ΑΡΧΕΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Ιωάννης Π. Ζώης
E-mail: `i.zois@exeter.oxon.org`

24 Φεβρουαρίου 2009

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή **6**
1.1 Κλασική Μηχανική 7
1.2 Κλασική Θεωρία Πεδίων 8
1.3 Κλασική Στατιστική Μηχανική 9
1.4 Θεωρία/Αρχή Σχετικότητας 17

2 Η Ανάγκη μιας νέας Θεωρίας για τον Μικρόκοσμο **22**
2.1 Ακτινοβολία Μέλανος Σώματος 23
2.2 Το Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο 24
2.3 Το Φαινόμενο Compton 25
2.4 Ατομικά Μοντέλα - Ατομική Φασματοσκοπία 26

3 Η Σχολή της Κοπεγχάγης **31**
3.1 Η Μητρομηχανική του Heisenberg 31
3.2 Η Υπόθεση των Υλικών Κυμάτων του de Broglie 32

4 Η Εξίσωση του Schrödinger **35**
4.1 Η Ελεύθερη Εξίσωση του Schrödinger 36
4.2 Γενικότερες Μορφές της Εξίσωσης Schrödinger 39

5 Ένα Μαθηματικό Intermezzo **42**
5.1 Στοιχεία Συναρτησιακής Ανάλυσης 42
5.1.1 Χώροι Hilbert 42
5.1.2 Γραμμικοί Τελεστές 49
5.1.3 Αναπαραστάσεις Τελεστών Πεπερασμένης Διάστασης . 55
5.1.4 Μαθηματικές Κατανομές και η Συνάρτηση δ του Dirac . 56
5.1.5 Τριάδες Gelfand 61
5.2 Συνδυαστική και Βασικές Στατιστικές Έννοιες 62

6 Η Επίλυση της Εξίσωσης του Schrödinger **66**

7 Η Στατιστική Ερμηνεία της Κυματοσυνάρτησης **68**
7.1 Τα Υλικά Κύματα ως Κύματα Πιθανότητας - Ρεύμα Πιθανότητας 68
7.2 Στατιστική Ερμηνεία Φυσικών Μεγεθών 72
7.3 Ο Ρόλος των Ιδιοσυναρτήσεων 74
7.4 Το Ανάπτυγμα σε Ιδιοσυναρτήσεις 75
7.5 Η Περίπτωση του Συνεχούς Φάσματος 77
7.6 Η Κατάρρευση της Κυματοσυνάρτησης 81

8 Η Σχέση Αβεβαιότητας **85**
8.1 Συμβιβαστά και Ασυμβίβαστα Φυσικά Μεγέθη 85
8.2 Η Γενικευμένη Σχέση Αβεβαιότητας 86

9 Η Χρονική Μεταβολή των Μέσων Τιμών **89**

10 Ανακεφαλαίωση των Βασικών Αρχών της Κβαντομηχανικής **91**

11 Ασκήσεις - Φύλλο 1: **94**

12 Ασκήσεις - Φύλλο 2: **95**

Σύντομο Βιογραφικό Σημείωμα του Συγγραφέα:

Ο Ιωάννης Παναγιώτου Ζώης γεννήθηκε το 1968 στη Βέροια. Μετά το πέρας των προπτυχιακών του σπουδών στο Τμήμα Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών, απ΄ όπου αποφοίτησε με Άριστα, συνέχισε τις μεταπτυχιακές του σπουδές στην Αγγλία: Μάστερ (Part III of the Mathematical Tripos) στο Πανεπιστήμιο του Κέιμπριτζ (Κολλέγιο Εμμανουήλ) και Διδακτορικό στο Πανεπιστήμιο της Οξφόρδης (Κολλέγιο Έξετερ). Η τριμελής επιτροπή της διδακτορικής του διατριβής απαρτιζόταν από τους καθηγητές Simon K. Donaldson FRS (Fields Medal 1986, Crafoord Prize 1996), Roger Penrose FRS και Sheung-Tsoun Tsou. Ήταν υπότροφος, μεταξύ άλλων, της Ευρωπαϊκής Ένωσης, της Βρεττανικής Κυβέρνησης, του ΙΚΥ (Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών), του Κοινωφελούς Ιδρύματος *Α.Σ. Ωνάσης* και του Κοινωφελούς Ιδρύματος *Α.Γ. Λεβέντης*. Έχει εργασθεί στο παρελθόν ως ερευνητής και πανεπιστημιακός δάσκαλος στα Πανεπιστήμια της Οξφόρδης και του Κέιμπριτζ της Αγγλίας, στο Institut des Hautes Études Scientifiques (IHES) (ως μέλος της ερευνητικής ομάδας του καθηγητή Alain Connes–Fields Medal 1982, Crafoord Prize 2002–) και στην École Normale Superieure (ENS) στο Παρίσι της Γαλλίας και αλλού. Τα ερευνητικά του ενδιαφέροντα εμπίπτουν στα γνωστικά αντικείμενα της Μη-μεταθετικής Γεωμετρίας, της Τοπολογίας και Γεωμετρίας των Πολλαπλοτήτων (ειδικότερα των Πολλαπλοτήτων Χαμηλών Διαστάσεων) και εφαρμογές αυτών στη Θεωρητική Φυσική (Κοσμολογία, Θεωρίες Ενοποίησης, Θεωρία Χορδών/Μεμβρανών). Έχει δημοσιεύσει μέχρι στιγμής περίπου είκοσι άρθρα σε διεθνή ερευνητικά επιστημονικά περιοδικά (σε ηλεκτρονική και έντυπη μορφή).

Πρόλογος:

Οι διδακτικές αυτές σημειώσεις προήλθαν από το μάθημα του 2ου εξαμήνου (1ου έτους) *Σύγχρονη Φυσική* που ο συγγραφέας δίδαξε κατά το ακαδημαϊκό έτος 2006-2007 στην Ανώτατη Σχολή Τοπογραφίας της Γεωγραφικής Υπηρεσίας Στρατού (ΓΥΣ), σχολή που ακολουθεί (σε κάπως πιο υψηλό επίπεδο), το πρόγραμμα σπουδών της σχολής Τοπογράφων Μηχανικών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου της Αθήνας (ΕΜΠ).

Η ύλη του μαθήματος βασίστηκε εν πολλοίς στο μάθημα του 6ου τριμήνου του δευτέρου έτους *Κβαντική Μηχανική* το οποίο ο συγγραφέας είχε διδάξει στο παρελθόν στους προπτυχιακούς φοιτητές των Μαθηματικών Τμημάτων των Πανεπιστημίων της Οξφόρδης και του Κέιμπριτζ της Αγγλίας. (Σημειώνουμε πως στην πιο έγκυρη πρόσφατη διεθνή λίστα αξιολόγησης με τα 200 κορυφαία πανεπιστήμια του κόσμου των εφημερίδων Times Λονδίνου και Ν. Υόρκης καθώς και του περιοδικού Time, τα εν λόγω πανεπιστήμια βρίσκονται στις θέσεις 1 και 2 στην επί μέρους κατάταξη που αφορά τα μαθηματικά και τις θετικές επιστήμες ενώ βρίσκονται στις θέσεις 2 και 3 της γενικής κατάταξης).

Πέρα από τη μετάφραση των σημειώσεων στα ελληνικά έγινε και μια προσπάθεια να αναλυθούν περισσότερο πολλά σημεία αλλά και να εμπλουτισθούν με κάποιες επιπλέον εφαρμογές. Ταυτόχρονα συμπεριελήφθησαν και αρκετοί ορισμοί ώστε να γίνουν οι σημειώσεις αυτές κατά το δυνατό αυτοδύναμες στην μελέτη τους. Η πρόθεση ήταν αφ΄ ενός να προσφερθεί ένα μάθημα υψηλού προπτυχιακού επιπέδου σύμφωνα με τα διεθνή πρότυπα, αλλά ταυτόχρονα η ύλη να είναι προσιτή και σε ένα ακροατήριο με τεχνολογική κατεύθυνση.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες εκφράζονται προς τους φοιτητές για τον ενθουσιασμό τους, την διάθεση για μελέτη, την ενθάρρυνση, τις παρατηρήσεις και τα ποικίλα σχόλιά τους. Η διδασκαλία είναι αμφίδρομη διαδικασία και χωρίς τη δική τους συμβολή είναι αμφίβολο αν το μάθημα θα είχε αυτή τη μορφή. Η ελπίδα είναι να μην απογοητεύθηκαν οι φοιτητές και επίσης να μην απογοητευθούν και οι τυχόν λοιποί αναγνώστες.
Αθήνα, Μάιος 2007
Ι.Π.Ζ.

