (2m)^{3/2} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon = (2s + 1) \frac{V}{10\pi^2} (2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2} \\ &= \frac{C_F}{m(2s + 1)^{2/3}} \frac{N^{5/3}}{V^{2/3}}, \end{aligned} \quad (15.24)$$

όπου $C_F = \frac{3}{10}(6\pi^2)^{2/3} \simeq 4,56$. Ισοδύναμα η πυκνότητα ενέργειας $\rho = E_0/V$ είναι συνάρτηση της πυκνότητας σωματιδίων $n = N/V$,

$$\rho = \frac{C_F}{m(2s+1)^{2/3}} n^{5/3}. \quad (15.25)$$

15.3 Η ευστάθεια της ύλης

Οι πυρηνικές δυνάμεις έχουν εμβέλεια της τάξης των $10^{-15}m$. Οπότε σε κλίμακες μεγαλύτερης της ατομικής ($> 10^{-11}m$) μπορούμε να θεωρούμε τους πυρήνες ως θετικά φορτισμένα σωματάρια με σπιν και φορτίο ίσο με $+Ze$, όπου Z ο ατομικός αριθμός του πυρήνα, και να αγνοήσουμε την εσωτερική τους δομή. Σ' αυτές τις κλίμακες, η ισχυρότερη αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων είναι η δύναμη Κουλόμπ. Σε πρώτη προσέγγιση το πρόβλημα που έχουμε να μελετήσουμε αφορά την αλληλεπίδραση μεταξύ N ηλεκτρονίων και K πυρήνων. Τα ηλεκτρόνια χαρακτηρίζονται από ένα δείκτη $i = 1, 2, \dots, N$. Οι K πυρήνες μπορεί να είναι διαφορετικοί μεταξύ τους, οπότε τους περιγράφουμε από ένα δείκτη $a = 1, 2, \dots, K$, και γράφουμε τους ατομικούς αριθμούς ως Z_a και τις μάζες τους ως M_a .

Περιοριζόμενοι στις δυνάμεις Κουλόμπ, η Χαμιλτονιανή γι' αυτό το σύστημα είναι της μορφής

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \sum_{a=1}^K \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2M_a} + \alpha V(\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{R}}_a), \quad (15.26)$$

όπου $\hat{\mathbf{r}}_i$ οι θέσεις των ηλεκτρονίων, $\hat{\mathbf{R}}_a$ οι θέσεις των πυρήνων, $\hat{\mathbf{p}}_i$ και $\hat{\mathbf{P}}_a$ οι αντίστοιχες ορμές, m η μάζα του ηλεκτρονίου, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi} \simeq \frac{1}{137}$ η λεγόμενη σταθερά λεπτής υφής και V το δυναμικό

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_a) = - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^K \frac{Z_a}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_a|} + \sum_{1 \leq a < b \leq K} \frac{Z_a Z_b}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (15.27)$$

Το πρώτο άθροισμα στην Εξ. (15.27) περιγράφει την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-πυρήνων, το δεύτερο την αλληλεπίδραση μεταξύ πυρήνων και το τρίτο την αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων. Η Χαμιλτονιανή (15.26) για $K = 1$ περιγράφει άτομα ή ιόντα, για K από 2 ως μερικές χιλιάδες περιγράφει μόρια και για K, N της τάξης του 10^{23} περιγράφει ηλεκτρικά ουδέτερα ($N = \sum_{a=1}^K Z_a$) μακροσκοπική ύλη.

Ο χώρος Χίλμπερτ στον οποίον ορίζεται η Χαμιλτονιανή (15.26) αποτελείται από διανύσματα αντισυμμετρικά ως προς την εναλλαγή των ηλεκτρονίων, ενώ μπορεί να είναι συμμετρικό ή αντισυμμετρικό ως προς την εναλλαγή των πυρήνων, ανάλογα με τα σπιν τους. Συμβολίζουμε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης ως E_0 .

Όπως εξηγήσαμε στο Κεφ. 8.2, η ευστάθεια της ύλης προϋποθέτει την ύπαρξη κατάστασης ελάχιστης ενέργειας, $E_0 > -\infty$. Αυτή η απαίτηση κάποιες φορές καλείται *ευστάθεια πρώτου τύπου*. Υπάρχει όμως και μια πιο αυστηρή συνθήκη, που καλείται *ευστάθεια δεύτερου τύπου*,

$$E_0 > -C(Z)(N + K), \quad (15.28)$$

για κάθε N και K , όπου $C(Z)$ είναι μία θετική σταθερά που εξαρτάται μόνο από το μέγιστο ατομικό αριθμό των πυρήνων, $Z = \max_a Z_a$, και $N + K$ ο συνολικός αριθμός σωματιδίων.

Η ανάγκη της ευστάθειας δεύτερου τύπου είναι η εξής. Για $K = 1$ (άτομο), αν δεν ισχύει η (15.28), για μεγάλες τιμές του N η ενέργεια ανά ηλεκτρόνιο E_0/N θα ελαττώνεται όσο αυξάνει το N . Αυτό σημαίνει ότι αν έχουμε N ηλεκτρόνια είναι ευνοϊκότερο ενεργειακά να τα βάλουμε όλα

σε ένα άτομο, από να τα μοιράσουμε σε πολλά. Δηλαδή, ένα άτομο θα τείνει να παίρνει τεράστιο αριθμό ηλεκτρονίων. Βεβαίως τα ηλεκτρικά ουδέτερα άτομα που γνωρίζουμε δε θα μπορούν να είναι ευσταθή, γιατί πάντα θα είναι ενεργειακά προτιμότερο να απορροφήσουν ένα έξτρα ηλεκτρόνιο.

Αν η ανισότητα (15.28) δεν ισχύει στο επίπεδο της μακροσκοπικής ύλης, τότε η ενέργεια και ο όγκος $2N$ ατόμων θα είναι μικρότερη από δύο φορές την ενέργεια και τον όγκο N ατόμων. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να πάρουμε ενέργεια από ένα μακροσκοπικό σύστημα απλά σχηματίζοντας μεγαλύτερους σωρούς από αυτό. Θα μπορούμε να παίρνουμε μεγάλες ποσότητες ενέργειας ακόμα και ρίχνοντας δύο ποτήρια νερό σε μία καράφα. Προφανώς αυτό δεν το παρατηρούμε και ευτυχώς δηλαδή, γιατί θα σήμαινε ότι η ύλη θα ήταν εξαιρετικά ασταθής. Μακροσκοπικά η ενέργεια και ο όγκος που καταλαμβάνουν $2N$ άτομα θα πρέπει να είναι διπλάσια από την ενέργεια και τον όγκο που καταλαμβάνουν N άτομα. Στη θερμοδυναμική αυτή η ιδιότητα καλείται *εκτατικότητα*. Η ανισότητα (15.28) εξασφαλίζει την εκτατικότητα στη μακροσκοπική ύλη, εφόσον η ενέργεια ανά σωματίο έχει κάτω όριο ανεξάρτητο του αριθμού των σωματιδίων.

Η κβαντική θεωρία από τη γέννηση της έλυσε το πρόβλημα της έλλειψης ευστάθειας πρώτου τύπου που χαρακτήριζε το μοντέλο του ατόμου του Ράδερφορντ. Αλλά δεν ήταν προφανές ότι εξασφάλιζε την ευστάθεια δεύτερου τύπου. Όπως αποδείχτηκε, η ευστάθεια δεύτερου τύπου εξαρτάται απόλυτα από το γεγονός ότι τα ηλεκτρόνια είναι φερμιόνια. Η απόδειξη δόθηκε το 1967 από τους Ντάyson (F. Dyson) και Λέναρντ (A. Lenard) [248], σε ένα από τα σημαντικότερα θεωρήματα μαθηματικής φυσικής του 20ου αιώνα. Η απόδειξη της ευστάθειας δεύτερου τύπου για φερμιόνια έχει βελτιωθεί και απλοποιηθεί σημαντικά από τότε. Περιγράφεται από το ακόλουθο θεώρημα [249].

Θεώρημα 15.1 Ευστάθεια της ύλης. *Η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης της Χαμιλτονιανής (15.26) ικανοποιεί την ανισότητα (15.28) για $C(Z) \simeq 1, 7\alpha^2 Z^2$.*

Είναι αξιοσημείωτο ότι η ευστάθεια δεύτερου τύπου υπάρχει μόνο για φερμιόνια. Για μποζόνια, η ενέργεια E_0 είναι ανάλογη του $-N^{7/5}$ [250, 251], δηλαδή η ενέργεια ανά σωματίο γίνεται ολοένα και πιο μικρή όσο μεγαλώνει το N . Αν το ηλεκτρόνιο ήταν μποζόνιο, ο κόσμος θα ήταν ριζικά διαφορετικός. Τα παραπάνω ισχύουν στα πλαίσια της μη-σχετικιστικής κβαντομηχανικής. Αν κανείς λάβει υπόψη τη σχετικότητα, το πρόβλημα της ευστάθειας της ύλης γίνεται ακόμα πιο πολύπλοκο, αλλά εν γένει τα φερμιόνια δίνουν ευστάθεια έστω και κάτω από περιορισμούς, ενώ τα μποζόνια όχι.

15.4 Χώροι Φοκ

15.4.1 Βασικοί ορισμοί

Μέχρι στιγμής, τα συστήματα που έχουμε εξετάσει χαρακτηρίζονται από σταθερούς αριθμούς για κάθε είδος σωματιδίου που τα αποτελεί: στην Εξ. (15.12), οι αριθμοί σωματιδίων N_a και M_b είναι σταθερές. Αυτός ο περιορισμός απαγορεύει την περιγραφή σημαντικών φαινομένων.

Σε πολλές φυσικές διεργασίες ο τύπος των σωματιδίων που συμμετέχουν σ' αυτές μεταβάλλεται. Τέτοιες είναι οι χημικές και οι πυρηνικές αντιδράσεις: στις πρώτες αλλάζει ο τύπος των μορίων, στις δεύτερες ο τύπος των πυρήνων που συμμετέχουν. Αυτού του είδους οι διεργασίες δεν αφορούν μόνο σύνθετα σωματίδια όπως τα μόρια και οι πυρήνες, αλλά και σωματίδια που θεωρούμε στοιχειώδη. Για παράδειγμα, η σκέδαση ενός ηλεκτρονίου και ενός ποζιτρονίου οδηγεί στην εξαφάνισή τους και στην εμφάνιση δύο φωτονίων. Η διάσπαση ενός σωματιδίου μ έχει ως προϊόντα ένα ηλεκτρόνιο και δύο νετρίνα. Επίσης, σε μακροσκοπικά συστήματα ο αριθμός των σωματιδίων μπορεί να υφίσταται μικρές διακυμάνσεις λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον, χωρίς όμως να αλλάζουν οι μακροσκοπικές ιδιότητες του συστήματος.

Για να περιγράψουμε τα παραπάνω φαινόμενα, πρέπει να ορίσουμε ένα χώρο Χίλμπερτ που περιγράφει συστήματα με μεταβλητό αριθμό σωματιδίων. Αυτός καλείται *χώρος Φοκ* (Fock). Η κατασκευή του χώρου Φοκ γίνεται ως εξής. Έστω \mathcal{H} ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει ένα σωματίο. Ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει απροσδιόριστο αριθμό από τέτοια σωματίδια προκύπτει αν "ενώσει" κανείς το χώρο Χίλμπερτ για 0 σωματίο, με το χώρο Χίλμπερτ για ένα σωματίο, με το χώρο Χίλμπερτ για δύο σωματίδια κ.ο.κ. Η ένωση γίνεται μέσω ευθέος αθροίσματος. Δεδομένου ότι οι χώροι Χίλμπερτ που περιγράφουν $N > 1$ σωματίδια εξαρτάται από το αν αυτά είναι φερμιόνια ή μποζόνια, υπάρχουν δύο διαφορετικοί χώροι Φοκ.

- Ο μποζονικός χώρος Φοκ ορίζεται ως

$$\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \mathcal{C} \oplus \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}_S^2 \oplus \mathcal{H}_S^3 \oplus \dots \quad (15.29)$$

- Ο φερμιονικός χώρος Φοκ ορίζεται ως

$$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \mathcal{C} \oplus \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}_A^2 \oplus \mathcal{H}_A^3 \oplus \dots \quad (15.30)$$

Για να μελετήσουμε τις ιδιότητες των χώρων Φοκ πρέπει να εισάγουμε ένα διαφορετικό συμβολισμό, για να αποφύγουμε προβλήματα από το γεγονός ότι σε πολλές εκφράσεις θα εμφανίζονται ποσότητες που ορίζονται στο χώρο \mathcal{H} του ενός σωματιδίου μαζί με ποσότητες που ορίζονται στο χώρο Φοκ. Θα κρατήσουμε το φορμαλισμό Ντιράκ για όλες τις ποσότητες που ορίζονται στο χώρο Φοκ, διανύσματα και τελεστές. Θα υιοθετήσουμε όμως ένα διαφορετικό συμβολισμό για το χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} .

Έστω $|a\rangle$ μία ορθοκανονική βάση στο χώρο Χίλμπερτ του ενός σωματιδίου \mathcal{H} , όπου το a παίρνει τιμές σε κάποιο σύνολο L . Γράφουμε τη συνθήκη ορθοκανονικοποίησης ως $\langle a'|a\rangle = \delta_{a'a}$. Το L μπορεί να είναι συνεχές σύνολο οπότε τα $|a\rangle$ αντιστοιχούν σε γενικευμένη βάση και το σύμβολο $\delta_{a'a}$ σε συνάρτηση δέλτα.

Η βάση $|a\rangle$ επάγει μία ορθοκανονική βάση $|a_1, a_2\rangle$ στο χώρο H_S^2 , μία ορθοκανονική βάση $|a_1, a_2, a_3\rangle_S$ στο χώρο H_S^3 , κ.ο.κ. Δεδομένου ότι διανύσματα με διαφορετικό αριθμό σωματιδίων n , ανήκουν σε ορθογώνιους υπόχωρους του $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, τα διανύσματα βάσης για διαφορετικές τιμές του n είναι μεταξύ τους κάθετα. Άρα στον μποζονικό χώρο Φοκ $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, ορίζεται μία ορθοκανονική βάση από όλα τα διανύσματα της μορφής

$$|0\rangle, |a\rangle, |a_1, a_2\rangle_S, |a_1, a_2, a_3\rangle_S, \dots, |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_S, \dots, \quad (15.31)$$

όπου $|0\rangle$ είναι το μοναδικό διάνυσμα που αντιστοιχεί σε μηδέν σωματίδια. Θα το αποκαλούμε διάνυσμα κενού ή απλά κενό.

Είναι βολικό να παραμετροποιήσει κανείς την παραπάνω βάση χρησιμοποιώντας μία συνάρτηση $n : L \rightarrow \mathbb{N}$, που σε κάθε $a \in L$ αντιστοιχεί έναν ακέραιο n_a . Κάθε διάνυσμα της βάσης (15.31) ορίζει μία τέτοια συνάρτηση, όπου n_a είναι ο αριθμός των σωματιδίων που βρίσκονται στην κατάσταση a . Για παράδειγμα, αν $L = \mathbb{N}$, στο διάνυσμα $|0, 1, 1, 2, 4, 4\rangle_S$ αντιστοιχεί η συνάρτηση με $n_0 = 1, n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 0, n_4 = 2$ και $n_i = 0$, για $i \geq 5$. Δεδομένου ότι κάθε διάνυσμα βάσης αντιστοιχεί σε πεπερασμένο αριθμό σωματιδίων, οι συναρτήσεις n_a παίρνουν μη-μηδενική τιμή μόνο για πεπερασμένο αριθμό τιμών του a , έτσι ώστε $\sum_a n_a < \infty$. Αντίστροφα, για κάθε συνάρτηση $n : L \rightarrow \mathbb{N}$, με $\sum_a n_a \leq \infty$ αντιστοιχεί ένα από τα διανύσματα (15.31). Θα συμβολίζουμε μία τέτοια βάση του $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, ως $|\{n_a\}\rangle$ ή ισοδύναμα ως $|n_{a_1}, n_{a_2}, n_{a_3}, \dots\rangle$, όπου τα n_a παίρνουν οποιαδήποτε τιμή στο \mathbb{N} .

Το αντίστοιχο ισχύει και για το φερμιονικό χώρο Φοκ $\mathcal{F}_F(\mathcal{H})$. Ορίζεται ορθοκανονική βάση από όλα τα διανύσματα της μορφής

$$|0\rangle, |a\rangle, |a_1, a_2\rangle_A, |a_1, a_2, a_3\rangle_A, \dots, |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A, \dots, \quad (15.32)$$

Η βάση αυτή περιγράφεται μέσω συναρτήσεων $n : L \rightarrow \{0, 1\}$, με $\sum_a n_a < \infty$. Λόγω της αρχής του Πάουλι, δεν μπορούν να υπάρξουν δύο σωματίδια με την ίδια τιμή του a , οπότε οι δυνατές τιμές του n_a είναι μόνο 0 και 1. Θα συμβολίζουμε μία τέτοια βάση του $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, ως $|\{n_a\}\rangle$.

15.4.2 Τελεστές στον μποζονικό χώρο Φοκ

Για κάθε $c \in L$, ορίζουμε τον μειωτικό τελεστή \hat{a}^c και τον αυξητικό τελεστή \hat{a}_c^\dagger στον $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, μέσω της δράσης τους στα διανύσματα βάσης $|n_{a_1}, n_{a_2}, n_{a_3}, \dots\rangle$,

$$\hat{a}^c |n_1, n_2, \dots, n_c, \dots\rangle = \sqrt{n_c} |n_1, n_2, \dots, n_c - 1, \dots\rangle \quad (15.33)$$

$$\hat{a}_c^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_c, \dots\rangle = \sqrt{n_c + 1} |n_1, n_2, \dots, n_c + 1, \dots\rangle, \quad (15.34)$$

σε άμεση αντιστοιχία με τον αυξητικό και μειωτικό τελεστή του αρμονικού ταλαντωτή. Ο λόγος που ο δείκτης στο \hat{a} είναι πάνω και στο \hat{a}^\dagger είναι κάτω θα εξηγηθεί στη συνέχεια.

Άμεσα βρίσκουμε τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{a}^c, \hat{a}^d] = 0, \quad [\hat{a}_c^\dagger, \hat{a}_d^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}^c, \hat{a}_d^\dagger] = \delta_d^c \hat{I}. \quad (15.35)$$

Σε αντιστοιχία με τον αρμονικό ταλαντωτή, τα διανύσματα βάσης $|\{n_a\}\rangle$ γράφονται ως

$$|n_{a_1}, n_{a_2}, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{a_1}! n_{a_2}! \dots}} (\hat{a}_{a_1}^\dagger)^{n_{a_1}} (\hat{a}_{a_2}^\dagger)^{n_{a_2}} \dots |0\rangle. \quad (15.36)$$

Συμβολίζουμε ως ξ^a τους συντελεστές του αναπτύγματός ενός διανύσματος $|\xi\rangle \in \mathcal{H}$ ως προς τη βάση $|a\rangle$ και ως $\bar{\xi}_a$ τους μιγαδικούς συζυγείς των ξ^a , που αντιστοιχούν στο ανάπτυγμα του $\langle\xi|$ στη βάση $\langle a|$. Ορίζουμε τους τελεστές

$$\hat{a}^\dagger(\xi) = \hat{a}_c^\dagger \xi^c \quad \hat{a}(\bar{\xi}) = \hat{a}^c \bar{\xi}_c, \quad (15.37)$$

όπου χρησιμοποιούμε τη σύμβαση άθροισης σύμφωνα με την οποία οποιοσδήποτε δείκτης εμφανίζεται δύο φορές, τη μία φορά πάνω και την άλλη κάτω, αθροίζεται.

Οι τελεστές $\hat{a}^\dagger(\xi)$ και $\hat{a}(\bar{\xi})$ δεν εξαρτώνται από την επιλογή βάσης στον \mathcal{H} και ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{a}(\bar{\xi}), \hat{a}(\bar{\eta})] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger(\xi), \hat{a}^\dagger(\eta)] = 0, \quad [\hat{a}(\bar{\eta}), \hat{a}^\dagger(\xi)] = (\bar{\eta}_c \xi^c) \hat{I}. \quad (15.38)$$

Κάθε τελεστής \hat{A} στον $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ αναλύεται ως άθροισμα επιμέρους γραμμικών απεικονίσεων A_{mn} από τον υπόχωρο \mathcal{H}_S^n n σωματιδίων στον υπόχωρο \mathcal{H}_S^m m σωματιδίων. Κατασκευάζουμε την απεικόνιση A_{mn} δρώντας με n μειωτικούς τελεστές σε μία κατάσταση με n σωματίδια ώστε να οδηγηθούμε στο κενό και μετά δρώντας με m αυξητικούς τελεστές οπότε καταλήγουμε σε μία κατάσταση με m σωματίδια. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να γράψουμε οποιονδήποτε τελεστή του χώρου Φοκ ως άθροισμα όρων που περιέχουν n δράσεις των μειωτικών τελεστών και m δράσεις αυξητικών τελεστών, για όλα τα δυνατά n και m ,

$$\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} K_{a_1 a_2 \dots a_n}{}^{b_1 b_2 \dots b_m} \hat{a}_{b_1}^\dagger \dots \hat{a}_{b_m}^\dagger \hat{a}^{a_1} \dots \hat{a}^{a_n}, \quad (15.39)$$

για κάποιες σταθερές $K_{a_1 a_2 \dots a_n}{}^{b_1 b_2 \dots b_m}$. Στην Εξ. (15.50) οι μειωτικοί τελεστές είναι στα δεξιά των αυξητικών τελεστών σε κάθε όρο του αθροίσματος. Αυτή η έκφραση καλείται *συνήθως διατεταγμένη* (normal-ordered) μορφή του \hat{A} .

Έστω κανονικός τελεστής \hat{f} στον \mathcal{H} . Συμβολίζουμε τα στοιχεία πίνακά του ως προς τη βάση $|a\rangle$ ως $f^a{}_b := \langle a | \hat{f} | b \rangle$. Στη συνέχεια, ορίζουμε τον τελεστή $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ στο $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ ως

$$d\hat{\Gamma}(\hat{f}) = \hat{a}_a^\dagger f^a{}_b \hat{a}^b. \quad (15.40)$$

Η εξάρτηση του $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ από το \hat{f} είναι γραμμική: $d\hat{\Gamma}(\lambda\hat{f} + \hat{g}) = \lambda d\hat{\Gamma}(\hat{f}) + d\hat{\Gamma}(\hat{g})$.

Ο τελεστής $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ γράφεται και ως

$$d\hat{\Gamma}(\hat{f}) = 0 \oplus \hat{f} \oplus \hat{f}^{(2)} \oplus \hat{f}^{(3)} \oplus \dots, \quad (15.41)$$

όπου οι τελεστές $\hat{f}^{(n)}$ στο \mathcal{H}_S^n ορίζονται από την Εξ. (15.8).

Η Εξ. (15.41) σημαίνει ότι ο ορισμός του $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ δεν εξαρτάται από την επιλογή βάσης στο \mathcal{H} . Για την απόδειξη της, παρατηρούμε πρώτα ότι ο τελεστής (15.40) δεν αλλάζει τον αριθμό των σωματιδίων. Αυτό σημαίνει ότι αν δράσει σε ένα διάνυσμα του \mathcal{H}_S^n , δίνει διάνυσμα του \mathcal{H}_S^n . Για $n = 2$, βρίσκουμε αμέσως $d\hat{\Gamma}(\hat{f})|a_1, a_2\rangle_S = \sum_{b_1} f^{a_1}{}_{b_1} |b_1, a_2\rangle_S + \sum_{b_2} f^{a_2}{}_{b_2} |a_1, b_2\rangle_S = \hat{f}^{(2)}|a_1, a_2\rangle$. Επαγωγικά αποδεικνύουμε το ίδιο για κάθε υπόχωρο \mathcal{H}_S^n , οπότε επιβεβαιώνεται η Εξ. (15.41).

Αν ο \hat{f} είναι αυτοσυζυγής στον \mathcal{H} , τότε ο $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ είναι αυτοσυζυγής στον $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$. Έστω ότι μια βάση $|a\rangle$ του \mathcal{H} ορίζεται από ιδιοδιανύσματα του \hat{f} με ιδιοτιμές f_a . Τότε τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα βάσης $|\{n_a\}\rangle$ στο χώρο Φοκ $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ είναι ιδιοδιανύσματα του $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$,

$$d\hat{\Gamma}(\hat{f})|\{n_a\}\rangle = \left(\sum_a n_a f_a \right) |\{n_a\}\rangle. \quad (15.42)$$

Αν ο \hat{f} είναι θετικός τελεστής, τότε $f_a \geq 0$, οπότε και ο $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ είναι θετικός τελεστής.

Για $\hat{f} = \hat{I}$, $f_a = 1$, οπότε ο τελεστής $d\hat{\Gamma}(\hat{I})$ έχει ως ιδιοτιμές το συνολικό αριθμό των σωματιδίων $\sum_a n_a$. Τον αποκαλούμε *τελεστή αριθμού σωματιδίων*, και τον συμβολίζουμε ως \hat{N} ,

$$\hat{N} = d\hat{\Gamma}(\hat{I}) = \hat{a}_c^\dagger \hat{a}^c. \quad (15.43)$$

Για κάθε τελεστή \hat{u} στο \mathcal{H} , ορίζουμε τον τελεστή $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ στο $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ ως

$$\hat{\Gamma}(\hat{u}) = \hat{I} \oplus \hat{u} \oplus (\hat{u} \otimes \hat{u}) \oplus (\hat{u} \otimes \hat{u} \otimes \hat{u}) \oplus \dots \quad (15.44)$$

Από τον ορισμό προκύπτει άμεσα ότι αν ο \hat{u} είναι μοναδιαίος τότε και ο $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ είναι μοναδιαίος. Επίσης βρίσκουμε ότι

$$\hat{\Gamma}(\hat{u}_1)\hat{\Gamma}(\hat{u}_2) = \hat{\Gamma}(\hat{u}_1\hat{u}_2); \quad (15.45)$$

Αυτό σημαίνει ότι οποιαδήποτε μοναδιαία αναπαράσταση μίας ομάδας G στο \mathcal{H} επάγει μία αναπαράσταση της ίδιας ομάδας στο $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$.

Έστω ότι ο τελεστής \hat{u} ορίζει το μετασχηματισμό μεταξύ δύο ορθοκανονικών βάσεων, $|a\rangle$ και $|\bar{a}\rangle$, δηλαδή $|\bar{a}\rangle = \hat{u}|a\rangle$. Τότε ο τελεστής $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ ορίζει το μετασχηματισμό μεταξύ των αντίστοιχων βάσεων $|\{n_a\}\rangle$ και $|\{n_{\bar{a}}\}\rangle$ στο χώρο Φοκ,

$$|\{n_{\bar{a}}\}\rangle = \hat{\Gamma}(\hat{u})|\{n_a\}\rangle. \quad (15.46)$$

Έστω μια μονοπαραμετρική ομάδα μοναδιαίων τελεστών $\hat{u}_t = e^{-i\hat{f}t}$ στο \mathcal{H} , όπου \hat{f} αυτοσυζυγής. Οι μοναδιαίοι τελεστές $\hat{\Gamma}(e^{-i\hat{f}t})$ ορίζουν επίσης μια μονοπαραμετρική ομάδα στο $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ με γεννήτορα $\hat{F} = i\frac{d}{dt}\hat{\Gamma}(e^{-i\hat{f}t})|_{t=0}$. Εφαρμόζοντας τον κανόνα του Λάιμπνιτς στην Εξ. (15.44) βρίσκουμε ότι $\hat{F} = d\hat{\Gamma}(\hat{f})$. Καταλήγουμε λοιπόν ότι

$$\hat{\Gamma}(e^{-i\hat{f}t}) = \exp \left[-id\hat{\Gamma}(\hat{f})t \right]. \quad (15.47)$$

Αυτή η σχέση δικαιολογεί και το συμβολισμό που χρησιμοποιήσαμε.

Παράδειγμα 15.1. Αν επιλέξουμε $\mathcal{H} = \mathcal{C}^n$, οι αυξητικοί και μειωτικοί τελεστές ικανοποιούν τις εξισώσεις $[\hat{a}^a, \hat{a}^b] = [\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b^\dagger] = 0$ και $[\hat{a}^a, \hat{a}_b^\dagger] = \delta^a_b \hat{I}$, για $a, b = 1, 2, \dots, n$, δηλαδή ο χώρος Φοκ $\mathcal{F}_B(\mathcal{C}^n)$ περιγράφει ένα σύστημα n αρμονικών ταλαντωτών. Δεδομένου ότι στο \mathcal{C}^n ορίζεται η θεμελιώδης αναπαράσταση της ομάδας $U(n)$, οι τελεστές $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ ορίζουν μία αναπαράσταση της $U(n)$ στο χώρο Φοκ.

Ορίζοντας $\hat{x}_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^a + \hat{a}_a^\dagger)$ και $\hat{p}_a = \frac{1}{\sqrt{2}i}(\hat{a}^a - \hat{a}_a^\dagger)$, παίρνουμε

$$[\hat{x}_a, \hat{x}_b] = 0 \quad [\hat{p}_a, \hat{p}_b] = 0 \quad [\hat{x}_a, \hat{p}_b] = i\delta_{ab}\hat{I}, \quad (15.48)$$

δηλαδή ο χώρος Φοκ φέρει μία μοναδιαία αναπαράσταση της ομάδας Χάιζενμπεργκ-Βάουλ H_n . Η αναπαράσταση αυτή είναι μη-αναγωγίμη, γιατί ο μοναδικός τελεστής που μετατίθεται με όλα τα \hat{a}_a και \hat{a}_a^\dagger είναι η μονάδα και τα πολλαπλάσιά της.

15.4.3 Τελεστές στο φερμιονικό χώρο Φοκ

Για κάθε $b \in L$, ορίζουμε τον μειωτικό τελεστή \hat{c}^b και τον αυξητικό τελεστή \hat{c}_b^\dagger στον $\mathcal{F}_F(\mathcal{H})$, μέσω της δράσης τους στα διανύσματα βάσης (15.32)

$$\hat{c}^b |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A = \sum_i \delta^b_{a_i} |a_1, a_2, \dots, q_i, \dots, a_n\rangle_A, \quad (15.49)$$

$$\hat{c}_b^\dagger |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A = |b, a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_a, \quad (15.50)$$

όπου ως $|a_1, a_2, \dots, q_i, \dots, a_n\rangle_A$ συμβολίζουμε το διάνυσμα $|a_1, a_2, \dots, a_{i-1}, a_{i+1}, \dots, a_n\rangle_A$.

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{c}^a \hat{c}^b |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A &= \sum_{i,j} \delta^a_{a_i} \delta^b_{a_j} |a_1, a_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, a_n\rangle_A \\ &= - \sum_{i,j} \delta^a_{a_i} \delta^b_{a_j} |a_1, a_2, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, a_n\rangle_A \\ &= - \sum_{i,j} \delta^b_{a_i} \delta^a_{a_j} |a_1, a_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, a_n\rangle_A = -\hat{c}^b \hat{c}^a |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A, \end{aligned}$$

και άρα

$$[\hat{c}^a, \hat{c}^b]_+ = 0, \quad (15.48)$$

όπου ορίσαμε τον *αντιμεταθέτη* δύο τελεστών ως

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (15.49)$$

Ομοίως, βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_b^\dagger |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A &= |a, b, a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A = \\ &= -|b, a, a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A = -\hat{c}_b^\dagger \hat{c}_a^\dagger |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A, \end{aligned}$$

και άρα

$$[\hat{c}_a^\dagger, \hat{c}_b^\dagger]_+ = 0. \quad (15.48)$$

Επίσης,

$$\begin{aligned} \hat{c}^a \hat{c}_b^\dagger |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A &= \delta^a_b |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A + \sum_i \delta^a_{a_i} |b, a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n\rangle_A = \\ &= \delta^a_b |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A + \hat{c}_b^\dagger \hat{c}^a |a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A \end{aligned}$$

και άρα

$$[\hat{c}^a, \hat{c}_b^\dagger]_+ = \delta^a_b \hat{I}. \quad (15.47)$$

Τα διανύσματα $|a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A$ γράφονται ως

$$|a_1, a_2, \dots, a_n\rangle_A = \hat{c}_{a_n}^\dagger \dots \hat{c}_{a_2}^\dagger \hat{c}_{a_1}^\dagger |0\rangle. \quad (15.48)$$

Σε αναλογία με την μποζονική περίπτωση, ορίζουμε τους τελεστές $\hat{c}(\bar{\xi}) = \hat{c}^a \bar{\xi}_a$ και $\hat{c}^\dagger(\xi) = \hat{c}_a^\dagger \xi^a$, οι οποίοι δεν εξαρτώνται από την επιλογή βάσης στον χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} . Οι σχέσης αντιμετάθεσης (15.48—15.47) γράφονται

$$[\hat{c}(\bar{\xi}), \hat{c}(\bar{\eta})]_+ = 0 \quad [\hat{c}^\dagger(\xi), \hat{c}^\dagger(\eta)]_+ = 0, \quad [\hat{c}(\bar{\eta}), \hat{c}^\dagger(\xi)] = (\bar{\eta}_c \xi^c) \hat{I} \quad (15.49)$$

όπου ορίσαμε τον *αντιμεταθέτη* δύο τελεστών ως $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

Οι ιδιότητες των τελεστών σε φερμιονικούς χώρους Φοκ αντικατοπτρίζουν αυτές των τελεστών σε μποζονικούς χώρους Φοκ. Ειδικότερα, κάθε τελεστής \hat{A} του $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ γράφεται στη συνήθως διατεταγμένη μορφή του

$$\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} K_{a_1 a_2 \dots a_n}{}^{b_1 b_2 \dots b_m} \hat{c}_{b_1}^\dagger \dots \hat{c}_{b_m}^\dagger \hat{c}^{a_1} \dots \hat{c}^{a_n}, \quad (15.50)$$

όπου $K_{a_1 a_2 \dots a_n}{}^{b_1 b_2 \dots b_m}$ σταθερές.

Για κάθε τελεστή \hat{f} στο \mathcal{H} ορίζουμε τον τελεστή $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ στον $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$ ως

$$d\hat{\Gamma}(\hat{f}) := \hat{c}_a^\dagger f^a \hat{c}^b. \quad (15.51)$$

Ο τελεστής $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ ικανοποιεί ακριβώς τις ίδιες ιδιότητες με αυτές του αντίστοιχου τελεστή στον μποζονικό χώρο Φοκ. Ειδικότερα, ορίζει τον τελεστή αριθμού σωματιδίων $\hat{N} = d\hat{\Gamma}(\hat{I})$.

Για κάθε τελεστή \hat{u} στο \mathcal{H} ορίζουμε τον τελεστή $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ στο $\mathcal{F}_A(\mathcal{H})$ μέσω της Εξ. (15.44). Οι ιδιότητες των τελεστών $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ καθώς και η σχέση τους με τους τελεστές $d\hat{\Gamma}(\hat{f})$ σύμφωνα με την Εξ. (15.47) εξακολουθούν να ισχύουν.

Παράδειγμα 15.2. Αν $\mathcal{H} = \mathcal{C}^d$, η σειρά από ευθεία αθροίσματα στο φερμιονικό χώρο Φοκ (15.30) έχει πεπερασμένο αριθμό όρων, καθώς $\mathcal{H}_A^n = \emptyset$ για $n > d$. Δεδομένου ότι η διάσταση του \mathcal{H}_A^n είναι ίση με $\frac{d!}{(d-n)!n!}$, η διάσταση του $\mathcal{F}_A(\mathcal{C}^d)$ είναι $\sum_{n=0}^d \frac{d!}{(d-n)!n!} = 2^d$. Άρα $\mathcal{F}_A(\mathcal{C}^d) = \mathcal{C}^{2^d}$, δηλαδή ταυτίζεται με το χώρο Φοκ ενός συστήματος από d κιούμπιτ. Δεδομένου ότι οι μοναδιαίοι πίνακες στο \mathcal{C}^d είναι στοιχεία της ομάδας $U(d)$, οι τελεστές $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ ορίζουν μία αναπαράσταση της $U(d)$ στο χώρο Χίλμπερτ \mathcal{C}^{2^d} . Για $d = 1$, $\mathcal{F}_A(\mathcal{C}) = \mathcal{C}^2$, ο αυξητικός τελεστής \hat{c}^\dagger ταυτίζεται με το $\hat{\sigma}_+$ και ο μειωτικός \hat{c} με το $\hat{\sigma}_-$.

15.5 Κβαντικά πεδία

15.5.1 Μη αλληλεπιδρώντα σωματρία

Θα εξετάσουμε τώρα την περίπτωση που ο χώρος Χίλμπερτ \mathcal{H} αντιστοιχεί σε ένα σωματρία με μάζα M και σπιν s , δηλαδή ταυτίζεται με τον $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathbf{C}^{2s+1}$. Θα θεωρήσουμε ότι τα σωματρία είναι φερμιόνια—οι εκφράσεις για μποζόνια προκύπτουν με άμεση αντιστοίχιση.

Χρησιμοποιούμε τη γενικευμένη βάση $|a\rangle = |\mathbf{p}, m\rangle$ στο \mathcal{H} , όπου \mathbf{p} ένα διάνυσμα ορμής και m η συνιστώσα του σπιν στην κατεύθυνση 3. Συμβολίζοντας τους αντίστοιχους μειωτικούς και αυξητικούς τελεστές ως $\hat{c}_m(\mathbf{p})$ και $\hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p})$, οι σχέσεις αντιμετάθεσης γράφονται

$$[\hat{c}_m(\mathbf{p}), \hat{c}_{m'}(\mathbf{p}')]_+ = 0, \quad [\hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p}), \hat{c}_{m'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ = 0, \quad [\hat{c}_m(\mathbf{p}), \hat{c}_{m'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ = \delta_{mm'} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \hat{I}. \quad (15.52)$$

Έστω ότι τα σωματρία δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Αν \hat{h} είναι η Χαμιλτονιανή για ένα σωματρία, η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή στο χώρο Φοκ είναι $\hat{H} = d\hat{\Gamma}(\hat{h})$. Για ελεύθερα σωματρία (απουσία εξωτερικών πεδίων), $\hat{h} = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \otimes \hat{I}$, οπότε

$$\hat{H} = d\hat{\Gamma}(\hat{h}) = \sum_m \int d^3p \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} \hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p}) \hat{c}_m(\mathbf{p}). \quad (15.53)$$

Ομοίως γράφουμε την ολική ορμή του συστήματος

$$\hat{\mathbf{P}} = d\hat{\Gamma}(\hat{\mathbf{p}}) = \sum_m \int d^3p \mathbf{p} \hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p}) \hat{c}_m(\mathbf{p}). \quad (15.54)$$

Ορίζουμε τα αντίστοιχα κβαντικά πεδία ως

$$\hat{\psi}_m(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}} \hat{c}_m(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}} \hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}. \quad (15.55)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (15.52), παίρνουμε τις σχέσεις αντιμετάθεσης για τους τελεστές πεδίων

$$[\hat{\psi}_m(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{m'}(\mathbf{x}')]_+ = 0 \quad [\hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{m'}^\dagger(\mathbf{x}')]_+ = 0 \quad [\hat{\psi}_m(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{m'}^\dagger(\mathbf{x}')]_+ = \delta_{mm'} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{I}. \quad (15.56)$$

Γράφουμε τη Χαμιλτονιανή \hat{H} , την ορμή $\hat{\mathbf{P}}$, και τον αριθμό σωματιδίων \hat{N} συναρτήσεων των τελεστών πεδίου

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M} \sum_m \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.57)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = -i \sum_m \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.58)$$

$$\hat{N} = \sum_m \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.59)$$

και αποτελούν τοπικές συναρτήσεις των πεδίων, δηλαδή μπορούν να γραφούν ως ολοκληρώματα πυκνοτήτων που εξαρτώνται μόνο από τα πεδία και πεπερασμένο αριθμό παραγώγων τους. Όντως, οι Εξ. (15.57—15.59) γράφονται ως $\hat{H} = \int d^3x \hat{\epsilon}(\mathbf{x})$, $\hat{\mathbf{P}} = \int d^3x \hat{\boldsymbol{\pi}}(\mathbf{x})$ και $\hat{N} = \int d^3x \hat{\nu}(\mathbf{x})$, όπου

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2M} \sum_m \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.60)$$

είναι ο τελεστής πυκνότητας ενέργειας,

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}) = -i \sum_m \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.61)$$

είναι ο τελεστής πυκνότητας ορμής, και

$$\hat{\nu}(\mathbf{x}) = \sum_m \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \quad (15.62)$$

είναι ο τελεστής πυκνότητας σωματιδίων.

Η Χαμιλτονιανή \hat{h} για ένα σωματίο μάζας s , σπιν s , φορτίου q και γυρομαγνητικού λόγου γ μέσα σε ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο με ηλεκτρικό δυναμικό ϕ και μαγνητικό δυναμικό \mathbf{A} δίνεται από την Εξ. (14.8). Εφόσον τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους αλλά μόνο με το ΗΜ πεδίο, η Χαμιλτονιανή στο χώρο Φοκ παραμένει ίση με $d\Gamma(\hat{h})$ και γράφεται συναρτήσει των πεδίων

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_m \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{1}{2M} \nabla^2 + q\phi + \frac{iq}{m} \hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \\ + \gamma \sum_{mm'} \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{mm'} \hat{\psi}_{m'}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (15.62)$$

όπου $\hat{\mathbf{S}}_{mm'}$ είναι τα στοιχεία πίνακα των τελεστών του σπιν. Στον υπολογισμό της (15.62) χρησιμοποιήθηκε η μορφή (13.90) για την αλληλεπίδραση του πεδίου με τους μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας.

Οι εξισώσεις εξέλιξης (8.8) για τους τελεστές πεδίου $-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_m(\mathbf{x}, t) = [\hat{H}, \hat{\psi}_m(\mathbf{x}, t)]$ υπολογίζονται χρησιμοποιώντας την ταυτότητα

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]_+ \hat{C} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}]_+. \quad (15.63)$$

Για $\hat{H} = d\Gamma(\hat{h})$, οι εξισώσεις εξέλιξης δίνουν

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) = \hat{h} \hat{\psi}_m(\mathbf{x}), \quad (15.64)$$

δηλαδή το πεδίο εξελίσσεται με τον ίδιο κανόνα όπως η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου, μόνο που το ίδιο είναι τελεστής. Γι' αυτό το λόγο, η περιγραφή κβαντικών συστημάτων με πεδία ονομάζονται παλιότερα *δεύτερη κβάντωση*, υπονοώντας ότι η πρώτη κβάντωση είναι η κατασκευή της εξίσωσης Σρέντινγκερ για σωματίδια, και η δεύτερη κβάντωση η αντικατάσταση της κυματοσυνάρτησης σωματιδίων με τον τελεστή πεδίου.

Για ελεύθερα σωματίδια, οι χρονοεξαρτώμενοι τελεστές πεδίου υπολογίζονται άμεσα ως

$$\hat{\psi}_m(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}} \hat{c}_m(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - i\frac{\mathbf{p}^2}{2M}t} \quad \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}} \hat{c}_m^\dagger(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} + i\frac{\mathbf{p}^2}{2M}t}. \quad (15.65)$$

15.5.2 Αλληλεπιδρώντα σωματίδια

Όταν τα σωματίδια αλληλεπιδρούν πλέον δεν μπορούμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή στο χώρο Φοκ στη μορφή $d\Gamma(\hat{h})$ για κάποιο τελεστή \hat{h} . Πρέπει να προσθέσουμε και κάποιον όρο \hat{U} που περιγράφει την αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματιδίων, έτσι ώστε

$$\hat{H} = d\Gamma(\hat{h}) + \hat{U}. \quad (15.66)$$

Η απλούστερη περίπτωση αφορά την περίπτωση αλληλεπίδρασης ανά ζεύγη, δηλαδή κάθε ζεύγος σωματιδίων συνεισφέρει στη Χαμιλτονιανή έναν ξεχωριστό όρο αλληλεπίδρασης. Έστω U_{ab} ο όρος στη Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στην αλληλεπίδραση ενός σωματιδίου στην κατάσταση $|a\rangle$ και ενός στην κατάσταση $|b\rangle$. Για n_a σωματίδια στην $|a\rangle$ και n_b σωματίδια στην $|b\rangle$, η συνεισφορά στην ενέργεια είναι $U_{ab}n_a n_b$. Αντικαθιστώντας τα n_a με τον τελεστή αριθμού σωματιδίων $\hat{N}_a = \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_a$ (χωρίς άθροιση στα a) καταλήγουμε στη γενικότερη δυνατή μορφή του \hat{V} για αλληλεπίδραση κατά ζεύγη

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{ab} U_{ab} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_a \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_b. \quad (15.67)$$

Ο όρος $\frac{1}{2}$ εισήχθη προκειμένου να μη μετρούνται δύο φορές οι όροι U_{ab} και U_{ba} .