1 Εισαγωγή

Στις αρχές του 20ου αιώνα η φυσική βρέθηκε σε ένα κρίσιμο σταυροδρόμι: από την μια μεριά υπήρχε η (λεγόμενη σήμερα) *κλασική φυσική* που ήταν ένα οικονομικό σύνολο εξισώσεων που περιέγραφε με ικανοποιητική ακρίβεια όλα τα μέχρι τότε γνωστά φαινόμενα της φύσης (του *μεγάκοσμου*). Από την άλλη πλευρά, έχοντας προηγηθεί οι σημαντικές ανακαλύψεις της χημείας στα μέσα και τέλη του 19ου αιώνα που συνοψίζονταν στο *περιοδικό σύστημα των στοιχείων*, η ανθρωπότητα εισερχόταν στην λεγόμενη *ατομική περίοδο*, δηλαδή στην μελέτη των φαινομένων του *μικρόκοσμου*. Σε αυτό βοήθησε βέβαια και η τεχνολογική πρόοδος με την παράλληλη ανάπτυξη της φασματοσκοπίας, των πειραμάτων σκέδασης κλπ. Η βασική λοιπόν παραδοχή και υπόθεση ήταν πως η κλασική φυσική θα επαρκούσε και για την ερμηνεία των φαινομένων του μικρόκοσμου που μόλις τότε άρχιζε να εξερευνάται, κάτι που όμως σχετικά γρήγορα αποδείχθηκε λάθος, και η φυσική εισήλθε σε μια περίοδο γόνιμης κρίσης από την οποία εξήλθε περίπου το 1930 με την διατύπωση των βασικών αρχών μιας νέας θεωρίας, της *κβαντομηχανικής*.

Σημείωση: Η λέξη κβαντομηχανική συνίσταται από τη λέξη κβάντο (quantum στα λατινικά) που σημαίνει κομμάτι και την λέξη μηχανική. Η λέξη κβάντο πρωτοχρησιμοποιήθηκε από τον Max Planck στις αρχές του 20ου αιώνα.

Θα δούμε σύντομα από τι αποτελείται η λεγόμενη κλασική φυσική καθώς και τα βασικά πειραματικά δεδομένα που οδήγησαν στην ανατροπή της εικασίας πως η κλασική φυσική ισχύει και στον μικρόκοσμο.

Η λεγόμενη κλασική φυσική χωρίζεται σε τρεις θεμελιώδεις κλάδους:
- *Την Κλασική Μηχανική*
- *Την Κλασική Θεωρία των Πεδίων*
- *Την Κλασική Στατιστική Μηχανική*

Αυτός ο διαχωρισμός δεν γίνεται μόνο για παιδαγωγικούς λόγους αλλά αντανακλά την ίδια τη λογική του κλασικού προγράμματος για μια πλήρη περιγραφή της φυσικής πραγματικότητας. Πράγματι, σε στοιχειώδες επίπεδο, ένα οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο ανάγεται σε τελική ανάλυση, στην κίνηση ενός μικρού ή μεγάλου αριθμού σωματιδίων, άρα χρειαζόμαστε τουλάχιστον: τους νόμους των δυνάμεων που αναπτύσονται μεταξύ των σωματιδίων (που αποτελεί αντικείμενο της κλασικής θεωρίας πεδίων) και τις εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων υπό την επίδραση αυτών των δυνάμεων (που αποτελεί αντικείμενο της κλασικής μηχανικής). Όπως όμως διαπιστώθηκε πειραματικά, το πέρασμα από τον μικρόκοσμο (επίπεδο σωματιδίων) στον μεγάκοσμο δεν γίνεται με τόσο

αθώο τρόπο, αλλά απαιτείται η χρήση ενός ανεξάρτητου θεμελιακού νόμου της φυσικής, αυτού *της αύξησης της εντροπίας*, και έτσι μπαίνει στην συζήτηση και η κλασική στατιστική μηχανική που, κάπως απλουστευτικά, θα μπορούσαμε να πούμε πως αποτελεί μια πιο αυστηρή μορφή της θερμοδυναμικής. Τηλεγραφικά θα λέγαμε πως η κλασική στατιστική μηχανική συνδέει τον μικρόκοσμο με τον μεγάκοσμο.

Ας δούμε λίγο πιο αναλυτικά τους τρεις κλάδους της κλασικής φυσικής.

1.1 Κλασική Μηχανική

Το αντικείμενο της κλασικής μηχανικής είναι η μελέτη της κίνησης των υλικών σωμάτων (ή σωματιδίων) υπό την επίδραση μιας δεδομένης δύναμης. Το περιεχόμενό της συνοψίζεται στην περίφημη εξίσωση αδράνειας του Newton:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a},$$

όπου $\vec{F}$ η ασκούμενη δύναμη (αίτιο), $\vec{a}$ η επιτάχυνση που αποκτά το σώμα εξαιτίας της εφαρμογής της δύναμης (αποτέλεσμα) και m η (αδρανειακή) μάζα του σώματος. Το εύρος της ισχύος της παραπάνω εξίσωσης είναι εντυπωσιακό: από τα γήινα σώματα μέχρι τους πλανήτες!

Στο αντικείμενο μελέτης της κλασικής μηχανικής εντάσσονται και τα κάθε μορφής κύματα, δηλαδή φαινόμενα που υπακούουν στην γνωστή κυματική εξίσωση

$$\nabla^2\phi - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = 0,$$

συνεπώς περιλαμβάνεται και η μηχανική των ρευστών, η κυματική και γενικά η λεγόμενη μηχανική των συνεχών μέσων. Άλλωστε η ίδια η κυματική εξίσωση προκύπτει από τον νόμο της αδράνειας του Newton.

Αναφέρουμε δύο βασικά χαρακτηριστικά της κλασικής μηχανικής:
(α). Όπως προκύπτει από τον νόμο της αδράνειας, τα σωματίδια κινούνται σε αυστηρά καθορισμένες τροχιές, οπότε είναι προφανές πως κάθε χρονική στιγμή είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια τόσο την θέση όσο και την ταχύτητα του σωματιδίου.
(β). Τα διάφορα φυσικά μεγέθη αναπαρίστανται ως πραγματικές (βαθμωτές ή διανυσματικές) συναρτήσεις, με πεδίο ορισμού το $\mathbb{R}\times\mathbb{R}^3$, όπου ο παράγοντας $\mathbb{R}$ (ή κάποιο υποσύνολό του) αποτελεί το πεδίο ορισμού τη χρονικής μεταβλητής και ο παράγοντας $\mathbb{R}^3$ (ή κάποιο υποσύνολό του) αποτελεί το πεδίο ορισμού της

μεταβλητής που εκφράζεται με το διάνυσμα θέσης, ενώ το πεδίο τιμών είναι επίσης το $\mathbb{R}$ (αν πρόκειται για βαθμωτή συνάρτηση) ή το $\mathbb{R}^3$ (αν πρόκειται για διανυσματική συνάρτηση) ή κάποια *συνεχή* (κυρίως) υποσύνολα αυτών. Επισημαίνουμε με έμφαση όμως ότι η έννοια του *διακριτού πεδίου τιμών*, δηλαδή της *κβάντωσης* ενός μεγέθους, υπάρχει και στην κλασική μηχανική, για παράδειγμα στα *στάσιμα κύματα* μιας χορδής μήκους L: τα στάσιμα κύματα έχουν μήκος κύματος λ_n που παίρνουν τιμές σε μια διακριτή ακολουθία τιμών:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n},$$

όπου $n \in \mathbb{N}^*$.

Το χρήσιμο μάθημα που συνάγεται από την μελέτη των στάσιμων κυμάτων είναι πως *η έννοια της κβάντωσης υποδηλώνει κυματική συμπεριφορά και αντίστροφα*, κάτι ιδιαίτερα χρήσιμο για την κατανόηση αργότερα του *δυϊσμού κύματος - ακτινοβολίας*.