Στην παραπάνω έκφραση δεν χρησιμοποιείται η συνήθης σύμβαση άθροισης, γι' αυτό και κατεβάσαμε αυθαίρετα τους δείκτες των \hat{c} . Μπορούμε όμως να γράψουμε

$$\hat{U} = \sum_{abcd} W^{ab}_{cd} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_c \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_d, \quad (15.68)$$

όπου $W^{ab}_{cd} = \frac{1}{2} U_{ab} \delta_c^a \delta_d^b$.

Έστω ότι το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι κεντρικό και δεν εξαρτάται από τα σπιν. Οι δείκτες a και b αντιστοιχούν σε (\mathbf{r}, m) και το U_{ab} γράφεται ως

$$U_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta_{mm'} U(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (15.69)$$

Ο όρος αλληλεπίδρασης (15.67) γράφεται ως

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\nu}(\mathbf{x}) \hat{\nu}(\mathbf{x}'), \quad (15.70)$$

όπου $\hat{\nu}(\mathbf{x})$ ο τελεστής πυκνότητας σωματιδίων (15.62). Προσθέτοντας και τον όρο της κινητικής ενέργειας (15.57) βρίσκουμε την ολική Χαμιλτονιανή για το πεδίο που περιγράφει σωματάρια που αλληλεπιδρούν ανά ζεύγη μέσω δυναμικού ως

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M} \sum_m \int d^3x \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\nu}(\mathbf{x}) \hat{\nu}(\mathbf{y}) \quad (15.71)$$

Παρατηρούμε ότι η ολική Χαμιλτονιανή δεν είναι τοπική συνάρτηση των πεδίων, καθώς ο όρος της αλληλεπίδρασης περιέχει διπλό ολοκλήρωμα ως προς τη θέση. Στη μη-σχετικιστική φυσική οι αλληλεπιδράσεις αναπαρίστανται αναγκαστικά μέσω μη-τοπικών Χαμιλτονιανών. Αντίθετα στη σχετικιστική φυσική η τοπικότητα της Χαμιλτονιανής είναι κεφαλιώδους σημασίας. Αποδεικνύεται ότι μη-τοπικές Χαμιλτονιανές οδηγούν σε μετάδοση πληροφορίας με ταχύτητες μεγαλύτερες από αυτή του φωτός.

15.5.3 Χημικές αντιδράσεις

Η αξία του φορμαλισμού του χώρου Φοκ έγκειται στη δυνατότητα περιγραφής διαδικασιών κατά τις οποίες εξαφανίζονται σωματάρια ενός τύπου και εμφανίζονται ενός άλλου. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα μία χημική αντίδραση της μορφής $A + C \rightarrow D$, όπου δύο σωματάρια A και C αλληλεπιδρούν και δίνουν ένα σωματάρια D . Η διατήρηση της στροφορμής μας λέει ότι δεν μπορεί και τα τρία σωματάρια

A , C και D να είναι φερμιόνια. Θα θεωρήσουμε τα C και D φερμιόνια ίδιου σπιν και το A μποζόνιο με σπιν μηδέν.

Γράφουμε τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής για το ω ως \hat{a}^a και \hat{a}_a^\dagger αντίστοιχα, για το C ως \hat{c}^a και \hat{c}_a^\dagger και για το D ως \hat{d}^a και \hat{d}_a^\dagger . Βεβαίως οι \hat{c}_a και \hat{d}_a είναι φερμιονικοί τελεστές και ικανοποιούν σχέσεις αντιμετάθεσης, ενώ οι \hat{a}_a είναι μποζονικοί και ικανοποιούν σχέσεις μετάθεσης.

Για να γίνεται η παραπάνω αντίδραση πρέπει να υπάρχει ένας όρος αλληλεπίδρασης που καταστρέφει ένα σωματίο A και ένα σωματίο C και δημιουργεί ένα σωματίο D . Δηλαδή πρέπει να υπάρχει ένας όρος της μορφής $\hat{c}^a \hat{a}^b \hat{d}_c^\dagger$. Βεβαίως, εφόσον η Χαμιλτονιανή είναι αυτοσυζυγής τελεστής πρέπει να περιέχει και τον ερμιτιανό συζυγή αυτού του όρου, δηλαδή $\hat{c}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{d}_c$. Άρα ο γενικότερος δυνατός όρος που περιγράφει αυτήν την αντίδραση είναι της μορφής

$$\hat{V} = K_{abc} \hat{c}^a \hat{a}^b \hat{d}_c^\dagger + \bar{K}_{ab}^c \hat{c}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{d}_c, \quad (15.72)$$

όπου ο όρος \bar{K}_{ab}^c είναι ο μιγαδικός συζυγής του K_{abc} .

Αν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων είναι μικρής εμβέλειας, τότε μπορεί να χρησιμοποιηθεί η λεγόμενη υπερ-τοπική προσέγγιση (super-local approximation), σύμφωνα με την οποία ο όρος \hat{V} είναι τοπική συνάρτηση των τελεστών πεδίων. Συμβολίζουμε ως $\hat{\psi}_m(\mathbf{x})$ τον τελεστή πεδίου για τα σωματίια C , ως $\hat{\chi}_m(\mathbf{x})$ τον τελεστή πεδίου για τα σωματίια D και ως $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ τον τελεστή πεδίου για τα σωματίια A .

Η υπερτοπική προσέγγιση αντιστοιχεί σε τελεστή αλληλεπίδρασης

$$\hat{V} = g \sum_m \int d^3x \left[\hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\chi}_m(\mathbf{x}) + \hat{\chi}_m^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_m(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \right], \quad (15.73)$$

όπου g είναι η σταθερά σύζευξης της αλληλεπίδρασης. Η υπερτοπική προσέγγιση εφαρμόζεται σε πολλά προβλήματα, όπως για παράδειγμα στην (προσεγγιστική) περιγραφή των ασθενών αλληλεπιδράσεων.

Ερωτήσεις

- Έχουμε 4 σωματίια και 4 διαθέσιμες καταστάσεις a, b, c, d για κάθε σωματίιο. Πόσες είναι οι δυνατές καταστάσεις του συστήματος αν τα σωματίια είναι (α) διακρίσιμα, (β) μποζόνια, (γ) φερμιόνια;
- Έστω ότι υπάρχει ένα σωματίιο το ηλεθρόνιο που είναι καθόλα όμοιο με το ηλεκτρόνιο αλλά έχει έναν επιπλέον κβαντικό αριθμό τον "ηλεκτρικό αριθμό" η που το διαχωρίζει από το ηλεκτρόνιο. Έστω ότι δεν έχουμε τρόπο να μετράμε το η ευθέως και ότι το η δε δημιουργεί αλληλεπιδράσεις με τα γνωστά σωματίια. Πώς θα ξεχωρίζαμε αν ένα άτομο He είχε δύο ηλεκτρόνια ή ένα ηλεκτρόνιο και ένα ηλεθρόνιο;
- Πόσο πρέπει να απομακρύνουμε δύο ταυτοτικά σωματίια για να έχει νόημα να τα θεωρούμε διακρίσιμα;
- Το σωματίιο A είναι φερμιόνιο. Μπορεί να υπάρξει κατάσταση επαλληλίας μίας κατάστασης με τέσσερα A και μίας με πέντε A ;
- Γιατί είναι σημαντικό να είναι η Χαμιλτονιανή τοπική συνάρτηση των πεδίων;
- Ποια είναι η γενική μορφή τελεστή αλληλεπίδρασης \hat{V} που περιγράφει αντιδράσεις της μορφής $A \rightarrow B + C + D$; Γράψτε τη μορφή του στην υπερτοπική προσέγγιση.

Ασκήσεις

- Θεωρείστε ένα σύστημα δύο σωματιδίων σε μία διάσταση. Δείξτε ότι ο τελεστής $(\hat{A} \otimes \hat{I} - \hat{I} \otimes \hat{A})^2$ είναι συμβατός με τη συμμετρία εναλλαγής και υπολογίστε τη μέση τιμή του για τις καταστάσεις $|a, b\rangle$, $|a, b\rangle_S$, $|a, b\rangle_A$. Εξειδικεύστε τα αποτελέσματά σας για \hat{A} τον τελεστή της θέσης ενός σωματιδίου και $|a\rangle$, $|b\rangle$, τη θεμελιώδη και την πρώτη διεγερμένη κατάσταση ενός αρμονικού ταλαντωτή.

2. Υπολογίστε τις 5 χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες ενός συστήματος 4 ταλαντωτών ίδιας συχνότητας ω και τον αντίστοιχο εκφυλισμό τους, (i) αν είναι φερμιονικοί, (ii) αν είναι μποζονικοί και (iii) αν είναι διακρίσιμοι.
3. Δείξτε ότι σε ένα σύστημα δύο σωματιδίων με σπιν $s = 0$, η σχετική τους στροφορμή μπορεί να πάρει μόνο άρτιες τιμές του ℓ .
4. Υπολογίστε τις 4 χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες ενός συστήματος 3 ταλαντωτών ίδιας συχνότητας ω και τον αντίστοιχο εκφυλισμό τους (i) αν έχουν σπιν $s = \frac{1}{2}$ και (ii) αν έχουν σπιν $s = 1$. (Θεωρείστε ότι ισχύει η σχέση σπιν στατιστικής).
5. Υπολογίστε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης σε ιδανικό αέριο N φερμιονίων σε 1 και σε 2 χωρικές διαστάσεις.
6. Δείξτε ότι η πυκνότητα καταστάσεων για τρισδιάστατο ιστροπικό ταλαντωτή συχνότητας ω είναι ίση με $g(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\omega^3}$, στο όριο μεγάλων ενεργειών. Υπολογίστε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης N τέτοιων φερμιονικών ταλαντωτών με σπιν s , στο όριο μεγάλου N .
7. Θεωρείστε ένα σωματίο με σπιν $s = \frac{1}{2}$ και γυρομαγνητικό λόγο g στις δύο διαστάσεις σε περιοχή εμβαδού A και παρουσία κάθετου σταθερού μαγνητικού πεδίου B . Δείξτε ότι η ενέργεια E_0 της θεμελιώδους για N σωματίια είναι

$$E_0 = \frac{\pi A}{4m} \left(\frac{N}{A} + \frac{gB}{\pi} \right)^2.$$

8. Δείξτε ότι αν ο \hat{u} είναι μοναδιαίος τότε και ο $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ είναι μοναδιαίος και ότι αν ο \hat{u} είναι προβολικός τότε και ο $\hat{\Gamma}(\hat{u})$ είναι προβολικός.
9. Επιβεβαιώστε ότι $[\hat{c}(\bar{\xi})]^\dagger = \hat{c}^\dagger(\xi)$.
10. (α) Υπολογίστε τους μεταθέτες $[d\hat{\Gamma}(\hat{f}), \hat{a}(\bar{\xi})]$ και $[d\hat{\Gamma}(\hat{f}), \hat{a}(\xi)]$ σε μποζονικό χώρο Φοκ. (β) Δείξτε ότι $[d\hat{\Gamma}(\hat{f}), d\hat{\Gamma}(\hat{g})] = d\Gamma([\hat{f}, \hat{g}])$. (γ) Επαναλάβετε τα παραπάνω για τους αντίστοιχους τελεστές σε φερμιονικό χώρο Φοκ.
11. Δείξτε ότι $\hat{\Gamma}(\hat{u})\hat{a}(\xi)\hat{\Gamma}(\hat{u}^\dagger) = \hat{a}(\bar{u}\xi)$ και το αντίστοιχο για τους φερμιονικούς τελεστές.
12. Δείξτε ότι για μη αλληλεπιδρώντα σωματίια

$$\langle 0|\hat{\psi}_m(\mathbf{x}, t)\hat{\psi}_{m'}^\dagger(\mathbf{x}', t')|0\rangle = G_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t'),$$

όπου $G_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)$ ο διαδότης της Χαμιλτονιανής \hat{h} ενός σωματιδίου στη βάση θέσης, σπιν $|\mathbf{x}, m\rangle$.

13. Υπολογίστε τις αναμενόμενες τιμές $\langle \Psi|\hat{\nu}(\mathbf{x}, t)|\Psi\rangle$ και $\langle \Psi|\hat{\nu}(\mathbf{x}, t)\hat{\nu}(\mathbf{x}', t')|\Psi\rangle$ για ελεύθερα σωματίια. Θεωρείστε (α) ως κατάσταση $|\Psi\rangle$ το κενό, (β) κατάσταση $|\Psi\rangle$ ενός σωματιδίου και (γ) κατάσταση $|\Psi\rangle$ δύο σωματιδίων.

Βιβλιογραφία

- Για την ιστορία της απαγορευτικής αρχής του Πάουλι βλ. τη διάλεξη Νόμπελ του Πάουλι [252] και το άρθρο του Straumann [253]. Για το θεώρημα σπιν-στατιστικής, βλ. το βιβλίο των Duck και Sudarshan [254]. Για γενικευμένα είδη στατιστικής, βλ. το άρθρο του Leinaas, Anyons και του Greenberg, Generalizations of Quantum Statistics στο Compendium of Quantum Physics [135].
- Για την ευστάθεια της ύλης, βλ. το βιβλίο των Lieb και Seiringer [249]
- Για τις ιδιότητες του χώρου Φοκ, βλ. το βιβλίο του Berezin [255].

Κεφάλαιο 16

Ενεργειακά φάσματα και δομή σύνθετων συστημάτων

Το να προσπαθείς να φτιάξεις ένα μοντέλο του ατόμου από το φάσμα του είναι σαν να προσπαθείς να φτιάξεις το μοντέλο ενός πιάνου ακούγοντας τους θορύβους που κάνει όταν κατακυλά στις σκάλες.

Ανώνυμος

16.1 Το υπό επίλυση πρόβλημα

Ένα από τα σημαντικότερα κίνητρα για την ανάπτυξη της κβαντικής θεωρίας ήταν η ανάγκη κατανόησης της δομής των ατόμων και των μορίων και η αναζήτηση ποσοτικού προσδιορισμού των φασμάτων εκπομπής τους. Αργότερα, τα ίδια ερωτήματα τέθηκαν και για άλλα σύνθετα συστήματα όπως οι ατομικοί πυρήνες και τα αδρόνια. Σε όλες τις περιπτώσεις, η απάντηση προκύπτει από την εύρεση του διακριτού φάσματος της Χαμιλτονιανής \hat{H} που περιγράφει το σύστημα

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (16.1)$$

όπου $n = 0, 1, 2, \dots$

Η δομή του σύνθετου συστήματος προσδιορίζεται από τη γνώση της θεμελιώδους κατάστασης $|0\rangle$, μέσω των κατανομών πιθανοτήτων που αυτή γεννά για τα διάφορα παρατηρήσιμα μεγέθη. Για παράδειγμα, η κατανομή πιθανοτήτων για τις θέσεις των πυρήνων και των ηλεκτρονίων σε ένα μόριο προσδιορίζει το σχήμα και το μέγεθός του μορίου, καθώς και ποσότητες όπως η ηλεκτρική διπολική ροπή. Οι συχνότητες εκπομπής ενός σύνθετου συστήματος προσδιορίζονται από τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής ως $E_n - E_m$.

Σε ρεαλιστικά συστήματα δεν μπορούμε να βρούμε αναλυτική λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής, οπότε για τα περισσότερα προβλήματα χρησιμοποιούμε αριθμητικές μεθόδους. Αλλά ακόμα και με υπολογιστές στη διάθεσή μας, οι αριθμητικές μέθοδοι δεν επαρκούν. Απαιτούνται φυσικές προσεγγίσεις που θα απλοποιήσουν αρκετά το πρόβλημα, ώστε να μπορέσουμε να χρησιμοποιήσουμε αριθμητικές μεθόδους. Ο λόγος είναι ότι ο κανόνας σύνθεσης κβαντικών συστημάτων με το τανυστικό γινόμενο ανεβάζει τις υπολογιστικές ανάγκες εκθετικά με τον αριθμό των σωματιδίων που αποτελούν ένα σύστημα.

Εν γένει, ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει ακριβώς ένα φυσικό σύστημα είναι απειροδιάστατος, οπότε η εξίσωση ιδιοτιμών για τη Χαμιλτονιανή αντιστοιχεί στη διαγωνιοποίηση ενός απειροδιάστατου πίνακα. Για να χειριστούμε το πρόβλημα αριθμητικά, πρέπει να κάνουμε τις διαστάσεις

του πίνακα πεπερασμένες, έστω N . Αυτό σημαίνει ότι περιοριζόμαστε σε ένα N -διάστατο υπόχωρο (με αντίστοιχο προβολικό τελεστή \hat{P}) για τον οποίο εκτιμούμε ότι περιέχει προσεγγιστικά τα πρώτα $k < N$ ιδιοδιανύσματα του \mathcal{H} . (Αυτό το σκεπτικό θα το αιτιολογήσουμε στη συνέχεια). Ουσιαστικά αντικαθιστούμε τον τελεστή \hat{H} με τον τελεστή $\hat{P}\hat{H}\hat{P}$, εκτιμώντας ότι το σφάλμα στον υπολογισμό των ιδιοτιμών και των ιδιοσυναρτήσεων είναι πολύ μικρό,

$$\frac{|\langle n | \hat{H} - \hat{P}\hat{H}\hat{P} | n \rangle|}{|E_n|} \ll 1, \quad (16.2)$$

για $0 \leq n < k$.

Ας δούμε τί σημαίνει αυτό για ένα άτομο με ατομικό αριθμό Z . Ένα ηλεκτρόνιο περιγράφεται από το χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathbf{C}^2$. Ακόμα κι αν αγνοήσουμε το σπιν (εκτός βέβαια από τις συνέπειές του για την αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης) θα χρειαστούμε (έστω) έναν 6-διάστατο υπόχωρο του $L^2(\mathbf{R}^3)$ για να έχουμε μια αξιοπρεπή ακρίβεια στους υπολογισμούς. Αυτό σημαίνει ότι θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε έναν 6^Z -διάστατο χώρο Χίλμπερτ για να περιγράψουμε το άτομο. Για ένα ελαφρύ άτομο όπως ο P με $Z = 15$, χρειαζόμαστε ένα διάνυσμα διάστασης $\sim 4 \times 10^{11}$, και θεωρώντας $8B$ μνήμης για κάθε στοιχείο του διανύσματος, θέλουμε ένα σκληρό δίσκο με $3TB$ μνήμης μόνο και μόνο για να αποθηκεύσουμε ένα καταστατικό διάνυσμα.

Για ένα μεσαίου βάρους άτομο, όπως ο Zn με $Z = 30$, το καταστατικό διάνυσμα απαιτεί περίπου $10^{12}TB$, δηλαδή χίλιες φορές περισσότερη πληροφορία από όση είναι σήμερα (2018) ψηφιακά καταγεγραμμένη σε όλον τον πλανήτη. Η εκθετική αύξηση δίνει έναν εξωφρενικό αριθμό $10^{50}TB$ για ένα βαρύ άτομο όπως ο Hg με $Z = 80$. Είναι προφανές ότι απαιτούνται προσεγγιστικές τεχνικές οι οποίες θα απλοποιούν σημαντικά το φυσικό σύστημα, χωρίς να χάνουν σημαντικά σε ακρίβεια, τουλάχιστον στις φυσικές προβλέψεις που μας ενδιαφέρουν.

Στη συνέχεια θα περιγράψουμε μερικές από τις σημαντικότερες τεχνικές που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών.

16.2 Διαταραχές

Η απλούστερη μέθοδος είναι η θεωρία διαταραχών, την οποία παρουσιάσαμε στο Κεφ. 6.8. Προϋποθέτει ότι μπορούμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή στη μορφή $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$, όπου \hat{H}_0 μια Χαμιλτονιανή με επιλύσιμο πρόβλημα ιδιοτιμών και $\lambda \ll 1$. Ως εκ τούτου, δεν αποτελεί την πρώτη μέθοδο που χρησιμοποιούμε, αλλά συνήθως εφαρμόζεται στο τέλος για να βελτιώσει τα αποτελέσματα που παίρνουμε από άλλες μεθόδους, που έχουν χρησιμοποιηθεί για την επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών της \hat{H}_0 . Σε ότι ακολουθεί, θα δώσουμε μερικά παραδείγματα εφαρμογών της διαταρακτικής μεθόδου σε ατομικά συστήματα.

16.2.1 Άτομο του ηλίου

Το άτομο του ηλίου χαρακτηρίζεται από τη Χαμιλτονιανή (15.26) για $K = 1$, $N = 2$. Καθώς ο πυρήνας είναι πιο βαρύτες από τα ηλεκτρόνια τον θεωρούμε σε πρώτη προσέγγιση στατικό. Οπότε εξετάζουμε ένα σύστημα δύο ηλεκτρονίων, το οποίο περιγράφεται από τον αντισυμμετρικό υπόχωρο \mathcal{H}_A^2 του $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}} \otimes \mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$.

Γράφουμε τη Χαμιλτονιανή ως $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Εδώ $\hat{H}_0 = \hat{h}_Z \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{h}_Z$, όπου $\hat{h}_Z = \frac{\hat{p}^2}{2m} - Ze^2\hat{r}^{-1}$ είναι η Χαμιλτονιανή ενός ηλεκτρονίου σε δυναμικό Κουλόμπ που προέρχεται από πυρήνα ατομικού αριθμού Z .

Οι ιδιοσυναρτήσεις της \hat{h}_Z είναι οι $|n, \ell, m_\ell\rangle \otimes |m_s\rangle$ και οι ιδιοτιμές $\epsilon_n = -\frac{Z^2}{2ma_0^2n^2}$, όπου $a_0 = (m\alpha)^{-1}$ η ακτίνα του Μπορ. Ως διαταραχή θεωρούμε τον όρο αλληλεπίδρασης των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{V} = \alpha |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|^{-1}, \quad (16.3)$$

όπου $\hat{\mathbf{r}}_{1,2}$ οι τελεστές θέσης των ηλεκτρονίων.

Δεν περιμένουμε τη θεωρία διαταραχών να είναι ιδιαίτερα ακριβής σ' αυτό το σύστημα, δεδομένου ότι ο όρος διαταραχής είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με τους όρους του δυναμικού Κουλόμπ στην αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή.

Η θεμελιώδης κατάσταση της Χαμιλτονιανής \hat{H}_0 σπάει σε χωρικό μέρος $|1, 0, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle$ που είναι συμμετρικό ως προς την εναλλαγή των δύο ηλεκτρονίων και σε μέρος του σπιν που είναι αντισυμμετρικό ως προς την εναλλαγή των ηλεκτρονίων (αντιστοιχεί σε ολικό σπιν $s = 0$). Το αντίστροφο δε γίνεται, γιατί αν έχουμε συμμετρική κατάσταση ως προς την εναλλαγή των ηλεκτρονίων, θα πρέπει να έχουμε αντισυμμετρική ως προς το χωρικό μέρος. Αυτό σημαίνει ότι θα πρέπει να συμμετέχει και άλλο διάνυσμα πέρα από το $|1, 0, 0\rangle$, οπότε δε θα είναι θεμελιώδης κατάσταση της \hat{H}_0 .

Η πρώτη διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης είναι

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \alpha (\langle 1, 0, 0 | \otimes \langle 1, 0, 0 |) |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|^{-1} (|1, 0, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle) \\ &= \alpha \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{|\langle \mathbf{r}_1 | 1, 0, 0 \rangle|^2 |\langle \mathbf{r}_2 | 1, 0, 0 \rangle|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \end{aligned} \quad (16.3)$$

Δεδομένου ότι $\langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$,

$$E_0^{(1)} = \frac{\alpha}{\pi^2} (Z/a_0)^6 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^{-2Zr_1/a_0 - 2Zr_2/a_0}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{2Z}{ma_0^2} K, \quad (16.4)$$

όπου K το ολοκλήρωμα

$$K = \frac{1}{2^6 \pi^2} \int d^3 \rho_1 d^3 \rho_2 \frac{e^{-\rho_1 - \rho_2}}{|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|}, \quad (16.5)$$

το οποίο προέκυψε θέτοντας $\boldsymbol{\rho} = 2Z\mathbf{r}/a_0$.

Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος δίνει $K = \frac{5}{16}$, οπότε η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του He είναι

$$E_0 = -2 \frac{Z^2}{2ma_0^2} + \frac{5Z}{8ma_0^2} = -\frac{1}{ma_0^2} (Z^2 - \frac{5}{8}Z). \quad (16.6)$$

Για $Z = 2$ παίρνουμε $E_0 = -75eV$ ενώ η πειραματική τιμή είναι $E_0 = -79eV$. Φαινομενικά αυτό σημαίνει ένα σφάλμα της τάξης του 5%. Ωστόσο αυτό που είναι σημαντικό για τον προσδιορισμό της ακρίβειας της διαταρακτικής μεθόδου είναι η ενέργεια που αντιστοιχεί στην άπωση των ηλεκτρονίων. Ο διαταρακτικός υπολογισμός τη δίνει $34eV$, ενώ η πειραματική τιμή είναι $30eV$, δηλαδή σφάλμα στο 13%. Το σφάλμα μειώνεται όσο αυξάνει το Z , δεδομένου ότι όσο αυξάνει το Z τόσο ελαττώνεται το σχετικό μέγεθος του διαταρακτικού όρου ως προς το \hat{H}_0 . Για $Z = 6$ έχουμε τον τετραπλά ιονισμένο άνθρακα (C^{4+}), για τον οποίο ο διαταρακτικός υπολογισμός δίνει ενέργεια άπωσης ηλεκτρονίων $102eV$ $E_0 = -877eV$, ενώ η πειραματική τιμή είναι περίπου $97,2eV$, δηλαδή σφάλμα 5%.

Ένθετο 16.1. Υπολογισμός του K της Εξ. (16.5)

Η Εξ. (16.5) περιλαμβάνει ολοκλήρωση ως προς τις σφαιρικές συντεταγμένες $(\rho_1, \theta_1, \phi_1)$ για το $\boldsymbol{\rho}_1$ και ως προς τις σφαιρικές συντεταγμένες $(\rho_2, \theta_2, \phi_2)$ για το $\boldsymbol{\rho}_2$. Μπορούμε να επιλέξουμε το θ_2 να αντιστοιχεί στη γωνία μεταξύ των διανυσμάτων $\boldsymbol{\rho}_1$ και $\boldsymbol{\rho}_2$, οπότε η ολοκλήρωση ως προς θ_1, ϕ_1, ϕ_2 γίνεται άμεσα αφού η ολοκληρώσιμη ποσότητα δεν εξαρτάται από αυτές. Δεδομένου ότι $|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2| = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos \theta_2}$

παίρνουμε

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{64\pi^2} (4\pi)(2\pi) \int_0^\infty d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^\infty d\rho_2 \rho_2^2 e^{-\rho_1 - \rho_2} \int_0^\pi \frac{d\theta_2 \sin \theta_2}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1 \rho_2 \cos \theta_2}} \\ &= \frac{1}{8} \int_0^\infty d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^\infty d\rho_2 \rho_2^2 e^{-\rho_1 - \rho_2} \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1 \rho_2 \xi}}, \end{aligned}$$

όπου θέσαμε $\xi = \cos \theta$.

Χρησιμοποιώντας το αόριστο ολοκλήρωμα $\int \frac{dx}{\sqrt{a-x}} = -2\sqrt{a-x}$, βρίσκουμε ότι

$$\int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1 \rho_2 \xi}} = \frac{1}{\rho_1 \rho_2} (\rho_1 + \rho_2 - |\rho_1 - \rho_2|) = \frac{2}{\rho_1 \rho_2} \min\{\rho_1, \rho_2\}.$$

Αυτό σημαίνει ότι το ολοκλήρωμα στον υπολογισμό του K σπάει σε δύο κομμάτια, ένα για $\rho_1 < \rho_2$ και ένα για $\rho_1 > \rho_2$, αλλά λόγω της συμμετρίας μεταξύ ρ_1 και ρ_2 αυτά είναι ίσα. Οπότε,

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2} \int_0^\infty d\rho_1 \rho_1 e^{-\rho_1} \int_0^{\rho_1} d\rho_2 \rho_2 e^{-\rho_2} = \frac{1}{2} \int_0^\infty d\rho_1 e^{-\rho_1} \rho_1 (2 - 2e^{-\rho_1} - 2\rho_1 e^{-\rho_1} - \rho_1^2 e^{-\rho_1}) \\ &\quad \frac{1}{2} \int_0^\infty d\rho_1 (2\rho_1 e^{-\rho_1} - 2\rho_1 e^{-2\rho_1} - 2\rho_1^2 e^{-2\rho_1} - 2\rho_1^3 e^{-2\rho_1}) = \frac{1}{2} (2 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{3}{8}) = \frac{5}{16}. \end{aligned}$$

16.2.2 Λεπτή υφή του ατόμου του υδρογόνου

Η Χαμιλτονιανή για το άτομο του υδρογόνου $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \alpha \hat{r}^{-1}$ επιδέχεται μεν ακριβείς λύσεις, αλλά από τον ίδιο της τον ορισμό εμπεριέχει προσεγγίσεις. Συγκεκριμένα, το ηλεκτρόνιο περιγράφεται από μη σχετικιστική φυσική. Καθώς το τυπικό μέγεθος του ατόμου είναι της τάξης της ακτίνας του Μπορ a_0 , άρα η τυπική ορμή της τάξης του $1/a_0$, και η τυπική ταχύτητα της τάξης του $(ma_0)^{-1} \sim 10^6 m/s$, δηλαδή της τάξης του 1% της ταχύτητας του φωτός. Αυτό σημαίνει μεν ότι η μη-σχετικιστική προσέγγιση είναι δικαιολογημένη, αλλά τα σχετικιστικά φαινόμενα μπορούν να αντιμετωπιστούν ως διαταραχή.

Οι κυρίαρχες σχετικιστικές διορθώσεις είναι δύο. Καταρχάς υπάρχει μία διόρθωση στην κινητική ενέργεια. Η σχετικιστική έκφραση για την ενέργεια ενός σωματιδίου μάζας m , $= \sqrt{p^2 + m^2} = m\sqrt{1 + (p/m)^2}$, για $p/m \ll 1$ δίνει $E = m + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3} + \dots$. Οπότε η πρώτη σχετικιστική διόρθωση στη Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 είναι ο τελεστής $\hat{V}_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3} = -\frac{1}{2m} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)^2 = -\frac{1}{2m} \left(\hat{H}_0 + \alpha \hat{r}^{-1}\right)^2$. Η αντίστοιχη διόρθωση πρώτης τάξης στην ενέργεια στη βάση $|n, j, m_j, \ell\rangle$ είναι

$$\begin{aligned} \langle n, j, m_j, \ell | \hat{V}_1 | n, j, m_j, \ell \rangle &= -\frac{1}{2m} \langle n, j, m_j, \ell | \hat{H}_0^2 + \alpha \hat{H}_0 \hat{r}^{-1} + \alpha \hat{r}^{-1} \hat{H}_0 + \alpha^2 \hat{r}^{-2} | n, j, m_j, \ell \rangle \\ &= -\frac{1}{2m} \{ [E_n^{(0)}]^2 + 2\alpha E_n^{(0)} \langle \hat{r}^{-1} \rangle + \alpha^2 \langle \hat{r}^{-2} \rangle \}. \end{aligned} \quad (16.1)$$

Στην άσκηση 13.11, δείξαμε ότι για το άτομο του υδρογόνου $\langle \hat{r}^{-1} \rangle = \frac{\alpha m}{n^2}$ και $\langle \hat{r}^{-2} \rangle = \frac{\alpha^2 m^2}{(\ell + \frac{1}{2})n^3}$, οπότε καταλήγουμε ότι

$$\langle n, j, m_j, \ell | \hat{V}_1 | n, j, m_j, \ell \rangle = \frac{\alpha^4 m}{2} \left(\frac{3}{4n^4} - \frac{1}{(\ell + \frac{1}{2})n^3} \right). \quad (16.2)$$

Η δεύτερη σχετικιστική διόρθωση είναι η σύζευξη σπιν-τροχιάς, όπως δίνεται από την Εξ. (14.24). Για ηλεκτρόνιο σε δυναμικό Κουλόμπ, όπου $\phi(r) = -\alpha/r$, η Εξ. (14.24) δίνει όρο διόρθωσης

$$\hat{V}_2 = \frac{\alpha}{2m^2} \hat{r}^{-3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}. \quad (16.3)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (11.108) βρίσκουμε ότι

$$\langle n, j, m_j, \ell | \hat{V}_2 | n, j, m_j, \ell \rangle = \frac{\alpha}{4m^2} \langle \hat{r}^{-3} \rangle \left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right). \quad (16.4)$$

Στην άσκηση 13.12, δείξαμε ότι $\langle \hat{r}^{-3} \rangle = \frac{\alpha^3 m^3}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)}$, οπότε

$$\langle n, j, m_j, \ell | \hat{V}_2 | n, j, m_j, \ell \rangle = \frac{\alpha^4 m}{4} \frac{(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4})}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} r. \quad (16.5)$$

Οι δυνατές τιμές του j είναι $\ell \pm \frac{1}{2}$. Για $j = \ell + \frac{1}{2}$, $j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} = j - \frac{1}{2}$, οπότε $\langle \hat{V}_2 \rangle = \frac{\alpha^4 m}{4j(j + \frac{1}{2})}$. Για $j = \ell - \frac{1}{2}$, $j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} = -(j + \frac{3}{2})$, οπότε $\langle \hat{V}_2 \rangle = -\frac{\alpha^4 m}{4(j + \frac{1}{2})(j+1)}$. Και στις δύο περιπτώσεις, αν προσθέσουμε τη συνεισφορά από τα \hat{V}_1 και τα \hat{V}_2 βρίσκουμε ότι η διόρθωση πρώτης τάξης λόγω σχετικιστικών φαινομένων εξαρτάται μόνο από το n και το j , και δίνεται από τον τύπο του Σόμερφελντ (Sommerfeld)

$$E_{n,j}^{(1)} = \frac{\alpha^4 m}{2n^4} \left(\frac{3}{4n} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right). \quad (16.6)$$

Καταστάσεις με το ίδιο j αλλά διαφορετικό m_j και ℓ έχουν την ίδια ενέργεια. Δηλαδή ο εκφυλισμός g είναι $2m_j + 1$ επί 2 (για $\ell = j \pm \frac{1}{2}$, δηλαδή $g = 2(2m_j + 1)$).

Βλέπουμε λοιπόν ότι τα σχετικιστικά φαινόμενα σπάνε μερικώς τον εκφυλισμό της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου, εφόσον η διόρθωση πρώτης τάξης εξαρτάται από το j . Οι διορθώσεις αυτές αντιστοιχούν στη λεγόμενη *λεπτή υφή* του ατόμου του υδρογόνου. Ο λόγος $E_{n,j}^{(1)}/E_n^{(0)}$ είναι της τάξης του α^2 , οπότε η ενέργεια λόγω λεπτής υφής αντιστοιχεί περίπου στο $1 : 10^4$ των ενεργειών του αδιατάρακτου φάσματος.

16.2.3 Επίδραση ασθενούς ηλεκτρικού πεδίου

Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα που αποτελείται από N σωματίδια φορτίων q_i και μαζών m_i , όπου $i = 1, 2, \dots, N$. Η Χαμιλτονιανή του, έστω \hat{H}_0 έχει ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$ και ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$. Θέτουμε το σύστημα εντός ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E} . Η Χαμιλτονιανή γίνεται

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_i q_i \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{r}}_i, \quad (16.7)$$

όπου $\hat{\mathbf{r}}_i$ ο τελεστής θέσης του i σωματιδίου. Για ασθενές μαγνητικό πεδίο, η πρώτη διόρθωση στη ενεργειακή στάθμη είναι

$$E_n^{(1)} = - \sum_i q_i \mathbf{E} \cdot \langle n | \mathbf{r}_i | n \rangle. \quad (16.8)$$

Δεδομένου ότι σε ένα ηλεκτρικό δίπολο η ενέργεια λόγω αλληλεπίδρασης με το ηλεκτρικό πεδίο είναι ίση με $-\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}$, προσδιορίζουμε την ηλεκτρική διπολική ροπή του συστήματος \mathbf{d}_n στην κατάσταση $|n\rangle$ ως

$$\mathbf{d}_n = \sum_i q_i \langle n | \mathbf{r}_i | n \rangle. \quad (16.9)$$

Η ηλεκτρική διπολική ροπή ενός ευσταθούς συστήματος ορίζεται συνήθως ως προς τη θεμελιώδη κατάσταση του ($n = 0$).

Η μετατόπιση των ενεργειακών επιπέδων σύμφωνα με την Εξ. (16.8) όταν το σύστημα τοποθετείται σε ένα ηλεκτρικό πεδίο καλείται *φαινόμενο Σταρκ* (Stark). Όπως είδαμε, σε περίπτωση που η αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 χαρακτηρίζεται από εκφυλισμό, οι καταστάσεις $|n\rangle$ στην Εξ. (16.8) επιλέγονται έτσι ώστε να διαγωνοποιείται ο πίνακας V_{kn} στον αντίστοιχο ιδιόχωρο. Σ' αυτήν την περίπτωση υπάρχει συνήθως άρση του εκφυλισμού.

Παράδειγμα 16.1. Εξετάζουμε το φαινόμενο Σταρκ στο άτομο του υδρογόνου. Δεδομένου ότι το ηλεκτρικό πεδίο δεν επηρεάζει το σπιν, εξετάζουμε μόνο τους τροχιακούς βαθμούς ελευθερίας, άρα αρκεί να εξετάσουμε τη βάση $|n, \ell, m_\ell\rangle$. Δεδομένου ότι ο πυρήνας είναι πρακτικά σημειακός σε σχέση με το άτομο, η διπολική του ροπή είναι αμελητέα, άρα εξετάζουμε μόνο τα ηλεκτρόνια.

Παρατηρούμε ότι

$$E_{n,\ell,m_\ell}^{(1)} = e\mathbf{E} \cdot \langle n, \ell, m_\ell | \hat{\mathbf{r}} | n, \ell, m_\ell \rangle = e\mathbf{E} \cdot \left(\int d^3r |\langle \mathbf{r} | n, \ell, m_\ell \rangle|^2 \mathbf{r} \right) = 0, \quad (16.10)$$

δεδομένου ότι η συνάρτηση $\langle \mathbf{r} | n, \ell, m_\ell \rangle$ έχει σαφή αρτιότητα, οπότε η $|\langle \mathbf{r} | n, \ell, m_\ell \rangle|^2$ είναι άρτια, και το στην Εξ. (16.10) εμφανίζεται ολοκλήρωμα περιττής συνάρτησης που μηδενίζεται.

Στη συνέχεια, θα αποδείξουμε μία χρήσιμη ταυτότητα για γενικά στοιχεία πίνακα του τελεστή της διαταραχής. Γράφουμε $\mathbf{E} = (0, 0, \mathcal{E})$, οπότε τα ζητούμε στοιχεία πίνακα είναι ανάλογα του $\langle n, \ell', m'_\ell | \hat{x}_3 | n, \ell, m_\ell \rangle$. Δεδομένου ότι $[\hat{x}_3, \hat{\ell}_3] = 0$, ισχύει ότι

$$\langle n, \ell', m'_\ell | \hat{x}_3 \hat{\ell}_3 - \hat{\ell}_3 \hat{x}_3 | n, \ell, m_\ell \rangle = (m_\ell - m'_\ell) \langle n, \ell', m'_\ell | \hat{x}_3 | n, \ell, m_\ell \rangle = 0. \quad (16.11)$$

Δηλαδή όλα τα στοιχεία πίνακα της διαταραχής με διαφορετικό m_ℓ μηδενίζονται.

Για $n = 1$, η Εξ. (16.10) δίνει ότι $E_{1,0,0} = 0$. Για $n = 2$, έχουμε τετραπλό εκφυλισμό που αντιστοιχεί στα ιδιοδιανύσματα $|2, 0, 0\rangle, |2, 1, -1\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 1, 1\rangle$. Από όλα τα στοιχεία πίνακα της διαταραχής σ' αυτόν τον ιδιόχωρο τα μόνα που δε μηδενίζονται είναι αυτά μεταξύ $|2, 0, 0\rangle$ και $|2, 1, 0\rangle$.

Αυτό σημαίνει ότι τα ιδιοδιανύσματα $|2, 0, \pm 1\rangle$ μένουν ανεπηρέαστα από τη διαταραχή, ενώ στον υπόχωρο που ορίζουν τα διανύσματα $|2, 0, 0\rangle$ και $|2, 1, 0\rangle$ η διαταραχή αντιστοιχεί σε πίνακα $\gamma \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, όπου

$$\gamma = e\mathcal{E} \langle 2, 0, 0 | \hat{x}_3 | 2, 1, 0 \rangle. \quad (16.12)$$

Τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα είναι το $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle)$ με ιδιοτιμή γ και το $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle)$ με ιδιοτιμή $-\gamma$. Οπότε καταλήγουμε ότι ο τετραδιάστατος ιδιόχωρος της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου με $n = 2$, σπάει σε

- έναν δισδιάστατο ιδιόχωρο που ορίζεται από τα διανύσματα $|2, 1, -1\rangle$ και $|2, 1, 1\rangle$, με ενέργεια $E_2^{(0)}$.
- το ιδιοδιάνυσμα $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle)$ με ενέργεια $E_2^{(0)} + \gamma$
- το ιδιοδιάνυσμα $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle)$ με ενέργεια $E_2^{(0)} - \gamma$

Το μόνο που απομένει είναι ο υπολογισμός του γ . Διαβάζουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $|n, \ell, m_\ell\rangle$ από τον πίνακα 3.1 και γράφουμε $x_3 = r \cos \theta$ στην Εξ. (16.12), οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{e\mathcal{E}}{32\pi a_0^4} \left(\int_0^{2\pi} d\phi \right) \left(\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta \right) \left(\int_0^\infty r^4 (2 - r/a_0) e^{-r/a_0} \right) \\ &= \frac{e\mathcal{E}}{32\pi a_0^4} (2\pi) \left(\frac{2}{3} \right) (-72a_0^5) = -3e\mathcal{E}a_0. \end{aligned} \quad (16.12)$$

16.2.4 Επίδραση ασθενούς μαγνητικού πεδίου

Αν θέσουμε το ίδιο σύστημα που εξετάσαμε στην προηγούμενη ενότητα σε ασθενές ομογενές μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} , η Χαμιλτονιανή (14.8) αντιστοιχεί στην πρόσθεση ενός όρου $-\sum_i \frac{q_i}{2m_i} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L}_i + g_i \mathbf{S}_i)$ στη Χαμιλτονιανή. Υπάρχει και ένας όρος τετραγωνικός ως προς το \mathbf{B} αλλά είναι αμελητέος στο όριο ασθενούς πεδίου και εφόσον περιοριζόμαστε στη διαταρακτική διόρθωση πρώτης τάξης στην ενέργεια. Βρίσκουμε ότι

$$E_n^{(1)} = - \sum_i \frac{q_i}{2m_i} \mathbf{B} \cdot \langle n | \mathbf{L}_i + g_i \mathbf{S}_i | n \rangle. \quad (16.13)$$

Σε μαγνητικό δίπολο, η ενέργεια λόγω αλληλεπίδρασης με το μαγνητικό πεδίο είναι ίση με $-\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}$, υπολογίζουμε τη μαγνητική ροπή $\boldsymbol{\mu}_n$ στην κατάσταση $|n\rangle$ ως

$$\boldsymbol{\mu}_n = \sum_i \frac{q_i}{2m_i} \langle n | \mathbf{L}_i + g_i \mathbf{S}_i | n \rangle. \quad (16.14)$$

Η μαγνητική ροπή ενός ευσταθούς συστήματος ορίζεται συνήθως ως προς τη θεμελιώδη κατάσταση του ($n = 0$).