1.2 Κλασική Θεωρία Πεδίων

Η κλασική θεωρία πεδίων αποτελεί ουσιαστικά την κλασική θεωρία των δυνάμεων. Στην κλασική φυσική δύο είδη πεδίων δυνάμεων υπάρχουν στην φύση: το *βαρυτικό* και το *ηλεκτρομαγνητικό* πεδίο.

Το βαρυτικό πεδίο δυνάμεων περιγράφεται από τον γνωστό *νόμο της παγκόσμιας έλξης* του Newton

$$\vec{F} = G\frac{M_1 M_2}{r^2}\hat{u}_r.$$

Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο περιγράφεται από τις 4 εξισώσεις του Maxwell, οι οποίες σε διαφορική μορφή στο κενό έχουν την εξής γνωστή μορφή:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$$

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

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

και

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\vec{j}.$$

Οι παραπάνω εξισώσεις, μαζί με την εξίσωση της λεγόμενης δύναμης Lorentz, που είναι η δύναμη που ασκείται σε ένα φορτίο q που κινείται με ταχύτητα $\vec{v}$ μέσα σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο),

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

περιγράφουν πλήρως όλα τα ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα.
Η πιο σημαντική συνέπεια των εξισώσεων Maxwell είναι η ύπαρξη και η διάδοση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων στο κενό απουσία φορτίων και ρευμάτων ($\rho = \vec{j} = 0$):

$$\Box\vec{E} = (\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\vec{E} = 0$$

και

$$\Box\vec{B} = (\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\vec{B} = 0.$$

Μια απλή ποιοτική ερμηνεία της ύπαρξης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου προκύπτει από τις 2 τελευταίες εξισώσεις του Maxwell ($\rho = \vec{j} = 0$): μια απόπειρα να εξαφανισθεί για παράδειγμα το μαγνητικό πεδίο θα προκαλέσει την χρονική μεταβολή του, η οποία με την σειρά της θα προκαλέσει την δημιουργία πρόσθετου ηλεκτρικού πεδίου (3η εξίσωση), η οποία με την σειρά της θα δημιουργήσει επιπρόσθετο μαγνητικό πεδίο κοκ. Έτσι με αυτόν τον μηχανισμό αλληλοϋποστήριξης μεταξύ του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου το ηλεκτρομαγνητικό κύμα διαδίδεται στο κενό ανεξάρτητα από τον μηχανισμό που το δημιούργησε.

Μια σημαντική συνέπεια των παραπάνω (δηλαδή της κλασικής μηχανικής και της κλασικής θεωρίας πεδίων) είναι το γεγονός ότι οι φυσικές οντότητες που εμφανίζονται στην κλασική φυσική είναι τα *σωματίδια* και τα ηλεκτρομαγνητικά *κύματα* και οι δύο αυτές οντότητες είναι τελείως ξεχωριστές και αλληλοαποκλειόμενες. Το ασυμβίβαστο μεταξύ σωματιδίων και κυμάτων είναι βασικό στοιχείο της κλασικής φυσικής.

1.3 Κλασική Στατιστική Μηχανική

Κάθε φυσικό φαινόμενο οφείλεται, σε στοιχειώδες επίπεδο, στην κίνηση ενός μεγάλου αριθμού σωματιδίων. Άρα θα μπορούσε, κατ΄ αρχή να ερμηνευθεί αν γνωρίζαμε αφ΄ ενός τους νόμους των δυνάμεων που αναπτύσονται μεταξύ των σωματιδίων και αφ΄ ετέρου τις εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων υπό την επίδραση αυτών των δυνάμεων. Τα πράγματα όμως δεν είναι τόσο απλά διότι:
(α). Ο αριθμός των σωματιδίων που αποτελούν ένα μακροσκοπικό σύστημα

ή σώμα είναι ανάλογος του αριθμού Avogadro $N \sim 10^{23}$, οπότε η λύση των εξισώσεων κίνησης για το σύνολο των σωματιδίων είναι αδύνατη πρακτικά.
(β). Σε ένα αέριο για παράδειγμα, από την πλευρά των μακροσκοπικών μεγεθών όπως η πίεση P και η θερμοκρασία T, η γνώση της ταχύτητας και της θέσης του κάθε μορίου του αερίου μας είναι άχρηστη, αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η *στατιστική κατανομή* των μορίων (στον χώρο των θέσεων και των ορμών).
(γ). Για το πέρασμα από τον μικρόκοσμο στον μεγάκοσμο απαιτείται επιπρόσθετα και η χρήση του νόμου για την *αύξηση της εντροπίας*. Αν συμβολίσουμε την εντροπία με S, τότε ο νόμος αύξησης της εντροπίας σχηματικά μπορεί να γραφεί $\Delta S \geq 0$. Αυτός ο νόμος αποτελεί μια *ανεξάρτητη φυσική αρχή* που διέπει όλες τις γνωστές φυσικές μεταβολές και δεν προκύπτει από τις εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων: οι εξισώσεις κίνησης είναι αμετάβλητες στην χρονική αντιστροφή $t \mapsto -t$ ενώ ο νόμος αύξησης της εντροπίας εισάγει φορά στην χρονική μεταβλητή. Το παραπάνω είναι γνωστό ως το *παράδοξο Loschmidt* στη φυσική.

Μπορούμε να συνοψίσουμε τις βασικές αρχές της κλασικής στατιστικής μηχανικής σε δύο εξισώσεις:

$$\Delta S \geq 0,$$

που περιγράφει την αρχή αύξησης της εντροπίας, και στην εξίσωση

$$S = k_B \ln W,$$

που περιγράφει τον ορισμό της *εντροπίας* από τον Ludwig Boltzmann (1844-1906). (Η εξίσωση του ορισμού της εντροπίας είναι γραμμένη και στον τάφο του Boltzmann στη Βιέννη). Στην δεύτερη εξίσωση, με k_B συμβολίζουμε την σταθερά Boltzmann που είναι ίση με $k_B = 1.3806505(24) \times 10^{-23} JK^{-1}$. Το φυσικό νόημα της σταθεράς αυτής είναι πως συνδέει μακροσκοπικά με μικροσκοπικά μεγέθη. Με W συμβολίζουμε το πλήθος των πιθανών μικροκαταστάσεων μέσω των οποίων μπορεί να πραγματοποιηθεί μια δεδομένη μακροκατάσταση του συστήματος που υπόκειται σε κάποιους μακροσκοπικούς περιορισμούς (πχ έχει σταθερή ενέργεια E). Στην πραγματικότητα αν και ο Boltzmann ήταν αυτός που μεγαλοφυώς συσχέτισε την εντροπία με πιθανότητες το 1877, το σύμβολο k_B εισήχθηκε από τον Max Planck το 1900 για την ερμηνεία της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος. Η επιλογή μονάδων έτσι ώστε $k_B = 1$ βολεύει διότι τότε η θερμοδυναμική εντροπία του Boltzmann ταυτίζεται με την εντροπία του Gibbs.

Η έννοια της εντροπίας είναι χρήσιμη όχι μόνο στη φυσική αλλά και σε πολλές άλλες επιστήμες, όπως την πληροφορική. Είναι δε μια έννοια η οποία παρουσιάζει κάποιες ιδιαιτερότητες και συχνά κάποια πράγματα που αναφέρονται για αυτή στη βιβλιογραφία είναι λανθασμένα. Για τον λόγο αυτό θα θέλαμε να σταθούμε λίγο περισσότερο και να εξηγήσουμε ορισμένα βασικά στοιχεία.

Ιστορικά ο πρώτος επιστήμονας που ασχολήθηκε με την έννοια της εντροπίας ήταν ο γάλλος μαθηματικός Lazare Carnot και αργότερα ο γιός του Sadi Carnot στις αρχές του 19ου αιώνα (1804). Ο πρώτος πειραματικός ορισμός που δόθηκε για την εντροπία ήταν από τον γερμανό φυσικό Rudolf Clausius στα μέσα του 19ου αιώνα:

$$\delta S = \int \frac{dQ}{T},$$

όπου το δS συμβολίζει την πεπερασμένη μεταβολή της εντροπίας του συστήματος, dQ είναι το ποσό της θερμότητας που απορροφάται σε μια ισόθερμη αντιστρεπτή μεταβολή κατά την οποία το σύστημα μεταβαίνει από μια κατάσταση σε μια άλλη και T είναι η (απόλυτη) θερμοκρασία στην οποία συμβαίνει αυτή η μεταβολή. Σε διαφορική μορφή η παραπάνω εξίσωση γράφεται

$$dS = \frac{dQ}{T}.$$

Ο παραπάνω είναι ο θερμοδυναμικός (μακροσκοπικός) ορισμός της εντροπίας και έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά η ισχύς της παραπάνω εξίσωσης.