Στο άτομο του υδρογόνου, με δεδομένο ότι ο πυρήνας είναι πολύ πιο βαρύτερος από το ηλεκτρόνιο, κυριαρχεί μόνο ο όρος που αφορά το ηλεκτρόνιο στην Εξ. (16.13). Για $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ο όρος αλληλεπίδρασης είναι $\frac{e}{2m} (\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3)$, όπου θέσαμε $g_e = 2$. Τα ιδιοδιανύσματα $|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$ του αδιατάρακτου συστήματος είναι επίσης ιδιοδιανύσματα του όρου διαταραχής. Άρα παρότι έχουμε διαταραχή εκφυλισμένου φάσματος, το πρόβλημα γίνεται πολύ απλό, αφού ο όρος διαταραχής είναι ήδη διαγώνιος στη βάση $|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$. Βρίσκουμε ότι

$$E_{n,\ell,m_\ell,m_s}^{(1)} = \frac{eB}{2m} \langle n, \ell, m_\ell, m_s | \hat{L}_3 + 2\hat{S}_3 | n, \ell, m_\ell, m_s \rangle = \frac{eB}{2m} (m_\ell + 2m_s). \quad (16.15)$$

Δηλαδή έχουμε μερική άρση του εκφυλισμού λόγω περιστροφής, λόγω της παρουσίας του μαγνητικού πεδίου, κάτι που είναι γνωστό ως *φαινόμενο Ζέεμαν* (Zeeman).

16.3 Μέθοδος των μεταβολών

16.3.1 Βασική ιδέα

Έστω μια Χαμιλτονιανή \hat{H} σε ένα χώρο Χίλμπερτ \mathcal{H} με ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης ίση με E_0 και αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα $|0\rangle$. Η μέθοδος των μεταβολών βασίζεται στη στοιχειώδη παρατήρηση, ότι για οποιοδήποτε κανονικοποιημένη $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ισχύει

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0. \quad (16.16)$$

Θεωρούμε ένα υποσύνολο (δεν είναι απαραίτητο να είναι υπόχωρος) του \mathcal{H} που αποτελείται από κανονικοποιημένα διανύσματα $|\psi(b)\rangle$, όπου το b παίρνει τιμές σε κάποιο σύνολο S . Γράφουμε $E(b) = \langle \psi(b) | \hat{H} | \psi(b) \rangle$. Έστω b_{min} η τιμή του b που ελαχιστοποιεί την $E(b)$, δηλαδή $\frac{\partial}{\partial b} E(b_{min}) = 0$. Ορίζουμε $|b_{min}\rangle = |\psi(b_{min})\rangle$ και $E_{min} = E(b_{min})$. Προφανώς, η Εξ. (16.16) σημαίνει ότι

$$E_{min} \geq E_0, \quad (16.17)$$

Δεδομένου ότι οι ποσότητες $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ είναι συνεχείς συναρτήσεις των $|\psi\rangle$, αν κάνουμε μια καλή επιλογή των $|\psi(b)\rangle$, το E_{min} μπορεί να προσεγγίσει το E_0 με εξαιρετική ακρίβεια. Μάλιστα, το σχετικό

σφάλμα στην ενέργεια είναι μικρότερο ως τάξη μεγέθους από το σχετικό σφάλμα στα διανύσματα. Για να το επιβεβαιώσουμε, έστω $|b_{min}\rangle = |0\rangle + \epsilon|\chi\rangle$, για κάποιο κανονικοποιημένο διάνυσμα $|\chi\rangle$, όπου $\epsilon \ll 1$. Εφόσον, $\langle b_{min}|b_{min}\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$ ισχύει ότι

$$\epsilon\langle\chi|0\rangle + \epsilon\langle 0|\chi\rangle + \epsilon^2 = 0 \quad (16.18)$$

Από την άλλη,

$$\begin{aligned} E_{min} &= \langle b_{min}|\hat{H}|b_{min}\rangle = \langle 0|\hat{H}|0\rangle + \epsilon\langle\chi|\hat{H}|0\rangle + \epsilon\langle 0|\hat{H}|\chi\rangle + \epsilon^2\langle\chi|\hat{H}|\chi\rangle \\ &= E_0(1 + \epsilon\langle\chi|0\rangle + \epsilon\langle 0|\chi\rangle) + \epsilon^2\langle\chi|\hat{H}|\chi\rangle. \end{aligned} \quad (16.18)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (16.18), βρίσκουμε ότι $|E_{min} - E_0| = \epsilon^2|\langle\chi|\hat{H}|\chi\rangle - E_0|$. Δηλαδή ενώ το σφάλμα στο $|b_{min}\rangle$ είναι πρώτης τάξης ως προς το ϵ , το σφάλμα ως προς την ενέργεια είναι δεύτερης τάξης.

Αν κάνουμε εύστοχη επιλογή των συναρτήσεων $|\psi(b)\rangle$, αντικαθιστούμε το πρόβλημα της διαγωνιοποίησης της Χαμιλτονιανής σε έναν απειροδιάστατο χώρο Χίλμπερτ με τον πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης που ορίζεται στο σύνολο S , κάτι που είναι πολύ πιο εύκολο υπολογιστικά. Βεβαίως ισχύει και το αντίστροφο. Αν η επιλογή των συναρτήσεων $|\psi(b)\rangle$ δεν είναι καλή, γιατί δεν προσομοιώνουν επαρκώς την πραγματική θεμελιώδη κατάσταση, τότε η εκτίμηση της ενέργειας μπορεί να είναι ολοκληρωτικά λάθος.

Με τη μέθοδο των μεταβολών μπορούμε να υπολογίσουμε και την ενέργεια διεγερμένων καταστάσεων. Αν $|0\rangle$ είναι η θεμελιώδης κατάσταση, τότε η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας της Χαμιλτονιανής $\hat{H} - E_0|0\rangle\langle 0|$ ταυτίζεται με την πρώτη διεγερμένη κατάσταση της \hat{H} . Δεδομένου ότι εμείς έχουμε προσεγγίσει το ιδιοδιάνυσμα $|0\rangle$ με το $|b_{min}\rangle$ και το E_0 με το E_{min} , γράφουμε τη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}' \simeq \hat{H} - E_{min}|b_{min}\rangle\langle b_{min}|. \quad (16.19)$$

Στη συνέχεια, εφαρμόζουμε θεωρία μεταβολών για άλλη οικογένεια συναρτήσεων προκειμένου να προσεγγίσουμε την κατάσταση ελάχιστης ενέργειας που αντιστοιχεί στην \hat{H}' , και άρα στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση της \hat{H} . Μπορούμε να συνεχίσουμε αυτή τη διαδικασία επ' αορίστω. Ωστόσο η \hat{H}' εμπεριέχει ήδη το σφάλμα του υπολογισμού της θεμελιώδους, οπότε το σφάλμα στον υπολογισμό της διεγερμένης θα είναι μεγαλύτερο. Έτσι το σφάλμα αυξάνει για κάθε ενεργειακό επίπεδο. Γι' αυτό το λόγο, με τη θεωρία μεταβολών περιοριζόμαστε μόνο στον υπολογισμό των λίγων πρώτων ενεργειακών επιπέδων ενός συστήματος.

16.3.2 Εφαρμογή στο άτομο He

Επιστρέφουμε στο άτομο He που εξετάσαμε νωρίτερα διαταρακτικά. Δεδομένου ότι στη θεμελιώδη κατάσταση το ολικό spin των δύο ηλεκτρονίων είναι μηδέν, η κυματοσυνάρτηση ως προς το χώρο είναι συμμετρική, αφού η αντισυμμετρικότητα οφείλεται στα spin. Επιλέγουμε διαχωρίσιμη κυματοσυνάρτηση ως προς τη θέση της μορφής $|\psi_b\rangle \otimes |\psi_b\rangle$, όπου

$$\langle \mathbf{r}|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(b/a_0)^{3/2}e^{-br/a_0} \quad (16.20)$$

είναι ουσιαστικά η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης του ατόμου του υδρογονοειδούς ατόμου, αλλά για ατομικό αριθμό ίσο με b . Αν γράψουμε $\hat{h}_Z = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - Z\alpha\hat{r}^{-1}$, τότε η $|\psi_b\rangle$ ικανοποιεί

την Εξ.

$$\hat{h}_b|\psi_b\rangle = -\frac{b^2}{2ma_0^2}|\psi_b\rangle. \quad (16.21)$$

Δεδομένου ότι $\hat{h}_Z - \hat{h}_b = -(Z - b)\alpha\hat{r}^{-1}$, ισχύει ότι $\langle\psi_b|\hat{h}_Z|\psi_b\rangle = -\frac{b^2}{2ma_0^2} - (Z - b)\alpha\langle\psi_b|\hat{r}^{-1}|\psi_b\rangle$.
Βρίσκουμε

$$\langle\psi_b|\hat{r}^{-1}|\psi_b\rangle = (b/a_0)^3 4 \int_0^\infty dr r e^{-2br/a_0} = b/a_0, \quad (16.22)$$

οπότε $\langle\psi_b|\hat{h}_Z|\psi_b\rangle = -\frac{b^2}{2ma_0^2} - \frac{(Z-b)b}{ma_0^2}$.

Η Χαμιλτονιανή του ατόμου He είναι $\hat{H} = \hat{h}_Z \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{h}_Z + \hat{V}$, όπου το \hat{V} δίνεται από την Εξ. (16.3). Η Εξ. (16.4) σημαίνει ότι $\langle\psi_b, \psi_b|\hat{V}|\psi_b, \psi_b\rangle = \frac{5b}{8ma_0^2}$ οπότε

$$E(b) := \langle\psi_b, \psi_b|\hat{H}|\psi_b, \psi_b\rangle = -\frac{1}{ma_0^2}\left(-b^2 + 2Zb - \frac{5b}{8}\right). \quad (16.23)$$

Το ελάχιστο του $E(b)$ βρίσκεται για $b_{min} = Z - \frac{5}{16}$ και είναι ίσο με

$$E(b_{min}) = -\frac{1}{ma_0^2}\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2. \quad (16.24)$$

Για $Z = 2$ παίρνουμε μία εκτίμηση για την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του He ίση με $-\frac{36}{2^8 ma_0^2}$, δηλαδή $-77,4 eV$ που αντιστοιχεί σε απόκλιση περίπου 2% από την πραγματική τιμή των $79 eV$. Η ακρίβεια στον υπολογισμό του όρου της άπωσης είναι 8,5%. Δηλαδή έχουμε σημαντική βελτίωση σε σύγκριση με το διαταρακτικό υπολογισμό, έχοντας χρησιμοποιήσει μόλις μία ελεύθερη μεταβλητή b .

16.3.3 Η μέθοδος Ρέιλι-Ριτζ

Πολύ συχνά χρησιμοποιούνται ως συναρτήσεις $|\psi(b)\rangle$ γραμμικοί συνδυασμοί των διανυσμάτων ενός πεπερασμένου ορθοκανονικού συνόλου $|n\rangle$, όπου $n = 1, 2, \dots, N$. Δηλαδή,

$$|\psi(b)\rangle = \sum_{n=1}^N b_n |n\rangle \quad (16.25)$$

και οι ελεύθερες μεταβλητές είναι N μιγαδικοί αριθμοί b_n , οι οποίοι ικανοποιούν

$$\sum_{n=1}^N |b_n|^2 = 1. \quad (16.26)$$

Δηλαδή οι συναρτήσεις $|\psi(b)\rangle$ ορίζουν έναν υπόχωρο με αντίστοιχο προβολικό τελεστή $\hat{P} = \sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n|$ και εμείς αναζητούμε ποιο διάνυσμα του υπόχωρου προσεγγίζει καλύτερα τη θεμελιώδη κατάσταση.

Αμέσως υπολογίζουμε ότι

$$E(b) = \langle\psi(b)|\hat{H}|\psi(b)\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N b_m^* b_n H_{mn}, \quad (16.27)$$

όπου $H_{mn} = \langle m | \hat{H} | n \rangle$. Ελαχιστοποιούμε την $E(b)$ με δεδομένο ότι ισχύει η Εξ. (16.26). Χρησιμοποιούμε τη μέθοδο των πολλαπλασιαστών Λαγκράνζ και ελαχιστοποιούμε την ποσότητα

$$E(b) - \lambda \left(\sum_{n=1}^N |b_n|^2 - 1 \right) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N b_m^* b_n (H_{mn} - \lambda \delta_{mn}) + \lambda, \quad (16.28)$$

ως προς b_n και b_n^* . (Δεδομένου ότι τα b_n είναι μιγαδικοί αριθμοί, κάθε ένα αντιστοιχεί σε δύο ανεξάρτητες μεταβλητές.) Η ποσότητα λ είναι ο πολλαπλασιαστής Λαγκράνζ.

Η παραγωγή ως προς b_m^* δίνει

$$\sum_{n=1}^N H_{mn} b_n = \lambda b_m, \quad (16.29)$$

δηλαδή τα b_n ορίζουν ιδιοδιάνυσμα του πίνακα $N \times N$ H_{mn} .

Κατ' αυτόν τον τρόπο, πήραμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ προβεβλημένη στο N -διάστατο υπόχωρο που ορίζουν τα διανύσματα $|n\rangle$. Ουσιαστικά αντικαθιστούμε τον τελεστή \hat{H} με τον τελεστή $\hat{P}\hat{H}\hat{P}$.

Καταλήγουμε ότι η απαίτηση ελαχιστοποίησης του $E(b)$ μας λέει ότι η καλύτερη προσέγγιση στην ενέργεια της θεμελιώδους αντιστοιχεί στη μικρότερη ιδιοτιμή του πίνακα $N \times N$ H_{mn} . Βεβαίως με τη διαδικασία που περιγράψαμε νωρίτερα, μπορούμε να θεωρήσουμε και τις υψηλότερες ιδιοτιμές του H_{mn} ως αντιστοιχούντες σε υψηλότερες ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής, αλλά το σφάλμα αυξάνει όσο υψηλότερες ιδιοτιμές θεωρούμε. Αυτή η παραλλαγή της μεθόδου των μεταβολών καλείται μέθοδος Ρέιλι-Ριτζ (Rayleigh-Ritz).

16.4 Προσέγγιση μέσου πεδίου

Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη προσέγγιση για την εύρεση των ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής σε συστήματα πολλών σωματιδίων είναι η *προσέγγιση μέσου πεδίου*. Η βασική της ιδέα είναι η θεώρηση ότι ένα σωματίδιο κινείται μέσα σε ένα μέσο πεδίο που γεννούν όλα τα υπόλοιπα σωματίδια. Αυτή η προσέγγιση παρέχει τεράστια υπολογιστική διευκόλυνση, γιατί όπως θα δούμε, μετατρέπει το πρόβλημα της αλληλεπίδρασης N σωμάτων σε ένα πρόβλημα πιο πολύπλοκης αλληλεπίδρασης ενός σώματος.

Η αξία της έγκειται στο ότι μπορεί να υλοποιηθεί με πολλούς διαφορετικούς τρόπους και να αποτελέσει τη βάση πολλών διαφορετικών μεθόδων υπολογισμού, οι οποίοι συχνά δίνουν ικανοποιητική ακρίβεια. Ωστόσο οι προσεγγίσεις μέσου πεδίου χάνουν σημαντική πληροφορία από το σύστημα, αυτή που αφορά τις στατιστικές συζεύξεις και τον εναγκαλισμό μεταξύ των σωματιδίων. Συχνά χρησιμοποιείται ως πρώτη προσέγγιση ενός προβλήματος και η ακριβέστερη περιγραφή γίνεται προσθέτοντας επιπλέον όρους μέσω της θεωρίας διαταραχών.

Θα εξετάσουμε τρεις βασικές υλοποιήσεις της προσέγγισης μέσου πεδίου που χρησιμοποιούνται σε ατομικά (και μοριακά) συστήματα. Πρώτα θα εξετάσουμε την ειδική περίπτωση που το μέσο πεδίο είναι σφαιρικά συμμετρικό, η οποία οδηγεί στην ιδιαίτερα πετυχημένη θεωρία των ατομικών τροχιακών. Στη συνέχεια θα δούμε τη θεωρία Χάρτρι (Hartree)-Φοκ (Fock), η οποία προσφέρει μία μαθηματικά πιο ακριβή υλοποίηση της θεωρίας μέσου πεδίου, και μπορεί να θεωρηθεί ως ειδική περίπτωση της θεωρίας μεταβολών. Στο επόμενο κεφάλαιο, θα παρουσιάσουμε τη θεωρία Τόμας-Φέρμι, η οποία είναι ένα μίγμα θεωρίας πεδίου και άλλων προσεγγίσεων.

16.4.1 Η θεωρία τροχιακών

Έστω ένα άτομο με ατομικό αριθμό Z . Θεωρούμε τον πυρήνα στατικό και σημειακό, στο κέντρο των αξόνων. Στην προσέγγιση μέσου πεδίου, σε κάθε ηλεκτρόνιο αντιστοιχεί μία Χαμιλτονιανή

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{r}), \quad (16.30)$$

όπου το κεντρικό δυναμικό $V(r)$ συμπεριλαμβάνει την έλξη του πυρήνα και μια "μέση" άπωση από τα υπόλοιπα $Z - 1$ ηλεκτρόνια. Το δυναμικό $V(r)$ διαφέρει από άτομο σε άτομο, αφού ο αριθμός των ηλεκτρονίων αλλάζει.

Η θεώρηση ενός κεντρικού δυναμικού στην Εξ. (16.30) είναι μία επιπλέον προσέγγιση, πέρα της προσέγγισης μέσου πεδίου που εξηγήσαμε πριν. Καλείται προσέγγιση *κεντρικού πεδίου* και εφαρμόζεται ειδικά σε άτομα. Θεωρούμε ότι το άτομο είναι κατά καλή προσέγγιση ένα σφαιρικά συμμετρικό σύστημα εφόσον αποτελείται από έναν και μοναδικό βαρύ πυρήνα που ορίζει ένα κέντρο.

Για μεγάλες τιμές του r , το δυναμικό είναι $-\frac{\alpha}{r}$, δεδομένου ότι ιδωμένα από απόσταση, τα υπόλοιπα $(Z - 1)$ ηλεκτρόνια και ο πυρήνας συμπεριφέρονται ως ένα ιόν φορτίου $+e$. Για μικρές τιμές του r , το υπό εξέταση ηλεκτρόνιο είναι πιο κοντά στον πυρήνα από τα υπόλοιπα οπότε "βλέπει" μόνο το δυναμικό Κουλόμπ του πυρήνα $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$. Οπότε το δυναμικό γράφεται ως $V(r) = -\frac{\alpha}{r}\chi(r)$, όπου $\chi(r)$ μία συνάρτηση που ικανοποιεί $\chi(0) = Z$ και $\chi(\infty) = 1$.

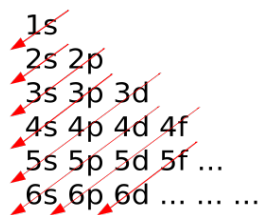
Με την προσέγγιση μέσου πεδίου, έχουμε αντικαταστήσει το σύστημα Z αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων μέσω δυνάμεων Κουλόμπ, με ένα σύστημα μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων κάτω από ένα κοινό δυναμικό, δηλαδή ένα σύστημα του ίδιου τύπου με αυτά που εξετάσαμε στο Κεφ. 15.2. Συμβολίζουμε ως $|a\rangle$ τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή (16.30) και ως ϵ_a τις αντίστοιχες ιδιοτιμές, όπου ο δείκτης a είναι συλλογικός δείκτης που εμπεριέχει τους κβαντικούς αριθμούς (n, ℓ, m_ℓ, m_s) ενός ηλεκτρονίου μέσα σε κεντρικό δυναμικό.

Δεδομένο ότι το άτομο ταυτίζεται με ένα σύστημα των Z μη-αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων, η θεμελιώδης του κατάσταση προσδιορίζεται από τις Z μικρότερες ιδιοτιμές της ενέργειας και τα ιδιοδιανύσματα τους $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_Z\rangle$. Τα τελευταία συνδυάζονται σε ένα πλήρως αντισυμμετρικό καταστατικό διάνυσμα $|a_1, a_2, \dots, a_Z\rangle_A$, σύμφωνα με την Εξ. (15.9). Στην αναπαράσταση Σρέντινγκερ, χρησιμοποιούμε κυματοσυναρτήσεις που κατασκευάζονται μέσω της ορίζουσας Σλέιτερ

$$\psi_{a_1, a_2, \dots, a_Z}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{a_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{a_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{a_2}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{a_2}(\mathbf{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{a_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{a_N}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{a_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (16.31)$$

Για σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό $V(r)$ ξέρουμε ότι οι ιδιοτιμές $\epsilon_{n,\ell}$ της Χαμιλτονιανής εξαρτώνται μόνο από το n και το ℓ , και χαρακτηρίζονται από εκφυλισμό ίσο με $2(2\ell + 1)$. (Θυμίζουμε ότι ο επιπλέον παράγοντας 2 οφείλεται στο σπιν.) Στη γλώσσα της ατομικής φυσικής, οι ιδιόχωροι της Χαμιλτονιανής (16.30) χαρακτηρίζονται ως "φλοιοί" του ατόμου. Αν στη θεμελιώδη κατάσταση, υπάρχει ένα ηλεκτρόνιο σε κάθε μία από τις $2(2\ell + 1)$ καταστάσεις ενός φλοιοού, λέμε ότι ο φλοιοός είναι συμπληρωμένος. Οπότε η κατασκευή της θεμελιώδους κατάστασης του ατόμου στην προσέγγιση μέσου πεδίου χρησιμοποιεί την εικόνα της συμπλήρωσης φλοιών: τοποθετούμε ηλεκτρόνια γεμίζοντας πρώτα τους φλοιοούς χαμηλότερης ενέργειας και μετά αυτούς της υψηλότερης, μέχρι να συμπληρωθεί ο αριθμός Z των ηλεκτρονίων που είναι διαθέσιμοι. Αυτή η περιγραφή του ατόμου καλείται περιγραφή *τροχιακών*.

Το ερώτημα που τίθεται είναι ποια είναι η διάταξη των ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής $\epsilon_{n,\ell}$, δηλαδή ποιοι φλοιοί συμπληρώνονται πρώτοι. Είδαμε στο Κεφ. 13.3.2 ότι δεν υπάρχει πλήρης διάταξη των ιδιοτιμών $\epsilon_{n,\ell}$ που να ισχύει για κάθε δυναμικό. Ειδικότερα, το ποια από τις ιδιοτιμές $\epsilon_{n,\ell+1}$ και $\epsilon_{n+1,\ell}$ είναι μικρότερη εξαρτάται από το δυναμικό.



Σχήμα 16.1: Κανόνας απομνημόνευσης της αρχής δόμησης των ατόμων.

Τα δεδομένα της φασματοσκοπίας μας υποδεικνύουν ποια είναι η σωστή διάταξη των ιδιοτιμών. Για να τα παρουσιάσουμε, χρησιμοποιούμε το φασματοσκοπικό συμβολισμό, όπου οι διαφορετικές τιμές του ℓ χαρακτηρίζονται από γράμματα σύμφωνα με τον ακόλουθο πίνακα.

σύμβολο	s	p	d	f	g	h
ℓ	0	1	2	3	4	5
$2(2\ell + 1)$	2	6	10	14	18	22

Τα φασματοσκοπικά δεδομένα δίνουν την ακόλουθη σειρά συμπλήρωσης των φλοιών,

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, (4s, 3d), 4p, (5s, 4d), 5p, (6s, 4f, 5d), 6p, (7s, 5f, 6d), \dots \quad (16.32)$$

Οι παρενθέσεις περιέχουν φλοιούς των οποίων η ενέργεια είναι τόσο κοντά, ώστε η διάταξή τους αλλάζει από άτομο σε άτομο.

Καλούμε *εξώτατη στιβάδα* το σύνολο των φλοιών σε ένα άτομο που αντιστοιχούν στη μέγιστη τιμή του κβαντικού αριθμού n . Παρατηρούμε ότι για δεδομένο n πρώτα συμπληρώνονται οι s και p φλοιοί του και μετά αρχίζουν να συμπληρώνονται φλοιοί που αντιστοιχούν στην αμέσως επόμενη τιμή, $n + 1$. Δηλαδή η εξώτατη στιβάδα ενός ατόμου περιέχει μόνο s και p φλοιούς, δηλαδή το πολύ να περιέχει $2 + 6 = 8$ ηλεκτρόνια. Σε μεγάλο βαθμό τα ηλεκτρόνια της εξώτατης στιβάδας του ατόμου είναι υπεύθυνα για τη χημική του συμπεριφορά και η περιοδικότητα στις χημικές ιδιότητες των στοιχείων αντανακλά την περιοδικότητα που χαρακτηρίζει τη διαδικασία συμπλήρωσης των φλοιών.

Η σειρά συμπλήρωσης (16.32) χωρίς τις παρενθέσεις

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, \dots \quad (16.33)$$

είναι η πιο συνηθισμένη σε άτομα και έχει έναν εύκολο κανόνα μνημονικής απομνημόνευσης, όπως φαίνεται στο Σχ. 16.1. Αυθαίρετα έχει επικρατήσει να θεωρείται αυτή τη σειρά ως *αρχή δόμησης* των ατόμων (Aufbau principle), και όσες περιπτώσεις δεν ταιριάζουν μ' αυτήν (περίπου το 20% των ατόμων) να αναφέρονται ως εξαιρέσεις του κανόνα. Οι εξαιρέσεις της αρχής δόμησης δίνονται στον πίνακα 16.1. Για να βρει κανείς την ηλεκτρονιακή δομή ενός ατόμου σύμφωνα με την αρχή δόμησης, ξεκινάει να γεμίζει φλοιούς μέχρι να φτάσει στον αριθμό Z των ηλεκτρονίων που χαρακτηρίζει ένα άτομο.

Παράδειγμα 16.2. Στον Ag ($Z = 47$) καταλαμβάνονται κατά σειρά, η $1s$ με 2, η $2s$ με 2, η $2p$ με 6, η $3s$ με 2, η $3p$ με 6, η $4s$ με 2, η $3d$ με 10, η $4p$ με 6, η $5s$ με δύο. Έτσι έχουμε φτάσει τα 38, και μένουν άλλα 9 τα οποία πάνε στην $4d$. Γράφουμε την ηλεκτρονιακή δομή του ατόμου Ag σε συντομογραφία ως $1s^2 2s^2 2p^6, 2s^2, 3p^6, 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^9$, όπου ο αριθμός των ηλεκτρονίων σε κάθε φλοιό γράφεται ως εκθέτης.

Τυχαίνει όμως και το άτομο Ag είναι μία από τις εξαιρέσεις του κανόνα δόμησης, οπότε η ηλεκτρονιακή δομή που δείξαμε δεν είναι σωστή. τα ηλεκτρόνια στις δύο εξώτερες στιβάδες είναι $\dots 5s^1 4d^{10}$ αντί για $\dots 5s^2 4d^9$.

Z	άτομο	κανόνας δόμησης	πραγματικά τροχιακά
24	Cr	$\dots 4s^2 3d^4$	$\dots 4s^1 3d^5$
29	Cu	$\dots 4s^2 3d^9$	$\dots 4s^1 3d^{10}$
41	Nb	$\dots 5s^2 4d^3$	$\dots 5s^1 4d^4$
42	Mo	$\dots 5s^2 4d^4$	$\dots 5s^1 4d^5$
44	Ru	$\dots 5s^2 4d^6$	$\dots 5s^1 4d^7$
45	Rh	$\dots 5s^2 4d^7$	$\dots 5s^1 4d^8$
46	Pd	$\dots 5s^2 4d^8$	$\dots 5s^1 4d^9$
47	Ag	$\dots 5s^2 4d^9$	$\dots 5s^1 4d^{10}$
57	La	$\dots 6s^2 4f^1$	$\dots 6s^2 5d^1$
58	Ce	$\dots 6s^2 4f^2$	$\dots 6s^2 4f^1 5d^1$
64	Gd	$\dots 6s^2 4f^8$	$\dots 6s^2 4f^7 5d^1$
78	Pt	$\dots 6s^2 4f^{14} 5d^8$	$\dots 6s^1 4f^{14} 5d^9$
79	Au	$\dots 6s^2 4f^{14} 5d^9$	$\dots 6s^1 4f^{14} 5d^{10}$
89	Ac	$\dots 7s^2 5f^1$	$\dots 7s^2 6d^1$
90	Th	$\dots 7s^2 5f^2$	$\dots 7s^2 6d^2$
91	Pa	$\dots 7s^2 5f^3$	$\dots 7s^2 5f^2 6d^1$
92	U	$\dots 7s^2 5f^4$	$\dots 7s^2 5f^3 6d^1$
93	Np	$\dots 7s^2 5f^5$	$\dots 7s^2 5f^4 6d^1$
96	Cm	$\dots 7s^2 5f^8$	$\dots 7s^2 5f^7 6d^1$
103	Lr	$\dots 7s^2 5f^{14} 6d^1$	$\dots 7s^2 5f^{14} 7p^1$

Πίνακας 16.1: Οι εξαιρέσεις στον κανόνα δόμησης.

Υπάρχουν περισσότερες λεπτομέρειες που μπορούν να προστεθούν στην προσέγγιση τροχιακών, όπως η σειρά με την οποία γεμίζεται κάθε φλοιός, πώς προσδιορίζεται η ολική τιμή του σπιν σε κάθε φλοιό και στο άτομο συνολικά και άλλα. Ωστόσο ήδη από τη στοιχειώδη περιγραφή που δώσαμε βλέπουμε ότι η προσέγγιση δίνει μία καλή πρώτη εξήγηση της περιοδικότητας των χημικών ιδιοτήτων των στοιχείων, όπως είχε αναγνωριστεί από τον Μεντελέγιεφ το 19ο αιώνα. Τρία είναι τα κύρια στοιχεία αυτής της εξήγησης

1. η απαγορευτική αρχή του Πάουλι,
2. η προσεγγιστική σφαιρική συμμετρία των ατόμων, που δίνει τον εκφυλισμό $2\ell + 1$.
3. το σπιν των ηλεκτρονίων που διπλασιάζει τον εκφυλισμό σε $2(2\ell + 1)$.

Πρέπει να τονιστεί ότι η παραπάνω περιγραφή είναι μόνο προσεγγιστική. Έννοιες όπως τα τροχιακά, οι φλοιοί, ή το μέσο δυναμικό V δεν είναι θεμελιώδεις στην κβαντική μηχανική. Η θεμελιώδης περιγραφή του συστήματος αναφέρεται σε ένα καταστατικό διάνυσμα στο χώρο Χίλμπερτ που περιγράφει τα Z ηλεκτρόνια του ατόμου. Η θεωρία τροχιακών μας λέει ότι για κάποιες μετρήσεις που μπορούν να γίνουν στο άτομο, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε κυματοσυναρτήσεις της μορφής (16.31) αντί του ακριβούς καταστατικού διανύσματος, χωρίς μεγάλο σφάλμα στις φυσικές προβλέψεις. Στη βάση αυτής της προσέγγισης κατασκευάζουμε εικόνες όπως το συμπλήρωμα των φλοιών, αλλά δεν πρέπει να τις παίρνουμε τοις μετρητοίς, ως ότι αντιστοιχούν σε πραγματικές ιδιότητες ή χαρακτηριστικά των ατόμων. Είναι απλώς οπτικοποίηση μαθηματικών όρων που εμφανίζονται σε μία προσεγγιστική περιγραφή του φυσικού συστήματος.

1 H 1s																	2 He 1s
3 Li 2s	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne 2p
11 Na 3s	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar 3p
19 K 4s	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr 4p
37 Rb 5s	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe 5p
55 Cs 6s	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn 6p
87 Fr 7s	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	113	114				
		58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu 4f		
		90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr 5f		

Σχήμα 16.2: Το περιοδικό σύστημα όπως περιγράφεται από το μοντέλο των φλοιών.

16.4.2 Ο υπολογισμός του δυναμικού

Ως τώρα δεν εξηγήσαμε πώς προσδιορίζουμε το μέσο δυναμικό $V(r)$ που εμφανίζεται στην Εξ. (16.30). Ο απλούστερος τρόπος είναι η θεώρηση αυτοσυνεπούς πεδίου, σύμφωνα με την οποία θεωρούμε ότι το δυναμικό V προέρχεται από μια κλασική κατανομή φορτίου, η οποία προσδιορίζεται με τρόπο συνεπή ως προς τις πιθανότητες της κβαντικής θεωρίας.

Έστω $|\psi\rangle$ ένα καταστατικό διάνυσμα του συστήματος των Z ηλεκτρονίων. Θεωρούμε τη γενικευμένη βάση $|\mathbf{r}_1, m_1; \mathbf{r}_2, m_2; \dots; \mathbf{r}_Z, m_Z\rangle$ ως προς τις θέσεις \mathbf{r}_i και τις τρίτες συνιστώσες του σπιν m_i για κάθε σωματίο. Ορίζουμε την πυκνότητα ηλεκτρονίων $n(\mathbf{r})$ ως

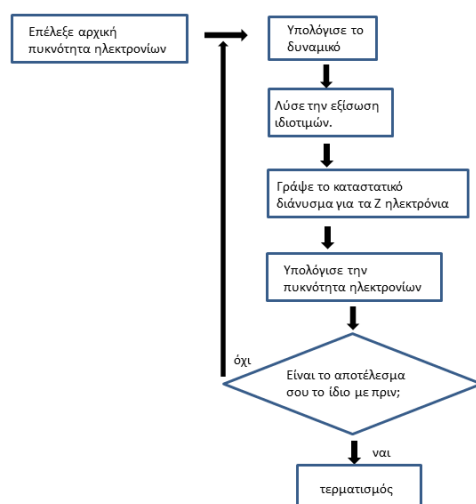
$$n(\mathbf{r}) = \sum_{m_1, m_2, \dots, m_Z} \int d^3r_2 \dots d^3r_Z \langle \mathbf{r}, m_1; \mathbf{r}_2, m_2; \dots; \mathbf{r}_Z, m_Z | \psi \rangle \times \langle \psi | \mathbf{r}, m_1; \mathbf{r}_2, m_2; \dots; \mathbf{r}_Z, m_Z \rangle. \tag{16.33}$$

Από την κανονικοποίηση της $|\psi\rangle$ ισχύει ότι $\int d^3r n = 1$, οπότε η πυκνότητα φορτίου για $Z - 1$ ηλεκτρόνια είναι ίση με $-(Z - 1)en(\mathbf{r})$. Προσθέτοντας την πυκνότητα φορτίου $Ze\delta(\mathbf{r})$ που αντιστοιχεί σε έναν σημειακό πυρήνα που βρίσκεται στην αρχή των αξόνων, το ηλεκτρικό δυναμικό $\phi(\mathbf{r})$ στο οποίο κινείται το ένα ηλεκτρόνιο που ξεχωρίζουμε στην προσέγγιση μέσου πεδίου είναι λύση της εξίσωσης Πουασόν $\nabla^2\phi = -Ze\delta(\mathbf{r}) + (Z - 1)en(\mathbf{r})$.

Ισοδύναμα, αφού $V = -e\phi$, το δυναμικό V που εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή (16.30) είναι λύση της εξίσωσης

$$\nabla^2V = Ze^2\delta^3(\mathbf{r}) - (Z - 1)e^2n(\mathbf{r}). \tag{16.34}$$

Οι παραπάνω εκφράσεις αρκούν για να ορίσουν μία διαδικασία υπολογισμού του δυναμικού $V(\mathbf{r})$.



Σχήμα 16.3: Διάγραμμα ροής για την υπολογιστική υλοποίηση της προσέγγισης αυτοσυνεπούς πεδίου.

1. Ξεκινάμε με κάποιο αυθαίρετο $n(\mathbf{r})$ που το θέτουμε κατά εκτίμηση.
2. Λύνουμε την εξίσωση Πουασόν (16.34) και υπολογίζουμε το $V(\mathbf{r})$.
3. Γράφουμε $\mathbf{r} = r\mathbf{n}$, όπου \mathbf{n} μοναδιαίο διάνυσμα και παίρνουμε τη μέση τιμή του $V(\mathbf{r})$ ως προς όλες τις κατευθύνσεις \mathbf{n} . Έτσι καθιστούμε το δυναμικό σφαιρικά συμμετρικό, $\bar{V}(r) = \int d^2\mathbf{n}V(r\mathbf{n})$.
4. Βρίσκουμε τις Z ιδιοσυναρτήσεις $|a\rangle$ της Χαμιλτονιανής $\frac{\hat{p}^2}{2m} + \bar{V}(\hat{\mathbf{r}})$ με τις χαμηλότερες τιμές ενέργειας ϵ_a , και κατασκευάζουμε την κατάσταση Z ηλεκτρονίων $|a_1, a_2, \dots, a_Z\rangle_A$.
5. Υπολογίζουμε την πυκνότητα ηλεκτρονίων $n(\mathbf{r})$ θέτοντας $|\psi\rangle = |a_1, a_2, \dots, a_Z\rangle_A$ στην Εξ. (16.33).
6. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία έως ότου να υπάρξει σύγκλιση στο αποτέλεσμα, για παράδειγμα οι τιμές της ολικής ενέργειας $\sum_{a=1}^N \epsilon_a$ να προκύπτουν σχεδόν ίδιες (με μία προκαθορισμένη ακρίβεια) σε δύο διαδοχικές επαναλήψεις του υπολογισμού.
7. Το δυναμικό \bar{V} που υπολογίστηκε τελευταία φορά πριν σταματήσει η διαδικασία είναι το ζητούμενο, όπως και η ολική αντίστοιχη ενέργεια και το καταστατικό διάνυσμα $|a_1, a_2, \dots, a_Z\rangle_A$.

Η παραπάνω διαδικασία υλοποιείται υπολογιστικά, και αποτελεί μία απλουστευμένη περιγραφή της προσέγγισης Χάρτρι (Hartree)-Φοκ (Fock) που θα εξετάσουμε σε ερχόμενο κεφάλαιο.

16.4.3 Προσέγγιση Χάρτρι-Φοκ

Η προσέγγιση Χάρτρι-Φοκ είναι μια υλοποίηση της θεωρίας μέσου πεδίου μέσω της θεωρίας μεταβολών. Σε ότι ακολουθεί θα την παρουσιάσουμε για μοζονικά συστήματα, όπου οι μαθηματικές εκφράσεις είναι πολύ πιο απλές. Οι βασικές ιδέες παραμένουν ίδιες.

Η προσέγγιση Χάρτρι-Φοκ διατυπώνεται πιο εύκολα στο φορμαλισμό του χώρου Φοκ. Θεωρούμε σύστημα N μοζονίων το οποίο περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή όπως αυτή του Κεφ. 15.5.2

$$\hat{H} = \hat{a}_a^\dagger h_a^a \hat{a}_b^b + W_{cd}^{ab} \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_c \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_d. \quad (16.35)$$

Για σωμάτια με διμερείς αλληλεπιδράσεις $W_{cd}^{ab} = \frac{1}{2} U_{ab} \delta_c^a \delta_d^b$.

Η προσέγγιση Χάρτρι-Φοκ βασίζεται στην υπόθεση ότι για μεγάλο N , οι συζεύξεις μεταξύ των σωματιδίων είναι συγκριτικά αμελητέες, οπότε είναι λογικό να προσεγγίσουμε τις καταστάσεις του

συστήματος με διανύσματα της μορφής $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{a}^\dagger(\phi)^N|0\rangle$, όπου ϕ_a διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ ενός σωματιδίου¹.

Υπολογίζουμε

$$\langle\phi|\hat{a}_a^\dagger\hat{a}^b|\phi\rangle = N\phi_a^*\phi^b \quad (16.36)$$

$$\begin{aligned} \langle\phi|\hat{a}_a^\dagger\hat{a}^c\hat{a}_b^\dagger\hat{a}^d|\phi\rangle &= \langle\phi|\hat{a}_a^\dagger\hat{a}_b^\dagger\hat{a}^c\hat{a}^d|\phi\rangle\phi_a\phi_b^* \\ &+ \delta_b^c\langle\phi|\hat{a}_a^\dagger\hat{a}^d|\phi\rangle = N(N-1)\phi_a^*\phi_b^*\phi^c\phi^d + N\delta_b^c\phi_a^*\phi^d. \end{aligned} \quad (16.36)$$

Στην απόδειξη των παραπάνω εξισώσεων χρησιμοποιήσαμε επανειλημμένα το μεταθέτη

$$[\hat{a}_a, \hat{a}^\dagger(\phi)^N] = N\phi_a\hat{a}^\dagger(\phi)^{N-1}, \quad (16.37)$$

προκειμένου να φέρουμε μειωτικούς τελεστές να δρουν στο κενό.

Οπότε η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας είναι

$$E(\phi) := \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle = \phi_a^*\phi^b\bar{h}^a{}_b + N(N-1)W^{ab}{}_{cd}\phi_a^*\phi_b^*\phi^c\phi^d, \quad (16.38)$$

όπου γράψαμε $\bar{h}^a{}_b = h^a{}_b + W^{ac}{}_{cb}$.

Ακολουθώντας τη λογική της θεωρίας μεταβολών ελαχιστοποιούμε το $E(\phi)$ ως προς το ϕ λαμβάνοντας υπόψη τη συνθήκη κανονικοποίησης $\phi_a^*\phi^a = 1$. Χρησιμοποιούμε τη μέθοδο των πολλαπλασιαστών Λαγκράνζ και παραγωγίζουμε την ποσότητα $E(\phi) - \lambda(\phi_a^*\phi^a - 1)$ ως προς ϕ και ϕ^* , όπου λ ο πολλαπλασιαστής Λαγκράνζ. Η παραγωγή ως προς ϕ^* δίνει την εξίσωση Χάρτρι-Φοκ (ΧΦ)

$$\bar{h}^a{}_b\phi^b + 2(N-1)W^{ab}{}_{cd}\phi_b^*\phi^c\phi^d = \frac{\lambda}{N}\phi_a. \quad (16.39)$$

Για αλληλεπιδράσεις ανά ζεύγος σωματιδίων, η εξίσωση ΧΦ γίνεται

$$(h\phi)_a + \frac{1}{2}U_{aa}\phi_a + U_a^{HF}(\phi)\phi_a = \frac{\lambda}{N}\phi_a \quad (16.40)$$

όπου U_a^{HF} είναι το δυναμικό Χάρτρι-Φοκ,

$$U_a^{HF}(\phi) = (N-1)\sum_b U_{ab}\phi_b^*\phi_b, \quad (16.41)$$

όπου κατεβάσαμε το δείκτη στο ϕ για να δείξουμε ότι εγκαταλείψαμε τη σύμβαση άθροισης.

Για σωματίδια με σπιν 0, διαλέγουμε τη βάση της θέσης, οπότε $\phi^a \rightarrow \phi(\mathbf{r})$. Θεωρούμε ότι ο τελεστής h είναι ο τελεστής Σρέντινγκερ για σωματίο μάζας m σε εξωτερικό δυναμικό $V(\mathbf{r})$, και ότι $U_{ab} \rightarrow U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ η Εξ. (16.40) γράφεται

$$-\frac{1}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + (N-1)\left[\int d^3r'U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|\phi(\mathbf{r}')|^2\right]\phi(\mathbf{r}) = \mu\phi(\mathbf{r}), \quad (16.42)$$

όπου γράψαμε $\mu := \frac{\lambda}{N} - U(0)$, δηλαδή απορροφήσαμε μία ενδεχομένως άπειρη σταθερά (που προέκυψε από τις σχέσεις μετάθεσης) στον ορισμό του πολλαπλασιαστή Λαγκράνζ.

Η Εξ. (16.42) είναι μια μη γραμμική ολοκληροδιαφορική εξίσωση. Λύνεται μόνο αριθμητικά, ωστόσο είναι πολύ πιο εύκολο να λύσεις μία ολοκληροδιαφορική εξίσωση για ένα σωματίο, από μία γραμμική διαφορική εξίσωση για N σωματίδια, όταν το N γίνεται μεγάλο. Τονίζουμε ότι η συνάρτηση $\phi(\mathbf{r})$ δεν περιγράφει την κβαντική κατάσταση κάποιου σωματιδίου. Είναι μία παράμετρος που χρησιμοποιήθηκε στη θεωρία μεταβολών, δηλαδή είναι της ίδιας φύσης με τις παραμέτρους b του Κεφ. 16.3.