Ο πρώτος που επιχείρησε να κάνει μια σύνδεση της εντροπίας με την θεωρία πιθανοτήτων και την στατιστική ήταν ο Ludwig Boltzmann ο οποίος λίγο αργότερα από τον Rudolf Clausius, το 1872, όρισε την εντροπία ως

$$S = k_B \ln W.$$

Για την καταννόηση του ορισμού αυτού θα πρέπει να καταλάβουμε την έννοια της *μακροκατάστασης* και της *μικροκατάστασης*. Έστω για απλότητα (και χωρίς να επειρεάζεται η ουσία των όσων θα αναφέρουμε), θεωρούμε ότι έχουμε ένα σύστημα που αποτελείται από ένα mole (γραμμομόριο) κάποιου ιδανικού αερίου μέσα σε ένα δοχείο, απομονωμένο από το περιβάλλον. Μια *μακροκατάσταση* του συστήματος σε κάποια δεδομένη χρονική στιγμή περιγράφεται από τις τιμές κάποιων μακροσκοπικών μεταβλητών του συστήματος όπως η πίεση, η θερμοκρασία κλπ κατά την δεδομένη χρονική στιγμή. Μια *μικροκατάσταση* του συστήματος σε κάποια δεδομένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την γνώση της θέσης και της ταχύτητας του κάθε μορίου που αποτελεί το αέριο

κατά την δεδομένη χρονική στιγμή. Είναι σαφές πως *πολλές μικροκαταστάσεις είναι συμβατές με μια δεδομένη μακροκατάσταση*. Για τον προσδιορισμό μιας μακροκατάστασης απαιτούνται δύο μόλις πραγματικοί αριθμοί, πχ οι τιμές των συναρτήσεων της πίεσης και της θερμοκρασίας του συστήματος σε κάποια δεδομένη χρονική στιγμή. Για τον προσδιορισμό μιας μικροκατάστασης απαιτούνται $6N$ πραγματικοί αριθμοί, όπου $N = 6,023 \times 10^{23}$ ο αριθμός Avogadro. Ο παράγοντας 6 μπαίνει διότι χρειαζόμαστε 3 αριθμούς για τις συντεταγμένες της θέσης του κάθε σωματιδίου στο χώρο και 3 αριθμούς για τις 3 συνιστώσες της ταχύτητας του κάθε σωματιδίου κατά την δεδομένη χρονική στιγμή. Ο χώρος αυτός (των θέσεων και των ορμών των σωματιδίων που αποτελούν ένα μακροσκοπικό σύστημα στη φυσική) λέγεται *χώρος των φάσεων*. Τοπικά μπορεί να θεωρηθεί ως ένας πραγματικός διανυσματικός χώρος διάστασης $6N$.

Για να αποκτήσουμε μια καλύτερη αίσθηση του παραπάνω ορισμού ας σκεφτούμε το εξής, απλουστεύοντας ακόμη περισσότερο τα πράγματα: παρότι οι ταχύτητες και οι θέσεις των σωματιδίων είναι συνεχείς μεταβλητές (δηλαδή παίρνουν πραγματικές τιμές, είναι πραγματικοί αριθμοί), ας τις φανταστούμε ως διακριτές μεταβλητές, δηλαδή να παίρνουν ακέραιες μη αρνητικές τιμές. Στη συνέχεια ας ξεχάσουμε για λίγο το αέριο και ας μεταφερθούμε σε ένα καζίνο: έστω ότι έχουμε μια ρουλέτα με n θέσεις στις οποίες είναι ισοπίθανο να καταλήξει η μπίλια. Οι n αυτές θέσεις απαριθμώνται από τον δείκτη i, προφανώς $i = 1, 2, ..., n$. Ρίχνουμε την μπίλια P φορές. Ζητάμε την πιθανότητα $p(A_1, A_2, ..., A_n)$ να εμφανισθεί μια συγκεκριμένη κατανομή $(A_1, A_2, ..., A_n)$, όπου το A_i υποδηλώνει πόσες φορές η μπίλια έπεσε στην θέση i και προφανώς ισχύει

$$P = \sum_{i=1}^{n} A_i.$$

Η ζητούμενη πιθανότητα δίδεται από την πλειονυμική κατανομή

$$p(A_1, A_2, ..., A_n) = \frac{W}{R} = \frac{P!}{A_1!A_2!...A_n!}(\frac{1}{n})^P,$$

όπου το

$$W = \frac{P!}{A_1!A_2!...A_n!}$$

συμβολίζει το πλήθος των πιθανών συνδυασμών των αποτελεσμάτων που είναι συμβατά με την δεδομένη κατανομή και το

$$R = n^P$$

συμβολίζει το σύνολο όλων των πιθανών συνδυασμών των αποτελεσμάτων για το σύνολο των P δοκιμών.

Η σχέση του συστήματος του αερίου με το παραπάνω πείραμα τύχης είναι προφανής: αφού θεωρήσαμε την θέση και την ταχύτητα των σωματιδίων διακριτές μεταβλητές, είναι σαν να χωρίσαμε τον χώρο των φάσεων σε κυψελίδες (ή κουτάκια) που αντιστοιχούν με τις θέσεις n της ρουλέτας. Κάθε σωμάτιο θα μπει μέσα σε κάποιο κουτάκι, κάποια κουτάκια μπορεί να είναι άδεια και κάποια μπορεί να έχουν παραπάνω από ένα σωμάτια, δηλαδή το P αντιστοιχεί στο συνολικό αριθμό των σωματιδίων του αερίου και η συγκεκριμένη κατανομή $(A_1, A_2, ..., A_n)$ αποτελεί ακριβώς μια επιτρεπτή μικροκατάσταση του συστήματος. Ο ορισμός του Boltzmann για την εντροπία ακριβώς μας λέει πως η εντροπία είναι ανάλογη με το λογάριθμο του W παραπάνω (επί τη σταθερά Boltzmann):

$$S \sim \ln W = \ln \frac{P!}{A_1! A_2! ... A_n!} = \ln P! - \ln A_1! - \ln A_2! - ... - \ln A_n! =$$

$$= \sum_{i=1}^{P} \ln i - \sum_{i=1}^{A_1} \ln i - \sum_{i=1}^{A_2} \ln i - ... - \sum_{i=1}^{A_n} \ln i.$$

Τα αθροίσματα μπορούν να αντικατασταθούν με ολοκληρώματα οπότε

$$S \sim \int_1^P \ln x dx - \int_1^{A_1} \ln x dx - \int_i^{A_2} \ln x dx - ... - \int_1^{A_n} \ln x dx.$$

Το ολοκλήρωμα του λογαρίθμου είναι

$$\int \ln x dx = x \ln x - x$$

οπότε αν αντικαταστήσουμε την παραπάνω έκφραση θα πάρουμε

$$S \sim (P \ln P - P + 1) - (A_1 \ln A_1 - A_1 + 1) - (A_2 \ln A_2 - A_2 + 1) - ... - (A_n \ln A_n - A_n + 1) =$$

$$= P \ln P - \sum_{i=1}^{n} A_i \ln A_i + (1 - n).$$

Θέτοντας

$$p_i := \frac{A_i}{P}$$

παίρνουμε

$$S \sim (1 - n) - \sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i.$$

Η ποσότητα $(1-n)$ μπορεί να αγνοηθεί διότι είναι μια σταθερά, οπότε καταλήξαμε στην σχέση

$$S \sim -\sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i.$$

Η εξίσωση αυτή είναι σημαντική διότι μοιάζει με τον ορισμό του Gibbs

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i,$$

όπου ο δείκτης i μετρά όλες τις πιθανές μικροκαταστάσεις του συστήματος των P σωματιδίων, για την φυσική εντροπία ενός συστήματος, σχέση την οπία μιμήθηκε αργότερα ο Shannon για τον ορισμό της εντροπίας στην πληροφορική.