¹Στο συνήθη συμβολισμό, αυτό σημαίνει ότι θεωρούμε κατάσταση της μορφής $|\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes \dots \otimes |\phi\rangle$.

Η Εξ. (16.42) δεν μπορεί βεβαίως να χρησιμοποιηθεί για να περιγραφεί η δομή των ατόμων. Συνήθως χρησιμοποιείται για τη μελέτη συστημάτων μεγάλου αριθμού ($N \gg 1$) μποζονικών ατόμων σε χαμηλές θερμοκρασίες, όπως για παράδειγμα σε υπερυγρά και στα λεγόμενα συμπυκνώματα Μπόζε-Αϊνστάιν. Σ' αυτές τις περιπτώσεις, είναι βολικό να κανονικοποιεί κανείς τη συνάρτηση $\phi(\mathbf{r})$, έτσι ώστε $\int |\phi(\mathbf{r})|^2 = N - 1$, ώστε να απορροφηθεί ο παράγοντας $N - 1$ από το μη-γραμμικό όρο. Επίσης μας ενδιαφέρει η συμπεριφορά του συστήματος σε μεσοσκοπικές κλίμακες, οπότε ένα δυναμικό $U(\mathbf{r})$ με μικροσκοπική εμβέλεια, μπορεί να προσεγγιστεί από συνάρτηση δέλτα, $U(\mathbf{r}) = a\delta^3(\mathbf{r})$. Τότε η Εξ. (16.42) γίνεται

$$-\frac{1}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + a|\phi(\mathbf{r})|^2\phi(\mathbf{r}) = \mu\phi(\mathbf{r}), \quad (16.43)$$

Η Εξ. (16.43) είναι γνωστή ως εξίσωση Γκρος (Gross)- Πιτάεβσκι (Πιτάεβσκιϊ).

Παράδειγμα 16.3. Θεωρούμε την Εξ. ΧΦ (16.42) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για περίοδο L . Παρατηρούμε ότι για $V = 0$, επιδέχεται ως λύσεις επίπεδα κύματα $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, όπου $k_i = \frac{2\pi}{L}n_i$, για $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ και $i = 1, 2, 3$. Οι αντίστοιχες τιμές του μ είναι

$$\mu_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{N-1}{L^3} \int d^3r U(\mathbf{r}). \quad (16.44)$$

16.5 Η θεωρία Τόμας-Φέρμι

Η θεωρία Τόμας-Φέρμι (ΤΦ) [257] είναι μία φαινομενικά χονδροειδής προσέγγιση για την περιγραφή των ατόμων, η οποία όμως δίνει χρήσιμη πληροφορία και μπορεί να αποτελέσει βάση βελτιωμένων προσεγγίσεων. Η προσέγγιση συνίσταται στην περιγραφή του ατόμου αποκλειστικά και μόνο μέσω μίας πυκνότητας ηλεκτρονίων $n(\mathbf{r})$ όπως αυτή της Εξ. (16.33). Αυτό επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις του ιδανικού αέριου φερμιονίων για την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων του ατόμου. Δεδομένου ότι αυτή η έκφραση της κινητικής ενέργειας προκύπτει στο όριο του μεγάλου αριθμού φερμιονίων, η θεωρία ΤΦ λειτουργεί καλύτερα σε άτομα με μεγάλο αριθμό ηλεκτρονίων.

Η Εξ. (15.23) μας δίνει την ενέργεια Φέρμι ενός συστήματος N ανεξάρτητων ηλεκτρονίων (για $s = \frac{1}{2}$),

$$\epsilon_F = \frac{1}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}, \quad (16.45)$$

όπου n η πυκνότητα σωματιδίων. Υποθέτουμε ότι η Εξ. (15.24) μπορεί να εφαρμοστεί και για τα ηλεκτρόνια ενός ατόμου, μόνο που η πυκνότητα θα εξαρτάται από την απόσταση και θα πρέπει στην κινητική ενέργεια να προσθέσουμε ένα μέσο δυναμικό $V(r)$ που προκύπτει από όλα τα ηλεκτρόνια. Έχουμε λοιπόν,

$$\epsilon_F = \frac{1}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3} + V(r). \quad (16.46)$$

Η ενέργεια Φέρμι ορίζεται ως η μεγαλύτερη ενέργεια ενός δέσμιου ηλεκτρονίου και άρα ικανοποιεί $\epsilon_F \leq 0$. Περιμένουμε να είναι πολύ μικρότερη σε απόλυτη τιμή από την ολική ενέργεια του ατόμου, οπότε είναι καλή προσέγγιση να πάρουμε $\epsilon_F = 0$. Τότε η Εξ. (16.46) δίνει μια σχέση μεταξύ του V και του n

$$n = \frac{1}{3\pi^2} (-2mV)^{3/2}. \quad (16.47)$$

Μια δεύτερη σχέση μεταξύ n και V δίνεται από την εξίσωση Πουασόν

$$\nabla^2 V = Ze^2 \delta^3(\mathbf{r}) - e^2 n(r). \quad (16.48)$$

Η διαφορά από την Εξ. (16.34) έγκειται στο ότι η πυκνότητα ηλεκτρονίων είναι κανονικοποιημένη στον ολικό αριθμό ηλεκτρονίων στο άτομο, $\int d^3x n = Z$.

Δεδομένου ότι το δυναμικό Κουλόμπ είναι λύση της εξίσωσης Πουασόν, ισχύει ότι $\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$. Σε συνδυασμό με την Εξ. (16.47), η Εξ. (16.48) γράφεται

$$\nabla^2 \left(V + \frac{Ze^2}{4\pi r} \right) = -\frac{e^2}{3\pi^2} (-2mV)^{3/2}. \quad (16.49)$$

Θέτοντας $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi r} \phi(r)$ καταλήγουμε στη διαφορική εξίσωση Τόμας-Φέρμι

$$\sqrt{x} \frac{d^2 \phi}{dx^2} = \phi^{3/2}, \quad (16.50)$$

όπου $x = br/a_0$ και

$$b = 2Z^{1/3} (4\pi/3)^{2/3}. \quad (16.51)$$

Η Εξ. (16.50) λύνεται με συνοριακές συνθήκες $\phi(0) = 1$ και $\phi(\infty) = 0$. Η δεύτερη συνθήκη οφείλεται στο ότι σε ένα ουδέτερο άτομο, το δυναμικό πρέπει να μηδενίζεται ασυμπτωτικά πολύ πιο γρήγορα από το δυναμικό Κουλόμπ. Υπάρχει μία και μοναδική λύση ϕ_0 της Εξ. (16.50) με τις δεδομένες συνοριακές συνθήκες, η οποία καλείται *συνάρτηση Τόμας-Φέρμι*. Η ϕ_0 δεν έχει αναλυτική έκφραση και υπολογίζεται αριθμητικά. Η γραφική παράσταση της ϕ_0 δίνεται στο Σχ. 16.4.

Σημαντικές ιδιότητες της συνάρτησης ΤΦ είναι οι εξής.

1. Για x κοντά στο μηδέν, η ϕ_0 γράφεται ως ανάπτυγμα

$$\phi_0(x) = 1 + cx + \frac{4}{3}x^{3/2} + \frac{2c}{5}x^{5/2} + \dots, \quad (16.52)$$

όπου $c \simeq -1,588$ είναι μία σταθερά που προσδιορίζεται μόνο αριθμητικά.

2. Εύκολα διαπιστώνεται ότι η συνάρτηση $\phi_s(x) = 144/x^3$ είναι ακριβής λύση της Εξ. (16.50), για διαφορετικές συνοριακές συνθήκες από τη ϕ_0 . Στο όριο του πολύ μεγάλου x , η ϕ_0 προσεγγίζει την ϕ_s , δηλαδή

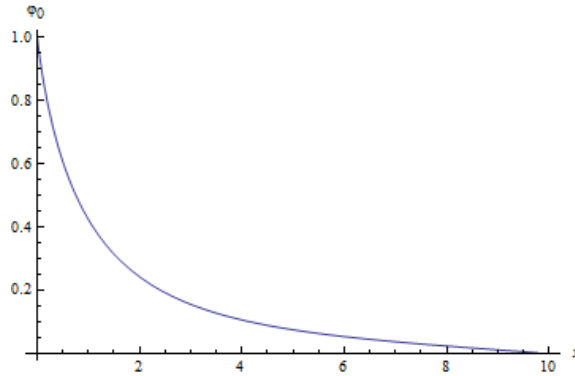
$$\phi(x) \simeq \frac{144}{x^3}. \quad (16.53)$$

3. Οι ακόλουθες είναι ενδεικτικές τιμές της ϕ_0 .

x	0	0,1	0,5	1	2	3	5	10
$\phi_0(x)$	1	0,882	0,607	0,424	0,242	0,157	0,079	0,024

Η πυκνότητα ηλεκτρονίων γράφεται ως

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2Z}{a_0 r} \right)^{3/2} \phi_0(br/a_0)^{3/2} \quad (16.54)$$



Σχήμα 16.4: Η συνάρτηση Τόμας Φέρμι.

Εκτιμούμε την ακτίνα ενός ατόμου στην προσέγγιση ΤΦ ως εξής. Η ποσότητα $Z^{-1}n(r)$ είναι μία πυκνότητα πιθανότητας για τα ηλεκτρόνια. Το κλάσμα w του ηλεκτρικού φορτίου που βρίσκεται σε σφαίρα ακτίνας R είναι

$$w = \frac{4\pi}{Z} \int_0^R dr r^2 n(r). \quad (16.55)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (16.54) και αλλάζοντας μεταβλητές σε $x = br/a_0$ βρίσκουμε ότι

$$w = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{bR/a_0} dx \sqrt{x} \phi_0(x)^{3/2} = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{bR/a_0} dx x \phi_0'' \quad (16.56)$$

Χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση κατά παράγοντες υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα $\int_0^y dx x \phi_0'' = (x\phi_0')|_0^y - \int_0^y \phi_0' = (x\phi_0' - \phi_0)|_0^y$. Θεωρώντας επαρκώς μεγάλο R ώστε να χρησιμοποιήσουμε την ασυμπτωτική έκφραση (16.53) για τη ϕ_0 , βρίσκουμε ότι $\int_0^y dx x \phi_0'' = 1 - 576/y^3$, οπότε η Εξ. (16.56) δίνει

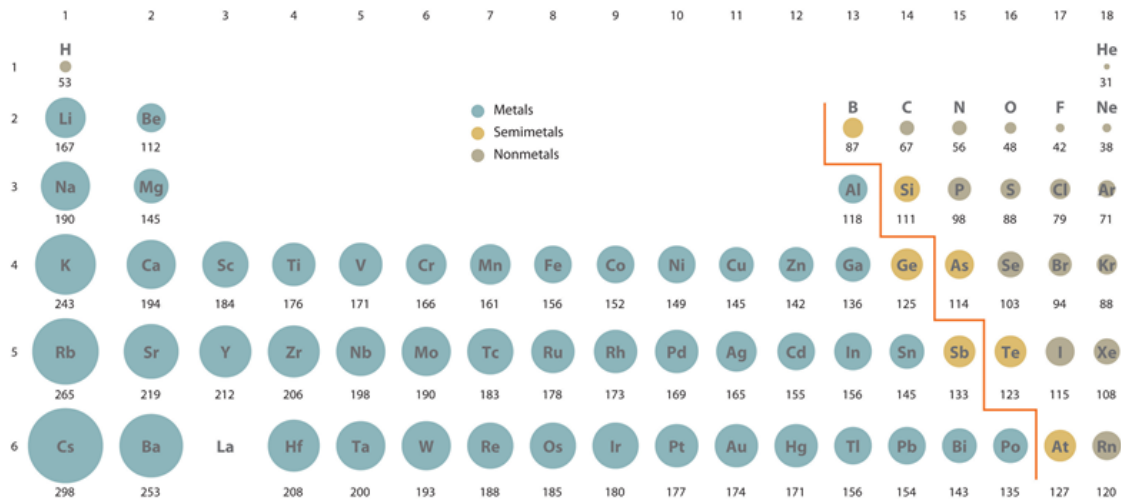
$$R = C_w a_0 Z^{-1/3}, \quad (16.57)$$

όπου $C_w = \frac{3^{1/3}}{4\pi^{5/3}(1-w)^{1/3}}$ μία σταθερά. Διαλέγοντας $w = 0,99$, έτσι ώστε το 99% του φορτίου να βρίσκεται εντός ακτίνας R , βρίσκουμε ότι $C_w \simeq 0,25$. Συμπεραίνουμε ότι η θεωρία ΤΦ υποδηλώνει ότι το μέγεθος του ατόμου (όπως αυτό προσδιορίζεται από την κατανομή φορτίου) ελαττώνεται με τον ατομικό αριθμό.

Επειδή το άτομο δεν έχει ένα αυστηρά ορισμένο σύνορο, το τί εννοούμε ως μέγεθος ατόμου εξαρτάται από το πως το μετράμε. Ο πιο συχνός προσδιορισμός το υπολογίζει μετρώντας τις αποστάσεις μεταξύ των πυρήνων σε μόρια που τα άτομα συνδέονται με ομοιοπολικό δεσμό. Με αυτόν τον ορισμό του μεγέθους των ατόμων, η προσέγγιση ΤΦ είναι καλή μόνο εφόσον συγκρίνουμε τα μεγέθη ατόμων στην ίδια γραμμή του περιοδικού πίνακα. Όταν όμως αλλάζουμε γραμμή, το μέγεθος του ατόμου αυξάνει—βλ. Σχ. 16.5. Αυτό εξηγείται με βάση την περιγραφή τροχιακών, αφού όταν αλλάζουμε γραμμή τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας αποκτούν μεγαλύτερη τιμή του κβαντικού αριθμού n και άρα είναι πιο μακριά από τον πυρήνα. Αυτή η συμπεριφορά δεν μπορεί να προκύψει από τη θεωρία ΤΦ, που εξετάζει μια μέση συμπεριφορά των ηλεκτρονίων. Από την άλλη, αν ορίσουμε το μέγεθος του ατόμου ως το εύρος της κατανομής φορτίου, τότε η προσέγγιση ΤΦ είναι καλή.

Για να υπολογίσουμε την ενέργεια χρησιμοποιούμε την Εξ. (15.25) για την πυκνότητα ενέργειας ενός αερίου φερμιονίων. Αυτή αντιστοιχεί στην κινητική ενέργεια E_k των ηλεκτρονίων

$$E_k = \frac{3\pi^2}{10m} (3/\pi)^{2/3} \int d^3x n^{5/3} = \frac{6\pi^3}{5m} (3/\pi)^{2/3} \int_0^\infty dr r^2 n^{5/3}. \quad (16.58)$$



Σχήμα 16.5: Το μέγεθος των ατόμων σε pm , όπως προσδιορίζεται από τα μήκη χημικών δεσμών στα οποία συμμετέχουν, ως συνάρτηση του ατομικού αριθμού.

Αντικαθιστώντας την Εξ. (16.54) για την πυκνότητα ηλεκτρονίων n βρίσκουμε

$$E_k = \kappa Z^{7/3} \frac{1}{2ma_0^2}, \quad (16.59)$$

όπου $\kappa = \frac{16}{5\pi} (3\pi/4)^{1/3} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} \phi_0(x)^{5/2} \simeq 1, 537$. Η δυναμική ενέργεια E_p μιας κατανομής ηλεκτρικού φορτίου $n(r)$ είναι ίση με $-\frac{3}{5} \int d^3x n(r)V(r)$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (16.47) βρίσκουμε ότι $E_p = -2E_k$. Οπότε η ολική ενέργεια είναι ίση με

$$E = -E_k = -\kappa Z^{7/3} \frac{1}{2ma_0^2}, \quad (16.60)$$

δηλαδή αυξάνει ανάλογα με το $Z^{7/3}$.

Η θεωρία ΤΦ δίνει ένα σφάλμα 54% για το άτομο του υδρογόνου ($Z = 1$), αλλά για μεγάλα Z το σφάλμα πέφτει στο 15% το οποίο πάντως παραμένει υψηλό. Επίσης έχει αποδειχτεί ότι δεν είναι δυνατός ο σχηματισμός χημικών δεσμών και άρα μορίων στα πλαίσια της θεωρίας ΤΦ [258]. Ο χημικός δεσμός σχετίζεται με λεπτά χαρακτηριστικά του καταστατικού διανύσματος ενός ατόμου (τα οποία προσεγγίζονται από τους φλοιούς στη θεωρία τροχιακών) και δεν αποτελεί εκδήλωση μίας μέσης συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων όπως περιγράφει η θεωρία ΤΦ.

Ωστόσο η θεωρία ΤΦ προσφέρει μία εύκολη και γρήγορη εκτίμηση των χαρακτηριστικών των βαριών ατόμων, όπως το πώς κλιμακώνεται η ενέργειά τους με το Z . Είναι σχετικά καλή περιγραφή για τον πυρήνα των ατόμων, δηλαδή για την κατανομή των ηλεκτρονίων εκτός αυτών της εξωτερης στιβάδας. Επιπλέον αποδεικνύεται ότι είναι ακριβής στο όριο $Z \rightarrow \infty$ [259]. Αυτό σημαίνει ότι μπορεί να θεωρηθεί ως πρώτη προσέγγιση, η ακρίβεια της οποίας βελτιώνεται προσθέτοντας επιπλέον όρους.

16.6 Η προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμερ

Πολλά φυσικά συστήματα χαρακτηρίζονται από μεγάλη διαφορά κλίμακας μεταξύ των βαθμών ελευθερίας που τα συνθέτουν. Το πιο γνωστό παράδειγμα είναι τα άτομα και τα μόρια, στα οποία

οι πυρήνες είναι πολύ βαρύτεροι από τα ηλεκτρόνια. Το ίδιο ισχύει φυσική υψηλών ενεργειών, μπορούμε να έχουμε αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων με πολύ διαφορετική μάζα ηρεμίας. Η προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμερ μας προσφέρει μία μεγάλη διευκόλυνση στους υπολογισμούς για την εύρεση του φάσματος σε τέτοια συστήματα.

Έστω ότι το σύστημα μας περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_h$, όπου \mathcal{H}_l ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει τους ελαφρείς βαθμούς ελευθερίας και \mathcal{H}_h ο χώρος Χίλμπερτ που περιγράφει του βαρείς βαθμούς ελευθερίας. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$\hat{H} = \hat{H}_l \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_h + \hat{H}_{int}, \quad (16.61)$$

όπου \hat{H}_l είναι η Χαμιλτονιανή των ελαφρών βαθμών ελευθερίας, \hat{H}_h η Χαμιλτονιανή των βαριών βαθμών ελευθερίας και \hat{H}_{int} ένας όρος αλληλεπίδρασης. Θεωρούμε μία (γενικευμένη) βάση $|Z\rangle$ στον \mathcal{H}_h , η οποία διαγωνοποιεί τον όρο αλληλεπίδρασης, δηλαδή για κάθε $|\psi_l\rangle \in \hat{H}_l$,

$$\hat{H}_{int}(|\psi_l\rangle \otimes |Z\rangle) = \hat{V}(Z)|\psi_l\rangle \otimes |Z\rangle \quad (16.62)$$

όπου ο $\hat{V}(Z)$ είναι τελεστής στο \hat{H}_l που εξαρτάται από το Z παραμετρικά, δηλαδή το Z εμφανίζεται ως μια σταθερή κλασική παράμετρος στο \hat{V} .

Στη συνέχεια, για κάθε τιμή του Z λύνουμε την εξίσωση ιδιοτιμών για τον τελεστή $\hat{H}_l + \hat{V}(Z)$ στο \hat{H}_l ,

$$[\hat{H}_l + \hat{V}(Z)]|\nu, Z\rangle = \epsilon_\nu(Z)|\nu, Z\rangle, \quad (16.63)$$

όπου ν είναι δείκτης των ιδιοτιμών. Τόσο οι ιδιοτιμές $\epsilon_\nu(Z)$ όσο και τα ιδιοδιανύσματα $|\nu, Z\rangle$ εξαρτώνται παραμετρικά από το Z . Θεωρούμε ότι το φάσμα είναι διακριτό, ή το κάνουμε διακριτό απαιτώντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Έτσι, για δεδομένη τιμή του Z , τα ιδιοδιανύσματα $|\nu, Z\rangle$ ορίζουν μία βάση στο \mathcal{H}_l . Άρα τα διανύσματα $|\nu, Z\rangle \otimes |Z\rangle$ ορίζουν μία γενικευμένη βάση στο \mathcal{H} , δηλαδή μπορούμε να αναπτύξουμε οποιοδήποτε διάνυσμα $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ ως

$$|\Psi\rangle = \sum_\nu \int dZ f_\nu(Z) |\nu, Z\rangle \otimes |Z\rangle. \quad (16.64)$$

Η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ γράφεται

$$\sum_{\nu'} \int dZ' f_{\nu'}(Z') |\nu', Z'\rangle \otimes [\hat{H}_h - E + \epsilon_{\nu'}(Z')] |Z'\rangle = 0. \quad (16.65)$$

Πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με $\langle \nu, Z | \otimes \langle Z |$ παίρνουμε

$$\sum_{\nu'} \int dZ' f_{\nu'}(Z') \langle \nu, Z | \nu', Z' \rangle \langle Z | \hat{H}_h | Z' \rangle + [\epsilon_\nu(Z) - E] f_\nu(Z) = 0. \quad (16.66)$$

Η Εξ. (16.66) είναι ακριβής, αποδείχτηκε χωρίς τη χρήση καμίας προσέγγισης. Η προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμερ αντιστοιχεί στην απαίτηση ότι η μεταβολή του Z εντός της $f_\nu(Z)$ γίνεται σε κλίμακα πολύ μικρότερη από αυτή που αντιστοιχεί στην παραμετρική εξάρτηση της $|n, Z\rangle$ από το Z . Έτσι μπορούμε να προσεγγίζουμε $\langle \nu, Z | \nu', Z' \rangle \simeq \langle \nu, Z | \nu', Z \rangle = \delta_{\nu\nu'}$, οπότε η Εξ. (16.66) δίνει

$$\int dZ' \langle Z | \hat{H}_h | Z' \rangle f_\nu(Z') + [\epsilon_\nu(Z) - E] f_\nu(Z) = 0. \quad (16.67)$$

Ορίζοντας $|f_\nu\rangle = \int dZ f_\nu(Z) |Z\rangle$ και $\hat{\epsilon}_\nu = \int dZ \epsilon(Z) |Z\rangle \langle Z|$, η Εξ. (16.67), γίνεται μία εξίσωση ιδιοτιμών στο \mathcal{H}_h ,

$$(\hat{H}_h + \hat{\epsilon}_\nu) |f_\nu\rangle = E |f_\nu\rangle. \quad (16.68)$$

Με την προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμερ αντικαθιστούμε το πρόβλημα ιδιοτιμών για τη Χαμιλτονιανή (16.61) με δύο σημαντικά απλούστερα, την Εξ. (16.63) και την Εξ. (16.67).

Ως εφαρμογή, θεωρούμε τη Χαμιλτονιανή (15.26) που περιγράφει ένα σύστημα ηλεκτρονίων και πυρήνων που αλληλεπιδρούν μέσω δυνάμεων Κουλόμπ. Οι ελαφριοί βαθμοί ελευθερίας είναι τα ηλεκτρόνια, οπότε

$$\hat{H}_l = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{\alpha}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|}, \quad (16.69)$$

όπου $\hat{\mathbf{r}}_i$ και $\hat{\mathbf{p}}_i$, οι τελεστές θέσης και ορμής του ηλεκτρονίου με δείκτη i . Οι βαριοί βαθμοί ελευθερίας αντιστοιχούν στους πυρήνες, οπότε

$$\hat{H}_h = \sum_{a=1}^K \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2M_a} + \sum_{1 \leq a < b \leq K} \frac{Z_a Z_b \alpha}{|\hat{\mathbf{R}}_a - \hat{\mathbf{R}}_b|}, \quad (16.70)$$

όπου ο πυρήνας με δείκτη a έχει ατομικό αριθμό Z_a , μάζα M_a , και περιγράφεται από τελεστή θέσης $\hat{\mathbf{R}}_a$ και τελεστή ορμής $\hat{\mathbf{P}}_a$.

Η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης είναι

$$\hat{H}_{int} = - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^K \frac{Z_a \alpha}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{R}}_a|. \quad (16.71)$$

Οι βαριοί βαθμοί ελευθερίας εμφανίζονται στην \hat{H}_{int} μέσω των τελεστών θέσης των πυρήνων $\hat{\mathbf{R}}_a$, άρα το αντίστοιχο της γενικευμένης βάσης $|Z\rangle$ είναι η γενικευμένη βάση $|\mathbf{R}_a\rangle$ των θέσεων. Οπότε

$$\hat{V}(\mathbf{R}_a) = - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^K \frac{Z_a \alpha}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \mathbf{R}_a|} \quad (16.72)$$

και στην εξίσωση ιδιοτιμών (16.63) οι θέσεις των πυρήνων αντιμετωπίζονται ως κλασικές μεταβλητές.

Η Εξ. (16.68) είναι η εξίσωση ιδιοτιμών για έναν τελεστή Σρέντινγκερ $\sum_{a=1}^K \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2M_a} + V_{eff}(\mathbf{R}_a)$ με ενεργό δυναμικό

$$V_{eff}(\mathbf{R}_a) = \sum_{1 \leq a < b \leq K} \frac{Z_a Z_b \alpha}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|} + \epsilon_\nu(\mathbf{R}_a). \quad (16.73)$$

Στο σύστημα κέντρου μάζας για τους πυρήνες και για $\nu = 0$ —θεμελιώδη κατάσταση για τα ηλεκτρόνια— το ενεργό δυναμικό τυπικά χαρακτηρίζεται από ένα ελάχιστο $\mathbf{R}_a^{(0)}$. Μπορούμε να αναπτύξουμε το δυναμικό σε σειρά Τέιλορ γύρω από το ελάχιστο,

$$V_{eff}(\mathbf{R}_a) = V_{eff}(\mathbf{R}_a^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq a, b \leq K} \frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{R}_a \partial \mathbf{R}_b} (\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_a^{(0)}) (\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_b^{(0)}) \quad (16.74)$$

και να βρούμε τις $3K - 3$ χαρακτηριστικές ιδιοσυχνότητες $\omega_{\nu, s}$ των ταλαντώσεων γύρω από τη θέση ισορροπίας, όπου $s = 1, 2, \dots, 3K - 3$. (Αφαιρούμε τους τρεις βαθμούς ελευθερίας αντιστοιχούν

στην κίνηση του κέντρου μάζας.) Δεδομένου ότι η αλλαγή της θέσης των πυρήνων λόγω των ταλαντώσεων είναι αμελητέα, στα πλαίσια της προσέγγισης Μπορν-Οπενχάιμερ, η ενέργεια της θεμελιώδους για τους βαθμούς ελευθερίας των ηλεκτρονίων είναι $\epsilon_0(\mathbf{R}^{(0)})$.

Παράδειγμα 16.3. Ένα οπτομηχανικό σύστημα χαρακτηρίζεται από έναν ή περισσότερους τρόπους του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου σε αλληλεπίδραση με ένα κβαντικό μηχανικό σύστημα. Για παράδειγμα θεωρούμε ένα πεδίο σε μία ιδανική κοιλότητα μήκους L . Ωστόσο το μήκος L δεν είναι σταθερό, αλλά κάνει αρμονικές ταλαντώσεις γύρω από μια τιμή ισορροπίας L_0 . Το σύστημα υπό μελέτη είναι ένας τρόπος του ΗΜ πεδίου με συχνότητα συντονισμού π/L και ένας αρμονικός ταλαντωτής μάζας M και συχνότητας ω ο οποίος μεταβάλλει το μήκος L της κοιλότητας ως $L(x) = L_0 + x$. Η Χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \frac{\pi}{L_0 + \hat{x}} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{x}^2, \quad (16.75)$$

όπου \hat{a} και \hat{a}^\dagger ο μειωτικός και αυξητικός τελεστής αντίστοιχα για τον τρόπο του ΗΜ πεδίου. Θεωρώντας το ΗΜ πεδίο ως τον ελαφρύ βαθμό ελευθερίας, βρίσκουμε ότι $\epsilon_n(x) = n \frac{\pi}{L_0 + x}$, όπου $n = 0, 1, 2, \dots$

Για δεδομένο n , ο αρμονικός ταλαντωτής κινείται κάτω από ενεργό δυναμικό $V_{eff}(x) = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 + n \frac{\pi}{(L_0 + x)}$. Εφόσον ο αρμονικός ταλαντωτής είναι βαρύς, οι χαμηλές ιδιοκαταστάσεις του έχουν μικρό πλάτος, οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε $x \ll L_0$. Κρατώντας μέχρι τετραγωνικούς όρους στο ανάπτυγμα του $(L_0 + x)^{-1}$, βρίσκουμε

$$V_{eff}(x) = \frac{\pi}{L_0} - \frac{n\pi}{L_0^2} x + \frac{1}{2} M \left(\omega^2 + \frac{2n\pi}{ML_0^3} \right) x^2. \quad (16.76)$$

Το ελάχιστο του ενεργού δυναμικού είναι στο $x_0 = \frac{n\pi}{ML_0^2 \omega^2}$, ενώ η συχνότητα των μικρών ταλαντώσεων γύρω από τη θέση ισορροπίας είναι $\sqrt{\omega^2 + \frac{2n\pi}{ML_0^3}}$. Οι ιδιοκαταστάσεις ενέργειας του ΗΜ πεδίου είναι

$$\epsilon_n(x_0) = \frac{\pi}{(L_0 + \frac{n\pi}{ML_0^2 \omega^2})} \simeq \frac{\pi}{L_0} \left(1 - \frac{n\pi}{ML_0^3 \omega^2} \right). \quad (16.77)$$

Βεβαίως, η προσέγγιση ισχύει για επαρκώς μικρά n , έτσι ώστε $\frac{n\pi}{ML_0^3 \omega^2} \ll 1$.

Ερωτήσεις

1. Γράψτε την ηλεκτρονιακή δομή του ατόμου Pb ($Z = 82$) και του ατόμου Sg ($Z = 106$).
2. Πώς θα ήταν τα άτομα αν το ηλεκτρόνιο είχε spin $s = \frac{3}{2}$ και όλα τα άλλα ήταν ίδια;
3. Πώς θα ήταν τα άτομα αν το ηλεκτρόνιο ήταν μποζόνιο και όλα τα άλλα ήταν ίδια;
4. Το μέγεθος των ατόμων, όπως μετρείται από το μήκος των ομοιοπολικών δεσμών στους οποίους συμμετέχουν δίνεται από το Σχ. 16.5. Εξηγήστε τα βασικά χαρακτηριστικά του με βάση όσα ξέρετε από την προσέγγιση τροχιακών και την προσέγγιση ΤΦ.
5. Ποιο περιμένετε να είναι το μεγαλύτερο γνωστό άτομο;
6. Ποιες από τις παρακάτω ποσότητες περιμένετε να έχουν περιοδική συμπεριφορά στα άτομα: (i) η ενέργεια ιονισμού του πρώτου ηλεκτρονίου, (ii) η ενέργεια ιονισμού όλων των ηλεκτρονίων, (iii) η ενέργεια πρόσληψης ενός ηλεκτρονίου, (iv) η μέση απόσταση των ηλεκτρονίων από τον πυρήνα.

Ασκήσεις

1. Θεωρείστε σύστημα δύο αρμονικών ταλαντωτών σε μία διάσταση με ίδια συχνότητα ω και δυναμικό αλληλεπίδρασης $\hat{V} = \lambda \hat{x}_1^2 \otimes \hat{x}_2^2$. Υπολογίστε τις διορθώσεις της ενέργειας για τις τρεις πρώτες ενεργειακές στάθμες του αδιατάρακτου συστήματος και προσδιορίστε ποιος ιδιοκαταστάσεις του αδιατάρακτου επιλέγονται όταν υπάρχει εκφυλισμός.
2. Επαναλάβετε το παραπάνω ερώτημα θεωρώντας ότι οι δύο ταλαντωτές είναι φερμιονικοί.
3. Μελετήστε το φαινόμενο Σταρκ για τον ιδιόχωρο $n = 3$ της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου.
4. Δείξτε ότι στη δεύτερη τάξη της θεωρίας διαταραχών, η διόρθωση της ενέργειας ΔE της ενέργειας στη θεμελιώδη στάθμη του ατόμου του υδρογόνου λόγω εξωτερικού ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου \mathcal{E} είναι $\Delta E = -\frac{1}{2}b\mathcal{E}^2$, όπου $b = 2e^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|(1,0,0|\hat{x}_3|n,1,0)|^2}{E_n - E_1}$. Χρησιμοποιώντας την ανισότητα $E_n \geq E_2$ για $n \geq 2$, δείξτε ότι $\Delta E < \frac{16}{3}4\pi a_0^3$.
5. Θεωρείστε δύο άτομα υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση τους σε απόσταση $R \gg a_0$ μεταξύ τους. Το κάθε άτομο αποτελεί μία κατανομή φορτίου, και η κλασική ενέργεια αλληλεπίδρασης τους δίνεται στην προσέγγιση διπόλου από την έκφραση

$$W = \frac{e^2}{4\pi R^3} [\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 - 3(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{n})],$$

όπου \mathbf{r}_i το διάνυσμα θέσης του κάθε ηλεκτρονίου (ως προς τον αντίστοιχο πυρήνα του) και \mathbf{n} το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος της ευθείας που περνά από τους πυρήνες. (α) Γράψτε τον αντίστοιχο κβαντικό τελεστή. (β) Δείξτε ότι η διόρθωση πρώτης τάξης μηδενίζεται. (γ) Γράψτε τη διόρθωση δεύτερης τάξης και εκτιμήστε την χρησιμοποιώντας την (πολύ χονδρική προσέγγιση) προσέγγιση $E_n \ll E_1$ για $n > 1$. Θα βρείτε ότι η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι ανάλογη του R^{-6} , η οποία είναι χαρακτηριστική των λεγόμενων δυνάμεων φαν ντερ Βάαλς.

6. Στον κλασικό ΗΜ η αλληλεπίδραση δύο διπόλων με μαγνητικές ροπές $\boldsymbol{\mu}_1$ και $\boldsymbol{\mu}_2$ περιγράφεται από έναν όρο στη Χαμιλτονιανή

$$V = -\frac{2\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \delta(\mathbf{r}) - \frac{(3\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \mathbf{r}) - \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 r^2}{4\pi r^5},$$

όπου \mathbf{r} το διάνυσμα που ενώνει τα δύο δίπολα. Χρησιμοποιούμε αυτόν τον όρο για να περιγράψουμε την αλληλεπίδραση των διπολικών ροπών πυρήνα-ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου. Γράφουμε $\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 = \frac{e}{2m} g_e \mathbf{S}_e$ και $\hat{\boldsymbol{\mu}}_2 = \frac{e}{2m} g_p \mathbf{S}_p$. Εστιάζουμε στη διόρθωση της θεμελιώδους κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου λόγω της αλληλεπίδρασης, οπότε η συνεισφορά της τροχιακής στροφορμής του ηλεκτρονίου μηδενίζεται. (α) Δείξτε ότι ο δεύτερος όρος στο V δίνει μηδενική διόρθωση πρώτης τάξης. (β) Δείξτε ότι συνολική διόρθωση πρώτης τάξης είναι

$$\Delta E = -\frac{e^2 g_e g_p}{6m^2} |\psi_0(0)|^2 \mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p,$$

όπου ψ_0 η κυματοσυνάρτηση της θέσης για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου. (γ) Δείξτε ότι η εκφυλισμένη (ως προς το σπιν) θεμελιώδης κατάσταση σπάει σε δύο επίπεδα, τα οποία ορίζουν τη λεγόμενη *υπέρλεπτη υφή* του ατόμου του υδρογόνου. Για ολική στροφορμή ηλεκτρονίου-πρωτονίου $F = 0$,

$$\Delta E_0 = \frac{e^2 g_e g_p}{8\pi m^2 a_0^3}, \quad (16.75)$$

ενώ για $F = 1$,

$$\Delta E_1 = -\frac{e^2 g_e g_p}{24\pi m^2 a_0^3}. \quad (16.76)$$

(δ) Δείξτε ότι η ενέργεια των φωτονίων σε μεταβάσεις υπέρλεπτης υφής είναι $5, 9 \cdot 10^{-6} eV$.

7. Έστω άτομο του υδρογόνου μέσα σε μαγνητικό πεδίο. Αν το πεδίο είναι τόσο ασθενές, ώστε οι διορθώσεις τύπου Ζέεμαν είναι ίδιας τάξης με αυτές της υπέρλεπτης υφής, τότε δεν μπορούμε να θεωρήσουμε την αλληλεπίδραση με το μαγνητικό πεδίο χωριστά από την αλληλεπίδραση LS. Θεωρούμε τη συνολική διαταραχή $\hat{V} = \frac{eB}{2m}(\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3) + \frac{e^2}{8\pi m^2} \hat{r}^{-3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ και εφαρμόζουμε τη θεωρία διαταραχών για εκφυλισμένες καταστάσεις. (α) Δείξτε ότι οι διαταραχές στον ιδιόχωρο $n = 1$ είναι τετριμμένες, (β) κατασκευάστε τον πίνακα 8×8 της διαταραχής στον ιδιόχωρο $n = 2$. Είναι βολικό να χρησιμοποιήσετε τη βάση $|n, j, m_j, \ell\rangle$ και την ανάλυση του Κεφ. 11.5.4. (γ) Διαγωνοποιείστε τον πίνακα της διαταραχής και υπολογίστε τις διορθώσεις της ενέργειας.
8. Έστω σωματίο μάζας m μέσα σε κεντρικό δυναμικό Γιουκάβα $V(r) = -g \frac{e^{-\mu r}}{r}$, όπου g, μ θετικές σταθερές. Εκτιμήστε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης στο όριο όπου $gm/\mu \gg 1$. (Υπόδειξη: Χρησιμοποιείστε δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις της μορφής $\psi_b(r) = C e^{-b\mu r}$.)
9. Εκτιμήστε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης ενός αναρμονικού ταλαντωτή $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \lambda \hat{x}^4$ με τη θεωρία μεταβολών. (Υπόδειξη: χρησιμοποιείστε μία Γκαουσιανή συνάρτηση.)
10. Χρησιμοποιείστε τη θεωρία μεταβολών για να εκτιμήσετε την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης ενός σωματιδίου στην ημιευθεία $x > 0$ κάτω από δυναμικό $V(x) = ax^3$, όπου $a > 0$. (Προσοχή: η δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση πρέπει να ικανοποιεί συνθήκη Ντιρισλέ στο $x = 0$.)
11. Έστω Χαμιλτονιανή με ιδιοδιανύσματα $|\psi_n\rangle$ και ιδιοτιμές $E_n, n = 0, 1, 2, \dots$, με μη-εκφυλισμένη θεμελιώδη κατάσταση. Έστω $|\psi\rangle$ μία δοκιμαστική συνάρτηση. (α) Δείξτε ότι πάντα μπορούμε να επιλέξουμε τη φάση της $|\psi\rangle$, έτσι ώστε

$$\frac{1}{2} \|\psi - \psi_0\|^2 \leq 1 - \sqrt{\frac{E_1 - \langle \hat{H} \rangle}{E_1 - E_0}}.$$

Δείξτε ότι στη χαμηλότερη τάξη ως προς το σφάλμα $\Delta := \langle \hat{H} \rangle - E_0, \|\psi - \psi_0\| \leq \sqrt{\frac{\Delta}{E_1 - E_0}}$.

12. Δείξτε ότι η εξίσωση Γκρος-Πιταέβσκι σε μία διάσταση επιδέχεται λύσεις $\phi(x) = C \tanh(x/L)$ για $a > 0$ και $\phi(x) = C' [\cosh(x/L')]^{-1}$ για $a < 0$. Προσδιορίστε τις τιμές των L και L' .
13. Η προσέγγιση Τόμας-Φέρμι για την εξίσωση Γκρος-Πιταέβσκι συνίσταται στην υπόθεση ότι για μεγάλο αριθμό ατόμων συγκεντρωμένων σε μία μικρή περιοχή, ο όρος κινητικής ενέργειας είναι αμελητέος σε σύγκριση με τους όρους της δυναμικής ενέργειας. Βρείτε τη λύση της εξίσωσης μ' αυτήν την προσέγγιση. Υπολογίστε την κινητική ενέργεια γι' αυτή τη λύση θεωρώντας δυναμικό ομοιογενούς αρμονικού ταλαντωτή $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{x}^2$.
14. (α) Δείξτε ότι κάθε λύση της εξίσωσης ΤΦ που ικανοποιεί $\phi(0) = 1$ γράφεται κοντά στο $x = 0$ ως σειρά $\phi(x) = 1 + cx + \frac{4}{3} x^3/2 + \dots$ για κάποια σταθερά c . (β) Δείξτε ότι η συνάρτηση $\phi_s(x) = \frac{144}{x^3}$ είναι λύση της εξίσωσης ΤΦ. (γ) Δείξτε ότι κάθε λύση της εξίσωσης ΤΦ που μηδενίζεται στο άπειρο έχει ασυμπτωτική συμπεριφορά

$$\phi(x) = \frac{144}{x^3} + \frac{c'}{x^\sigma} + \dots,$$

όπου c' μία σταθερά και $\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{73}) \simeq 4,8$.

15. Έστω άτομο με Z ηλεκτρόνια στην προσέγγιση που αγνοείται η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων. Χρησιμοποιείστε τις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής του ατόμου του υδρογόνου για να δείξετε ότι στο όριο μεγάλου Z , η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης είναι

$$E_0 = - (12)^{1/3} \frac{1}{2ma_0^2} Z^{7/3}.$$

Συγκρίνετε με το αποτέλεσμα της θεωρίας ΤΦ.

16. Το μοριακό ιόν του υδρογόνου αποτελείται από δύο πυρήνες υδρογόνου σε απόσταση R και ένα ηλεκτρόνιο. Θεωρείστε δοκιμαστικές συναρτήσεις της μορφής $\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = [\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \pm \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)]$, όπου \mathbf{R}_i είναι τα διανύσματα θέσης των πρωτονίων και ψ_0 η θεμελιώδης κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου. Εξ' ορισμού $R = |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|$. (α) Δείξτε ότι ο παράγοντας κανονικοποίησης ισούται με $[2(1 \pm J)]^{-1/2}$, όπου

$$J = \int d^3r \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2).$$

- (β) Δείξτε ότι $J = e^{-X}(1 + X + \frac{1}{3}X^3)$. (γ) Δείξτε ότι $\langle \hat{H} \rangle = E_0[1 + 4C^2(K \pm L)]$, όπου

$$K = a_0 \int d^3r \frac{|\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|}, \quad L = a_0 \int d^3r \frac{\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|}.$$

- (δ) Δείξτε ότι $K = X^{-1}[1 - (1 + X)e^{-2X}]$ και ότι $L = (1 + X)e^{-X}$. (ε) Δείξτε ότι $\langle \hat{H} \rangle = E_0 S_{\pm}(X)$, όπου E_0 η ενέργεια της θεμελιώδους του ατόμου του υδρογόνου και

$$S_{\pm}(X) = -1 + \frac{2}{X} \left[\frac{(1 + X)e^{-2X} \pm (1 - \frac{2}{3}X^2)e^{-X}}{1 \pm (1 + X + \frac{1}{3}X^2)e^{-X}} \right].$$

- (στ) Από τη γραφική παράσταση του $S_{\pm}(X)$, δείξτε ότι μόνο η λύση με $+$ έχει ελάχιστο ως προς το X . Εκτιμήστε την αντίστοιχη τιμή του R και την ολική ενέργεια.

17. Κβαντικό σύστημα περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hat{P}^2}{2M} - a|\hat{Q}|^{-1} + \lambda \hat{x}^2 \hat{Q}^2$, όπου $\lambda, a > 0$, \hat{x} και \hat{p} είναι συζυγείς μεταβλητές θέσης και ορμής και ομοίως οι \hat{Q} και \hat{P} . Οι μάζες ικανοποιούν $m \ll M$, οπότε μπορείτε να χρησιμοποιήσετε την προσέγγιση Μπορν-Οπενχάιμ. (α) Βρείτε τη θέση ισορροπίας του βαριού σωματιδίου και τη συχνότητα των ταλαντώσεων γύρω από αυτή. (β) Υπολογίστε την ενέργεια της θεμελιώδους του ελαφριού σωματιδίου. (γ) Επαναλάβετε τα παραπάνω θεωρώντας ότι το ελαφρύ σωματίο βρίσκεται στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση.