Ενώ ο ορισμός του Clausius για την εντροπία είναι πειραματικός, οι ορισμοί τόσο του Boltzmann όσο και του Gibbs είναι θεωρητικοί. Η σύγκριση των ορισμών του Boltzmann και του Gibbs είναι ένα ενδιαφέρον θέμα, βλέπε [1] και [17]: Η βασική διαφορά είναι πως ο Boltzmann δέχθηκε πως αντί να θεωρήσουμε ένα σύστημα αποτελούμενο από έστω P σωμάτια, μπορούμε ισοδύναμα να θεωρήσουμε μια συλλογή αποτελούμενη από P μονοσωματιδιακά συστήματα, (κάτι που σιωπηρά παραδεχθήκαμε όταν αναφέραμε τις αναλογίες μεταξύ της ρουλέτας και του αερίου!) Αυτή η προσέγγιση δεν θεωρείται σήμερα απόλυτα σωστή, ή θεωρείται σωστή μόνο για ιδανικά αέρια, όπου αγνοούνται οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μορίων του αερίου. Η εντροπία του Boltzmann ταυτίζεται με την εντροπία του Clausius μόνο για ιδανικά αέρια. Από την άλλη μεριά, ο ορισμός του Gibbs θεωρείται σωστός και ταυτίζεται αριθμητικά με τον πειραματικά επιβεβαιωμένο ορισμό του Clausius αν εφαρμόσουμε την αρχή *μεγιστοποίησης της εντροπίας*. Τέλος η εντροπία του Gibbs αποτελεί σταθερή ποσότητα του συστήματος, κάτι που χρειάζεται όμως για την απόδειξη του νόμου της αύξησης της εντροπίας (το περίφημο Η-Θεώρημα του Boltzmann).

Στηριζόμενοι στον ορισμό της εντροπίας του Boltzmann

$$S = k_B \ln W$$

μπορούμε να υπολογίσουμε την κατανομή των σωματιδίων ενός ιδανικού αερίου με βάση την ενέργειά τους σχετικά εύκολα, θεωρώντας ένα σύστημα ιδανικού αερίου με σταθερό πλήθος σωματιδίων N τα οποία είναι διακριτά μεταξύ τους. Τα σωματίδια αυτά βρίσκονται σε διάφορες ενεργειακές στάθμες ϵ_i, όπου ο δείκτης $i = 1, 2, ..., k$ μετρά τις διαφορετικές ενεργειακές στάθμες. Συμβολίζουμε με N_i το πλήθος των σωματιδίων που βρίσκονται στην στάθμη i με ενέργεια

ϵ_i. Προφανώς η συνολική ενέργεια του αερίου θα είναι

$$E = \sum_{i=1}^{k} N_i \epsilon_i$$

και

$$N = \sum_{i=1}^{k} N_i.$$

Για απλότητα θεωρούμε πως οι ενεργειακές στάθμες δεν είναι εκφυλισμένες, δηλαδή πως υπάρχει μοναδικός τρόπος να κατανεμηθούν N_i σωμάτια στην στάθμη i, συνεπως δεν μας ενδιαφέρει η διάταξη.

Γνωρίζουμε ότι για να επιλέξουμε n αντικείμενα από N χωρίς να μας ενδιαφέρει η διάταξη (προφανώς $n \leq N$), υπάρχουν

$$\frac{N!}{n!(N-n)!}$$

τρόποι. Αν έχουμε k κουτάκια (ενεργειακές στάθμες), $i = 1, 2, ..., k$ και N συνολικά αντικείμενα, οι πιθανοί τρόποι με τους οποίους μπορούμε να διαλέξουμε N_1 αντικείμενα από τα N και να τα βάλουμε στο κουτί 1, N_2 αντικείμενα από τα εναπομείναντα $N - N_1$ και να τα βάλουμε στο κουτί 2, κοκ, N_k αντικείμενα από τα εναπομείναντα $N - N_1 - ... - N_{k-1}$ και να τα βάλουμε στο κουτί k, είναι

$$W = [\frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}] \cdot [\frac{(N-N_1)!}{N_2!(N-N_1-N_2)!}] \cdot ... \cdot [\frac{N_k!}{N_k!0!}] =$$

$$= \frac{N!}{\prod_{i=1}^{k} N_i!}.$$

Θέλουμε να βρούμε το σύνολο των N_i για το οποίο *μεγιστοποιείται* το W (η εντροπία), με τον περιορισμό ότι η ενέργεια E πρέπει να παραμένει σταθερή. Τα μέγιστα των W και $\ln W$ επισυμβαίνουν στις ίδιες τιμές των N_i και θα μεγιστοποιήσουμε την δεύτερη συνάρτηση διότι είναι πιο βολικό. Ακολουθούμε την κλασική μέθοδο των *πολλαπλασιαστών Lagrange*:

$$f(N_i) := \ln W + \beta(E - \sum_{i=1}^{k} N_i \epsilon_i).$$

Επειδή

$$W = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{k} N_i!} \Rightarrow \ln W = \ln N! - \sum_{i=1}^{k} \ln N_i!,$$

έχουμε ότι

$$f(N_i) = \ln N! - \sum_{i=1}^{k} \ln N_i! + \beta(E - \sum_{i=1}^{k} N_i \epsilon_i).$$

Στη συνέχεια επιλύουμε την διαφορική εξίσωση

$$\frac{\partial f}{\partial N_i} = 0 \Leftrightarrow 0 - \frac{\partial \ln N_i!}{\partial N_i} + \beta(0 - \epsilon_i) = 0.$$

Χρησιμοποιούμε την προσέγγιση του Stirling για τα παραγοντικά

$$n! \simeq \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} \simeq n^n e^{-n} \Rightarrow \ln n! \simeq n \ln n - n$$

και την εφαρμόζουμε στο $\ln N_i!$. Θα πάρουμε

$$\frac{\partial f}{\partial N_i} = 0 \Leftrightarrow -\frac{\partial}{\partial N_i}(N_i \ln N_i - N_i) - \beta\epsilon_i = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow -\ln N_i - N_i \frac{1}{N_i} + 1 - \beta\epsilon_i = 0 \Leftrightarrow \ln N_i = -\beta\epsilon_i \Leftrightarrow N_i = e^{-\beta\epsilon_i}.$$

Στη φυσική ο πολλαπλασιαστής Lagrange $\beta = 1/KT$, οπότε η κατανομή Maxwell-Boltzmann δίδεται από την σχέση

$$p(\epsilon_i) := \frac{N_i}{N} = Ae^{-\epsilon_i/KT}.$$

Η παραπάνω σχέση δίδει το ποσοστό των σωματιδίων που έχουν ενέργεια ϵ_i, ή ισοδύναμα εκφράζει την πιθανότητα ένα σωμάτιο να έχει ενέργεια ϵ_i. Η σταθερά A υπολογίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης, δηλαδή

$$\int p(\epsilon_i) d\tau = 1$$

και η ποσότητα

$$Z = \int e^{-\epsilon_i/KT} d\tau = \frac{1}{A}$$

λέγεται *συνάρτηση επιμερισμού*. (Με $d\tau$ συμβολίζουμε τον στοιχειώδη όγκο στον χώρο των φάσεων). Ο τύπος της παραπάνω κατανομής Maxwell-Boltzmann (που προκύπτει από τον ορισμό της εντροπίας του Boltzmann εφαρμόζοντας την αρχή μεγιστοποίησης της εντροπίας), αποτελεί την βασική εξίσωση της στατιστικής φυσικής μέσω της οποίας γίνονται οι διάφοροι υπολογισμοί.

Θα θέλαμε να κλείσουμε αυτή την παράγραφο με κάποιες σημειώσεις:
Σημείωση 1: Σύμφωνα με τις σύγχρονες επιστημονικές απόψεις, η εντροπία

θεωρείται μια *ανθρωποκεντρική έννοια*, δηλαδή *δεν* αποτελεί μια αντικειμενική ιδιότητα των φυσικών συστημάτων αλλά αποτελεί ιδιότητα των φυσικών συστημάτων και των εξειδικευμένων πειραμάτων που επιθυμούμε να εκτελέσουμε σε/με κάποιο φυσικό σύστημα. Για να υπολογισθεί συνεπως η εντροπία ενός συστήματος θα πρέπει να ορισθούν κάποιες συγκεκριμένες φυσικές παράμετροι. Το ίδιο φυσικό σύστημα, σε κάποιο διαφορετικό πείραμα με χρήση διαφορετικών παραμέτρων ή μεταβλητών μπορεί να έχει διαφορετική εντροπία.
Σημείωση 2: Θέτουμε το εξής ερώτημα: ένα βιολογικό σύστημα, πχ μια γάτα, η οποία μετατρέπει νεκρή τροφή σε δομή και συμπεριφορά υψηλής οργάνωσης, δεν παραβαίνει το νόμο για την αύξηση της εντροπίας; Χωρίς να καθορίσουμε ποιές είναι οι θερμοδυναμικές παράμετροι που ορίζουν την μακροκατάσταση της γάτας, η παραπάνω ερώτηση είναι ασαφής.
Σημείωση 3: Η γνωστή φράση πως η εντροπία αποτελεί μέτρο της αταξίας ή της τυχαιότητας των φυσικών συστημάτων στην πραγματικότητα δεν έχει και πολύ νόημα. Το κύριο ερώτημα είναι τι είναι η τυχαιότητα.

1.4 Θεωρία/Αρχή Σχετικότητας

Δεν θα μπορούσαμε να κάνουμε ανασκόπιση της φυσικής (τουλάχιστον όπως αυτή διατυπωνόταν στις αρχές του 20ου αιώνα), χωρίς να αναφερθούμε στην Θεωρία της Σχετικότητας. Η φυσική είναι πειραματική επιστήμη, άρα βασίζεται στα πειράματα και στις μετρήσεις. Είναι σαφές πως τα πειραματικά δεδομένα και οι μετρήσεις εξαρτώνται από τον παρατηρητή που τις πραγματοποιεί, για παράδειγμα αν θεωρήσουμε έναν παρατηρητή που βρίσκεται στο ήλιο αυτός διαπιστώνει πως η γη κινείται γύρω από τον ήλιο και περιστρέφεται και γύρω από τον εαυτό της, ενώ ένας αλλος παρατηρητής πάνω στη γη δεν παρατηρεί αυτές τις κινήσεις και θεωρεί τη γη ακίνητη. Τα διάφορα φαινόμενα υπάρχουν αντικειμενικά, συνεπώς θα πρέπει να υπάρχει ένας τρόπος να συνδιαλέγονται μεταξύ τους οι διάφοροι παρατηρητές και να συσχετίζουν τις μετρήσεις τους οι οποίες μπορεί να είναι διαφορετικές για το ίδιο φαινόμενο. *Αυτό επιτυγχάνεται μέσω των αρχών σχετικότητας.* Όλες οι φυσικές θεωρίες συνεπώς είναι υποχρεωμένες να υπακούουν στην (ή τουλαχιστόν σε κάποια) αρχή σχετικότητας. Μια διατύπωση της αρχής σχετικότητας περιλαμβάνεται στην φράση:

'Όλα τα αδρανειακά συστήματα συντεταγμένων είναι ισοδύναμα',

όπου αδρανειακό σύστημα συντεταγμένων είναι κάθε σύστημα συντεταγμένων στο οποίο ισχύουν οι τρεις νόμοι της μηχανικής του Νεύτωνα.

Από μαθηματικής πλευράς οι αρχές σχετικότητας περιγράφονται μέσω ομάδων μετασχηματισμών που διατηρούν αναλλοίωτο κάποιο εσωτερικό γινόμενο (και άρα τα μήκη που ορίζονται μέσω αυτού). Η πρώτη αρχή σχετικότητας της φυσικής που έγινε γνωστή ιστορικά είναι η λεγόμενη *αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου*. Μαθηματικά αυτή εκφράζεται μέσω της ομάδας μετασχηματισμών που διατηρούν αναλλοίωτο το Ευκλείδειο εσωτερικό γινόμενο στις 3 διαστάσεις (για να είμαστε απόλυτα σωστοί θα πρέπει να προσθέσουμε και τις μετατωπίσεις στον Ευκλείδειο χώρο τριών διαστάσεων). Τόσο η κλασική μηχανική και ο νόμος της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα όσο και η στατιστική φυσική υπακούουν στην αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου.

Όταν διατυπώθηκε η ηλεκτρομαγνητική θεωρία περίπου στα μέσα - τέλη του 19ου αιώνα, κατέστη σχεδόν άμεσα σαφές πως οι εξισώσεις του Maxwell δεν ικανοποιούν την αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου. Μετά κάποια χρόνια, με τη συμβολή κυρίως του A. Einstein, (1905), αλλά και άλλων μαθηματικών και φυσικών, διαπιστώθηκε πως η κατάλληλη αρχή σχετικότητας για τις εξισώσεις του Maxwell είναι αυτή που σήμερα αναφέρεται ως *αρχή σχετικότητας του Einstein*, η οποία από μαθηματικής πλευράς στηρίζεται στην ομάδα μετασχηματισμών του Lorentz που διατηρεί αναλλοίωτο το εσωτερικό γινόμενο Minkowski σε έναν χώρο 4 διαστάσεων. Δηλαδή από μαθηματικής πλευράς έχουμε τις εξής 3 διαφορές μεταξύ των αρχών σχετικότητας Γαλιλαίου και Einstein: από διάσταση 3 πάμε σε 4 (ο χώρος παραμένει επίπεδος), από μετρική Ευκλείδη πάμε σε μετρική Minkowski με υπογραφή $(+,-,-,-)$ και συνεπακόλουθο αυτών είναι πως από την ομάδα ορθογώνιων μετασχηματισμών του χώρου 3 διαστάσεων πάμε στην ομάδα μετασχηματιμών του Lorentz.

Από φυσικής πλευράς, η θεωρία (ή αρχή) σχετικότητας του Einstein επέφερε δραστικές μεταβολές στον τρόπο που αντιλαμβανόμαστε την φυσική πραγματικότητα: η πρώτη σπουδαία μεταβολή έρχεται από το μέγιστο και το αναλλοίωτο της ταχύτητας του φωτός (κάτι που προέκυψε ως πειραματικό δεδομένο από το περίφημο πείραμα Michelson-Morley στα τέλη του 19ου αιώνα) και η δεύτερη από την εννοποίηση του χώρου και του χρόνου σε μια εννιαία οντότητα που λέγεται *χωρόχρονος* με διάσταση 4. Η αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου δεχόμαστε ότι ισχύει ικανοποιητικά σε μικρές ταχύτητες (ταχύτητες πολύ μικρότερες από την ταχύτητα του φωτός), οπότε για παράδειγμα η στατιστική φυσική δεν παρουσιάζει κανένα πρόβλημα να παραμείνει ως έχει διότι οι ταχύτητες των μορίων σε ένα αέριο είναι πολύ μικρές σε σχέση με την ταχύτητα του φωτός.

Συνοψίζοντας μπορούμε να πούμε τα εξής για την ειδική θεωρία σχετικότητας (ΕΘΣ): Το κίνητρο για την εμφάνιση της ΕΘΣ ήταν η ασυμβατότητα

μεταξύ της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας του Maxwell και της αρχής σχετικότητας του Γαλιλαίου, δηλαδή οι εξισώσεις του Maxwell δεν είναι αναλλοίωτες κάτω από τους μετασχηματισμούς Γαλιλαίου (στροφές και μετατωπίσεις του $\mathbb{R}^3$). Επιπρόσθετα το πείραμα Michelson - Morley έδειξε ότι η ταχύτητα του φωτός δεν ακολουθεί τον μετασχηματισμό ταχυτήτων του Γαλιλαίου αλλά είναι ίδια για κάθε αδρανειακό σύστημα συντεταγμένων.

Οι αρχές τις ΕΘΣ είναι οι εξής:

• Υποθέτουμε γραμμικούς μετασχηματισμούς των χωροχρονικών συντεταγμένων (όπως και στην αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου).

• Υποθέτουμε ομογένεια και ισοτροπία του χώρου (δηλαδή οι εξισώσεις μας είναι αναλλοίωτες σε μετατωπίσεις και στροφές), υιοθετούμε τον ορισμό των αδρανειακών συστημάτων αναφοράς καθώς και την ισοδυναμία μεταξύ τους (όλα αυτά ισχύουν και στην αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου).

• *Ανταλλάσσουμε το αναλοίωτο της ταυτοχρονίας της αρχής του Γαλιλαίου με το αναλλοίωτο της ταχύτητας του φωτός* που προέκυψε από το πείραμα Michelson - Morley. Αυτό έχει σημαντικές συνέπειες διότι στην ΕΘΣ η έννοια των ταυτόχρονων γεγονότων είναι σχετική, δηλαδή εξαρτάται από το σύστημα συντεταγμένων και όχι απόλυτη.