Βιβλιογραφία

- Για τον υπολογισμό των φασμάτων σε ατομικά και μοριακά συστήματα, βλ. το βιβλίο κβαντικής χημείας του Levine [260]. Για τη θεωρία Τόμας-Φέρμι, βλ. τα κλασικά άρθρα επισκόπησης των March [261] και Lieb [262]

Κεφάλαιο 17

Θεωρία σκέδασης

Πώς μπορούμε να διαιρέσουμε ένα στοιχειώδες σωματίο; Μόνο βέβαια χρησιμοποιώντας έντονες δυνάμεις και πολύ ακριβή εργαλεία. Τα μόνα εργαλεία που έχουμε διαθέσιμα είναι άλλα στοιχειώδη σωματία. Οπότε, οι συγκρούσεις μεταξύ σωματιδίων εξαιρετικά υψηλής ενέργειας πρέπει να είναι οι μόνες διαδικασίες με τις οποίες τα σωματία θα μπορούν τελικά να διαχωριστούν.

B. Χάιζενμπεργκ [44]

17.1 Σκέδαση από δυναμικό

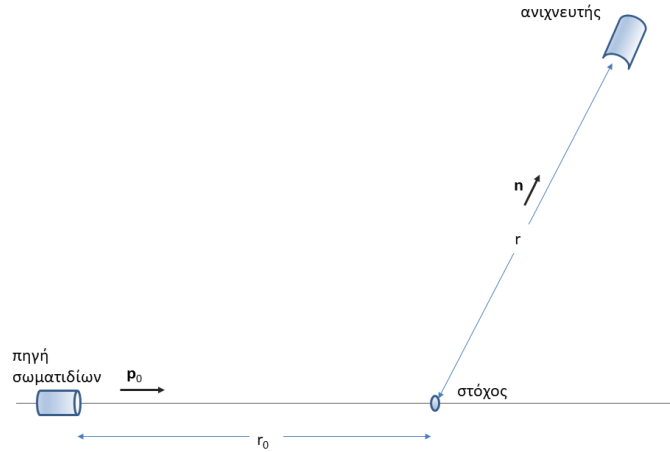
17.1.1 Πειράματα σκέδασης

Ένα από τα σημαντικότερα εργαλεία που έχουμε για να παίρνουμε πληροφορία για τη δομή και για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ μικροσκοπικών συστημάτων είναι τα πειράματα σκέδασης. Στα πειράματα σκέδασης προετοιμάζουμε μία δέσμη κάποιου είδους σωματιδίων και την κατευθύνουμε προς κάποιον στόχο. Η αλληλεπίδραση των σωματιδίων της δέσμης με αυτά του στόχου μπορεί να οδηγήσει σε διάφορα φαινόμενα: μεταβολή της ενέργειας και της κατεύθυνσης των επερχόμενων σωματιδίων, απελευθέρωση των σωματιδίων του στόχου, εμφάνιση νέων σωματιδίων και ούτω καθεξής. Γύρω από το στόχο έχουμε τοποθετήσει σωματιδιακούς ανιχνευτές, οι οποίοι προσδιορίζουν τα σωματίδια που προέρχονται από την περιοχή της αλληλεπίδρασης και μετρούν τις ορμές τους.

Τα πειραματικά δεδομένα ενός πειράματος σκέδασης είναι η στατιστική κατανομή των προϊόντων σωματιδίων, τόσο ως προς το είδος τους, όσο και ως προς ιδιότητες όπως η ορμή. Ο σκοπός της θεωρητικής περιγραφής είναι να περιγράψει τα πειραματικά δεδομένα από τη γνώση της προετοιμασίας των προσπιπτόντων σωματιδίων, του στόχου και από τη γνώση της αλληλεπίδρασής τους.

Τα πειράματα σκέδασης χαρακτηρίζονται από θεμελιώδεις διαφορές κλίμακας που απλουστεύουν σημαντικά την κβαντική περιγραφή.

1. Η δέσμη εισερχόμενων σωματιδίων προετοιμάζεται σε μακροσκοπικά μεγάλη απόσταση από το στόχο, και ομοίως οι μετρητικές συσκευές τοποθετούνται σε μακροσκοπικά μεγάλη απόσταση από το στόχο. Αυτό σημαίνει ότι τόσο τα εισερχόμενα όσο και τα εξερχόμενα σωματία συμπεριφέρονται ως ελεύθερα σωματία τον περισσότερο χρόνο, καθώς ο χρόνος που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους είναι πολύ μικρότερος τόσο από το χρόνο που χρειάζεται για να μεταβούν από την πηγή στο στόχο, τόσο και από το χρόνο που χρειάζεται για να μεταβούν από το στόχο στον ανιχνευτή.



Σχήμα 17.1: Η γεωμετρία ενός πειράματος σκέδασης.

2. Το εύρος της αρχικής δέσμης είναι πολύ μεγαλύτερο από τις τυπικές διαστάσεις των σωματιδίων του στόχου. Αυτό σημαίνει ότι η απόσταση που προσεγγίζει κάθε εισερχόμενο σωματίο ένα σωματίο του στόχου είναι τυχαία μεταβλητή, και ότι οι παρατηρούμενες πιθανότητες εμπεριέχουν άθροιση ως προς όλα τα σχετικά ενδεχόμενα.

Τα παραπάνω χαρακτηριστικά ικανοποιούνται από το σύστημα που περιγράφεται στο Κεφ. 8.3.4, δηλαδή τη σκέδαση ενός σωματίου από ένα δυναμικό στη μία διάσταση. Στη συνέχεια, θα εξετάσουμε το αντίστοιχο πρόβλημα σε τρεις διαστάσεις, όπως στο Σχ. 17.1.

Θεωρούμε ότι ο στόχος αντιστοιχεί σε ένα δυναμικό $V(\mathbf{r})$ το οποίο παίρνει τιμές διάφορες του μηδενός μόνο σε μία περιοχή διάσταση ℓ γύρω από την αρχή των αξόνων. Το δυναμικό μπορεί να θεωρηθεί ότι αφορά την αλληλεπίδραση δύο σωματιδίων (ενός από τη δέσμη και ενός από το στόχο) στο σύστημα όπου το κέντρο μάζας είναι ακίνητο. Ωστόσο αν τα σωματία του στόχου είναι πολύ πιο βαριά από αυτά της προσπίπτουσας δέσμης, κατά καλή προσέγγιση είναι τα ίδια ακίνητα.

Τα προσπίπτοντα σωματία προετοιμάζονται σε μία κατάσταση $\psi_0(\mathbf{r})$, η οποία είναι επικεντρωμένη γύρω από το σημείο $\mathbf{r}_0 = (0, 0, -r_0)$ με εύρος Δx , έτσι ώστε $r_0 \gg \Delta x \gg \ell$. Ο μετασχηματισμός Φουριέ $\tilde{\psi}_0$ της ψ_0 είναι επικεντρωμένος γύρω από την ορμή $\mathbf{p}_0 = (0, 0, p_0)$ με εύρος Δp , έτσι ώστε $p_0 \gg \Delta p$. Αυτό σημαίνει ότι $\psi(\mathbf{r}) \simeq 0$ αν $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \gg \Delta x$, και $\tilde{\psi}_0(\mathbf{p}) \simeq 0$ αν $|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0| \gg \Delta p$.

Το κυματοπακέτο κινείται σε μακροσκοπικές κλίμακες κατά μήκος του άξονα 3 για να βρει το στόχο. Από την άλλη στις κατευθύνσεις 1 και 2 εκτείνεται σε μικρή απόσταση γύρω από τον άξονα 3 και παραμένει έτσι και κάτω τη χρονική εξέλιξη. Το μόνο που μας ενδιαφέρει από τη συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης στις εγκάρσιες κατευθύνσεις είναι το εύρος της, γιατί αυτό ορίζει τη διατομή A της προσπίπτουσας δέσμης. Μπορούμε λοιπόν να παραμετροποιήσουμε την αρχική κυματοσυνάρτηση έτσι ώστε να εμφανίζεται μόνο η διατομή.

Θεωρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι διάφορη του μηδενός μόνο σε έναν κύλινδρο ακτίνας a γύρω από τον άξονα 3,

$$\psi_0(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \psi(0, 0, x_3), & \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \leq a \\ 0, & \sqrt{x_1^2 + x_2^2} > a \end{cases} \quad (17.1)$$

Αυτό σημαίνει ότι

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_3 |\psi(0, 0, x_3)|^2 = \frac{1}{A}, \quad (17.2)$$

όπου $A = \pi a^2$ είναι η διατομή της προσπίπτουσας δέσμης.

17.1.2 Υπολογισμός της πιθανότητας ανίχνευσης

Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει τα σκεδαζόμενα σωματία είναι $\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$. Καθώς το δυναμικό είναι μηδέν παντού εκτός από μία περιοχή γύρω από το στόχο, τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής \hat{H} ταυτίζονται με αυτά της Χαμιλτονιανής για ελεύθερο σωματίο. Βεβαίως τα δεύτερα έχουν άπειρο βαθμό εκφυλισμού, οπότε η επιλογή μίας γενικευμένης βάσης από αυτά τα ιδιοδιανύσματα είναι αυθαίρετη. Η ίδια ελευθερία υπάρχει και στην επιλογή μίας γενικευμένης βάσης για τη Χαμιλτονιανή \hat{H} . Εμείς διαλέγουμε μία γενικευμένη βάση $|\mathbf{k}\rangle$, η οποία χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα \mathbf{k} , έχει αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας $E_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m}$ και στην περιοχή όπου το δυναμικό μηδενίζεται συμπεριφέρεται ως

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \right], \quad (17.3)$$

όπου $r = |\mathbf{r}|$, $k = |\mathbf{k}|$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ και η συνάρτηση $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ καλείται πλάτος σκέδασης. Αφήνουμε την αυστηρή δικαιολόγηση της Εξ. (17.3), όπως και την απόδειξη της σχέσης ορθοκανονικότητας, για το Κεφ. 8.3, όπου θα αναπτύξουμε μία γενικότερη θεωρία. Για την ώρα παρατηρούμε ότι στο επίπεδο κλασικών κυμάτων, η Εξ. (17.3) είναι ένας γραμμικός συνδυασμός ενός επίπεδου κύματος (που αντιστοιχεί στην εισερχόμενη δέσμη) και ενός σφαιρικού κύματος (που αντιστοιχεί στα σκεδασμένα σωματία). Αυτή η επιλογή οδηγεί σε ιδιαίτερα απλή μορφή για την κυματοσυνάρτηση των σωματιδίων $\psi_t(\mathbf{r})$ μετά τη σκέδαση.

Για να το επιβεβαιώσουμε χρησιμοποιούμε την ανάλυση της μονάδας για τον τελεστή χρονικής εξέλιξης, προκειμένου να γράψουμε

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \int d^3k \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle e^{-iE_{\mathbf{k}}t} \langle \mathbf{k} | \psi_0 \rangle, \quad (17.4)$$

όπου το \mathbf{r} βρίσκεται στην περιοχή όπου το δυναμικό μηδενίζεται.

Βρίσκουμε ότι

$$\langle \mathbf{k} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{n}) \frac{e^{-i\mathbf{k}r}}{r} \right] \psi_0(\mathbf{r}) \quad (17.5)$$

$$\simeq \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}r_0} f_{\mathbf{k}}^*(-\mathbf{n}_0) \int d^3r e^{-i\mathbf{k}r} \psi_0(\mathbf{r}), \quad (17.6)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι η ψ_0 είναι στενά συγκεντρωμένη γύρω από την ακτινική συντεταγμένη $r = r_0$ και μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{n} = -\mathbf{p}_0/|\mathbf{p}_0| := -\mathbf{n}_0$. Επίσης γράφουμε $k r \simeq \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}$, όπου $\mathbf{k}' = -k\mathbf{n}_0$, αφού η κυματοσυνάρτηση είναι επικεντρωμένη σε σημεία που αντιστοιχούν σε μοναδιαίο διάνυσμα $-\mathbf{n}_0$. Άρα,

$$\langle \mathbf{k} | \psi_0 \rangle \simeq \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}) + \frac{1}{r_0} f_{\mathbf{k}}^*(-\mathbf{n}_0) \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}'), \quad (17.7)$$

Καθώς $|\mathbf{k}' - \mathbf{p}_0| = p_0 + k \gg \Delta p$, $\tilde{\psi}_0(\mathbf{k}') \simeq 0$, οπότε καταλήγουμε ότι

$$\langle \mathbf{k} | \psi_0 \rangle \simeq \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}), \quad (17.8)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (17.4), και γράφοντας $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})| e^{i\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})}$ παίρνουμε

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \psi_t^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}r} \int d^3k |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})| e^{i\mathbf{k}r - iE_{\mathbf{k}}t + i\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})} \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}), \quad (17.9)$$

όπου $\psi_t^{(0)}(\mathbf{r})$ η εξέλιξη της αρχικής κατάστασης κάτω από τη Χαμιλτονιανή του ελεύθερου σωματιδίου. Μπορούμε να πούμε ότι αυτός ο όρος αντιστοιχεί στο κλάσμα της αρχικής δέσμης που δεν έχει σκεδαστεί. Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος στην Εξ. (17.9), χρησιμοποιούμε τη μέθοδο αναπτύγματος της φάσης για μονοχρωματικά κυματοπακέτα—βλ. ένθετο 2.2.

Συγκεκριμένα προσεγγίζουμε $|f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})| \simeq |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|$, ενώ από τις φάσεις κρατάμε όρους μέχρι πρώτης τάξης ως προς $\mathbf{k} - \mathbf{p}_0$,

$$E_{\mathbf{k}} \simeq E_{\mathbf{p}_0} + \frac{\mathbf{p}_0}{m} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{p}_0), \quad k \simeq p_0 + \mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{p}_0), \quad (17.10)$$

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = \chi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) + \mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{p}_0) \quad (17.11)$$

όπου $\mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) = \nabla_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})|_{\mathbf{k}=\mathbf{p}_0}$.

Μ' αυτήν την προσέγγιση, η ολοκλήρωση ως προς \mathbf{k} δίνει απλά έναν αντίστροφο μετασχηματισμό Φουριέ για την ψ_0 ,

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \psi_t^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})}{r} e^{iE_{\mathbf{p}_0}t - i\mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{p}_0 t} \psi_0[\mathbf{n}_0 r - \frac{\mathbf{p}_0}{m}t + \mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})]. \quad (17.12)$$

Η ποσότητα $\mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})$ είναι ουσιαστικά μία ενεργή μετατόπιση του σωματιδίου λόγω της αλληλεπίδρασης. Είναι τυπικά της τάξης μεγέθους της εμβέλειας του δυναμικού, άρα πολύ μικρότερη από το r . Μπορεί λοιπόν να αγνοηθεί στο όρισμα της ψ_0 , καθώς και στη φάση για επαρκώς μεγάλους χρόνους. Οπότε,

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \psi_t^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})}{r} e^{iE_{\mathbf{p}_0}t} \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]. \quad (17.13)$$

Εφόσον ο χρόνος t δεν είναι υπερβολικά μεγάλος, ώστε να υπάρχει έντονη διασπορά του κυματοπακέτου, ο όρος $\psi_t^{(0)}(\mathbf{r})$ είναι διάφορος του μηδενός μόνο για εξαιρετικά μικρές γωνίες γύρω από το διάνυσμα \mathbf{n}_0 . Άρα για οποιοδήποτε άλλη κατεύθυνση, η πυκνότητα πιθανότητας ως προς τη θέση \mathbf{r} σε μία χρονική στιγμή t είναι

$$|\psi_t(\mathbf{r})|^2 = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{r^2} |\psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]|^2 \quad (17.14)$$

Θέλουμε να υπολογίσουμε την πιθανότητα ότι ένα σωματίο θα ανιχνευθεί οποιαδήποτε στιγμή από έναν στοιχειώδη ανιχνευτή που βρίσκεται στο \mathbf{r} . Αυτού του είδους η πιθανότητα είναι δύσκολο να υπολογιστεί, ο κανόνας του Μπορν δίνει την πιθανότητα σε μία δεδομένη χρονική στιγμή κάθε φορά, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να αθροίσουμε πιθανότητες από διαφορετικές χρονικές στιγμές.

Ωστόσο παρατηρούμε, η πυκνότητα πιθανότητας $|\psi_t(\mathbf{r})|^2$ εξαρτάται από το \mathbf{n} μόνο μέσω του $|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2$, ενώ η εξάρτηση από το t είναι μέσω του συνδυασμού $r - \frac{p_0}{m}t$. Άρα ουσιαστικά η ολοκλήρωση ως προς r , που επιτρέπεται από τον κανόνα του Μπορν, είναι ισοδύναμη με ολοκλήρωση ως προς χρόνο.

Υπολογίζουμε έτσι την πιθανότητα $\text{Prob}(\mathbf{n}, t) \delta\Omega$ το σωματίο να βρίσκεται τη χρονική στιγμή t εντός μίας στερεάς γωνίας ανοίγματος $\delta\Omega$ γύρω από το \mathbf{n} ,

$$\begin{aligned} \text{Prob}(\mathbf{n}, t) \delta\Omega &:= \delta\Omega \int_r^\infty r'^2 dr' |\psi_t(r', \mathbf{n})|^2 = \delta\Omega |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 \int_r^\infty dr |\psi_0(\mathbf{n}_0(r' - \frac{p_0}{m}t))|^2 \\ &= \delta\Omega |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 \int_{r' - \frac{p_0}{m}t}^\infty dx_3 |\psi_0(0, 0, x_3)|^2, \end{aligned} \quad (17.14)$$

όπου θέσαμε $x_3 = r' - \frac{p_0}{m}t$.

Για $t \gg m(r_0 + r)/p_0$ μπορούμε να αντικαταστήσουμε το κάτω όριο της ολοκλήρωσης με το $-\infty$, οπότε η Εξ. (17.14) ορίζει μία πυκνότητα πιθανότητας $p(\mathbf{n})$ ως προς τις δυνατές κατευθύνσεις των εξερχόμενων σωματιδίων

$$p(\mathbf{n}) = \frac{|f_{p_0}(\mathbf{n})|^2}{A}, \quad (17.15)$$

όπου η διατομή της προσπίπτουσας δέσμης όπως προκύπτει από την Εξ. (17.2).

17.1.3 Ενεργός διατομή

Δείξαμε ότι η πιθανότητα ανίχνευσης σωματιδίων κινούμενα προς την κατεύθυνση \mathbf{n} είναι ο λόγος μιας ποσότητας $\sigma(\mathbf{n})$ με διαστάσεις εμβαδού προς τη διατομή της αρχικής δέσμης,

$$p(\mathbf{n}) = \frac{\sigma(\mathbf{n})}{A}. \quad (17.16)$$

Αυτό το συμπέρασμα είναι γενικό σε πειράματα σκέδασης, αν και αποτελεί μία μη τετριμμένη πρόβλεψη της κβαντικής θεωρίας. Η ποσότητα $\sigma(\mathbf{n})$ στον αριθμητή καλείται *διαφορική ενεργός διατομή*. Είναι μετρήσιμη ποσότητα: χρειαζόμαστε να γνωρίζουμε το κλάσμα των αρχικών σωματιδίων που μετρήθηκε στη συγκεκριμένη κατεύθυνση και τη διατομή της αρχικής δέσμης.

Βεβαίως, η ανάλυση που κάναμε εδώ υποθέτει ένα και μοναδικό σωματίο στον στόχο. Αν έχουμε N σωματίδια του στόχου εντός της διατομής της εισερχόμενης δέσμης και θεωρούμε ότι η πιθανότητα σκέδασης από καθένα είναι τόσο μικρή ώστε η πολλαπλή σκέδαση να είναι αμελητέα, πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (17.16) με το N για να πάρουμε την παρατηρήσιμη πυκνότητα πιθανότητας.

Στη σκέδαση από δυναμικό που μελετήσαμε εδώ, δείξαμε ότι

$$\sigma(\mathbf{n}) = |f_{p_0}(\mathbf{n})|^2. \quad (17.17)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας (17.16) δεν είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα, δεδομένου ότι αγνοήσαμε το κλάσμα των σωματιδίων που δεν σκεδάστηκαν. Αν ολοκληρώσουμε ως προς όλες τις γωνίες παίρνουμε την ολική πιθανότητα σκέδασης $p_{tot} = \sigma_{tot}/A$, όπου

$$\sigma_{tot} = \int d^2\mathbf{n} \sigma(\mathbf{n}) \quad (17.18)$$

καλείται *ολική ενεργός διατομή*. Η ολική πιθανότητα σκέδασης είναι γενικά μικρότερη της μονάδας και πάντα υπάρχει μη μηδενική πιθανότητα μη-σκέδασης¹, ίση με $1 - p_{sc}$.

Αυτό που πετύχαμε με την παραπάνω ανάλυση είναι να εκφράσουμε την πιθανότητα ανίχνευσης, και άρα την ενεργό διατομή, ως συνάρτηση της ποσότητας $f_k(\theta)$ που ορίζεται από τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής. Εφόσον ισχύουν οι προϋποθέσεις που έχουμε θέσει για τη σκέδαση, μπορούμε να προσδιορίσουμε τις παρατηρήσιμες ποσότητες χωρίς να χρειαστεί να λύσουμε κάποια εξίσωση χρονικής εξέλιξης. Αρκεί η επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών για τη Χαμιλτονιανή \hat{H} , και η εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων που έχουν ασυμπτωτική συμπεριφορά όπως στην Εξ. (17.3).

¹Στη γλώσσα της θεωρίας πιθανοτήτων αυτό σημαίνει ότι ο δειγματικός χώρος του πειράματος που εξετάσαμε είναι $\Gamma = S^2 \cup \{OXI\}$, δηλαδή η ένωση της μοναδιαίας σφαίρας S^2 των κατευθύνσεων με το μονοσύνολο που περιέχει το ενδεχόμενο *OXI* της μη-σκέδασης.

17.1.4 Το οπτικό θεώρημα

Η Εξ. (17.17) ισχύει για όλες τις κατευθύνσεις \mathbf{n} εκτός από αυτές που σχηματίζουν γωνία της τάξης $\Delta x/r$ με τον άξονα \mathbf{p}_0 . Σ' αυτήν την περίπτωση, πρέπει κανείς να χρησιμοποιήσει την Εξ. (17.13) για να υπολογίσει τις σχετικές πιθανότητες.

Η Εξ. (17.13) δίνει

$$|\psi_t(\mathbf{r})|^2 = |\psi_t^{(0)}(\mathbf{r})|^2 + \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{r^2} |\psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]|^2 + \frac{2}{r} \text{Re} \left[f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) e^{iE_{\mathbf{p}_0}t} \psi_t^{*(0)}(\mathbf{r}) \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)] \right]. \quad (17.18)$$

Με βάση τη λογική που αναπτύξαμε παραπάνω, η πυκνότητα πιθανότητας $p(\mathbf{n})$ ως προς τις κατευθύνσεις των σωματιδίων ισούται με $\int_r^\infty r'^2 dr' |\psi_t(\mathbf{r})|^2$ για επαρκώς μεγάλο t , ενώ η αντίστοιχη ποσότητα $p^{(0)}(\mathbf{n})$ απουσία στόχου είναι $\int_r^\infty r'^2 dr' |\psi_t^{(0)}(\mathbf{r})|^2$, πάλι στο όριο μεγάλου χρόνου. Εφαρμόζοντας τα αντίστοιχα ολοκληρώματα στην Εξ. (17.18), παίρνουμε

$$p(\mathbf{n}) - p^{(0)}(\mathbf{n}) = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{A} + 2\text{Re} \left[e^{iE_{\mathbf{p}_0}t} \int_r^\infty r' dr' f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \psi_t^{*(0)}(\mathbf{r}) \psi_0[\mathbf{n}_0(r' - \frac{p_0}{m}t)] \right]. \quad (17.19)$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο αναπτύγματος φάσης, προκειμένου να προσεγγίσουμε

$$\psi_t^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{-iE_{\mathbf{p}_0}t} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{p}_0 t/m). \quad (17.20)$$

Η Εξ. (17.19) γράφεται

$$p(\mathbf{n}) - p^{(0)}(\mathbf{n}) = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{A} + 2\text{Re} \left[\int_r^\infty r' dr' f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \psi_0^*(\mathbf{r}' - \mathbf{p}_0 t/m) \psi_0[\mathbf{n}_0(r' - \frac{p_0}{m}t)] \right]. \quad (17.21)$$

Το γινόμενο $\psi_0^*(\mathbf{r}' - \mathbf{p}_0 t/m) \psi_0[\mathbf{n}_0(r' - \frac{p_0}{m}t)]$ είναι διάφορο του μηδενός μόνο αν $r' |\mathbf{n} - \mathbf{n}_0| < \Delta x$. Αφού στο ολοκλήρωμα $r' \geq r$, η παραπάνω συνθήκη γράφεται $|\mathbf{n} - \mathbf{n}_0| < \Delta x/r$. ή ισοδύναμα $4 \sin^2 \frac{\theta}{2} < \Delta x/r$, όπου θ η γωνία μεταξύ των \mathbf{n} και \mathbf{n}_0 οσοδήποτε μικρή. Για επαρκώς μεγάλο r , η γωνία θ γίνεται εξαιρετικά μικρή, οπότε $4 \sin^2 \frac{\theta}{2} \simeq \theta^2$, οπότε καταλήγουμε στη συνθήκη

$$|\theta| < \sqrt{\frac{\Delta x}{r}}. \quad (17.22)$$

Αυτό σημαίνει ότι ο όρος του ολοκληρώματος είναι ανάλογος μίας προσεγγιστικής συνάρτησης δέλτα στη μοναδιαία σφαίρα $\delta_\epsilon^2(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$. Η ακριβής συνάρτηση δέλτα ορίζεται από τη συνθήκη

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2\mathbf{n} \delta_\epsilon(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) f(\mathbf{n}) = f(\mathbf{n}_0). \quad (17.23)$$

Στην προκειμένη περίπτωση, το ϵ είναι της τάξης $\sqrt{\frac{\Delta x}{r}}$. Οπότε η Εξ. (17.21) γράφεται ως

$$p(\mathbf{n}) - p^{(0)}(\mathbf{n}) = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{A} + C \delta_\epsilon^2(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0). \quad (17.24)$$

Για να υπολογίσουμε την ποσότητα C , ολοκληρώνουμε και τα δύο σκέλη της Εξ. (17.24) ως προς \mathbf{n} . Για μεγάλους χρόνους ($t \gg m(r_0 + r)/p_0$), οι πυκνότητες πιθανότητας $p(\mathbf{n})$ και $p^{(0)}(\mathbf{n})$ είναι κανονικοποιημένες στη μονάδα, οπότε $\sigma_{tot}/ + C = 0$. Η Εξ. (17.24) δίνει

$$p(\mathbf{n}) - p^{(0)}(\mathbf{n}) = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 - \sigma_{tot} \delta_\epsilon^2(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)}{A}. \quad (17.25)$$

Η ενεργός διατομή σκέδασης στην κατεύθυνση \mathbf{n}_0 είναι μικρότερη από αυτή που προβλέπει η Εξ. (17.16). Επίσης $p(\mathbf{n}_0) - p^{(0)}(\mathbf{n}) < 0$ αριθμός των σωματιδίων στην κατεύθυνση \mathbf{n}_0 ύστερα από τη σκέδαση πρέπει να είναι μικρότερος από τον αντίστοιχο απουσία σκέδασης και η διαφορά να ισούται ακριβώς με τον αριθμό των σωματιδίων που σκεδάστηκαν στις άλλες κατευθύνσεις.

Μπορούμε επίσης να ολοκληρώσουμε την Εξ. (17.18) ως προς όλο το χώρο. Λόγω κανονικοποίησης $\int d^3r |\psi_t(\mathbf{r})|^2 = \int d^3r |\psi_t^{(0)}(\mathbf{r})|^2 = 1$. Από την άλλη, $\int d^3r \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2}{r^2} |\psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]|^2 = \int d^2\mathbf{n} p(\mathbf{n}) = \sigma_{tot}/A$. Σε συνδυασμό με την Εξ. (17.20), παίρνουμε

$$\sigma_{tot} = -2A \operatorname{Re} \left[\int \frac{d^3r}{r} f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \psi_0^*(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}_0}{m}t) \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)] \right] = -2A \operatorname{Re} [f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}_0)D]. \quad (17.26)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι το γινόμενο $\psi_0^*(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}_0}{m}t) \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]$ είναι διάφορο του μηδενός μόνο για εξαιρετικά μικρή γωνία θ μεταξύ των \mathbf{n} και \mathbf{n}_0 , για να αντικαταστήσουμε το $f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})$ με το $f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}_0)$. Μένει να υπολογίσουμε την ποσότητα

$$\begin{aligned} D &:= \int \frac{d^3r}{r} \psi_0^*(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}_0}{m}t) \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)] \\ &= 2\pi \int_0^\infty r dr \int_0^\pi d\theta \sin \theta \psi_0^*(0, 0, r \cos \theta - p_0 t/m) \psi_0(0, 0, r - p_0 t/m). \end{aligned}$$

Για να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα ως προς θ , θέτουμε $\xi = \cos \theta$ γράφουμε $\psi_0(0, 0, x) = \int dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k)$. Παίρνουμε

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \psi_0(0, 0, r \cos \theta - p_0 t/m) &= \int dk \psi_0(k) \int_0^\pi e^{-ikp_0 t/m} \int_{-1}^1 d\xi e^{ikr\xi} \\ &= \int \frac{dk}{ikr} \psi_0(k) \int_0^\pi (e^{ik(r-p_0 t/m)} - e^{-k(-r-p_0 t/m)}) \\ &\simeq \frac{1}{ip_0 r} [\psi_0(0, 0, r - p_0 t/m) - \psi_0(0, 0, -r - p_0 t/m)], \end{aligned} \quad (17.23)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι η $\tilde{\psi}$ είναι στενά συγκεντρωμένη γύρω από το p_0 .

Καθώς $\psi_0^*(0, 0, -r - p_0 t/m) \psi_0(0, 0, r - p_0 t/m) \simeq 0$, υπολογίζουμε $D = \frac{2\pi i}{p_0} \int_0^\infty dr |\psi_0(0, 0, r - p_0 t/m)|^2$. Για επαρκώς μεγάλο t , ισχύει η Εξ. (17.2) για το ολοκλήρωμα, οπότε $D = \frac{2\pi}{ip_0}$, και η Εξ. (17.26) γίνεται

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{p_0} \operatorname{Im} f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}_0) \quad (17.24)$$

Η Εξ. (17.24) καλείται *οπτικό θεώρημα*, δεδομένου ότι πρωτοαποδείχθηκε στα πλαίσια της σκέδασης κλασικών ΗΜ κυμάτων.

Μας επιτρέπει να γράψουμε την Εξ. (17.24) ως μία τοπική εξίσωση ως προς τις κατευθύνσεις σκέδασης, δηλαδή χωρίς να εμφανίζεται η ολοκληρωμένη ποσότητα σ_{tot} ,

$$p(\mathbf{n}) - p^{(0)}(\mathbf{n}) = \frac{|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 - \frac{4\pi}{p_0} \operatorname{Im} f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \delta_\epsilon^2(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)}{A} \quad (17.25)$$

Δεδομένου ότι $|f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})| \geq \operatorname{Im} f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})$, μία συνέπεια του οπτικού θεωρήματος είναι η ανισότητα

$$\sigma(\mathbf{n}_0) \geq \frac{p_0^2 \sigma_{tot}^2}{16\pi^2} \quad (17.26)$$

Η μέση ενεργός διατομή $\bar{\sigma}$ ορίζεται ως $\sigma_{tot}/4\pi$, οπότε η Εξ. (17.26) δίνει

$$\frac{\sigma(\mathbf{n}_0)}{\bar{\sigma}} \geq \frac{\pi\sigma_{tot}}{\lambda^2}, \quad (17.27)$$

όπου λ το μήκος κύματος ντε Μπρέιγ ενός σωματιδίου. Αν η ενεργός διατομή δεν ελαττώνεται με την ενέργεια πιο γρήγορα από $1/E$, ο λόγος σ_{tot}/λ^2 μπορεί να γίνει σημαντικά μεγαλύτερος της μονάδας και άρα η διαφορική ενεργός διατομή στην κατεύθυνση \mathbf{n}_0 να είναι πολύ μεγαλύτερη από τη μέση ενεργό διατομή. Αυτό σημαίνει ότι το μεγαλύτερο ποσοστό των σκεδαζόμενων σωματιδίων σχηματίζει μικρή γωνία με το \mathbf{n}_0 . Το οπτικό θεώρημα προβλέπει λοιπόν ότι σε επαρκώς μεγάλες ενέργειες κυριαρχεί η εμπροσθοσκέδαση.

17.1.5 Ταυτοτικά σωματάρια

Όπως είδαμε στο Κεφ. 13.1, η αλληλεπίδραση ενός σωματιδίου με ένα δυναμικό είναι ισοδύναμη με την αλληλεπίδραση δύο σωματιδίων στο σύστημα του κέντρου μάζας τους, εφόσον ταυτίσουμε το διάνυσμα θέσης \mathbf{r} του ενός σωματιδίου με το διάνυσμα σχετικής θέσης των δύο σωματιδίων $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Οστόσο όταν έχουμε δύο σωματάρια, πρέπει να λάβουμε υπόψη και τη στατιστική τους.

Αν η αλληλεπίδραση των σωματιδίων δεν εξαρτάται από το σπιν, τότε μπορούμε να εξετάσουμε τη συνέπεια της στατιστικής τους απλά συμμετροποιώντας ή αντισυμμετροποιώντας την αρχική κατάσταση. Η εναλλαγή των σωματιδίων είναι ισοδύναμη με την αλλαγή προσήμου του \mathbf{r} , δηλαδή μετασχηματισμού πάρτυ. Η μέση θέση και ορμή της αρχικής κατάστασης μετασχηματίζεται ως $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (-\mathbf{r}_0, -\mathbf{p}_0)$.

Η (αντι)συμμετροποίηση είναι ισοδύναμη με την αντικατάσταση της αρχικής κατάστασης $\psi_0(\mathbf{r})$ με την $\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(\mathbf{r}) \pm \psi_0(-\mathbf{r})]$. Η χρονικά εξελιγμένη κυματοσυνάρτηση αντικαθίσταται με την

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_t(\mathbf{r}) \pm \psi_t(-\mathbf{r})] + \frac{1}{\sqrt{2}} [f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \pm f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})] \frac{e^{iE_{\mathbf{p}_0}t}}{r} \psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]. \quad (17.28)$$

Οπότε καταλήγουμε ότι για οποιαδήποτε κατεύθυνση $\mathbf{n} \neq \pm\mathbf{n}_0$,

$$\sigma(\mathbf{n}) = \frac{1}{2} |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) \pm f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2. \quad (17.29)$$

Έστω ότι τα σκεδαζόμενα σωματάρια είναι ηλεκτρόνια. Αν το ολικό σπιν τους είναι $S = 0$, η χωρική συνάρτηση είναι συμμετρική, άρα ισχύει το πρόσημο $+$ στην Εξ. (17.29). Αν $S = 1$, η χωρική συνάρτηση είναι αντισυμμετρική, άρα ισχύει το πρόσημο $-$. Αν έχουμε κατάσταση πλήρους άγνοιας για τα σπιν, τότε έχουμε πιθανότητα $\frac{3}{4}$ για $S = 1$ και $\frac{1}{4}$ για $S = 0$, οπότε

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{n}) &= \frac{3}{8} |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) - f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 + \frac{1}{8} |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) + f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 \\ &= \frac{1}{2} |f_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 + \frac{1}{2} |f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})|^2 - \frac{1}{4} \text{Re} [f_{\mathbf{p}_0}^*(\mathbf{n}) f_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{n})]. \end{aligned} \quad (17.29)$$

17.2 Η προσέγγιση Μπορν

Αν το δυναμικό είναι ασθενές σε σχέση με την κινητική ενέργεια του σωματιδίου, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση Μπορν, η οποία προσφέρει ένα γρήγορο και απλό υπολογισμό του πλάτους σκέδασης.

Έστω ότι το δυναμικό είναι ασθενές, υπό την έννοια ότι είναι ανάλογο μιας αδιάστατης παραμέτρου $\lambda \ll 1$. Αφού το πλάτος σκέδασης $f(\mathbf{n})$ είναι μηδέν απουσία δυναμικού, περιμένουμε ότι

θα είναι κι αυτό ανάλογο του λ . Η προσέγγιση Μπορν συνίσταται στο να κρατήσουμε τους όρους χαμηλότερης τάξης ως προς λ στην εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}|\mathbf{k}\rangle = \frac{k^2}{2m}|\mathbf{k}\rangle$, για τα ιδιοδιανύσματα $|\mathbf{k}\rangle$ της Εξ. (17.3). Γράφοντας $\hat{H} = -\frac{1}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$, η εξίσωση ιδιοτιμών δίνει

$$(\nabla^2 + k^2) \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \right) = 2mV(\mathbf{r}) \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f(\mathbf{n}) \right]. \quad (17.30)$$

Όλοι οι όροι είναι τάξης λ , εκτός από τον όρο που περιέχει το γινόμενο $V(\mathbf{r})f(\mathbf{n})$, ο οποίος είναι τάξης λ^2 . Η προσέγγιση Μπορν συνίσταται στην αγνόηση αυτού του όρου, οπότε η Εξ (17.30) γίνεται

$$(\nabla^2 + k^2) \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \right) = 2mV(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (17.31)$$

Η παραπάνω εξίσωση λύνεται με τη μέθοδο των συναρτήσεων Γκριν. Η λύση της είναι της μορφής

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f(\mathbf{n}) = 2m \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}, \quad (17.32)$$

όπου $G(\mathbf{r})$ είναι μία συνάρτηση Γκριν του διαφορικού τελεστή $(\nabla^2 + k^2)$, δηλαδή μια λύση της εξίσωσης

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^{(3)}(\mathbf{r}). \quad (17.33)$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, βλέπουμε αμέσως ότι οι συναρτήσεις $-e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/(4\pi r)$ είναι λύσεις της Εξ.(17.33), όπως και οι γραμμικοί συνδυασμοί της μορφής

$$-[ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + (1-a)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}]/(4\pi r)$$

για τυχαίο a . Για να ισχύει η Εξ. (17.34), πρέπει οι λύσεις να έχουν ασυμπτωτική εξάρτηση από το r της μορφής $\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r}$. Άρα η μοναδική δυνατή επιλογή είναι $a = 1$. Οπότε βρίσκουμε ότι

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = -\frac{m}{2\pi} \int d^3r' \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}'), \quad (17.33)$$

Η παραπάνω εξίσωση ισχύει ασυμπτωτικά για μακροσκοπικά μεγάλες τιμές του r , ενώ το δυναμικό είναι διάφορο του μηδενός μόνο για $|\mathbf{r}'|$ μικρότερο από την εμβέλεια του δυναμικού, που είναι μικροσκοπική ποσότητα. Άρα μπορούμε να προσεγγίσουμε $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} \simeq \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'} = r\sqrt{1 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r^2} \simeq r(1 - \mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r^2) = r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'$. Στον παρονομαστή αρκεί η προσέγγιση $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \simeq r$. Καταλήγουμε ότι

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = \frac{m}{2\pi} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (17.34)$$

όπου $\mathbf{q} = k\mathbf{n} - \mathbf{k}$ είναι η διαφορά μεταξύ της ορμής του εξερχόμενου σωματιδίου που ανιχνεύεται και του εισερχόμενου. Στην προσέγγιση Μπορν, το πλάτος σκέδασης εξαρτάται από τα διανύσματα \mathbf{k} και \mathbf{n} μόνο μέσω του \mathbf{q} .

Για ακτινικό δυναμικό, επιλέγουμε το \mathbf{q} στον άξονα z , οπότε υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα (17.34) σε σφαιρικές συντεταγμένες βρίσκουμε

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi} \int_0^\infty dr r^2 V(r) \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{-iqr \cos\theta} \int_0^{2\pi} d\phi = -\frac{2m}{q} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr). \quad (17.35)$$

Βλέπουμε ότι το πλάτος σκέδασης εξαρτάται μόνο από το μέτρο του \mathbf{q} . Αμέσως υπολογίζουμε ότι $q^2 = 2k^2(1 + \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$, όπου $\cos \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}/k$. Άρα ,

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (17.36)$$

Παράδειγμα 17.1. Για δυναμικό Γιουκάβα $V(r) = ge^{-\mu r}/r$, η Εξ. (17.35) δίνει

$$f(q) = -\frac{2mg}{q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin(qr) = -\frac{2mg}{q^2 + \mu^2}. \quad (17.37)$$

Οπότε η διαφορική ενεργός διατομή είναι

$$\sigma(\theta) = \frac{4m^2 g^2}{(\mu^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}. \quad (17.38)$$

Η ολική ενεργός διατομή είναι

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= 4m^2 g^2 (2\pi) \int_0^\pi \frac{d\theta \sin \theta}{[\mu^2 + 2k^2(1 + \cos \theta)]^2} \\ &= \frac{8\pi m^2 g^2}{\mu^4} \int_0^2 \frac{dy}{\left(1 + \frac{2k^2}{\mu^2} y\right)^2} = \frac{16\pi m^2 g^2}{\mu^2(\mu^2 + 4k^2)}, \end{aligned} \quad (17.38)$$

όπου θέσαμε $y = 1 + \cos \theta$. Βλέπουμε ότι η ολική ενεργός διατομή ελαττώνεται με την ενέργεια.

Στο όριο $\mu \rightarrow 0$, το δυναμικό Γιουκάβα ταυτίζεται δυναμικό Κουλόμπ, οπότε η Εξ. (17.38) γίνεται

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2 g^2}{4k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{g^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (17.39)$$

Η Εξ. (17.39) καλείται τύπος του Ράδερφορντ καθώς είχε υπολογιστεί στα πλαίσια της κλασικής φυσικής για το περιβόητο πείραμα του Ράδερφορντ, που οδήγησε στο μοντέλο του για το άτομο.

Η ολική ενεργός διατομή απειρίζεται στο όριο $\mu \rightarrow 0$. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το δυναμικό Κουλόμπ είναι μεγάλης εμβέλειας, οπότε αυστηρά μιλώντας η Εξ. (17.3) δεν είναι ακριβής για την ασυμπτωτική συμπεριφορά των ιδιοσυναρτήσεων του αντίστοιχου τελεστή Σρέντινγκερ.

17.3 Σκέδαση σε σφαιρικά συμμετρικά δυναμικά

17.3.1 Υπολογισμός του πλάτους σκέδασης

Στη συνέχεια θα επικεντρωθούμε στην ειδική περίπτωση σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού $V(\mathbf{r}) = V(r)$. Δεδομένου ότι η Χαμιλτονιανή είναι αναλλοίωτη κάτω από περιστροφές, το πλάτος σκέδασης $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ πρέπει να παραμένει αναλλοίωτο κάτω από το μετασχηματισμό $\mathbf{k} \rightarrow R\mathbf{k}$ και $\mathbf{n} \rightarrow R\mathbf{n}$, όπου R γενικός πίνακας περιστροφής. Αυτό σημαίνει ότι το $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ εξαρτάται μόνο από τις βαθμωτές ποσότητες που σχηματίζονται από τα διανύσματα \mathbf{k} και \mathbf{n} , δηλαδή από το μέτρο $k = |\mathbf{k}|$ και τη γωνία θ μεταξύ των δύο διανυσμάτων, $\cos \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}/k$. Θα γράφουμε λοιπόν το πλάτος σκέδασης ως $f_k(\theta)$.

Στο Κεφ. 13.2.3 δείξαμε ότι οι ιδιοκαταστάσεις σκέδασης του τελεστή Σρέντινγκερ για σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό προσδιορίζονται από τις φασικές μετατοπίσεις $\delta_\ell(k)$ που χαρακτηρίζουν την ασυμπτωτική συμπεριφορά της ιδιοσυνάρτησης για μεγάλα r . Περιμένουμε ότι το πλάτος σκέδασης μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση των φασικών μετατοπίσεων.