• Για λόγους αυτοσυνέπειας της θεωρίας (για να ισχύει η αιτιοκρατία, δηλαδή για να μην έπεται το αίτιο του αποτελέσματος) δεχόμαστε πως η ταχύτητα του φωτός είναι η μέγιστη δυνατή ταχύτητα στην φύση.

Στην συνέχεια ορίζουμε τον λεγόμενο παράγοντα k του Bondi ο οποίος ουσιαστικά εμπεριέχει την σχετική φύση της ταυτοχρονίας και υιοθετούμε νέους επιχειρησιακούς ορισμούς της ταυτοχρονίας και της χωρικής απόστασης μεταξύ διαφορετικών γεγονότων (ορισμοί Milne). Οι επιπτώσεις που προκύπτουν (και που αντιβαίνουν την καθημερινή μας διαίσθηση) είναι η διαστολή του χρόνου, η συστολή του μήκους και η χρήση των λεγόμενων μετασχηματισμών Lorentz.

Προσεκτική μελέτη των νέων μετασχηματισμών αυτών δίδει τον χωρόχρονο των 4 διαστάσεων, την (ψευδο)-μετρική Minkowski και τους νόμους μετασχηματισμών ταχυτήτων του Lorentz που είναι σύμφωνοι με το πείραμα Michelson - Morley. Με την χρήση των νέων αυτών μαθηματικών εργαλείων ουσιαστικά ξαναγράφουμε τις εξισώσεις της μηχανικής και από τον νόμο διατήρησης της (τετρα)-ορμής προκύπτει (από την χρονική συνιστώσα) η περίφημη σχέση

ισοδυναμίας μάζας και ενέργειας

$$E = mc^2.$$

Να δούμε όμως τι συμβαίνει με την βαρύτητα, το δεύτερο πεδίο (αλληλεπίδραση) της κλασικής φυσικής. Η αρχή σχετικότητας στάθηκε μοιραία για τον νόμο της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα: από την στιγμή που δεν υπάρχει ταχύτητα μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός δεν μπορεί να υπάρχει δράση από απόσταση, συνεπώς ο νόμος της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα τίθεται υπό αμφισβήτηση: για παράδειγμα έστω ότι ο νόμος της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα περιγράφει την έλξη μεταξύ δύο σωμάτων. Αν μετακινηθεί το ένα εξ αυτών, ο νόμος του Νεύτωνα λέει πως *ακαριαία* θα καταλάβει την μετακίνηση αυτή το δεύτερο σώμα οπότε η δύναμη θα μεταβληθεί. Όμως από την θεωρία σχετικότητας του Einstein δεν μπορεί να υπάρξει ταχύτητα μεγαλύτερη από αυτή του φωτός, συνεπώς θα πρέπει να περάσει κάποιος χρόνος μέχρι το δεύτερο σώμα να πληροφορηθεί την αλλαγή της θέσης του πρώτου. Αυτός ο χρόνος δεν είναι μικρός διότι στο νόμο της παγκόσμιας έλξης μιλάμε για γαλαξιακές αποστάσεις που είναι τεράστιες (πχ το φως κάνει 8 λεπτά για να έρθει από τον ήλιο στη γη). Ο ίδιος ο Einstein γρήγορα συνειδητοποίησε το πρόβλημα αυτό και μετά από 10 χρόνια, το 1915, παρουσίασε την λεγόμενη *Γενική Θεωρία Σχετικότητας*. Ο τίτλος είναι λίγο παραπλανητικός διότι μια αρχή σχετικότητας του Einstein υπάρχει, αυτό που αναφέρεται ως γενική θεωρία σχετικότητας είναι η τροποποίηση της θεωρίας του Νεύτωνα για την βαρύτητα ώστε να είναι συμβατή με την αρχή σχετικότητας του Einstein. Δεν θα μπούμε σε λεπτομέρειες.

[*Σημείωση:* Επειδή ο νόμος της παγκόσμιας έλξης μοιάζει με το νόμο του Coulomb της ηλεκτροστατικής, ίσως σκεφτεί κάποιος πως υπάρχει πρόβλημα συμβατότητας του νόμου του Coulomb με την αρχή σχετικότητας (μέγιστο της ταχύτητας του φωτός). Η απάντηση είναι πως δεν υπάρχει πρόβλημα διότι ο νόμος του Coulomb ισχύει για ακίνητα φορτία, αν κινούνται, τότε επεισέρχονται και μαγνητικά φαινόμενα και καταλήγουμε στις εξισώσεις Maxwell που είναι Lorentz αναλλοίωτες].

Θα θέλαμε να κλείσουμε με τρεις παρατηρήσεις:
1. Είναι αξιοπαρατήρητος ο καθοριστικός ρόλος της μελέτης και κατανόησης του φωτός (ηλεκτρομαγνητικά κύματα και φωτόνια) στην ανακάλυψη τόσο της αρχής σχετικότητας του Einstein όσο και στην εδραίωση της κβαντομηχανικής.
2. Η βασική διαφορά μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής, από μαθηματικής πλευράς είναι η εξής: στην κλασική φυσική τα φυσικά μεγέθη αναπαρίστανται μέσω πραγματικών συναρτήσεων (βαθμωτών ή διανυσματικών) και

αφού το $\mathbb{R}$ αποτελεί σώμα, ο πολλαπλασιασμός μεταξύ των συναρτήσεων είναι μεταθετικός, δηλαδή ισχύει πάντα η μεταθετική ιδιότητα $f \cdot g = g \cdot f$, για δύο τυχαίες συναρτήσεις f και g που αναπαριστούν κάποια φυσικά μεγέθη. (Σημειώνουμε πως και το εσωτερικό γινόμενο είναι μεταθετικό ενώ στο εξωτερικό υπάρχει μια αλλαγή προσήμου). Στην κβαντική φυσική τα φυσικά μεγέθη όπως θα δούμε αναπαρίστανται μέσω γραμμικών τελεστών, δηλαδή (περίπου) πινάκων, και όπως γνωρίζουμε ο πολλαπλασιασμός πινάκων *δεν* είναι μεταθετικός. Από φυσικής πλευράς στην κλασική φυσική υπάρχει σαφής διαχωρισμός μεταξύ υλικών σωματιδίων και κυμάτων. Στην κβαντομηχανική υπάρχει ο δυϊσμός κύματος σωματιδίου.

3. Την αρχή (θεωρία) σχετικότητας πρέπει να την βλέπουμε και κάπως ανεξάρτητα: όλες οι φυσικές θεωρίες θα πρέπει να ικανοποιούν την αρχή σχετικότητας, είτε είναι κλασικές (όπως η ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Maxwell ή η θεωρία για το βαρυτικό πεδίο), είτε είναι κβαντικές. Αυτό είναι απολύτως απαραίτητο για να μπορούν οι διάφοροι παρατηρητές να συνδέουν μεταξύ τους τα μετρούμενα μεγέθη στα πειράματα. Σημειώνουμε με έμφαση πως *η κβαντική θεωρία των Schrödinger, Heisenberg, Bohr, Plank κλπ που θα εξετάσουμε στο παρόν μάθημα δεν είναι συμβατή με την αρχή σχετικότητας του Einstein*, κάτι που ισχύει για την λεγόμενη *σχετικιστική κβαντομηχανική* του μεγάλου P.A.M. Dirac που εμφανίστηκε λίγο αργότερα, κάτι που όμως δεν θα μας απασχολήσει στο παρόν μάθημα.

2 Η Ανάγκη μιας νέας Θεωρίας για τον Μικρόκοσμο

Η Κβαντική Μηχανική περιγράφει τον μικρόκοσμο, δηλαδή φαινόμενα που συμβαίνουν σε κλίμακες μικρότερες από $10^{-10}m$ (που είναι περίπου η διάσταση των ατόμων). Η κβαντομηχανική ερμηνεύει την σταθερότητα των ατόμων, και άρα του υλικού κόσμου που παρατηρούμε γύρω μας, και βρίσκει πολλές πρακτικές εφαρμογές στην καθημερινή μας ζωή που κυμαίνονται από τους πυρηνικούς αντιδραστήρες και την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας μέχρι την λειτουργία των τρανσίστορ και την επανάσταση της μικροηλεκτρονικής. Επίσης ερμηνεύει τα χημικά φαινόμενα και τον μαγνητισμό.