Γράφουμε τη γενική έκφραση για μία ιδιοσυνάρτηση σκέδασης με ενέργεια $E = \frac{k^2}{2m}$ στο όριο μεγάλων αποστάσεων r ,

$$\psi_k(r, \theta, \phi) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell,m} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell}(k) \right) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (17.40)$$

όπου $c_{\ell,m}$ σταθερές. Το ζητούμενο είναι να επιλέξουμε τις σταθερές $c_{\ell,m}$, έτσι ώστε η (17.41) να είναι της μορφής (17.3). Λόγω της σφαιρικής συμμετρίας, μπορούμε πάντα να επιλέξουμε το διάνυσμα \mathbf{k} στην Εξ. (17.3) να είναι στην κατεύθυνση \mathcal{Z} , έτσι ώστε τα ιδιοδιανύσματα να μην εξαρτώνται από τη γωνία ϕ . Αυτό σημαίνει ότι στην Εξ. (17.40) εμφανίζονται μόνο οι σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell 0}(\theta)$, οι οποίες είναι ανάλογες του $P_{\ell}(\cos \theta)$, όπου P_{ℓ} τα πολυώνυμα Λεζάντρ—βλ. Εξ. (11.80). Οπότε μπορούμε να γράψουμε την ιδιοσυνάρτηση (17.41) ως

$$\psi_k(r, \theta) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} d_{\ell}(2\ell + 1) \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell}(k) \right) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (17.41)$$

για κάποιες σταθερές d_{ℓ} . Αυτή η έκφραση πρέπει να εξισωθεί με την έκφραση $e^{ikr \cos \theta} + f_k(\theta)e^{ikr}/r$ της Εξ. (17.3). Γι' αυτό το σκοπό χρησιμοποιούμε το λεγόμενο ανάπτυγμα σε σφαιρικά κύματα,

$$e^{i\rho \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(\rho) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (17.42)$$

η απόδειξη του οποίου δίνεται στο Ένθετο 17.1. Επίσης αναπτύσσουμε το πλάτος σκέδασης στη βάση των πολυωνύμων Λεζάντρ $f_k(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta)$. Η Εξ. (17.3) δίνει

$$\psi_k(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left[i^{\ell} j_{\ell}(kr) + f_{\ell} \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_{\ell}(\cos \theta). \quad (17.43)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (13.45) για το όριο του μεγάλου r , παίρνουμε

$$\psi_k(r, \theta) = \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left\{ e^{ikr} \left[i^{\ell} e^{-i\ell\pi/2} + 2ikf_{\ell} \right] - e^{-ikr} \left(i^{\ell} e^{i\ell\pi/2} \right) \right\} P_{\ell}(\cos \theta).$$

Εξισώνοντας με την Εξ. (17.41) παίρνουμε

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left[e^{ikr} \left(1 + 2ikf_{\ell} - d_{\ell}(-i)^{\ell} e^{+i\delta_{\ell}(k)} \right) - e^{-ikr} i^{\ell} \left(i^{\ell} - d_{\ell} e^{-i\delta_{\ell}(k)} \right) \right] P_{\ell}(\cos \theta) = 0.$$

Ο μηδενισμός του συντελεστή του e^{-ikr} δίνει $d_{\ell} = i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}(k)}$. Ο μηδενισμός του συντελεστή του e^{ikr} δίνει $2ikf_{\ell} = d_{\ell}(-i)^{\ell} e^{i\delta_{\ell}(k)} - 1$, και αντικαθιστώντας για το d_{ℓ} βρίσκουμε ότι

$$f_{\ell} = \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2ikr} = \frac{\sin \delta_{\ell} e^{i\delta_{\ell}}}{k}. \quad (17.41)$$

Άρα το πλάτος σκέδασης είναι

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin \delta_{\ell} e^{i\delta_{\ell}} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (17.42)$$

Η ολική ενεργός διατομή σκέδασης είναι $\sigma_{tot} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f_k(\theta)|^2$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. (4.17), υπολογίζουμε

$$\sigma_{tot} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) |f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (17.43)$$

Καθώς $P_\ell(1) = 1$, βρίσκουμε ότι $\text{Im} f_k(\theta)(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell = \frac{4\pi}{k} \sigma_{tot}$, και άρα επιβεβαιώνουμε το οπτικό θεώρημα.

Σε ότι αφορά τη σκέδαση ταυτοτικών σωματιδίων ισχύουν τα εξής. Για συμμετροποιημένη χωρική κατάσταση, $\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$, οπότε στο πλάτος σκέδασης συνεισφέρουν μόνο άρτιες τιμές του ℓ που αντιστοιχούν σε θετική πάριτυ. Για αντισυμμετροποιημένη χωρική κατάσταση, $\psi(\mathbf{r}) = -\psi(-\mathbf{r})$, οπότε στο πλάτος σκέδασης συνεισφέρουν μόνο περιττές τιμές του ℓ που αντιστοιχούν σε αρνητική πάριτυ.

Ένθετο 17.1. Απόδειξη του αναπτύγματος (17.42).

Αφού τα πολώνυμα Λεζάντρ αντιστοιχούν σε ορθοκανονική βάση στον χώρο Χίλμπερτ $L^2([-1, 1])$, η Εξ. (17.42) είναι ισοδύναμη με τον προσδιορισμό των συντελεστών του αναπτύγματος της συνάρτησης $e^{i\rho x}$ σ' αυτή τη βάση ως

$$\int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} P_\ell(x) = 2i^\ell j_\ell(x). \quad (17.44)$$

Από τον τύπο του Ροντρίγκεζ,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} P_\ell(x) &= \frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^\ell \frac{d^\ell e^{i\rho x}}{dx^\ell} \\ &= \frac{(-i\rho)^\ell}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^\ell e^{i\rho x}. \end{aligned} \quad (17.44)$$

Στην παραπάνω εξίσωση κάναμε ολοκλήρωση κατά παράγοντες ℓ φορές και χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι $\frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^\ell |_{x=\pm 1} = 0$, για $n < \ell$.

Παρατηρούμε ότι

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} = \frac{i}{\rho} \int_{-1}^1 dx x e^{i\rho x} = \frac{i}{2\rho} \int_{-1}^1 d(x^2 - 1) e^{i\rho x} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1) e^{i\rho x}. \quad (17.45)$$

Επαναλαμβάνοντας την ίδια πράξη ℓ φορές παίρνουμε

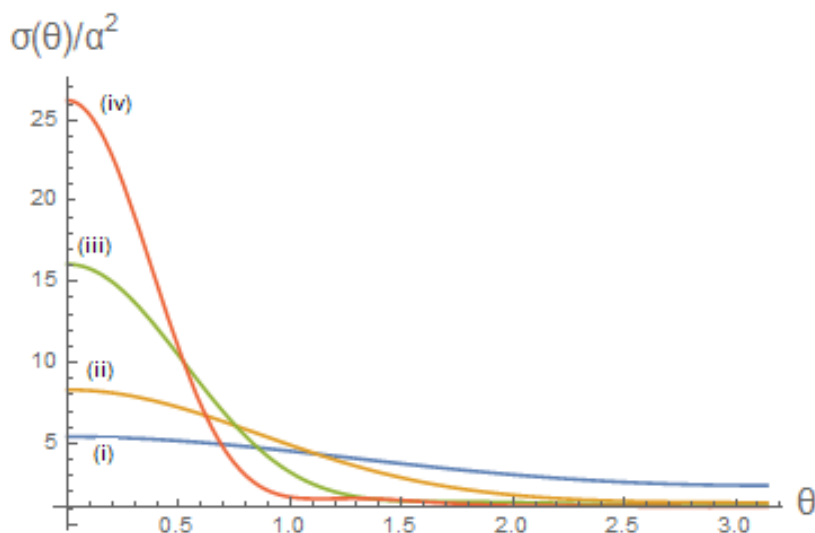
$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^\ell \int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} = \frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^\ell e^{i\rho x}. \quad (17.46)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (17.44) και χρησιμοποιώντας την Εξ. (13.41) παίρνουμε το ζητούμενο αποτέλεσμα

$$\int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} P_\ell(x) = (-i\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^\ell \int_{-1}^1 dx e^{i\rho x} = 2i^\ell (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho x}{\rho} = 2i^\ell j_\ell(x). \quad (17.47)$$

17.3.2 Δυναμικό σκληρής σφαίρας

Στο παράδειγμα 13.1 είχαμε δείξει ότι για δυναμικό σκληρής σφαίρας, οι μετατοπίσεις φάσης δίνονται από την Εξ. (13.52), $\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$, όπου a η ακτίνα της σκληρής σφαίρας. Αυτό σημαίνει



Σχήμα 17.2: Η αδιάστατη διαφορική ενεργός διατομή $\sigma(\theta)/a^2$ για δυναμικό σκληρής σφαίρας ακτίνας a , ως συνάρτηση του θ , για διαφορετικές τιμές της ενέργειας: (i) $ka = 0, 5$, (ii) $ka = 1$, (iii) $ka = 2$ και (iv) $ka = 3$.

ότι

$$e^{2i\delta_\ell} = -\frac{j_\ell(ka) - i\eta_\ell(ka)}{j_\ell(ka) + i\eta_\ell(ka)}. \quad (17.48)$$

και άρα ότι

$$f_\ell = -\frac{1}{k} \frac{j_\ell(ka)}{j_\ell(ka) + i\eta_\ell(ka)}. \quad (17.49)$$

Η διαφορική ενεργός διατομή ως συνάρτηση της γωνίας θ δίνεται στο Σχ. 17.2. Παρατηρούμε ότι όσο μεγαλώνει η ενέργεια, η εμπροσθοσκέδαση γίνεται ολοένα και πιο έντονη.

Η ολική ενεργός διατομή είναι

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \frac{j_\ell(ka)^2}{j_\ell(ka)^2 + \eta_\ell(ka)^2}. \quad (17.50)$$

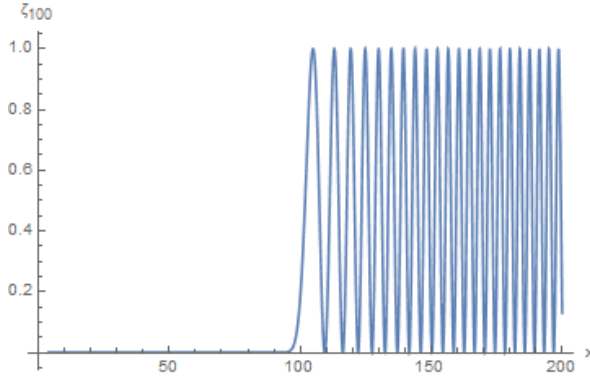
Στο όριο όπου $x \ll \ell$, οι σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσελ προσεγγίζονται ως (βλ. Ασκ. 13.7)

$$j_\ell(x) \simeq \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell + 1)!} x^\ell, \quad \eta_\ell(x) \simeq -\frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} x^{-(\ell+1)}, \quad (17.51)$$

οπότε για $ka \ll \ell$, $\tan \delta_\ell = -\frac{2^{2\ell} (\ell!)^2}{(2\ell+1)! (2\ell)!} (ka)^{2\ell+1}$. Αυτή η ποσότητα είναι πολύ μικρότερη της μονάδας σε απόλυτη τιμή, άρα η συνεισφορά στη ενεργό διατομή από στροφορμές $\ell \gg ka$ είναι αμελητέα. Στο κλασικό ανάλογο, ο λόγος ℓ/k είναι ίσος με την ελάχιστη απόσταση από το κέντρο που περνά ένα σωματίο. Αν αυτή είναι μεγαλύτερη από την εμβέλεια του δυναμικού, τότε το σωματίο δεν σκεδάζεται. Κλασικά η πιθανότητα σκέδασης θα έπρεπε να είναι ακριβώς μηδέν για ℓ απλά μεγαλύτερο του ka , κάτι που δεν ισχύει κβαντικά. Η έννοια της ελάχιστης απόστασης προϋποθέτει ύπαρξη τροχιάς για το σωματίο, κάτι που είναι ασύμβατο με την κβαντική θεωρία.

Για πολύ μικρές ενέργειες ($ka \ll 1$), παίρνουμε $\delta_\ell \sim (ka)^{2\ell+1}$, οπότε η κυρίαρχη συνεισφορά στην ενεργό διατομή προέρχεται από το $\ell = 0$. Δηλαδή σε καλή προσέγγιση, η διαφορική ενεργός διατομή δεν εξαρτάται από τη γωνία θ . Σ' αυτό το όριο,

$$\delta_0 = -ka, \quad (17.52)$$



Σχήμα 17.3: Το γράφημα της συνάρτησης $\zeta_\ell(x) := \frac{j_\ell(x)^2}{j_\ell(x)^2 + n_\ell(x)^2}$ για $\ell = 100$.

οπότε η Εξ. (17.43) δίνει

$$\sigma_{tot} = 4\pi a^2. \quad (17.53)$$

Το αποτέλεσμα διαφέρει κατά έναν παράγοντα 4 από την κλασική έκφραση. Κλασικά σκεδάζονται μόνο σωμάτια που πλησιάζουν το κέντρο σε απόσταση μικρότερη του a , οπότε $\sigma_{tot} = \pi a^2$.

Για ταυτοτικά σωμάτια, και για συμμετροποιημένη χωρική κυματοσυνάρτηση, η Εξ. (17.29) δίνει

$$\sigma_{tot} = 8\pi a^2. \quad (17.54)$$

Για αντισυμμετροποιημένη χωρική κυματοσυνάρτηση, η κυρίαρχη συνεισφορά στις χαμηλές ενέργειες προέρχεται από το $\ell = 1$, αφού ο όρος με $\ell = 0$ δε συνεισφέρει. Καθώς $\delta_1 = -\frac{2}{3}(ka)^3$, η Εξ. (17.29) δίνει

$$\sigma_{tot} = \frac{32}{3}a^3k. \quad (17.55)$$

Για υψηλές ενέργειες, $ka \gg \ell$, εξετάζουμε τη συμπεριφορά της ποσότητας $\zeta_\ell(x) := \frac{j_\ell(x)^2}{j_\ell(x)^2 + n_\ell(x)^2}$ που εμφανίζεται στην Εξ. (17.50). Για μεγάλα ℓ , η $\zeta_\ell(x)$ συμπεριφέρεται ως εξής. Παίρνει αμελητέες τιμές για $x < \ell$, αποκτά ένα απότομο μέγιστο για $x \simeq \ell$ και για $x > \ell$ επιδεικνύει ταλαντωτική συμπεριφορά. Μία ενδεικτική γραφική δίνεται στο Σχ 17.3.

Αυτό σημαίνει ότι για μεγάλες τιμές του ka , μόνο όροι με $\ell < ka$ συνεισφέρουν στο άθροισμα (17.50) για την σ_{tot} . Γι' αυτούς τους όρους χρησιμοποιούμε την ασυμπτωτική έκφραση (13.45), οπότε η Εξ. (17.48) δίνει ότι $\delta_\ell = -ka + \frac{\ell\pi}{2}$, ή ισοδύναμα

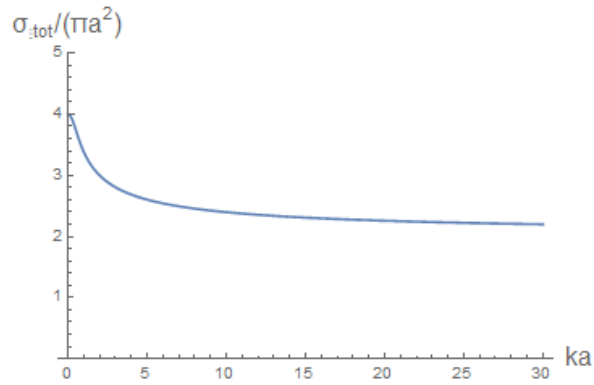
$$\sin^2 \delta_\ell = \begin{cases} \sin^2 ka, & \ell = 2n \\ \cos^2 ka, & \ell = 2n + 1 \end{cases} \quad (17.56)$$

Σ' αυτήν την προσέγγιση, δύο διαδοχικοί όροι $\ell = 2n$ και $\ell = 2n + 1$ συνεισφέρουν στο σ_{tot} κατά $(4n + 1) \sin^2 ka + (4n + 3) \cos^2 ka = 2(2n + 1) + \cos(2ka)$. Έτσι παίρνουμε

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[(2n + 1) + \frac{1}{2} \cos(2ka) \right], \quad (17.57)$$

όπου $n_{max} = \frac{1}{2}ka \gg 1$ η μέγιστη τιμή του n για την οποία υπάρχει σημαντική συνεισφορά στο άθροισμα. Βρίσκουμε ότι

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi}{k^2} \left[n_{max}^2 + 2n_{max} + \frac{1}{2}n_{max} \cos(2ka) \right] \simeq \frac{8\pi}{k^2} n_{max}^2 = 2\pi a^2. \quad (17.58)$$



Σχήμα 17.4: Η ολική ενεργός διατομή σ_{tot} για δυναμικό σκληρής σφαίρας διαιρεμένη με την κλασική διατομή πa^2 , ως συνάρτηση του ka .

Το αποτέλεσμα διαφέρει κατά έναν παράγοντα 2 από την κλασική έκφραση. Κλασικά σκεδάζονται μόνο σωμάτια που πλησιάζουν το κέντρο σε απόσταση μικρότερη του a , οπότε $\sigma_{tot} = \pi a^2$. Αφελώς θα περιμέναμε να πάρουμε το κλασικό αποτέλεσμα στο όριο των μεγάλων ενεργειών, ωστόσο το αποτέλεσμα διαφέρει κατά έναν παράγοντα 2. Η κλασική ανάλυση είναι εντελώς αναξιόπιστη ως ποσοτικός οδηγός για τη σκέδαση είτε στις υψηλές είτε στις χαμηλές ενέργειες.

Σ' αυτό το σύστημα, η ολική ενεργός διατομή είναι φθίνουσα συνάρτηση της ενέργειας, όπως δείχνεται στο Σχ. 17.4.

17.3.3 Γενική συμπεριφορά του πλάτους σκέδασης

Η συμπεριφορά των μετατοπίσεων φάσης και της ενεργού διατομής στο δυναμικό σκληρής σφαίρας είναι τυπική για δυναμικά μικρής εμβέλειας. Για να το διαπιστώσουμε εξετάζουμε την περίπτωση όπου ένα σωμάτιο μάζας m βρίσκεται εντός ενός γενικού κεντρικού δυναμικού $V(r)$ που μηδενίζεται για $r > a$. Για $r < a$, η ακτινική κυματοσυνάρτηση $R_{k,\ell}(r)$ είναι λύση της Εξ. (13.29) για $E = \frac{k^2}{2m}$. Για $r > a$, η ακτινική κυματοσυνάρτηση δίνεται από την Εξ. (13.49). Η απαίτηση συνέχειας του $R_{k,\ell}(r)$ και της πρώτης παραγώγου του στο $r = a$ δίνει τις εξισώσεις

$$R_{k,\ell}(a) = C_\ell(k) [\cos \delta_\ell j_\ell(ka) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(ka)] \quad (17.59)$$

$$R'_{k,\ell}(a) = C_\ell(k) k [\cos \delta_\ell j'_\ell(ka) - \sin \delta_\ell \eta'_\ell(ka)] \quad (17.60)$$

Ορίζουμε τη λογαριθμική παράγωγο

$$b_\ell(k) := a \frac{d \ln R_{k,\ell}(a)}{dr} \quad (17.61)$$

η οποία είναι μία αδιάστατη ποσότητα. Η Εξ. (6.60) σημαίνει ότι $\frac{d}{dk} b_\ell(k) \leq 0$.

Από τις Εξ. (17.59—17.60) παίρνουμε

$$b_\ell(k) = ka \frac{\cos \delta_\ell j'_\ell(ka) - \sin \delta_\ell \eta'_\ell(ka)}{\cos \delta_\ell j_\ell(ka) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(ka)}, \quad (17.62)$$

ή ισοδύναμα,

$$\tan \delta_\ell = \frac{b_\ell(k) j_\ell(ka) - ka j'_\ell(ka)}{b_\ell(k) \eta_\ell(ka) - ka \eta'_\ell(ka)}. \quad (17.63)$$

Βλέπουμε ότι οι μετατοπίσεις φάσης προσδιορίζονται πλήρως από τις λογαριθμικές παραγώγους $b_\ell(k)$. Για $b_\ell(k) \rightarrow \infty$, $\tan \delta_\ell \rightarrow \frac{j_\ell(ka)}{\eta_\ell(ka)}$, δηλαδή παίρνουμε τις ίδιες μετατοπίσεις φάσης με το δυναμικό σκληρής σφαίρας. Τις τελευταίες θα τις συμβολίζουμε ως $\delta_\ell^{(0)}$.

Για να κάνουμε εκπεφρασμένη τη σχέση των μετατοπίσεων φάσης δ_ℓ και $\delta_\ell^{(0)}$, γράφουμε την Εξ. (17.63) ως

$$e^{2i\delta_\ell} = -\frac{j_\ell(ka) - i\eta_\ell(ka)}{j_\ell(ka) + i\eta_\ell(ka)} \frac{b_\ell(k) - ka \frac{j'_\ell(ka) - i\eta'_\ell(ka)}{j_\ell(ka) - i\eta_\ell(ka)}}{b_\ell(k) - ka \frac{j'_\ell(ka) + i\eta'_\ell(ka)}{j_\ell(ka) + i\eta_\ell(ka)}}. \quad (17.64)$$

Από την Εξ. (17.48) βλέπουμε ότι ο πρώτος όρος στο γινόμενο είναι απλά $e^{2i\delta_\ell^{(0)}}$. Ορίζουμε

$$Q_\ell(k) + iS_\ell(k) = \frac{j'_\ell(ka) + i\eta'_\ell(ka)}{j_\ell(ka) + i\eta_\ell(ka)}, \quad (17.65)$$

έτσι ώστε να γράψουμε την Εξ. (17.64) ως

$$e^{2i\delta_\ell - 2i\delta_\ell^{(0)}} = \frac{b_\ell(k) - Q_\ell(k) + iS_\ell(k)}{b_\ell(k) - Q_\ell(k) - iS_\ell(k)}, \quad (17.66)$$

οπότε

$$\tan[\delta_\ell - \delta_\ell^{(0)}] = \frac{S_\ell(k)}{b_\ell(k) - Q_\ell(k)}, \quad (17.67)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (13.42), βρίσκουμε ότι η ποσότητα

$$S_\ell(k) = ka \frac{j_\ell(ka)\eta'_\ell(ka) - j'_\ell(ka)\eta_\ell(ka)}{j_\ell^2(ka) + \eta_\ell^2(ka)} = \frac{1}{ka[j_\ell^2(ka) + \eta_\ell^2(ka)]} \quad (17.68)$$

είναι πάντα θετική, κάτι που θα αποδειχθεί σημαντικό αργότερα στη μελέτη του συντονισμού.

Για μικρές τιμές της ενέργειας χρησιμοποιούμε το ανάπτυγμα (17.51) για τις σφαιρικές συναρτήσεις Μπέσελ, ενώ κρατάμε την τιμή $b_\ell(0)$ της λογαριθμικής παραγώγου για μηδενική ενέργεια. Παίρνουμε

$$\tan \delta_\ell = -\frac{b_\ell(0) - \ell}{b_\ell(0) + \ell + 1} \frac{2^{2\ell}(\ell!)^2}{(2\ell + 1)!(2\ell)!} (ka)^{2\ell+1}. \quad (17.69)$$

Αυτό σημαίνει ότι για μικρές ενέργειες, οι μετατοπίσεις φάσης τείνουν στο μηδέν ως $(ka)^{2\ell+1}$. Άρα η κυρίαρχη συνεισφορά σ' αυτό το όριο προέρχεται από τον όρο $\ell = 0$, όπου

$$\delta_0 \simeq \tan \delta_0 = -\frac{b_\ell(0)}{b_\ell(0) + 1} ka. \quad (17.70)$$

Συγκρίνοντας με την Εξ. (17.52) για το δ_0 σε δυναμικό σκληρής σφαίρας, βλέπουμε ότι η ακτίνα που χαρακτηρίζει τη σκέδαση σε χαμηλές ενέργειες είναι $a_s = \frac{b_\ell(0)}{b_\ell(0)+1} a$, καθώς έτσι η ενεργός διατομή γράφεται ως

$$\sigma_{tot} = 4\pi a_s^2. \quad (17.71)$$

Η μόνη περίπτωση να μη μηδενίζεται το δ_0 στις χαμηλές ενέργειες είναι αν $b_\ell(0) = -1$. Για $k = 0$ και για $r > a$, η Εξ. (13.29) γίνεται $(r^2 R'_{0,0})' = 0$, με γενική λύση $R_{0,0}(r) = c_1 + c_2 a/r$ για κάποιες σταθερές c_1, c_2 . Η Εξ. (17.61) δίνει $b_0(0) = -c_2/(c_1 + c_2)$, οπότε η συνθήκη $b_\ell(0) = -1$ δίνει $c_1 = 0$. Αλλά τότε η $R_{0,0}(r)$ πέφτει σαν $1/r$ στο άπειρο, άρα περιγράφει μία εντοπισμένη χωρικά κατάσταση, αν και όχι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

17.3.4 Συντονισμός

Εν γένει, η ολική ενεργός διατομή μεταβάλλεται αργά με την ενέργεια. Ωστόσο υπάρχουν περιπτώσεις όπου εμφανίζει απότομη μεταβολή για ένα μικρό διάστημα τιμών της ενέργειας και μετά επιστρέφει σε προηγούμενες τιμές της. Αυτό το φαινόμενο καλείται *συντονισμός*.

Το απλούστερο παράδειγμα συντονισμού εμφανίζεται στη σκέδαση από πηγάδι δυναμικού,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases}, \quad (17.72)$$

όπου $a, V_0 > 0$.

Για $r < a$, η Εξ. (13.29) είναι σαν την εξίσωση Σρέντινγκερ ελεύθερου σωματιδίου με ενέργεια $E + V_0$, οπότε η λύση είναι της μορφής $j_\ell(Kr)$, όπου ορίσαμε $K = \sqrt{2m(E + V_0)} = \sqrt{K_0^2 + k^2}$ και $K_0 = \sqrt{2mV_0}$. Από την Εξ. (17.61) παίρνουμε

$$b_\ell(k) = Ka \frac{j'_\ell(Ka)}{j_\ell(Ka)}. \quad (17.73)$$

Έστω ότι το πηγάδι είναι βαθύ, υπό την έννοια ότι $K_0a \gg 1$. Τότε για μικρές τιμές του ℓ ισχύει η προσέγγιση (13.45), οπότε

$$b_\ell(k) = Ka \cot(Ka - \frac{\ell\pi}{2}). \quad (17.74)$$

Ενδιαφερόμαστε για τιμές της ενέργειας από μηδέν μέχρι ka της τάξης της μονάδας, κάτι που σημαίνει ότι το Ka αυξάνει περίπου κατά k/K_0 γύρω από την τιμή K_0a . Για γενικές τιμές του K_0a , $|b_\ell(k)| \simeq K_0a \gg 1$, οπότε από την Εξ. (17.63), $\tan \delta_\ell \simeq \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$. Ωστόσο αν το K_0a βρίσκεται κοντά στο σημείο που μηδενίζεται η συνεφαπτομένη, το Ka μπορεί να πάρει τιμή που μηδενίζει την συνεφαπτομένη με μικρή αλλαγή του k . Για ένα μικρό εύρος τιμών του k θα έχουμε $b_\ell(k) \simeq 0$, και άρα $\tan \delta_\ell \simeq \frac{j'_\ell(ka)}{n'_\ell(ka)}$, δηλαδή έχουμε μία απότομη μετάβαση σε μία διαφορετική τιμή της μετατόπισης φάσης. Δεδομένης της Εξ. (17.43), αυτό σημαίνει απότομη μεταβολή στην εξάρτηση της ολικής ενεργούς διατομής από την ενέργεια.

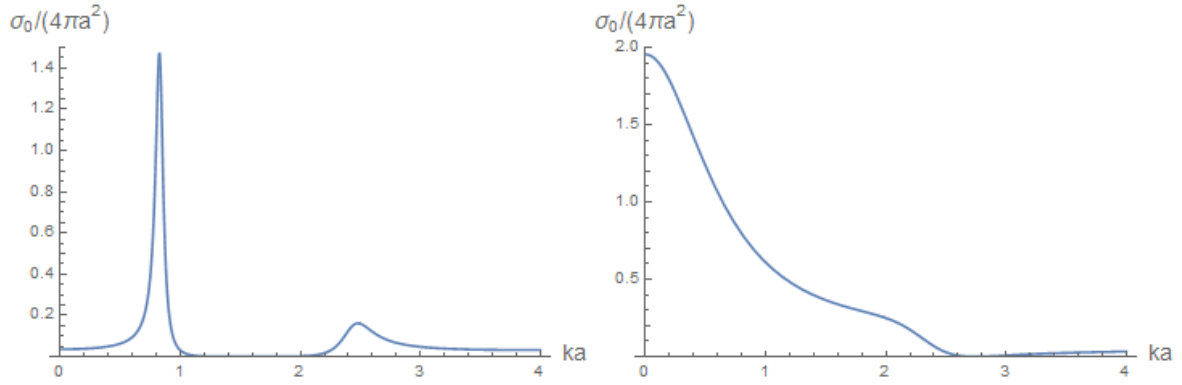
Στο Σχ. 17.5, δίνουμε ένα παράδειγμα. Εξετάζουμε την ποσότητα $\sigma_0 = 4\pi k^{-2} \sin^2 \delta_0$, που δίνει τη συνεισφορά της σκέδασης με $\ell = 0$ στην ολική ενεργό διατομή. Βλέπουμε ότι για ένα στενό εύρος ενεργειών όντως υπάρχει απότομο άλμα στην ενεργό διατομή. Επίσης παρατηρούμε ότι ο συντονισμός είναι ευαίσθητος στις τιμές της παραμέτρου K_0a , καθώς εξαφανίζεται ακόμα και με μία μικρή ποσοστιαία αλλαγή.

Από τη μελέτη του πηγαδιού δυναμικού κατανοούμε ότι εμφανίζεται συντονισμός όταν για κάποια στροφορμή ℓ_0 και (i) για κάποια τιμή της ενέργειας E_0 μηδενίζεται η λογαριθμική παράγωγος b_ℓ και (ii) για ενέργειες έξω από ένα στενό εύρος ΔE γύρω από το E_0 , $|b_{\ell_0}| \gg 1$. Άρα σε συντονισμό, η λογαριθμική παράγωγος σε απόσταση ΔE γύρω από το E_0 συμπεριφέρεται ως

$$b_{\ell_0}(E) = \alpha(E_0 - E), \quad (17.75)$$

όπου $\alpha > 0$ καθώς η λογαριθμική παράγωγος είναι φθίνουσα συνάρτηση της ενέργειας. Για να παίρνει μεγάλες τιμές το $|b_{\ell_0}|$ γρήγορα, πρέπει $\alpha \Delta E \gg 1$.

Υποθέτουμε ότι σ' αυτό το εύρος τιμών της ενέργειας, η μεταβολή των ποσοτήτων $Q_{\ell_0}(k)$ και $S_{\ell_0}(k)$ με την ενέργεια είναι αμελητέα, έτσι ώστε να μπορούμε να τις αντικαταστήσουμε στην Εξ. (17.67) με τις σταθερές τιμές $S_{\ell_0}(k_0)$ και $Q_{\ell_0}(k_0)$, όπου $k_0 = \sqrt{2mE}$. Είναι βολικό να ορίσουμε τις σταθερές $\Gamma = 2S_{\ell_0}(k_0)/\alpha > 0$ και $B = Q_{\ell_0}(k_0)/\alpha$. Εφόσον οι τιμές των $S_{\ell_0}(k_0)$ και $Q_{\ell_0}(k_0)$ είναι της τάξης της μονάδας, $\Gamma \ll \Delta E$ και $|B| \ll \Delta E$.



Σχήμα 17.5: Οι δύο γραφικές δίνουν τη συνεισφορά σ_0 στην ολική ενεργό διατομή από κύματα με $\ell = 0$, κανονικοποιημένη προς $4\pi a^2$, ως συνάρτηση του γινομένου ka . Στην αριστερή γραφική, $K_0a = 23.552$. Υπάρχει σαφής συντονισμός για $ka = 0.9$. Στη δεξιά γραφική, όπου $K_0a = 23.709$, δεν υπάρχει συντονισμός. Ο συντονισμός είναι εξαιρετικά ευαίσθητος στις παραμέτρους του συστήματος.

Μ' αυτόν τον τρόπο, η Εξ. (17.67) δίνει

$$\tan[\delta_{\ell_0} - \delta_{\ell_0}^{(0)}] = \frac{\Gamma}{2(E_R - E)}, \quad (17.76)$$

όπου ορίσαμε την ενέργεια συντονισμού $E_R := E_0 - B$. Εφόσον $|B| \ll \Delta E$, η E_R βρίσκεται εντός εύρους ΔE από την E_0 .

Η Εξ. (17.76) λέει ότι όπως προσεγγίζουμε την ενέργεια συντονισμού από κάτω, η μετατόπιση φάσης δ_{ℓ_0} είναι πάντα μεγαλύτερη από $\delta_{\ell_0}^{(0)}$. Η διαφορά $\delta_{\ell_0} - \delta_{\ell_0}^{(0)}$ ξεκινά από μικρές θετικές τιμές και γίνεται ίση με $\frac{\pi}{2}$, για $E = E_R$. Συνεχίζει να αυξάνεται μέχρι να προσεγγίσει την τιμή π για ενέργειες περίπου $E_R + \Delta E$.

Γενικά η γωνία $\delta_{\ell_0}^{(0)}$ που αντιστοιχεί σε δυναμικό σκληρής σφαίρας είναι πολύ μικρότερη από $\frac{\pi}{2}$. Κοντά στο συντονισμό μπορούμε να την αγνοήσουμε και να γράψουμε

$$\tan \delta_{\ell_0} = \frac{\Gamma}{2(E_R - E)}, \quad (17.77)$$

άρα

$$\sin^2 \delta_{\ell_0} = \frac{\tan^2 \delta_{\ell_0}}{1 + \tan^2 \delta_{\ell_0}} = \frac{\frac{1}{4}\Gamma^2}{(E - E_R)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2}. \quad (17.78)$$

Εφόσον όλες οι άλλες μετατοπίσεις φάσης πλην του συντονισμού είναι πολύ μικρότερες του $\frac{\pi}{2}$, η κυρίαρχη συνεισφορά στην ολική ενεργό διατομή προέρχεται από το συντονισμό, και άρα

$$\sigma_{tot} = \frac{\pi(2\ell_0 + 1)}{k^2} \frac{\Gamma^2}{(E - E_R)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2} \quad (17.79)$$

Η Εξ. (17.79) καλείται εξίσωση Μπράιτ (Breit)-Βίγκνερ [264].

17.3.5 Χρονική καθυστέρηση

Επιστρέφουμε στην Εξ. (17.12) που δίνει την κυματοσυνάρτηση σε ένα πείραμα σκέδασης. Παρατηρούμε ότι η ποσότητα

$$\tau(\mathbf{n}) = -\frac{m}{k} \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{n}) = -\frac{m}{k} \mathbf{n}_0 \cdot \text{Im}(\nabla_{\mathbf{k}} \log f_{\mathbf{k}}) \quad (17.80)$$

δίνει μία χρονική καθυστέρηση για το σωματίο που ανιχνεύθηκε στη διεύθυνση n , η οποία οφείλεται στη σκέδαση. Είχαμε δει αντίστοιχη ποσότητα για τη μονοδιάστατη σκέδαση στο Κεφ. 8.3.4.

Για κεντρικό δυναμικό, το πλάτος σκέδασης εξαρτάται από το k μόνο μέσω του k , οπότε η Εξ. (17.80) γίνεται

$$\tau(\theta) = -\text{Im} \frac{\partial \log f_E(\theta)}{\partial E}. \quad (17.81)$$

όπου $E = \frac{k^2}{2m}$.

Μπορούμε να υπολογίσουμε την ποσότητα $\tau(\theta)$ χρησιμοποιώντας την έκφραση (17.42) για το πλάτος σκέδασης. Στη γενική περίπτωση, η μορφή της $\tau(\theta)$ είναι περίπλοκη. Απλοποιείται σημαντικά όμως αν στο πλάτος σκέδασης κυριαρχεί ένας και μόνος όρος για συγκεκριμένη τιμή $\ell = \ell_0$. Τότε η χρονική καθυστέρηση τ δεν εξαρτάται από θ και είναι απλά

$$\tau = -\frac{\partial \delta_{\ell_0}}{\partial E}. \quad (17.82)$$

Δύο περιπτώσεις είναι άμεσου ενδιαφέροντος. Η πρώτη είναι το όριο χαμηλών ενεργειών, όπου κυριαρχεί η μετατόπιση φάσης δ_0 , όπως δίνεται από την Εξ. (17.70), βρίσκουμε

$$\tau = \frac{b_\ell(0)}{b_\ell(0) + 1} \frac{ma}{k}, \quad (17.83)$$

δηλαδή η χρονική καθυστέρηση είναι της τάξης μεγέθους του χρόνου που χρειάζεται για να διανυθεί η εμβέλεια του δυναμικού από ένα ελεύθερο σωματίο.

Η δεύτερη περίπτωση αφορά τον συντονισμό, όπου η κυρίαρχη μετατόπιση φάσης δίνεται από την Εξ. (17.77), οπότε

$$\tau = \frac{\frac{1}{2}\Gamma}{(E - E_R)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2}. \quad (17.84)$$

Για $E = E_R$, $\tau = 2\Gamma^{-1}$, δηλαδή η χρονική καθυστέρηση μπορεί να πάρει εξαιρετικά μεγάλες τιμές, πολύ μεγαλύτερες από αυτές που αντιστοιχούν στην εμβέλεια του δυναμικού. Γι' αυτό το λόγο λέμε ότι ένας συντονισμός έχει χρόνο 'ζωής' της τάξης του Γ^{-1} .

17.4 Γενική θεωρία σκέδασης

17.4.1 Ο τελεστής σκέδασης

Στις προηγούμενες ενότητες αναπτύξαμε μία θεωρία σκέδασης για ελαστική σκέδαση σωματιδίου από δυναμικό, ή ισοδύναμα δύο σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μέσω δυναμικού. Αυτό το είδος σκέδασης έχει πολλές εφαρμογές, αλλά απέχει πολύ από το να είναι το γενικότερο δυνατό. Μπορούμε να έχουμε μη ελαστικές σκεδάσεις, αλληλεπιδράσεις που εξαρτώνται από την ορμή και το σπιν των σωματιδίων, ακόμα και αλληλεπιδράσεις στις οποίες τα εξερχόμενα σωματίδια είναι άλλα από τα αρχικά. Στη γενική περίπτωση μάλιστα οι αλληλεπιδράσεις ορίζονται μέσω κβαντικών πεδίων και είναι εξαιρετικά δύσκολο να ορίσουμε ποσότητες που να αντιστοιχούν στην ανίχνευση σωματιδίων σε συγκεκριμένα σημεία.

Η γενική θεωρία σκέδασης μεταφέρει τις βασικές ιδέες που αναπτύξαμε στα προηγούμενα κεφάλαια στη γενικότερη δυνατή περίπτωση. Το ζητούμενο είναι να γραφεί μια γενική έκφραση για τις πιθανότητες σε πειράματα σκέδασης, η οποία να μην απαιτεί εκπεφρασμένη λύση της εξίσωσης

χρονικής εξέλιξης, αλλά να μπορεί να προσδιοριστεί από τη μελέτη των ιδιοδιανυσμάτων της Χαμιλτονιανής.

Θα θεωρήσουμε μία Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, όπου \hat{H}_0 είναι μια Χαμιλτονιανή που περιγράφει ελεύθερα σωματίδια και \hat{V} γενικός τελεστής αλληλεπίδρασης. Δεν προσδιορίζουμε ούτε τον αριθμό ούτε τη φύση των σωματιδίων, οπότε γενικά ο χώρος Χίλμπερτ θα είναι ένα ταυυστικό γινόμενο από χώρους Φοκ, έναν για κάθε τύπο σωματιδίου που ενδεχομένως να συμμετέχει στη διαδικασία της σκέδασης. Θεωρούμε δεδομένο ότι γνωρίζουμε πλήρως τη φασματική ανάλυση της \hat{H}_0 , και γράφουμε τη γενικευμένη εξίσωση ιδιοτιμών ως

$$\hat{H}_0|\alpha\rangle_0 = E_\alpha|\alpha\rangle_0. \quad (17.85)$$

Οι ενέργειες E_α παίρνουν όλες τις δυνατές τιμές στο $[0, \infty)$. Γενικά, η Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 έχει υψηλό εκφυλισμό, οπότε επιλέγουμε τα διανύσματα $|\alpha\rangle_0$ να ορίζουν μία γενικευμένη βάση. Συνήθως αυτή αντιστοιχεί στις ορμές και τα σπιν όλων των δυνατών σωματιδίων.

Θα θεωρούμε ότι η βάση είναι συνεχής, οπότε θα γράφουμε το φασματικό θεώρημα ως

$$f(\hat{H}_0) = \int d\alpha f(E_\alpha)|\alpha\rangle_0\langle\alpha|. \quad (17.86)$$

Το κρίσιμο βήμα στη μελέτη της σκέδασης από δυναμικό ήταν η επιλογή της γενικευμένης βάσης (17.3) από ιδιοδιανύσματα του \hat{H} . Η βάση αυτή ικανοποιεί την Εξ. (17.8), η οποία είναι ουσιώδης για την απόδειξη της Εξ. (17.14), και από εκεί στην εύρεση της ενεργούς διατομής. Παρατηρούμε επίσης, ότι για $t < 0$, η Εξ. (17.14) δίνει

$$\psi_t(\mathbf{r}) \simeq \psi_t^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (17.87)$$

αφού ο όρος της σκέδασης είναι ανάλογο του $\psi_0[\mathbf{n}_0(r - \frac{p_0}{m}t)]$, ο οποίος είναι αμελητέος για όλα τα αρνητικά t . Θα χρησιμοποιήσουμε ένα ανάλογο της Εξ. (17.87) προκειμένου να ορίσουμε μία χρήσιμη γενικευμένη βάση από ιδιοδιανύσματα της \hat{H} , αντίστοιχης της (17.3).

Θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση \hat{V} δε μεταβάλλει βίαια το φάσμα της \hat{H}_0 , δηλαδή η \hat{H} έχει επίσης συνεχές φάσμα στο $[0, \infty)$, και ότι υπάρχουν βάσεις ιδιοδιανυσμάτων $|\alpha\rangle$ του \hat{H}

$$\hat{H}|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle, \quad (17.88)$$

έτσι ώστε όταν το \hat{V} τείνει στο μηδέν, τα $|\alpha\rangle$ να ταυίζονται με τα $|\alpha\rangle_0$.

Από όλες τις δυνατές βάσεις $|\alpha\rangle$ ιδιοδιανυσμάτων του \hat{H} επιλέγουμε μία, την οποία θα τη συμβολίσουμε ως $|\alpha\rangle_+$, με το εξής κριτήριο. Θεωρούμε μία αρχική κατάσταση $|\Psi_0\rangle$, η οποία να ικανοποιεί όλες τις προϋποθέσεις για ένα πείραμα σκέδασης. Αναλύουμε την $|\Psi_0\rangle$ στη βάση $|\alpha\rangle_0$ ως $|\Psi_0\rangle = \int d\alpha\psi(\alpha)|\alpha\rangle_0$. Ορίζουμε τη βάση $|\alpha\rangle_+$ από την απαίτηση-ανάλογο της Εξ. (17.87),

$$e^{-i\hat{H}t} \int d\alpha\psi(\alpha)|\alpha\rangle_0 = e^{-i\hat{H}t} \int d\alpha\psi(\alpha)|\alpha\rangle_+, \text{ για } t \xrightarrow{sc} -\infty, \quad (17.89)$$

για όλα τα $\psi(\alpha)$ που αντιστοιχούν σε αρχικές καταστάσεις που οδηγούν σε σκέδαση. Το όριο $t \rightarrow -\infty$ δεν είναι κυριολεκτικό, καθώς σ' αυτό το όριο τα κυματοπακέτα έχουν διασπαρεί σ' όλο το χώρο. Εννοούμε ότι ο χρόνος είναι πολύ νωρίτερα από τη στιγμή που γίνεται η σκέδαση, αλλά όχι τόσο μεγάλο που η διασπορά να είναι σημαντική. Χρησιμοποιούμε το συμβολισμό sc πάνω από το βέλος του ορίου για να τονίσουμε ότι δε μιλάμε για κυριολεκτικό μαθηματικό όριο. Τα ιδιοδιανύσματα $|\alpha\rangle_+$ αποτελούν τη γενίκευση των ιδιοδιανυσμάτων (17.3) για τη σκέδαση σε δυναμικό, και καλούνται *καταστάσεις εισόδου* (in states).

Με τρόπο συμμετρικό ως προς την Εξ. (17.89), μπορούμε να ορίσουμε τις καταστάσεις εξόδου (out states), ως τα ιδιοδιανύσματα $|\alpha\rangle_-$ που ικανοποιούν

$$e^{-i\hat{H}_0 t} \int d\alpha \psi(\alpha) |\alpha\rangle_0 = e^{-i\hat{H} t} \int d\alpha \psi(\alpha) |\alpha\rangle_-, \text{ για } t \xrightarrow{sc} \infty, \quad (17.90)$$

για $\psi(\alpha)$ που αντιστοιχούν σε σκέδαση.

Θέλουμε να υπολογίσουμε την πιθανότητα μετάβασης $|\langle \psi_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | \psi_i \rangle|^2$ μεταξύ μίας αρχικής κατάστασης $|\psi\rangle_i$ τη χρονική στιγμή $t_i \xrightarrow{sc} -\infty$ και μίας τελικής κατάστασης $|\psi\rangle_f$ τη χρονική στιγμή $t_f \xrightarrow{sc} \infty$. Αναπτύσσουμε τα ket $|\psi\rangle_i$ και $|\psi\rangle_f$ στη βάση $|\alpha\rangle_0$, οπότε

$$\langle \psi_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | \psi_i \rangle = \int d\alpha d\beta \psi_i(\alpha) \psi_f^*(\beta) \langle \beta | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | \alpha \rangle_0. \quad (17.91)$$

Η Εξ. (17.89) σημαίνει ότι $e^{i\hat{H}t_i} |\alpha\rangle_0 = e^{iE_\alpha t_i} |\alpha\rangle_+$ και η Εξ. (17.90) ότι $e^{i\hat{H}t_f} |\beta\rangle_0 = e^{iE_\beta t_f} |\beta\rangle_-$. Άρα, η Εξ. (17.91) δίνει

$$\langle \psi_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | \psi_i \rangle = \int d\alpha d\beta \psi_i(\alpha) \psi_f^*(\beta) e^{-iE_\beta t_f + iE_\alpha t_i} \langle \beta | \alpha \rangle_+. \quad (17.92)$$

Ορίζουμε τον τελεστή σκέδασης \hat{S} , από τα στοιχεία πίνακα του $S_{\alpha\beta}$ στη βάση $|\alpha\rangle_0$,

$$S_{\alpha\beta} := -\langle \alpha | \beta \rangle_+. \quad (17.93)$$

Εφόσον οι καταστάσεις $|\alpha\rangle_\pm$ ορίζουν (γενικευμένη) ορθοκανονική βάση, το θεώρημα 5.8 σημαίνει ότι ο \hat{S} είναι μοναδιαίος και ότι

$$|\alpha\rangle_- = \hat{S} |\alpha\rangle_+. \quad (17.94)$$

Αυστηρά μιλώντας η Εξ. (17.93) ορίζει έναν τελεστή μόνο στον υπόχωρο \mathcal{H}_{sc} του χώρου Χίλμπερτ που επιδέχεται καταστάσεις σκέδασης. Αν υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις τότε πρέπει να επεκτείνουμε τον \hat{S} και στον υπόχωρο \mathcal{H}_{bound} των δέσμιων καταστάσεων. Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο \hat{S} δρα στο \mathcal{H}_{bound} τετριμμένα ως μονάδα. Μ' αυτήν την επέκταση, ο \hat{S} είναι μοναδιαίος τελεστής για όλο το χώρο Χίλμπερτ του συστήματος $\mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{bound}$.

Έστω ότι μπορούσαμε να επιλέξουμε τις καταστάσεις ώστε η $|\psi_i\rangle$ να μπορεί να ταυτιστεί με μία ιδιοκατάσταση $|\alpha_i\rangle_0$ της \hat{H}_0 και η $|\psi_f\rangle$ με μία ιδιοκατάσταση $|\alpha_f\rangle_0$. Τότε η Εξ. (17.92) δίνει

$$|{}_0\langle \alpha_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | \alpha_i \rangle_0|^2 = |S_{\alpha_f \alpha_i}|^2, \quad (17.95)$$

δηλαδή ότι η πιθανότητα μετάβασης εξαρτάται αποκλειστικά από τον πίνακα σκέδασης. Βεβαίως αυτή η επιλογή δεν είναι επιτρεπτή, τα ket $|\alpha_i\rangle_0$ αντιστοιχούν στο συνεχές φάσμα και δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμα, ενώ οι $|\psi_i\rangle$ είναι κανονικά τετραγωνικά ολοκληρώσιμα διανύσματα. Με τα $|\alpha_f\rangle_0$ δεν υπάρχει πρόβλημα, γιατί η Εξ. (17.95) μπορεί να θεωρηθεί ότι ορίζεται πυκνότητα πιθανότητας ως προς τα μεγέθη που αντιστοιχούν στον δείκτη α_f . Μία επιλογή είναι να θεωρήσουμε το σύστημα μέσα σε κουτί, οπότε το φάσμα των σχετικών τελεστών να γίνει διακριτό και αφού ορίσουμε τις μετρούμενες ποσότητες να πάρουμε το όριο όπου το κουτί τείνει στο άπειρο. Εναλλακτικά, θα πρέπει να δώσουμε έναν πιο πολύπλοκο χαρακτηρισμό των πιθανοτήτων που αντιστοιχούν στην ποσότητα $|S_{\alpha_f \alpha_i}|^2$, ανάλογο με αυτόν της Εξ. (17.15).

Σε κάθε περίπτωση, μπορούμε να δώσουμε έναν κλειστό τύπο για τον πίνακα σκέδασης χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Ντάyson, Εξ. (8.77). Ορίζουμε τον τελεστή $\hat{O}(t, t') := e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}(t-t')} e^{-i\hat{H}_0 t'}$.

Αμέσως βρίσκουμε ότι ικανοποιεί τις εξισώσεις $i\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}(t,t') = \hat{V}(t)\hat{O}(t,t')$ και $\hat{O}(t,t) = \hat{I}$, όπου $\hat{V}(t) = e^{i\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-i\hat{H}_0 t}$. Άρα $\hat{O}(t,t') = \mathcal{T}e^{-i\int_{t'}^t \hat{V}(s)ds}$.

Ο ορισμός (17.93) σε συνδυασμό με τις Εξ. (17.89, 17.90) δίνουν ότι

$$S_{\beta\alpha} = \lim_{t_i \xrightarrow{sc} -\infty} \lim_{t_f \xrightarrow{sc} \infty} {}_0\langle\beta|e^{i\hat{H}_0 t_f}e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)}e^{-i\hat{H}_0 t_i}|\alpha\rangle_0 = \lim_{t_i \xrightarrow{sc} -\infty} \lim_{t_f \xrightarrow{sc} \infty} {}_0\langle\beta|\hat{O}(t_f, t_i)|\alpha\rangle_0 \quad (17.96)$$

και άρα ότι

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \lim_{t_i \xrightarrow{sc} -\infty} \lim_{t_f \xrightarrow{sc} \infty} \hat{O}(t_f, t_i) \\ &= \hat{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} ds_n \mathcal{T}[\hat{V}(s_1)\hat{V}(s_2)\dots\hat{V}(s_n)]. \end{aligned} \quad (17.96)$$

Όπως είδαμε και στο Κεφ. 8, αν το δυναμικό \hat{V} είναι ασθενές μπορούμε να κρατήσουμε ένα μικρό αριθμό όρων από τη σειρά Ντάyson, οπότε να πάρουμε έναν διαταρακτικό υπολογισμό του τελεστή σκέδασης.

17.4.2 Η εξίσωση Λίπμαν-Σβίνγκερ

Ο υπολογισμός του πίνακα σκέδασης είναι ισοδύναμος με τον προσδιορισμό των βάσεων $|\alpha\rangle_{\pm}$. Στη συνέχεια θα δείξουμε πώς γίνεται αυτός ο υπολογισμός. Πρώτα όμως θα δώσουμε μερικές ταυτότητες, οι οποίες είναι εξαιρετικά χρήσιμες σε ότι ακολουθεί.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x - \omega + i\epsilon} = \begin{cases} e^{-i\omega t}, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases} \quad (17.97)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x - \omega - i\epsilon} = \begin{cases} 0, & t > 0 \\ e^{-i\omega t}, & t < 0 \end{cases}, \quad (17.98)$$

για κάθε $\omega \in \mathbf{R}$.

Η απόδειξη είναι απλή εφαρμογή του θεωρήματος του Κωσύ. Για $t > 0$ ολοκληρώνουμε στο μιγαδικό επίπεδο κατά μήκος της καμπύλης C_+ στο Σχ. 17.6. Το ολοκλήρωμα κατά μήκος του κύκλου στο άπειρο μηδενίζεται, και άρα το ολοκλήρωμα ισούται με το ολοκληρωτικό υπόλοιπο από τους πόλους εντός του C_+ . Ο πόλος $z = \omega - i\epsilon$ είναι εντός του C_+ , αλλά ο πόλος $z = \omega + i\epsilon$ είναι εκτός του C_+ . Έτσι προκύπτει η παραπάνω ταυτότητα. Για $t < 0$ ακολουθούμε την ίδια λογική, με ολοκλήρωση κατά μήκος της καμπύλης C_- . Προσοχή, η διαφορά στο πρόσημο οφείλεται στο ότι οι δυο καμπύλες διατρέχονται με αντίθετη φορά.

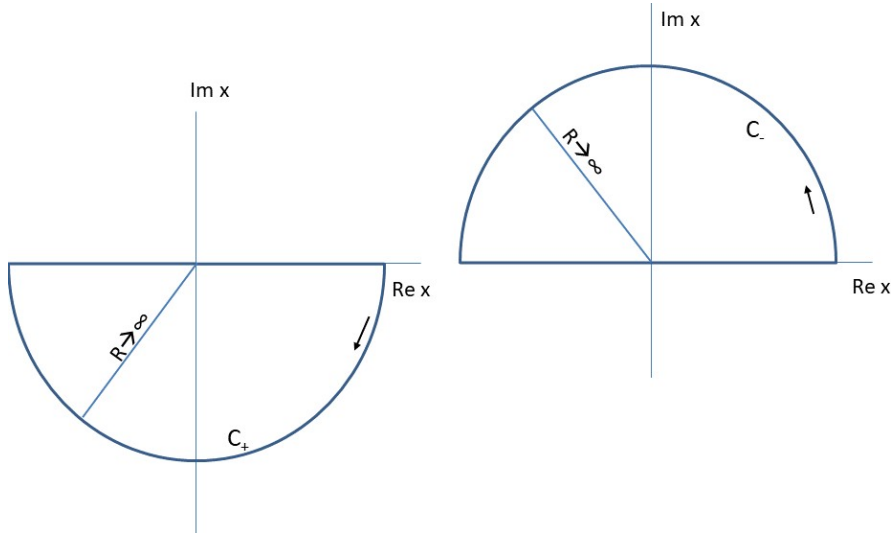
Εφόσον οι Εξ. (17.97,17.98) ισχύουν για κάθε $\omega \in \mathbf{R}$ ικανοποιούνται ως ταυτότητες για κάθε αυτοσυζυγή τελεστή. Ειδικότερα για τη Χαμιλτονιανή \hat{H} ,

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} (E - \hat{H} + i\epsilon)^{-1} = \begin{cases} e^{-i\hat{H}t}, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases} \quad (17.99)$$

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} (E - \hat{H} - i\epsilon)^{-1} = \begin{cases} 0, & t > 0 \\ e^{-i\hat{H}t}, & t < 0 \end{cases}, \quad (17.100)$$

όπου ακολουθούμε τη σύμβαση ότι το όριο $\epsilon \rightarrow 0^+$ υπονοείται. Βλέπουμε λοιπόν ότι μπορούμε να εκφράσουμε τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $e^{-i\hat{H}t}$ μέσω του αναλυτή (resolvent)

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}, \quad (17.101)$$



Σχήμα 17.6: Καμπύλες ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για την απόδειξη των Εξ. (17.97,17.98).

που ορίζεται για κάθε $z \in \mathcal{C}$ εκτός από τα σημεία του φάσματος του \hat{H} , τα οποία βρίσκονται στον άξονα των πραγματικών.

Η εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}|\alpha\rangle_+ = E_\alpha|\alpha\rangle_+$ γράφεται

$$(E_\alpha - \hat{H}_0)|\alpha\rangle_+ = \hat{V}|\alpha\rangle_+. \quad (17.102)$$

Η Εξ. (17.102) μπορεί να θεωρηθεί ως μια γραμμική εξίσωση με ένα μη ομογενή όρο $\hat{V}|\alpha\rangle_+$. Άρα η γενική λύση της είναι άθροισμα της λύσης της ομογενούς $|\alpha\rangle_0$, με μία μερική λύση. Μια μεγάλη κατηγορία μερικών λύσεων είναι της μορφής $\lim_{z \rightarrow E_\alpha} \hat{G}_0(z)\hat{V}|\alpha\rangle_+$, όπου $G_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$. Η εκπεφρασμένη μορφή της λύσης εξαρτάται από τον τρόπο που παίρνουμε το όριο $z \rightarrow E_\alpha$. Δύο προφανείς επιλογές είναι να πάρουμε το z να τείνει στο E από το πάνω μιγαδικό επίπεδο για όλα τα E ή από το κάτω μιγαδικό επίπεδο για όλα τα E . Συμβολίζουμε αυτά τα όρια σε γενική συνάρτηση $F(z)$ ως $F(E^\pm) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} F(E \pm i\epsilon)$.

Επιλέγοντας το όριο E^+ , διαλέγουμε λύσεις της Εξ. (17.102) της μορφής

$$|\alpha\rangle_+ = |\alpha\rangle_0 + \hat{G}(E^+)\hat{V}|\alpha\rangle_+. \quad (17.103)$$

Η φυσική σημασία αυτής της επιλογής φαίνεται αμέσως αν εξετάσουμε τη χρονική εξέλιξη του διανύσματος $|\Psi_0\rangle = \int d\alpha \psi(\alpha)|\alpha\rangle_+$,

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}t}|\Psi_0\rangle &:= \int d\alpha \psi(\alpha) e^{-iE_\alpha t} |\alpha\rangle_+ = \int d\alpha \psi(\alpha) e^{-iE_\alpha t} |\alpha\rangle_0 + \int d\alpha \psi(\alpha) e^{-iE_\alpha t} \hat{G}(E_\alpha^+) \hat{V} |\alpha\rangle_+ \\ &= e^{-i\hat{H}_0 t} |\Psi_0\rangle + \int d\alpha \int d\beta \psi(\alpha) \frac{e^{-iE_\alpha t}}{E_\alpha - E_\beta + i\epsilon} {}_0\langle \beta | \hat{V} |\alpha\rangle_+ |\beta\rangle_0, \end{aligned} \quad (17.103)$$

όπου στο τελευταίο βήμα εισάγαμε ένα ανάπτυγμα της μονάδας ως προς τη βάση $|\beta\rangle_0$.

Δεδομένου ότι οι δείκτες α ορίζουν μία ορθοκανονική βάση ιδιοδιανυσμάτων της ενέργειας, η ολοκλήρωση ως προς α συμπεριλαμβάνει και ολοκλήρωση ως προς την ενέργεια. Άρα ο δεύτερος όρος του δεξιού σκέλους της Εξ. (17.103) περιέχει ένα ολοκλήρωμα

$$I = \int dE f(E) \frac{e^{-iEt}}{E - E_\beta + i\epsilon},$$

όπου η συνάρτηση $f(E)$ περιλαμβάνει την εξάρτηση από το E_α του γινομένου $\psi(\alpha)_0 \langle \beta | \hat{V} |\alpha\rangle_+$. Εφόσον η $f(E)$ δεν έχει πόλους στο εσωτερικό της καμπύλης C_+ του Σχ. 17.6, τότε, όπως και στην Εξ.

(17.99), βρίσκουμε ότι $I = 0$, για $t < 0$. Αυτό σημαίνει ότι οι καταστάσεις $|\alpha\rangle_+$ ικανοποιούν την Εξ. (17.89), και άρα είναι οι καταστάσεις εισόδου. Έτσι εξηγείται και ο δείκτης $+$, ο οποίος αφορά τον τρόπο με τον οποίο προσεγγίζουμε τις ιδιοτιμές στο μιγαδικό επίπεδο.

Με αντίστοιχα επιχειρήματα βρίσκουμε για τις καταστάσεις εξόδου,

$$|\alpha\rangle_- = |\alpha\rangle_0 + \hat{G}(E^-)\hat{V}|\alpha\rangle_- \quad (17.103)$$

Οι Εξ. (17.103, 17.103) καλούνται εξισώσεις Λίπμαν-Σβίνγκερ (Lippman-Schwinger).

Παράδειγμα 17.2. Για σωματίο στην ευθεία, $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ και $\hat{V} = V(\hat{x})$. Τα ιδιοδιανύσματα $|p\rangle$ της \hat{H}_0 προσδιορίζονται από τις ορμές p . Τα στοιχεία πίνακα του $\hat{G}_0(E^+)$ στη βάση της θέσης υπολογίζονται

$$\langle x|\hat{G}_0(E^+)|x'\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \frac{1}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}} \langle p|x'\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{ip(x-x')}}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}}. \quad (17.104)$$

Η υπό ολοκλήρωση συνάρτηση έχει πόλους για $p = \pm\sqrt{2mE(1 \pm i\epsilon/E)} = \pm\sqrt{2mE} \pm i\frac{\epsilon}{2E}$. Για $x - x' > 0$, μπορούμε να ολοκληρώσουμε κατά μήκος της καμπύλης C_- του Σχ. 17.6, οπότε μόνο ο πόλος με θετικό μιγαδικό μέρος συνεισφέρει. Βρίσκουμε ότι

$$\langle x|\hat{G}_0(E^+)|x'\rangle = -\frac{im}{\sqrt{2mE}} e^{i\sqrt{2mE}(x-x')} \quad (17.105)$$

Για $x - x' < 0$, η ολοκλήρωση γίνεται κατά μήκος της καμπύλης C_+ , οπότε συνεισφέρει μόνο ο πόλος με αρνητικό μέρος. Το αποτέλεσμα είναι το ίδιο με την εναλλαγή του x με το x' , οπότε καταλήγουμε ότι

$$\langle x|\hat{G}_0(E^+)|x'\rangle = -\frac{im}{\sqrt{2mE}} e^{i\sqrt{2mE}|x-x'|} \quad (17.106)$$

Η εξίσωση Λίπμαν-Σβίνγκερ δίνει τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_p^+(x) := \langle x|p\rangle_+$ για ενέργειες $E = \frac{p^2}{2m}$,

$$\psi_p^+(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} - \frac{im}{|p|} \int dx' e^{i|p||x-x'|} V(x') \psi_p^+(x'). \quad (17.107)$$

Έστω ότι το δυναμικό είναι διάφορο του μηδενός μόνο σε ένα διάστημα $[a, b]$. Για $p > 0$,

$$\psi_p^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} - \frac{im}{|p|} e^{-ipx} \int dx' e^{ipx'} V(x') \psi_p^+(x'), & x < a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} - \frac{im}{|p|} e^{ipx} \int dx' e^{-ipx'} V(x') \psi_p^+(x'), & x > b. \end{cases} \quad (17.108)$$

ενώ για $p < 0$,

$$\psi_p^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} - \frac{im}{|p|} e^{ipx} \int dx' e^{-ipx'} V(x') \psi_p^+(x'), & x < a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} - \frac{im}{|p|} e^{-ipx} \int dx' e^{ipx'} V(x') \psi_p^+(x'), & x > b. \end{cases} \quad (17.109)$$

Βλέπουμε ότι οι λύσεις $\psi_p^+(x)$ για $p > 0$ ταυτίζονται με τις $f_{|p|,+}$ και για $p < 0$ ταυτίζονται με τις $f_{|p|,-}$ της Εξ. (6.65). Επίσης παίρνουμε τις ακόλουθες εκφράσεις για το πλάτος μετάδοσης και το πλάτος ανάκλασης,

$$\begin{aligned} T_k &= 1 + \frac{\sqrt{2\pi}m}{ik} \int dx' e^{-ikx'} V(x') \psi_k^+(x'), \quad \bar{T}_k = 1 + \frac{\sqrt{2\pi}m}{ik} \int dx' e^{ikx'} V(x') \psi_{-k}^+(x') \\ R_k &= \frac{\sqrt{2\pi}m}{ik} \int dx' e^{ikx'} V(x') \psi_k^+(x'), \quad \bar{R}_k = \frac{\sqrt{2\pi}m}{ik} \int dx' e^{-ikx'} V(x') \psi_{-k}^+(x'), \end{aligned} \quad (17.109)$$

όπου $k = |p| = \sqrt{2mE}$.

Παράδειγμα 17.3. Για σωματίο στις τρεις διαστάσεις $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ και $\hat{V} = V(\hat{r})$. Τα ιδιοδιανύσματα $|p\rangle$ της \hat{H}_0 προσδιορίζονται από τις ορμές p . Τα στοιχεία πίνακα του $\hat{G}_0(E^+)$ στη βάση της θέσης υπολογίζονται

$$\langle \mathbf{r} | \hat{G}_0(E^+) | \mathbf{r}' \rangle = \int d^3p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \frac{1}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}}}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}}, \quad (17.110)$$

όπου $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Αναλύουμε σε πολικές συντεταγμένες το \mathbf{p} παίρνοντας το βόρειο πόλο στη διεύθυνση του \mathbf{R} , έτσι ώστε $\mathbf{p} \cdot \mathbf{R} = pR \cos \theta$. Βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{G}_0(E^+) | \mathbf{r}' \rangle &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}} \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{ipR \cos \theta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i R} \int_0^\infty dp \frac{p(e^{ipR} - e^{-ipR})}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}} = \frac{1}{4\pi^2 i R} \int_{-\infty}^\infty dp \frac{pe^{ipR}}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}}. \end{aligned} \quad (17.110)$$

Το ολοκλήρωμα είναι παρόμοιο με αυτό της μονοδιάστατης περίπτωσης. Υπολογίζεται με ολοκλήρωση κατά μήκος της καμπύλης C_- όπου και πάλι συνεισφέρει μόνο ο πόλος με θετικό φανταστικό μέρος. Καταλήγουμε ότι

$$\langle \mathbf{r} | \hat{G}_0(E^+) | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i\sqrt{2mE}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (17.111)$$

Η εξίσωση Λίπμαν-Σβίνγκερ δίνει τις ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle_+$

$$\psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi} \int d^3r' \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}'). \quad (17.112)$$

Για \mathbf{r} σε μακροσκοπική απόσταση από την περιοχή σκέδασης και για μικροσκοπική εμβέλεια του δυναμικού, είναι η ίδια περίπτωση με το ολοκλήρωμα (17.33). Δηλαδή προσεγγίζουμε $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'$ στο εκθετικό, και $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r$ στον παρονομαστή. Καταλήγουμε ότι

$$\psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} - \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{r} \frac{m}{2\pi} \int d^3r' e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}'). \quad (17.113)$$

Βλέπουμε ότι η εξίσωση Λίπμαν-Σβίνγκερ μας δίνει την επιλογή της βάσης Εξ. (17.3) για πλάτος σκέδασης

$$f_{\mathbf{p}}(\mathbf{n}) = -\sqrt{2\pi m} \int d^3r' e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}'). \quad (17.114)$$

17.4.3 Ο τελεστής μετάβασης

Μία σημαντική ιδιότητα του αναλυτή είναι ότι μπορεί να αναπτυχθεί εύκολα σε μια διαταρακτική σειρά. Για Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$,

$$\begin{aligned} (z - \hat{H})^{-1} &= (z - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} = [(z - \hat{H}_0)(1 - (z - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V})]^{-1} \\ &= (1 - (z - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V})^{-1}(z - \hat{H}_0)^{-1}. \end{aligned}$$

Γράφουμε $\hat{G}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση για τη γεωμετρική σειρά $(\hat{I} - \hat{A})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{A}^n$, παίρνουμε

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z) + \dots \quad (17.113)$$

Παρατηρούμε ότι αν πολλαπλασιάσουμε και τα δύο σκέλη της εξίσωσης από αριστερά με $\hat{G}_0(z)\hat{V}$ ή από δεξιά με $\hat{V}\hat{G}_0(z)$, το δεξί σκέλος είναι $\hat{G}(z) - \hat{G}_0(z)$. Άρα η Εξ. (17.113) είναι ισοδύναμη με τις εξισώσεις

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}(z)\hat{V}\hat{G}_0(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z). \quad (17.114)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις γράφονται ως $[\hat{I} - \hat{G}_0(z)\hat{V}]\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z)$ και $[\hat{I} + \hat{G}(z)\hat{V}]\hat{G}_0(z) = \hat{G}(z)$, οι οποίες δίνουν ότι

$$[\hat{I} - \hat{G}_0(z)\hat{V}][\hat{I} + \hat{G}(z)\hat{V}] = [\hat{I} + \hat{G}(z)\hat{V}][\hat{I} - \hat{G}_0(z)\hat{V}] = \hat{I}. \quad (17.115)$$

Η Εξ. Λίπμαν-Σβίνγκερ γράφεται ως $[\hat{I} - \hat{G}_0(E_\alpha^\pm)\hat{V}]|\alpha\rangle_\pm = |\alpha\rangle_0$, οπότε μπορούμε να λύσουμε ως προς $|\alpha\rangle_\pm$,

$$|\alpha\rangle_\pm = [\hat{I} - \hat{G}_0(E_\alpha^\pm)\hat{V}]^{-1}|\alpha\rangle_0 = [\hat{I} + \hat{G}(E_\alpha^\pm)\hat{V}]|\alpha\rangle_0, \quad (17.116)$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (17.115).

Σ' αυτό το σημείο είναι χρήσιμο να εισάγουμε τον *τελεστή μετάβασης*

$$\hat{T}(z) := \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \dots, \quad (17.117)$$

ο οποίος μας επιτρέπει να γράψουμε την Εξ. (17.113) ως

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{T}(z)\hat{G}_0(z). \quad (17.118)$$

Η Εξ. (17.117) σημαίνει ότι $\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z)\hat{G}_0(z)\hat{V}$, ή ισοδύναμα ότι

$$\hat{T}(z)[\hat{I} - \hat{G}_0(z)\hat{V}] = \hat{V} \quad (17.119)$$

Σε συνδυασμό με την Εξ. (17.103) παίρνουμε τη χρήσιμη ταυτότητα

$$\hat{V}|\alpha\rangle_\pm = \hat{T}(E_\alpha^\pm)|\alpha\rangle_0 \quad (17.120)$$

Η Εξ. (17.120) σημαίνει ότι

$$T_{\beta\alpha} := {}_0\langle\beta|\hat{T}(E_\alpha^\pm)|\alpha\rangle_0 = {}_0\langle\beta|\hat{V}|\alpha\rangle_\pm. \quad (17.121)$$

Με την Εξ. (17.117) υπολογίζουμε τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= -\langle\alpha|\beta\rangle_+ = {}_0\langle\beta|\alpha\rangle_+ + {}_0\langle\beta|\hat{V}\hat{G}(E_\beta^+)|\alpha\rangle_+ = {}_0\langle\beta|\alpha\rangle_+ + \frac{{}_0\langle\beta|\hat{V}|\alpha\rangle_+}{E_\beta - E_\alpha + i\epsilon} \\ &= {}_0\langle\beta|\alpha\rangle_+ + \frac{T_{\beta\alpha}}{E_\beta - E_\alpha + i\epsilon}, \end{aligned} \quad (17.121)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι $G(E^-)^\dagger = G(E^+)$ και την Εξ. (17.120). Χρησιμοποιούμε την Εξ. (17.103) στον όρο ${}_0\langle\beta|\alpha\rangle_+$,

$${}_0\langle\beta|\alpha\rangle_+ = {}_0\langle\beta|\alpha\rangle_0 + {}_0\langle\beta|\hat{G}_0(E_\alpha^+)\hat{V}|\alpha\rangle_+ = \delta_{\alpha\beta} + \frac{T_{\beta\alpha}}{E_\alpha - E_\beta + i\epsilon} \quad (17.122)$$

Αντικαθιστώντας στην (17.121), βρίσκουμε ότι

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta} - 2i \frac{\epsilon}{(E_\beta - E_\alpha)^2 + \epsilon^2} T_{\beta\alpha}. \quad (17.123)$$

Παίρνουμε το όριο $\epsilon \rightarrow 0$ μέσω της Εξ. (5.44), Καταλήγουμε ότι

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_\beta - E_\alpha) T_{\beta\alpha} \quad (17.124)$$

Βλέπουμε ότι ο τελεστής σκέδασης προσδιορίζεται πλήρως από τα στοιχεία πίνακα του τελεστή μετάβασης στα οποία διατηρείται η ενέργεια.

Για να βρούμε το μέτρο $|S_{\beta\alpha}|^2$ χρησιμοποιούμε την Εξ. (17.123) προτού πάρουμε το όριο $\epsilon \rightarrow 0$, αλλιώς θα εμφανίζεται μία συνάρτηση δέλτα στο τετράγωνο που απειρίζεται. Για $\beta \neq \alpha$,

$$|S_{\beta\alpha}|^2 = \left[\frac{2\epsilon}{(E_\beta - E_\alpha)^2 + \epsilon^2} \right]^2 |T_{\beta\alpha}|^2. \quad (17.125)$$

Από τις Εξ. (17.97, 17.98), παρατηρούμε ότι μία πεπερασμένη τιμή του ϵ ισοδυναμεί με την αντικατάσταση του τελεστή χρονικές εξέλιξης από τον $e^{-\epsilon|t|}e^{-i\hat{H}t}$. Όπως είδαμε στο Κεφ. 8.4.3, η παρουσία ενός πολλαπλασιαστικού παράγοντα $f(t)$ στην εξέλιξη είναι ισοδύναμη με το να θεωρήσουμε έναν περιορισμένο χρόνο $\tau = \int dt f(t)$ διάρκειας της αλληλεπίδρασης. Για $f(t) = e^{-\epsilon|t|}$, $\tau = 2/\epsilon$.

Στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$, γράφουμε $\left[\frac{2\epsilon}{(E_\beta - E_\alpha)^2 + \epsilon^2} \right]^2 = 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha) \frac{2\epsilon}{(E_\beta - E_\alpha)^2 + \epsilon^2} = \frac{4\pi}{\epsilon} \delta(E_\beta - E_\alpha) = 2\pi\tau\delta(E_\beta - E_\alpha)$, οπότε

$$\frac{|S_{\beta\alpha}|^2}{\tau} = 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha)|T_{\beta\alpha}|^2. \quad (17.126)$$

Βλέπουμε ότι στο όριο $\tau \rightarrow \infty$, ο λόγος $\frac{|S_{\beta\alpha}|^2}{\tau}$ είναι σταθερός και ίσος με $W(\alpha \rightarrow \beta)\delta(E_\beta - E_\alpha)$. Προσωρινά θα ερμηνεύσουμε την ποσότητα

$$W(\alpha \rightarrow \beta)d\beta = 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha)|T_{\beta\alpha}|^2d\beta \quad (17.127)$$

ως ένα ρυθμό μετάβασης από την α στη β , όπου το $d\beta$ εμφανίζεται γιατί οι ποσότητες β είναι συνεχείς και άρα η $W(\alpha \rightarrow \beta)$ είναι πυκνότητα πιθανότητας ως προς β .

Η ποσότητα $W(\alpha \rightarrow \beta)d\beta$ δεν έχει απαραίτητα διαστάσεις [πιθανότητα]/[χρόνος], καθότι η διάστασή της εξαρτάται από την κανονικοποίηση των διανυσμάτων $|\alpha\rangle$. Επιπλέον, όπως θα δούμε, ο τελεστής μετάβασης μπορεί να περιέχει συναρτήσεις δέλτα και για άλλες ποσότητες, οι οποίες πρέπει να αντιμετωπιστούν με παρόμοια διαδικασία.

Παράδειγμα 17.4. Για σωματίο σε μία διάσταση, ο τελεστής μετάβασης έχει στοιχεία μήτρας $T_{pp'}$ στη βάση των ορμών. Η Εξ. (17.121) δίνει

$$T_{pp'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} V(x) \psi_{p'}^+(x). \quad (17.128)$$

Καθώς διατηρείται η ενέργεια, $|p| = |p'| = \sqrt{2mE} = k$, άρα οι δυνατές τιμές των $T_{pp'}$ για δεδομένη τιμή του k εξαρτώνται μόνο από το πρόσημό των p, p' . Γράφουμε λοιπόν τα στοιχεία πίνακα $T_{pp'}$ ως $T_{ab}(k)$, όπου τα a, b παίρνουν τιμές $+$ ή $-$. Συγκρίνοντας με την Εξ. (17.109) παίρνουμε

$$\begin{pmatrix} T_{++}(k) & T_{+-}(k) \\ T_{-+}(k) & T_{--}(k) \end{pmatrix} = \frac{ik}{2\pi m} \begin{pmatrix} T_k - 1 & \bar{R}_k \\ R_k & \bar{T}_k - 1 \end{pmatrix}. \quad (17.129)$$

Γράφοντας τα στοιχεία πίνακα του τελεστή σκέδασης ως $S_{ab}(k, k')$ με $a, b = +, -$, η Εξ. (17.124) δίνει

$$S(k, k') = \delta(k - k') \begin{pmatrix} T_k & \bar{R}_k \\ R_k & \bar{T}_k \end{pmatrix}. \quad (17.130)$$

Παράδειγμα 17.5. Για σωματίο σε τρεις διαστάσεις όπου οι καταστάσεις $|\alpha\rangle_0$ ταυτίζονται με τα γενικευμένα ιδιοδιανύσματα της ορμής $|\mathbf{p}\rangle$, η Εξ. (17.121) δίνει

$$T_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}). \quad (17.131)$$

Συγκρίνοντας με την Εξ. (17.114), βρίσκουμε ότι

$$T_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = -\frac{1}{2\pi m} f_{\mathbf{p}}(\mathbf{n}), \quad (17.132)$$

όπου $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$ και $\mathbf{n} = \mathbf{p}'/|\mathbf{p}'|$.

Η Εξ. (17.124) δίνει

$$S_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) + \frac{i}{p} \delta(p - p') f_{\mathbf{p}}(\mathbf{n}). \quad (17.133)$$

Η Εξ. (17.117) μας προσφέρει τη δυνατότητα ενός διαταρακτικού υπολογισμού του τελεστή σκέδασης, κρατώντας πεπερασμένο αριθμό όρων από το ανάπτυγμα του $\hat{T}(z)$. Στη χαμηλότερη τάξη κρατάμε μόνο τον πρώτο όρο, οπότε

$$T_{\beta\alpha} = V_{\beta\alpha}. \quad (17.134)$$

Αυτή η προσέγγιση είναι η *γενικευμένη προσέγγιση Μπορν*. Όντως μ' αυτήν την προσέγγιση, η Εξ. (17.132) για σωματίο σε δυναμικό, δίνει την Εξ. (17.34) της προσέγγισης Μπορν.

17.4.4 Συμμετρίες του πίνακα σκέδασης

Η πρώτη βασική ιδιότητα του πίνακα σκέδασης είναι ότι η μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή \hat{H}_0 ,

$$[\hat{H}_0, \hat{S}] = 0. \quad (17.135)$$

Για την απόδειξη, γράφουμε τα στοιχεία πίνακα του μεταθέτη ${}_0\langle\beta|\hat{H}_0\hat{S} - \hat{S}\hat{H}_0|\alpha\rangle_0 = (E_\beta - E_\alpha)S_{\beta\alpha}$, τα οποία μηδενίζονται λόγω της Εξ. (17.124).

Από την άλλη, ο πίνακας σκέδασης δε μετατίθεται με την ολική Χαμιλτονιανή \hat{H} , η διατήρηση της ενέργειας στην Εξ. (17.124) αναφέρεται στην κινητική ενέργεια των σκεδαζόμενων σωματιδίων που αντιστοιχεί στην \hat{H}_0 , όχι στην πραγματική ενέργεια που αντιστοιχεί στην \hat{H} .

Έστω ότι ο τελεστής \hat{X} ικανοποιεί $[\hat{H}_0, \hat{X}] = [\hat{H}, \hat{X}] = 0$. Τότε $[\hat{V}, \hat{X}] = 0$ και $[\hat{V}(t), \hat{X}] = 0$, όπου $\hat{V} = e^{i\hat{H}t}\hat{V}e^{-i\hat{H}t}$. Από την Εξ. (17.96) παίρνουμε ότι

$$[\hat{X}, \hat{S}] = 0. \quad (17.136)$$

Άρα όλοι οι μετασχηματισμοί που αντιστοιχούν σε δυναμικές συμμετρίες και του \hat{H} και του \hat{H}_0 αφήνουν τον τελεστή σκέδασης αναλλοίωτο.

Επίσης καθώς $[\hat{H}_0, \hat{X}] = 0$, μπορούμε πάντα να επιλέξουμε τη βάση $|\alpha\rangle_0$, έτσι ώστε να είναι ιδιοδιανύσματα και του \hat{X} , οπότε $\hat{X}|\alpha\rangle_0 = X_\alpha|\alpha\rangle_0$. Παίρνοντας τα στοιχεία μήτρας του μεταθέτη (17.136) βρίσκουμε ότι

$$0 = {}_0\langle\beta|\hat{X}\hat{S} - \hat{S}\hat{X}|\alpha\rangle_0 = (X_\beta - X_\alpha)S_{\beta\alpha}, \quad (17.137)$$

οπότε $S_{\beta\alpha} = 0$ αν $X_\beta \neq X_\alpha$. Η τιμή του X_α διατηρείται σε κάθε σκέδαση.

Σε συστήματα που είναι αναλλοίωτα κάτω από τους μετασχηματισμούς Γαλιλαίου ή τους μετασχηματισμούς Πουανκαρέ, τόσο η \hat{H}_0 όσο και η \hat{H} μετατίθενται με τους γεννήτορες \hat{P}_i των μετατοπίσεων στο χώρο, που ορίζουν το διάνυσμα της συνολικής ορμής του συστήματος. Αυτό σημαίνει ότι η ορμή διατηρείται σε μία σκέδαση, και άρα από την Εξ. (17.124) ότι τα στοιχεία πίνακα $T_{\beta\alpha}$ είναι ανάλογα της συνάρτησης δέλτα $\delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha)$,

$$T_{\beta\alpha} = \mathcal{M}_{ab}(2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha). \quad (17.138)$$

Αυτό σημαίνει ότι στον υπολογισμό του $|S_{\beta\alpha}|^2$ εμφανίζεται η συνάρτηση $\delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha)$ υψωμένη εις το τετράγωνο. Ακολουθούμε την ίδια λογική που χρησιμοποιήσαμε στην Εξ. (17.126), για να γράψουμε $[\delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha)]^2 = V(2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha)$, όπου V ο όγκος εντός του οποίου γίνεται η σκέδαση. Οπότε για $\beta \neq \alpha$ παίρνουμε

$$\frac{|S_{\beta\alpha}|^2}{\tau V} = (2\pi)^4 \delta(E_\beta - E_\alpha) \delta^3(\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\alpha) |\mathcal{M}_{\beta\alpha}|^2, \quad (17.139)$$

οπότε ορίζουμε ένα ρυθμό πιθανότητας ανά μονάδα όγκου $w(\alpha \rightarrow \beta)$,

$$w(\alpha \rightarrow \beta) d\beta = 2\pi |\mathcal{M}_{\beta\alpha}|^2 d\beta. \quad (17.140)$$

Έστω ότι τόσο η \hat{H}_0 όσο και η \hat{H} είναι αναλλοίωτες κάτω από τον τελεστή αντιστροφής στο χρόνο $\hat{\mathbb{T}}$. Εφόσον τα διανύσματα $|\alpha\rangle_0$ περιγράφουν ορμές και σπιν, η δράση του $\hat{\mathbb{T}}$ είναι της μορφής $\hat{\mathbb{T}}|\alpha\rangle_0 = \sigma|\alpha^*\rangle_0$, όπου $|\alpha^*\rangle$ ένα άλλο ιδιοδιάνυσμα της \hat{H}_0 και $\sigma = \pm 1$. Η συνθήκη $[\hat{S}, \hat{\mathbb{T}}] = 0$ σημαίνει ότι $\hat{\mathbb{T}}^\dagger \hat{S} \hat{\mathbb{T}} = \hat{S}$, οπότε

$$S_{\beta\alpha} = {}_0\langle\beta|\hat{\mathbb{T}}^\dagger \hat{S} \hat{\mathbb{T}}|\alpha\rangle_0 = \sigma^2 {}_0\langle\beta^*|\hat{S}|\alpha^*\rangle_0 = S_{\beta^*\alpha^*} \quad (17.141)$$

Για παράδειγμα, για σωματίο σε δυναμικό $\hat{\mathbb{T}}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$, οπότε η Εξ. (17.141) δίνει $S_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = S_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$, και άρα $f_{\mathbf{p}}(\mathbf{n}) = f_{-\mathbf{p}}(-\mathbf{n})$.

Με τον ίδιο τρόπο δείχνουμε ότι εφόσον ο τελεστής αντιστροφής του χώρου δρα ως $\hat{\mathbb{P}}|\alpha\rangle_0 = u|\alpha^P\rangle_0$, όπου $u = \pm 1$, τότε

$$S_{\beta\alpha} = S_{\beta^P\alpha^P} \quad (17.142)$$

Ασκήσεις

1. Εξετάστε τη σκέδαση ταυτοτικών σωματίων σε χαμηλές ενέργειες, όπου συνεισφέρουν μόνο τα μερικά κύματα με $\ell = 0, 1$. Ειδικότερα, κάντε το γράφημα της διαφορικής ενεργού διατομής ως συνάρτηση της γωνίας θ για (α) σωματίια με σπιν 0, (β) ηλεκτρόνια με ολικό σπιν $S = 1$, (γ) ηλεκτρόνια με ολικό σπιν $S = 0$ και (δ) ηλεκτρόνια με κατάσταση πλήρους άγνοιας για το σπιν.
2. Το παρακάτω δυναμικό μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη της σκέδασης πρωτονίων νετρονίων

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & r < a \\ 0 & r \geq a. \end{cases},$$

όπου $a, V_0 > 0$. Βρείτε την αλγεβρική εξίσωση που προσδιορίζει τη μετατόπιση φάσης $\delta_0(k)$ και την ενεργό διατομή στο όριο χαμηλών ενεργειών.

3. Το κλασικό όριο της σκέδασης αντιστοιχεί σε σωματίια με μεγάλη ορμή και κατανομή στροφορμών σε μακροσκοπικά μεγάλες τιμές του ℓ έτσι ώστε το πλάτος σκέδασης $f_k(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1)(e^{2i\delta_\ell} -$

1) $P_\ell(\cos \theta)$ να προσεγγίζεται από ολοκλήρωμα ως προς τα ℓ . (α) Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση $P_\ell(\cos \theta) \simeq J_0[(2\ell + 1) \sin \frac{1}{2}\theta]$ που ισχύει για μεγάλες τιμές του ℓ , δείξτε ότι

$$f_k(\theta) = -ik \int_0^\infty db b (e^{2i\delta(b)} - 1) J_0(qb)$$

όπου $b = \ell/k$ και $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$. (β) Ποια είναι η φυσική ερμηνεία του b στη σκέδαση ενός κλασικού σωματίου; (γ) Σε υψηλές ενέργειες, το δ_ℓ είναι περίπου σταθερό μέχρι μια τιμή ℓ_{max} και μετά πέφτει γρήγορα στο μηδέν. Προσεγγίζουμε αυτή τη συμπεριφορά, επιλέγοντας

$$\delta(b) = \begin{cases} \Delta(k) & b < b_m \\ 0 & b > b_m \end{cases}$$

Υπολογίστε το πλάτος σκέδασης. (Χρησιμοποιήστε την ταυτότητα $x^n J_{n-1}(x) = [x^n J_n(x)]'$.) (δ) Κάντε γραφική της διαφορικής ενεργού διατομής και δείξτε ότι είναι επικεντρωμένη σε τιμές του θ μικρότερες του $\sim \frac{1}{kb_m}$.

4. Υπολογίστε τις καταστάσεις εξόδου για σωματίο στην ευθεία υπό δυναμικό $V(x)$.
5. Θεωρούμε τη σκέδαση δύο σωματιδίων με σπιν S_1 και S_2 με μία αλληλεπίδραση της μορφής $\hat{V} = \hat{V}_0(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \otimes I + \hat{V}_1(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \otimes S_1 \cdot S_2$. (α) Δείξτε ότι σε κάθε ιδιόχωρο του $S_1 \cdot S_2$ με ιδιοτιμή σ , η αλληλεπίδραση αντιστοιχεί σε σκέδαση κάτω από κεντρικό δυναμικό $V_0(r) + \sigma V_1(r)$. (β) Υπολογίστε τη διαφορική διατομή σκέδασης στην προσέγγιση Μπορν για δύο σωματίδια με σπιν $s = \frac{1}{2}$, και δυναμικά αλληλεπίδρασης $V_0(r) = -V_1(r) = -V_0$ για $r < a$, και $V_0(r) = 0, V_1(r) = V_0(a/r)^6$ για $r > a$. Θεωρείστε κατάσταση πλήρης άγνοιας ως προς τα σπιν.
6. Έστω αλληλεπίδραση με στοιχεία μήτρας $\langle \alpha | \hat{V} | \beta \rangle = f(\alpha) f^*(\beta)$, όπου f είναι συνάρτηση των βασικών ποσοτήτων α . (α) Βρείτε τη λύση της εξίσωσης Λίπμαν -Σβίνγκερ για τις καταστάσεις εισόδου. (β) Υπολογίστε τον τελεστή σκέδασης.
7. (α) Γράψτε την εξίσωση Λίπμαν -Σβίνγκερ για σωματίδια με Χαμιλτονιανή $\hat{H}_0 = c|\hat{p}|$, όπου c σταθερά. (β) Υπολογίστε τα στοιχεία πίνακα του αναλυτή $G_0(E^+)$ στη βάση της θέσης. (γ) Προσδιορίστε την εξίσωση που ικανοποιεί το πλάτος σκέδασης.
8. Δείξτε ότι τρεις από τις τέσσερις σχέσεις (6.70) προκύπτουν από την απαίτηση ότι ο πίνακας σκέδασης για σωματίο σε μία διάσταση είναι μοναδιαίος και ότι η τέταρτη προκύπτει από την ανεξαρτησία κάτω από αντιστροφή του χρόνου.

Παράρτημα Α'

Ειδικές συναρτήσεις

Α'.1 Πολυώνυμα Ερμίτ

Τα πολυώνυμα Ερμίτ (Hermite) $H_n(x)$ είναι πολυώνυμα n βαθμού που ορίζονται ως

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}, \quad (\text{A'.1})$$

όπου $n = 0, 1, 2, \dots$. Αποτελούν λύσεις της διαφορικής εξίσωσης του Hermite

$$y'' - 2xy' + 2ay = 0. \quad (\text{A'.2})$$

Γράφοντας τη λύση της Εξ. (A'.2) ως σειρά $y = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$ παίρνουμε την αναδρομική σχέση

$$a_{k+2} = \frac{2(k-a)}{(k+2)(k+1)}, \quad (\text{A'.3})$$

από την οποία προκύπτει ότι πολυωνυμική λύση υπάρχει μόνο αν $a = n$ για κάποιο $n = 0, 1, 2, \dots$. Οι λύσεις ταυτίζονται με τα πολυώνυμα Ερμίτ.

Τα έξι πρώτα πολυώνυμα Ερμίτ είναι τα εξής

$$H_0(x) = 1 \quad (\text{A'.4})$$

$$H_1(x) = 2x \quad (\text{A'.5})$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \quad (\text{A'.6})$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad (\text{A'.7})$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12 \quad (\text{A'.8})$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x \quad (\text{A'.9})$$

Τα πολυώνυμα Ερμίτ ικανοποιούν τις εξής σχέσεις.

- σχέση συμμετρίας: $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$.
- αλγεβρική σχέση αναδρομής: $H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$.
- διαφορική σχέση αναδρομής: $H'_n = H_{n+1} - 2xH_n$
- ορθοκανονικοποίησης: $\int dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$

A'.2 Σφαιρικές αρμονικές

A'.2.1 Η Λαπλασιανή σε σφαιρικές συντεταγμένες

Ο τελεστής του Λαπλάς σε Καρτεσιανές συντεταγμένες (x_1, x_2, x_3) γράφεται

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (\text{A'.10})$$

Κάνουμε αλλαγή σε ένα σύστημα συντεταγμένων $y_a(x)$, όπου $a = 1, 2, 3$. Τότε έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{a=1}^3 \frac{\partial y_a}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial y_a} \quad (\text{A'.11})$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (A'.10) βρίσκουμε

$$\nabla^2 f = \sum_{i=1}^3 \sum_{a,b=1}^3 \frac{\partial y_a}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial y_a} \left(\frac{\partial y_b}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial y_b} \right). \quad (\text{A'.12})$$

Χρησιμοποιούμε σφαιρικές συντεταγμένες $y = (r, \theta, \phi)$, οπότε

$$(x_1, x_2, x_3) = r(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (\text{A'.13})$$

Ο Ιακωβιανός πίνακας $J_{ai} = \partial x_i / \partial y_a$ είναι

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r} & \frac{\partial x_1}{\partial \theta} & \frac{\partial x_1}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_2}{\partial r} & \frac{\partial x_2}{\partial \theta} & \frac{\partial x_2}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_3}{\partial r} & \frac{\partial x_3}{\partial \theta} & \frac{\partial x_3}{\partial \phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & r \cos \theta \cos \phi & -r \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A'.14})$$

Στην Εξ. (A'.12) εμφανίζεται ο αντίστροφος Ιακωβιανός πίνακας $\frac{\partial y_a}{\partial x_i}$, ο οποίος υπολογίζεται

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi & -\frac{1}{r \sin \theta} \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & -\frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi & \frac{1}{r \sin \theta} \cos \phi \\ \cos \theta & -\frac{1}{r} \sin \theta & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A'.15})$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (A'.12) παίρνουμε τον τελεστή Λαπλάς στις σφαιρικές συντεταγμένες

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}, \quad (\text{A'.16})$$

A'.2.2 Ιδιοσυναρτήσεις της εξίσωση Λαπλάς

Ο τελεστής Λαπλάς γράφεται ως

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \Delta_{S^2} \right), \quad (\text{A'.17})$$

όπου ο τελεστής

$$\Delta_{S^2} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \quad (\text{A'.18})$$

καλείται τελεστής Λαπλάς της σφαίρας S^2 .

Αναζητούμε τις ιδιοσυναρτήσεις $Y(\theta, \phi)$ του τελεστή Δ_{S^2} , δηλαδή τις λύσεις της εξίσωσης

$$\Delta_{S^2} Y(\theta, \phi) = aY(\theta, \phi). \quad (\text{A'.19})$$

Γράφοντας $Y(\theta, \phi) = g(\theta)h(\phi)$ παίρνουμε τη σχέση

$$\frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial \phi^2} = -\frac{\sin \theta}{g} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) - a \sin^2 \theta. \quad (\text{A'.20})$$

Δεδομένου ότι στην Εξ. (A'.20) το δεξί μέλος είναι συνάρτηση του ϕ και το αριστερό του θ , η ισότητα μπορεί να ισχύει αν και τα δύο μέλη ισούνται με μία σταθερά, έστω b . Η εξίσωση για το h γράφεται,

$$\frac{d^2 h}{d\phi^2} - b\phi = 0. \quad (\text{A'.21})$$

Η Εξ. (A'.21) αποδέχεται λύσεις της μορφής $h(\phi) = e^{\pm\sqrt{b}\phi}$, οι οποίες ικανοποιούν τη συνθήκη περιοδικότητας $h(\phi) = h(\phi + 2\pi)$, μόνο αν $b = -m^2$, όπου $m = 0, 1, 2, \dots$. Άρα οι αποδεκτές λύσεις της Εξ. (A'.21) είναι της μορφής $h_m(\phi) = e^{\pm im\phi}$.

Η Εξ. (A'.20) για τη συνάρτηση $g(\theta)$ γράφεται

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) + a \sin^2 \theta g = m^2 g. \quad (\text{A'.22})$$

Θέτοντας $\xi = \cos \theta$ καταλήγουμε στην *προσαρτημένη εξίσωση Λεζάντρ* (Legendre)

$$(1 - \xi^2)g'' - 2\xi g' + \left(a - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) g = 0. \quad (\text{A'.23})$$

Η προσαρτημένη εξίσωση Λεζάντρ αποδέχεται λύσεις με πεπερασμένες τιμές στο $\xi = \pm 1$, μόνο αν $a = \ell(\ell+1)$, για $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ και για $|m| \leq \ell$. Σ' αυτήν την περίπτωση οι λύσεις είναι τα προσαρτημένα πολυώνυμα Legendre $P_\ell^m(\xi)$ που ορίζονται ως

$$P_\ell^m(\xi) := \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1 - \xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{d\xi^{\ell+m}} (\xi^2 - 1)^\ell, \quad (\text{A'.24})$$

για $m \geq 0$, ενώ για αρνητικές τιμές του m

$$P_\ell^{-m}(\xi) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(\xi). \quad (\text{A'.25})$$

Για $m = 0$, η Εξ. (A'.24) ταυτίζεται με τον τύπο του Ροντρίγκεζ για τα πολυώνυμα Λεζάντρ, Εξ. (4.16), οπότε $P_\ell^0(\xi) = P_\ell(\xi)$.

Τα πρώτα προσαρτημένα πολυώνυμα Λεζάντρ είναι

$$P_0^0(\xi) = 1 \quad (\text{A'.26})$$

$$P_1^0(\xi) = \xi \quad P_1^1(\xi) = -(1 - \xi^2)^{1/2} \quad (\text{A'.27})$$

$$P_2^0(\xi) = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1) \quad P_2^1(\xi) = -3\xi(1 - \xi^2)^{1/2} \quad P_2^2(\xi) = 3(1 - \xi^2) \quad (\text{A'.28})$$

$$P_3^0(\xi) = \frac{1}{2}\xi(5\xi^2 - 3) \quad P_3^1(\xi) = \frac{3}{2}(1 - 5\xi^2)(1 - \xi^2)^{1/2} \quad (\text{A'.29})$$

$$P_3^2(\xi) = 15\xi(1 - \xi^2) \quad P_3^3(\xi) = -15(1 - \xi^2)^{3/2}. \quad (\text{A'.30})$$

Σημαντική ιδιότητα των προσαρτημένων πολυωνύμων Λεζάντρ είναι οι σχέσεις κανονικοποίησης

$$\int_{-1}^1 d\xi P_\ell^m(\xi) P_{\ell'}^m(\xi) = \frac{2(\ell + m)!}{(2\ell + 1)(\ell - m)!} \delta_{\ell\ell'}. \quad (\text{A'.31})$$

Επομένως ο τελεστής Λαπλάς της σφαίρας Δ_{S^2} χαρακτηρίζεται από ιδιοτιμές $-\ell(\ell + 1)$ και ιδιοσυναρτήσεις

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = C_{\ell, m} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (\text{A'.32})$$

όπου $m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$. Αυτό σημαίνει ότι για κάθε τιμή του l υπάρχουν $(2l + 1)$ ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$.

Οι ιδιοσυναρτήσεις $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ του Δ_{S^2} καλούνται *σφαιρικές αρμονικές*. Οι σταθερές $C_{\ell, m}$ στην Εξ. (A'.32) προσδιορίζονται από την απαίτηση ορθοκανονικοποίησης

$$\int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (\text{A'.33})$$

η οποία οδηγεί στη σχέση

$$C_{\ell, m} = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \quad (\text{A'.34})$$

Από τη σχέση (A'.17) καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\begin{aligned} r^2 \nabla^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \\ &= -\ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (\text{A'.34})$$

που αποδίδει τη σχέση των σφαιρικών αρμονικών με τον τελεστή Λαπλάς ∇^2 .

A'.3 Γενικευμένα πολυώνυμα Λαγκέρ

Τα γενικευμένα πολυώνυμα Λαγκέρ $L_n^\alpha(x)$ είναι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0, \quad (\text{A'.35})$$

για n ακέραιο. Το α γενικά παίρνει οποιοσδήποτε τιμές.

Γράφονται ως

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n + \alpha}{n - k} \frac{x^k}{k!}, \quad (\text{A'.36})$$

και ικανοποιούν τη σχέση ορθογωνιότητας

$$\int_0^\infty dx e^{-x} L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!}. \quad (\text{A'.37})$$

Τα πρώτα γενικευμένα πολυώνυμα Λαγκέρ είναι

$$\begin{aligned} L_0^\alpha(x) &= 1 \\ L_1^\alpha(x) &= -x + \alpha + 1 \\ L_2^\alpha(x) &= \frac{x^2}{2} - (\alpha + 2)x + \frac{(\alpha + 2)(\alpha + 1)}{2} \\ L_3^\alpha(x) &= -\frac{x^3}{6} + \frac{(\alpha + 3)x^2}{2} - \frac{(\alpha + 2)(\alpha + 3)x}{2} + \frac{(\alpha + 3)(\alpha + 2)(\alpha + 1)}{6}. \end{aligned}$$

Βιβλιογραφία

- [1] P.S. de Laplace, A Philosophical Essay on Probabilities, (Forgotten Books, 2012).
- [2] H. Goldstein, C. Poole and J. Safko, Classical Mechanics (Addison Wesley, 2001).
- [3] J. Laskar and M. Gastineau, Nature 459, 817 (2009).
- [4] C. Anastopoulos, Particle or Wave: The Evolution of the Concept of Matter in Modern Physics (Princeton University Press, 2008).
- [5] D. J. Griffiths, Introduction to Electrodynamics (Prentice-Hall, 1999).
- [6] M. R. Spiegel, Πιθανότητες και Στατιστική (ΕΣΠΙ, Αθήνα).
- [7] D. P. Bertsekas and J. N. Tsitsiklis, Introduction to Probability (Athena Scientific, 2008).
- [8] I. Hacking, An Introduction to Probability and Inductive Logic (Cambridge University Press, 2001).
- [9] D. H. Mellor, Probability: A Philosophical Introduction (Routledge, Oxon 2005).
- [10] C. J. Isham, Lectures on Quantum Theory (Allied Publishers, 2001).
- [11] C. N. Yang, Particle Physics (Princeton University Press, 1961).
- [12] A. Einstein, Ann. Physik 17, 132 (1905).
- [13] G. N. Lewis, Nature 118, 874 (1926).
- [14] A. H. Compton, Phys. Rev. 21, 483 (1923).
- [15] H. Geiger and E. Marsden, Proc. Roy. Soc. A82, 495 (1909).
- [16] E. Rutherford, Phil. Mag. 21, 669 (1911).
- [17] N. Bohr, Phil. Mag. 26, 1 (1913).
- [18] Γράμμα του Ράδερφορντ στον Μπορ (20.3.1913), ανατυπωμένο στο [19].
- [19] N. Bohr, Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge (Vintage Books, New York, 1963).
- [20] L. de Broglie, Nobel Lecture (1929). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.html
- [21] C. J. Davisson and L. Germer, Bell System Tech. J. 7 , 90 (1928).
- [22] I. Estermann and O. Stern, Z. Phys. 61, 95 (1930); I. Estermann, R. Frisch, and O. Stern, Z. Phys. 73, 348 (1931).
- [23] C. Jöhnsson, Z. Phys. 161, 454 (1961).

- [24] A. Tonomura et al, Am. J. Phys. 57, 117 (1989)
- [25] A. Zeilinger, R. Gähler, C. G. Shull, W. Treimer, and W. Mampe, Rev. Mod. Phys. 60, 1067 (1988).
- [26] D. W. Keith, M. L. Schattenburg, H. I. Smith, and D. E. Pritchard, Phys. Rev. Lett. 61, 1580 (1988); O. Carnal and J. Mlynek, Phys. Rev. Lett. 66, 2689(1991).
- [27] M. Arndt, et al., Nature 401, 680 (1999).
- [28] T. Juffmann et al, Nature Nanotechnology 7, 297 (2012).
- [29] H. Kragh, Οι Γενιές των Κβάντων (Κάτοπτρο, Αθήνα 2004).
- [30] M. Jammer, The Conceptual Development of Quantum Mechanics, (2nd ed: New York, American Institute of Physics, 1989).
- [31] B. L. van der Waerden, Sources of Quantum Mechanics (Dover, 2007).
- [32] N. Bohr, Nobel lecture (1922). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1922/Bohr-lecture.html
- [33] P. Rodger, Physics World, September 2002.
- [34] M. Arndt and A. Zeilinger, Physics World, March 2005.
- [35] W. Bragg, The Robert Boyle Lecture 1921, Scientific Monthly 14, 158 (1922).
- [36] W. Heisenberg, Zeit. Phys. 33, 879 (1925).
- [37] E. Schrödinger, Annalen der Physik 384, 273 (1926).
- [38] W. Heisenberg, Quantum theory and its interpretations, ανατυπωμένο από τους Wheeler και Zurek [39].
- [39] J. A. Wheeler and W. H. Zurek (editors), Quantum theory and Measurement, (Princeton University Press, Princeton 1983).
- [40] W. Heisenberg, Zeit. Phys. 43, 172 (1927).
- [41] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics (Cambridge University Press, Cambridge 1999).
- [42] P. Busch, T. Heinonen and P. Lahti, Phys. Rep. 452, 155 (2007).
- [43] P. Busch, P. Lahti and R. F. Werner, Phys. Rev. Lett. 160405 (2013).
- [44] W. Heisenberg, Physics and Philosophy (Prometheus Books, New York 1999).
- [45] P. A. Schilp (editor), Albert Einstein: Philosopher-Scientist, P.A. Schilp editor (Evanston 1949).
- [46] A. C. de la Torre et al, Eur. J. Phys. 21, 253 (2000).
- [47] M. Born, Zeit. Phys. 37, 863 (1926).
- [48] W. Heisenberg, The Physical Principles of the Quantum Theory (Dover, New York, 1949).
- [49] P. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (Oxford University Press, 1930).
- [50] J. von Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (Berlin, Julius Springer 1932).

- [51] Werner Heisenberg and the Uncertainty Principle, American Institute of Physics and D. Cassidy (1998 - 2014). <http://www.aip.org/history/heisenberg/>
- [52] W. Heisenberg, Nobel Lecture (1932). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1932/heisenberg-lecture.html
- [53] E. Schrödinger, Nobel Lecture (1933). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1933/schrodinger-lecture.html
- [54] M. Born, Nobel Lecture (1954). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1954/born-lecture.html
- [55] W.W. Bell, Special Functions for Scientists and Engineers (D. van Nostrand Comp. Ltd., 1968).
- [56] J. Hilgevoord and J. Uffink, "The Uncertainty Principle", The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Spring 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.). <http://plato.stanford.edu/archives/spr2014/entries/qt-uncertainty/>
- [57] J. Faye, Jan, "Copenhagen Interpretation of Quantum Mechanics", The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.). <http://plato.stanford.edu/archives/fall2014/entries/qm-copenhagen/>
- [58] A. Peres, Quantum Theory: Concepts and Method (Kluwer, 2002).
- [59] A. Tarski, Introduction to Logic and the Methodology of the Deductive Sciences (Oxford University Press, Oxford 1946).
- [60] E. Schrödinger, Proceedings of the American Philosophical Society, 124, 323 (1935). Ανατυπωμένο από τους Wheeler και Zurek [39].
- [61] M. Brune et al, Phys. Rev. Lett. 77, 4887 (1996).
- [62] C. Monroe et al, Science 272, 1131 (1996).
- [63] C. H. van der Wal et al, Science 290, 773 (2000).
- [64] J. R. Friedman et al, Nature 406, 43 (2002).
- [65] J. J. Korbakken et al, Eur. Phys. Lett. 89, 30003 (2010).
- [66] R. Leftzer, Giant Molecules Exist in Two Places at Once in Unprecedented Quantum Experiment, Space.com October 8, 2019.
- [67] S. Axler, Linear Algebra Done Right (Springer, 2004).
- [68] N. Young, An Introduction to Hilbert Space (Cambridge University Press, Cambridge 1988) .
- [69] D. W. Cohen An Introduction to Hilbert Space and Quantum Logic (Springer, 1989).
- [70] V. Scarani, Quantum Physics: A First Encounter: Interference, Entanglement, and Reality (Oxford University Press, Oxford 2006).
- [71] C. H. Holbrow, E. Galvez and M. E. Parks, Am. J. Phys. 70, 260 (2002).
- [72] A. J. Leggett, Phys. Scr. 2002, 69 (2002).
- [73] M. Arndt and K. Horberger, Nature Physics 10, 271 (2014).

- [74] D. J. Wineland, Nobel lecture (2012). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2012/wineland-lecture.html
- [75] S. Haroche, Nobel lecture (2012). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2012/haroche-lecture.html
- [76] O. Heaviside, *Electromagnetic Theory*, third edition (Chelsea Publishing Company, 1971).
- [77] P. A. M. Dirac, *Development of the physicist's conception of nature*, in "The Physicist's Conception of Nature", ed. J. Mehra (D. Reidel Publishing Company, Dordrecht 1973).
- [78] M. H. Stone, in Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA 16, 172 (1930).
- [79] M. H. Stone, Ann. Math. 33, 643 (1932).
- [80] J. von Neumann, Ann. Math. 33, 567 (1932).
- [81] Baker–Campbell–Hausdorff formula, in Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Baker%E2%80%9393Campbell%E2%80%9393Hausdorff_formula
- [82] <http://mathworld.wolfram.com/notebooks/Algebra/Baker-Campbell-HausdorffSeries.nb>
- [83] H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. 10, 545 (1959).
- [84] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators* (Academic Press, 1978).
- [85] S. Roman, *Advanced Linear Algebra* (Springer, 2010).
- [86] N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space* (Dover, 1993).
- [87] T. F. Jordan, *Linear Operators for Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1969).
- [88] B. Schumacher, Phys. Rev. A51, 2738 (1995).
- [89] V. Bargmann, On the number of bound states in a central field of force, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 38, 961 (1952).
- [90] J. Schwinger, On the bound states of a given potential, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 47, 122 (1960).
- [91] H. Poincaré, *Les methodes nouvelles de la mécanique céleste*, Vol. 3 (Blanchard, Paris 1987).
- [92] N. N. Khuri, A. Martin and T-T Wu, Bound State in n dimensions (especially n=1 and n=2), Few-Body Systems 31, 83 (2002).
- [93] F. A. Berezin and M. A. Shubin, *The Schrödinger Equation* (Kluwer, Dordrecht 1991).
- [94] J. R. Klauder and B. Skagerstam, in *Coherent States— Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, 1985).
- [95] C. M. Bender and T. T. Wu, *Anharmonic Oscillator. II. A Study of Perturbation Theory in Large Order*, Phys. Rev. D7, 1620 (1973).
- [96] E. T. Jaynes, *Probability Theory: the Logic of Science* (Cambridge University Press, Cambridge 2003).
- [97] A. M. Gleason, 1957, J. Math. Mech. 6, 885 (1957).
- [98] R. Cooke, M. Keane and W. Moran, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 98, 117 (1985).

- [99] R. Penrose, *The Road to Reality* (Knopf, 2005)
- [100] A. Einstein, *J. Franklin Institute* 221, 349 (1936).
- [101] M. Born, *Natural Philosophy of Cause and Chance* (Dover, 1964).
- [102] J. B. Hartle, *Am. J. Phys.* 36, 704 (1968).
- [103] C. Shannon, *Bell Syst. Tech. J.* 27, 379 (1948).
- [104] E. H. Kennard, *Zeit. Phys.* 44, 326 (1927).
- [105] H. P. Robertson, *Phys. Rev.* 34, 573 (1929).
- [106] N. Bohr, 'Discussion with Einstein on epistemological problems in atomic physics', in *Albert Einstein: philosopher-scientist*, P.A. Schilpp (ed.), (La Salle: Open Court) p. 201.
- [107] Branszyk et al, *New J. Phys.* 14, 085003 (2012).
- [108] M. Hofheinz et al, *Nature* 459, 546 (2009).
- [109] K. Vogel and H. Risken, *Phys. Rev.* 40, 2847 (1989).
- [110] D. T. Smithey, M. Beck, M. G. Raymer, and A. Faridani, *Phys. Rev. Lett.* 70, 1244 (1993).
- [111] I. I. Hirschman, *Am. J. Math.* 79, 152 (1957).
- [112] H. Everett, III, *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics: the theory of the universal wave function*, Princeton Ph.D. Thesis.
- [113] I. Bialynicki-Birula and J. Mycielski, *Comm. Math. Phys.* 44, 129 (1975).
- [114] W. Beckner, *Ann. Math.* 102, 159 (1975).
- [115] B. Mielnik, *Comm. Math. Phys.* 9, 55 (1968).
- [116] E. G. Beltrametti and G. Cassinelli, *The Logic of Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 2010).
- [117] N.L. Balazs, *Phys. Rep.* 104, 347 (1984).
- [118] A. Wehrl, *Rev. Mod. Phys.* 50, 221 (1978).
- [119] G. M. D' Ariano, M. G. A. Paris, and M. F. Sacchi, *Advances in Imaging and Electron Physics* 128, p. 205 (2003) [quant-ph/0302028].
- [120] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, London 1976).
- [121] Απόσπασμα από ομιλία του Ντιράκ στο Ινδικό Συνέδριο Επιστημών (Μπαρόντα, 5-1-1955). Η καταγεγραμμένη ομιλία βρίσκεται στο Αρχείο Ντιράκ του Πανεπιστημίου της Πολιτείας της Φλώριδας (FSU).
- [122] J Bellissard and B. Simon, *J. Funct. Anal.* 48, 408 (1982); A. Avila and S. Jitomirskaya, in *Mathematical Physics of Quantum Mechanics*, ed. by J. Asch and A. Joye (Springer, 2006).
- [123] W. Pauli, in *Encyclopedia of Physics*, edited by S. Flugge, Vol. 5/1, (Springer, Berlin 1958).
- [124] L. I. Mandelshtam, I. E. Tamm, *J. Phys. (USSR)* 9, 249 (1945).
- [125] N. Margolus and L. B. Levitin, *The maximum speed of dynamical evolution*, *Physica D*120, 188 (1998).

- [126] L. B. Levitin and Y. Toffoli, *Fundamental limit on the rate of quantum dynamics: The unified bound is tight*, Phys. Rev. Lett. 103, 160502 (2009).
- [127] T.E. Hartman, J. App. Physics 33, 3427 (1962).
- [128] C. Anastopoulos and N. Savvidou, arXiv:1212.6508; Ann. Phys. 336, 281 (2013).
- [129] D. B. Malament, In defense of dogma: Why there cannot be a relativistic quantum mechanics of (localizable) particles, in R. K. Clifton (Ed.), *Perspectives on quantum reality* (Kluwer, Dordrecht 1996).
- [130] G. C. Hegerfeldt, Instantaneous spreading and Einstein causality in quantum theory, *Annalen der Physik*, 7, 716 (1998).
- [131] M. Born and V. Fock, A. Phys. A51, 165 (1928).
- [132] T. Kato, J. Phys. Soc. Japan 5, 435 (1950).
- [133] J. E. Avron and A. Elgart, Commun. Math. Phys. 203, 445 (1999).
- [134] M. V. Berry, Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes, Proc. Roy. Soc. A. 392, 45 (1982).
- [135] Compendium of Quantum Physics - Concepts, Experiments, History and Philosophy, ed. by F. Weinert, K. Hentschel, D. Greenberger, B. Falkenburg (Springer 2009).
- [136] D. H. Zeh, *The Physical Basis of The Direction of Time* (springer, 2007).
- [137] J. C. Muga, R. S. Mayato, and I. L. Equisquiza, *Time in Quantum Mechanics, vol 1* (Springer 2008).
- [138] C. Isham and N. Savvidou, *Time in Modern Physics in Time, Darwin College Lecture* (K. Riderbos ed.) (Cambridge University Press, 2002).
- [139] S. Deffner and S. Campbell, *Quantum Speed Limits: from Heisenberg's Uncertainty Principle to Optimal Quantum Control*, J. Phys. A: Math. Theor. 50, 453001 (2017).
- [140] F. Wilczek, and A. Shapere, *Geometric Phases in Physics* (World Scientific, Singapore 1989).
- [141] H. P. Breuer and F. P. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2007).
- [142] E. Wigner, *διαλέξεις στο Princeton* (1976), ανατυπωμένες στο βιβλίο των Wheeler και Zurek [39].
- [143] F. Karolyhazy, *Gravitation and Quantum Mechanics of Macroscopic Objects*, Nuovo Cim. 52, 390 (1966).
- [144] L. Diosi, *Gravitation and Quantum-Mechanical Localization of Macro-Objects*, Phys. Lett. A 105, 199 (1984); *A Universal Master Equation for the Gravitational Violation of Quantum Mechanics*, Phys. Lett. 120, 377 (1987).
- [145] R. Penrose, *Gravity and State Vector Reduction in Quantum Concepts in Space and Time*, R. Penrose and C. J. Isham editors, (Oxford, 1986, Clarendon Press); *On Gravity's Role in Quantum State Reduction*, Gen. Rel. Grav. 28, 581 (1996).
- [146] G. C. Ghirardi, A. Rimini and T. Weber, Phys. Rev. D34, 470 (1986); P. Pearle, Phys. Rev. D13, 857 (1976); 29, 235 (1984); 33, 2240 (1986); G. C. Ghirardi, P. Pearle and A. Rimini, Phys. Rev. A42, 78 (1990); R. Tumulka, Rev. Math. Phys. 21, 155 (2009).
- [147] G. C. Ghirardi and A. Bassi, Phys. Rep. 379, 257 (2003).
- [148] A. Bassi, K. Lochan, S. Satin, T. P. Singh and H. Ulbricht, Rev. Mod. Phys. 85, 471 (2013).

- [149] Y. Aharonov, P. Bergmann, and J. Lebovitz, Time Symmetry in the Quantum Process of Measurement, Phys. Rev. 134, 1410 (1964).
- [150] Y. Aharonov and L. Vaidman, *The Two-State Vector Formalism of Quantum Mechanics: an Updated Review*, in 'Time in Quantum Mechanics', edited by J. G. Muga, R. Sala Mayato and I. L. Egusquiza (Springer, 2008).
- [151] J. B. Hartle, *M. Gell-Mann and J. B. Hartle, in Physical Origins of Time Asymmetry*, [arXiv:2002.07093].
- [152] W. Nagourney, J. Sandberg and H. Dehmelt, Phys. Rev. Lett. 56, 1699 (1986).
- [153] R. J. Cook and H. J. Kimble, Phys. Rev. LW. 54 1023 (1985).
- [154] P. Zoller, M. Marte and D. Walls, Phys. Rev. A35, 198 (1987).
- [155] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. 47, 777 (1935).
- [156] A. Degasperis, L. Fonda and G. C. Ghirardi, Nuov. Cim. A21, 471 (1974).
- [157] B. Misra and E.C.G. Sudarshan, J. Math. Phys. 18, 756 (1977).
- [158] W. Itano, D. Heinzen, J. Bollinger and D. Wineland, Phys. Rev. A41, 2295 (1990).
- [159] A. Einstein to W. Heitler, 1948, translated in A. Fine, Einstein's Interpretations of Quantum Theory, Science in Context 6, 257 (1993).
- [160] A. Kent, Phys. Rev. Lett. 78, 2874 (1997).
- [161] Y. Aharonov and M. Vardi, *Meaning of an individual "Feynman path"*, Phys. Rev. D21, 2235 (1980).
- [162] V. d' Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics* (Perseus Book, Reading MA, 1999).
- [163] R. E. March, Int. J. Mass. Spect. 200, 285 (2000).
- [164] R. Blatt and P. Zoller, Eur. J. Phys. 9, 250 (1988).
- [165] H. Dehmelt, Nobel lecture (1989), http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1989/dehmelt-lecture.html
- [166] W. Paul, Nobel Lecture (1989), http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1989/paul-lecture.html
- [167] A. Peres, Found. Phys. 14, 1131 (1984).
- [168] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki and K. Horodecki, Rev. Mod. Phys. 81, 865 (2009).
- [169] A. Peres, Phys. Rev. Lett. 77, 1413 (1996).
- [170] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, Phys. Lett. A 223, 1 (1996).
- [171] R. F. Werner, Phys. Rev. A40, 4277 (1989).
- [172] J. S. Bell, Physics 1, 195 (1964).
- [173] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Phys. Rev. Lett. 47, 460 (1981).
- [174] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, Phys. Rev. Lett. 49, 1804 (1982).
- [175] W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden and N. Gisin, Phys. Rev. A57, 3229 (1998).

- [176] W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden, N. Gisin, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3563 (1998).
- [177] G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter and A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039 (1998).
- [178] M.A. Rowe, D. Kielpinski, V. Meyer, C.A. Sackett, W.M. Itano, C. Monroe and D.J. Wineland *Nature* **409**, 791 (2001).
- [179] S. Gröblacher, T. Paterek, R. Kaltenbaek, S. Brukner, M. Zdotukowski, M. Aspelmeyer and A. Zeilinger, *Nature* **446**, 871 (2006).
- [180] M. Ansmann, H. Wang, R. C. Bialczak, M. Hofheinz, E. Lucero, M. Neeley, A. D. O'Connell, D. Sank, M. Weides, J. Wenner, A. N. Cleland and John M. Martinis, *Nature* **461**, 504 (2009).
- [181] M. Giustina, A. Mech, S. Ramelow, B. Wittmann, J. Kofler, J. Beyer, A. Lita, B. Calkins, T. Gerrits, S. W. Nam, R. Ursin and Anton Zeilinger, *Nature* **497**, 227 (2013).
- [182] B. Hensen, H. Bernien, A. E. Dréau, A. Reiserer, N. Kalb, M. S. Blok, J. Ruitenber, R. F. L. Vermeulen, R. N. Schouten, C. Abellán, W. Amaya, V. Pruneri, M. W. Mitchell, M. Markham, D. J. Twitchen, D. Elkouss, S. Wehner, T. H. Taminiou and R. Hanson, *Nature* **527**, 682 (2015).
- [183] J. S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 1989).
- [184] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 166 (1952).
- [185] B. S. Cirel'son, *Lett. Math. Phys.* **4**, 93 (1980).
- [186] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Zeilinger in *Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*, ed. M. Kafatos (Kluwer, Dordrecht 1989); D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Zeilinger, A. Shimony, *Am. J. Phys.* **58**, 1131 (1990).
- [187] D. Mermin, *Am. J. Phys.* **58**, 731 (1990).
- [188] J. W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter and A. Zeilinger, *Nature* **403**, 515 (2000).
- [189] W. Wootters and W. Zurek, *Nature* **299**, 802 (1982).
- [190] D. Dieks, *Phys. Lett. A* **92**, 271 (1982).
- [191] C. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres and W. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [192] D. Boschi, S. Branca, F. De Martini, L. Hardy, and S. Popescu, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1121 (1998).
- [193] M. Riebe, H. Häffner, C. F. Roos, W. Hänsel, M. Ruth, J. Benhelm, G. P. T. Lancaster, T. W. Körber, C. Becher, F. Schmidt-Kaler, D. F. V. James, R. Blatt, *Nature* **429**, 734 (2004).
- [194] M. D. Barrett, J. Chiaverini, T. Schaetz, J. Britton, W. M. Itano, J. D. Jost, E. Knill, C. Langer, D. Leibfried, R. Ozeri and D. J. Wineland, *Nature* **429**, 737 (2004).
- [195] X. S. Ma, T. Herbst, T. Scheidl, D. Wang, S. Kropatschek, W. Naylor, A. Mech, B. Wittmann, J. Kofler, E. Anisimova, V. Makarov, T. Jennewein, R. Ursin and Anton Zeilinger *Nature* **489**, 269 (2012).
- [196] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics: a Modern Development* (World Scientific, 1998).
- [197] A. Shimony, "Bell's Theorem", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (2013), E. N. Zalta (ed.), <http://plato.stanford.edu/archives/win2013/entries/bell-theorem/>.
- [198] S. Goldstein, T. Norsen, D. V. Tausk and N. Zhanghi, *Scholarpedia*, **6**(10), 8378 (2011). http://www.scholarpedia.org/article/Bell's_theorem.

- [199] N. D. Mermin, *Physics Today*, April 1985, p. 38.
- [200] F. Laloë, *Am. J. Phys.* 69, 655 (2001).
- [201] T. Sudbury, *Nature* 362, 586 (1993).
- [202] Quantum Teleportation, wikipedia article. http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_teleportation.
- [203] W. Heisenberg, *Der Teil und das Ganze* (R. Piper, München, 1969).
- [204] E. P. Wigner, *Gruppentheorie* (Friedrich Vieweg und Sohn, Braunschweig, 1931), pp. 251–254; *Group Theory* (Academic Press Inc., New York, 1959), pp. 233–236.
- [205] R. Simon, N. Mukunda, S. Chaturvedi, and V. Srinivasan, Two elementary proofs of the Wigner theorem on symmetry in quantum mechanics, *Phys. Lett. A* 372, 6847 (2007).
- [206] J. von Neumann, *Math. Ann.* 104, 570 (1931).
- [207] A. Mouchet, *Phys. Lett. A* 377, 2709 (2013).
- [208] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields: I. Foundations* (Cambridge University Press, 1995).
- [209] G. C. Wick, A. S. Wightman, and E. P. Wigner, *Phys. Rev.* 88, 101 (1952).
- [210] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, 1996).
- [211] A. Eddington, *New Pathways in Science* (Cambridge University Press, 1934).
- [212] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* 109, 642 (1925).
- [213] H. J. Groenewold, *Physica* 12, 405 (1946).
- [214] C. J. Isham: ‘Topological and global aspects of quantum theory’, in *Les Houches, Session XL: Relativity, Groups and Topology II*, B. S. DeWitt and R. Stora eds. (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1983).
- [215] A. Zee, *Fearful Symmetry: The Search for Beauty in Modern Physics* (Princeton University Press, 2007).
- [216] H. F. Jones, *Groups, Representations and Physics* (CRC Press, 1998).
- [217] P. Ramond, *Group Theory: A Physicist’s Survey* (Cambridge University Press, 2010).
- [218] A. O. Barut and R. Raczka, *Theory of Group Representations and Applications* (World Scientific, Singapore, 1986).
- [219] N. M. J. Woodhouse, *Geometric Quantisation* (Oxford University Press, 1997).
- [220] J. von Neumann and E. Wigner, *Phys. Z.* 30, 465 (1929).
- [221] F. H. Stillinger and D. R. Herrick, *Phys. Rev. A* 11, 446 (1975).
- [222] S. L. Sobolev, *Mat. Sb.* 46, 471 (1938)
- [223] G. Rosen, Minimum Value for c in the Sobolev Inequality $\|\phi\|^2 \leq c\|\nabla\phi\|^3$, *SIAM J. Appl. Math.* 21, 30 (1971).
- [224] G. Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators*, *Amer. Math. Soc. Vol. 157*, (Providence, 2014).

- [225] B. Baumgartner, H. Grosse and A. Martin, *Phys. Lett.* 146, 363 (1984).
- [226] P. M. Morse, *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels*, *Phys. Rev.* 34, 57 (1929).
- [227] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* 115, 485 (1959).
- [228] R.G. Chambers, *Phys. Rev. Lett.* 5, 3, (1960).
- [229] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum Mechanics I* (Springer, 1990).
- [230] M. Peshkin and A. Tonomura, *The Aharonov-Bohm Effect* (Springer, 1989).
- [231] Y. Aharonov and D. Rohrlich, *Quantum Paradoxes* (Wiley, 2005).
- [232] Από μία κάρτα του Χάιζενμπεργκ στον Πάουλι, in W. Pauli, *Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u.a., Band I: 1919-1929*, Springer Verlag, New York/Heidelberg/Berlin 1979.
- [233] W. Pauli, *Z. Physik* 31, 765 (1925).
- [234] W. Pauli, *Z. Physik* 36, 336 (1926).
- [235] O. Stern and W. Gerlach, *Z. Physik* 8, 110 (1922).
- [236] G. E. Uhlenbeck and S. Goudsmit, *Die Naturwissenschaften* 13, 953, (1925); *Nature* 117, 555, (1926).
- [237] J. M. Souriau, *Structure of Dynamical Systems: A Symplectic View of Physics* (Birkhäuser, 1997).
- [238] L. H. Thomas, *Nature* 117, 514 (1926).
- [239] G. Galilei, *Dialogo sopra i due massimi sistemi del mondo (1632)*[*Dialogue Concerning the Two Chief World Systems*, transl. Stillman Drake, University of California Press, 1953].
- [240] V. Bargmann, *On Unitary Ray Representations of Continuous Groups*, *Ann. Math.* 59, 1 (1954).
- [241] S.A. Goudsmit, *Nederlands Tijdschrift voor Natuurkunde* 37, 386 (1971), [https://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/goudsmit.html#\[1\]](https://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/goudsmit.html#[1])
- [242] D. Guilini, *Stud. Hist. Philos. Mod. Phys.* 39, 557 (2008).
- [243] S. I. Tomonaga, *The Story of Spin* (University of Chicago Press, 1998).
- [244] H. Weyl, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover, New York 1950).
- [245] W. Pauli, *Phys. Rev.* 58, 716 (1942).
- [246] A. M. L. Messiah and O. W. Greenberg, *Phys. Rev.* 136, B248 (1964).
- [247] D. R. Finkelstein and J. Rubinstein, *J. Math. Phys.* 9, 1762 (1968); R. Tscheuschner, , *Int. J. Theor. Phys.* 28,1269 (1989) Erratum-*ibid.*29, 1437 (1990); A.P. Balachandran, A. Daughton, Z.C. Gu, G. Marmo, R.D. Sorkin and A.M. Srivastava, *Mod. Phys. Lett. A5*, 1575 (1990); *Int. J. Mod. Phys. A8*, 2993 (1993); M. V. Berry and J. M. Robbins, *Proc. Roy. Soc. Lond. A453*, 1771 (1997); *J. Phys. A: Math. Gen.* 33, L207 (2000); J. Anandan, *Phys. Lett. A248*, 124 (1998); C. Anastopoulos, *Int. J. Mod. Phys. A19*, 655 (2004).
- [248] F. J. Dyson and A. Lenard, *J. Math. Phys.* 8, 423 (1967); II, *ibid.* 9, 1538 (1968).
- [249] E. H. Lieb and R. Seiringer, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, (Cambridge University Press, 2010).

- [250] F. J. Dyson, *J. Math. Phys.* 8, 1538 (1967).
- [251] J. G. Conlon, E. H. Lieb, and H.-T. Yau, *Commun. Math. Phys.* 116, 417 (1988).
- [252] W. Pauli, Nobel Lecture (1945). http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1945/pauli-lecture.html
- [253] N. Straumann, quant-ph/0403199.
- [254] I. Duck and E. C. G. Sudarshan, *Pauli and the Spin-Statistics Theorem* (World Scientific 1998).
- [255] F. A. Berezin, *The Method of Second Quantization* (Academic Press, 1966).
- [256] Άρθρο "Perturbation theory (quantum mechanics)", http://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation_theory_%28quantum_mechanics%29.
- [257] L. H. Thomas, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 23, 542 (1927); E. Fermi, *Rend. Acad. Maz. Lincei* 6, 602 (1927).
- [258] E. Teller, *Rev. Mod. Phys.* 34, 627 (1962).
- [259] E. H. Lieb and B. Simon, *Phys. Rev. Lett.* 31, 681 (1973).
- [260] I. N. Levine, *Quantum Chemistry* (Prentice Hall, 1999).
- [261] N. H. March, *Adv. Phys.* 6, 1 (1957).
- [262] E. H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* 53, 603 (1981).
- [263] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, M. C. Fischer, K. W. Madison, P. R. Morrow, Q. Niu, B. Sundaram and Mark G. Raizen, *Nature* 387, 575 (1997).
- [264] G. Breit and E. P. Wigner, *Phys. Rev.* 49, 519 (1936).
95, 1329 (1954) 1329.