Θα μπορούσε να ισχυριστεί κάποιος πως η ανθρωπότητα εισήλθε στην ατομική εποχή το 1896 που ο Bequerel ανακάλυψε την φυσική ραδιενέργεια. (Η ερμηνεία της ραδιενέργειας μέσω του φαινομένου σύραγγος της κβαντομηχανικής έγινε αργότερα, γύρω στο 1930, από τους Gamow, Condon, Gurney). Κυρίαρχο ρόλο στην ανάπτυξη της κβαντομηχανικής έπαιξε ο δυϊσμός κύματος - σωματιδίου που παρατηρήθηκε αρχικά στο φως.

Η κυματική φύση του φωτός ήταν γνωστή από πολύ παλιά εξ αιτίας ενός πλήθους φαινομένων και πειραμάτων (ανάκλαση, διάθλαση, περίθλαση κλπ). Επίσης το γεγονός ότι τόσο το ηλεκτρικό όσο και το μαγνητικό πεδίο μέσω των εξισώσεων του Maxwell ικανοποιούν την εξίσωση κύματος δεν αφήνουν καθόλου χώρο για αμφιβολία σχετικά με την κυματική συμπεριφορά του φωτός.

Τα νέα πειραματικά δεδομένα των αρχών του 20ου αιώνα που έρχονταν σε αντίθεση με την κυματική φύση του φωτός και τα οποία τελικά ερμηνεύθηκαν μέσω της επιπρόσθετης σωματιδιακής φύσης του φωτός ήταν η ακτινοβολία μέλανος σώματος, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και το φαινόμενο Compton.

Μεγέθη που αφορούν την κυματική φύση των φαινομένων είναι η συχνότητα (βαθμωτό μέγεθος) ν και το κυματάνυσμα (διανυσματικό μέγεθος) $\vec{k}$ ενώ μεγέθη που αφορούν την σωματιδιακή φύση είναι η ενέργεια (βαθμωτό μέγεθος) E και η ορμή (διανυσματικό μέγεθος) $\vec{P}$. Μαθηματικά, η διπλή φύση του φωτός εκφράζεται μέσω των γνωστών εξισώσεων

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

και

$$\vec{P} = \hbar\vec{k},$$

όπου $h = 6,6260755 \times 10^{-34} J \cdot s$ η σταθερά του Planck και $\hbar = h/2\pi$. Παρακάτω θα περιγράψουμε εν συντομία την ακτινοβολία μέλανος σώματος, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και την σκέδαση Compton.

2.1 Ακτινοβολία Μέλανος Σώματος

Με τον όρο μέλαν σώμα εννοούμε ένα σώμα που απορροφά την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία οποιασδήποτε συχνότητας που πέφτει επάνω του, συνεπώς θα είναι μαύρο (μέλαν). Αφού απορροφά ακτινοβολία θα πρέπει και να εκπέμπει, συνεπώς το φάσμα εκπομπής θα είναι συνεχές. Τα δύο μεγάλα επιτεύγματα της φυσικής του 19ου αιώνα, η θερμοδυναμική και η ηλεκτρομαγνητική θεωρία, φαίνονταν να είναι ασύμβατα στην περίπτωση της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος. Ποιο συγκεκριμένα, δοθείσης μιας κοιλότητας που περιέχει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία σε θερμοδυναμική ισορροπία, η θερμοδυναμική μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της κατανομής της πυκνότητας της ενέργειας $\epsilon(\nu)$ στις διάφορες συχνότητες. Εξ ορισμού η ποσότητα αυτή είναι ίση με (αγνοώντας σταθερές όπως ο όγκος της κοιλότητας και η θερμοκρασία, αφού το σύστημα υποθέτουμε πως βρίσκεται σε θερμική ισορροπία)

$$\epsilon(\nu) = \frac{dE}{d\nu}.$$

Οι πειραματικές μετρήσεις έδειχναν πως η κατανομή είναι της μορφής (νόμος του Wien)

$$\epsilon(\nu) \sim \nu^3 e^{-\nu}.$$

Εφαρμογή της θερμοδυναμικής, δηλαδή των αρχών της κλασικής φυσικής, δίδει τον θεωρητικό νόμο των Rayleigh-Jeans (βλέπε [34] και [36])

$$\epsilon(\nu) \sim \nu^2.$$

Για χαμηλές συχνότητες υπήρχε μια ικανοποιητική συμφωνία μεταξύ πειράματος και θεωρητικού (κλασικού) μοντέλου. Στο όριο όμως που η συχνότητα τείνει στο άπειρο, το πειραματικό και το θεωρητικό μοντέλο διαφέρουν ριζικά, η πειραματική μορφή δίδει όριο μηδέν ενώ ο νόμος Rayleigh-Jeans δίδει άπειρο. Αυτό έγινε γνωστό ως *υπεριώδης καταστροφή*. (Το ότι ο νόμος Wien δίδει όριο μηδέν για $\nu \to \infty$ φαίνεται αν εφρμόσουμε 3 φορές τον κανόνα de l' Hospital μιας και η μορφή

$$\frac{\nu^3}{e^\nu}$$

είναι απροσδιόριστη μορφή ή αν απλά σκεφτούμε πως στον αριθμητή έχουμε πολυωνυμική συνάρτηση ενώ στον παρονομαστή έχουμε εκθετική συνάρτηση η

οποία απειρίζεται πιο γρήγορα από την πολυωνυμική και άρα η αντίστροφή της τείνει στο μηδέν).

Η ερμηνεία του φαινομένου δόθηκε από τον Max Planck το 1900 που υπέθεσε ότι φως συχνότητας ν μπορεί να εκπέμπεται και να απορροφάται από την ύλη μόνο σε διακριτές μονάδες που τις ονόμασε *κβάντα*, ενέργειας

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

όπου h μια καινούργια θεμελιώδης φυσική σταθερά με μονάδες ενέργεια $\times$ χρόνο που αργότερα ονομάστηκε σταθερά του Planck και $\omega = 2\pi\nu$. Ο Planck δεν έδωσε καμία εξήγηση για την υπόθεση των κβάντων αλλά υπέθεσε πως οφείλεται σε κάποια άγνωστη αρχή που διέπει την αλληλεπίδραση του φωτός με την ύλη.

2.2 Το Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο

Το επόμενο βήμα έγινε από τον Einstein το 1905 στην ανάλυσή του για το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο που είναι η εκπομπή ηλεκτρονίων από μέταλλα αν βομβαρδιστούν με φως. Τα πειράματα έδειξαν ότι:
1. Υπάρχει μια κριτική συχνότητα ν_c (που εξαρτάται από το μέταλλο) κάτω από την οποία δεν εκπέμπονται ηλεκτρόνια άσχετα από την ένταση I του προσπιπτόμενου φωτός (η ένταση I ορίζεται ως ενέργεια ανά μονάδα εμβαδού και ανά μονάδα χρόνου).
2. Για $\nu \geq \nu_c$ τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια έχουν μέγιστη κινητική ενέργεια που αυξάνει γραμμικά με την συχνότητα ν αλλά είναι ανεξάρτητη από την ένταση I.
3. Ο αριθμός εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων στην μονάδα του χρόνου είναι ανάλογος της έντασης I.

Ο Einstein έδειξε πως η υπόθεση των κβάντων του Planck μπορεί να ερμηνεύσει το φαινόμενο. Για να ξεφύγει ένα ηλεκτρόνιο από το μέταλλο θα πρέπει να καταβάλει έργο W ίσο με την ενέργεια που το κρατά δέσμιο, το έργο αυτό εξαρτάται από την φύση του μετάλλου. Συνεπώς για να ξεφύγει ένα ηλεκτρόνιο θα πρέπει να απορροφήσει ενέργεια τουλάχιστον ίση με W. Όμως σύμφωνα με τον Planck η φωτεινή ενέργεια μπορεί να εκπεμφθεί ή να απορροφηθεί μόνο κατά κβάντα ενέργειας $E = h\nu$, συνεπώς εάν $\nu < W/h$ ένα ηλεκτρόνιο θα πρέπει να απορροφήσει πάνω από ένα κβάντο για να έχει αρκετή ενέργεια για να ξεφύγει. Αφού υπάρχουν τόσα πολλά διαθέσιμα ηλεκτρόνια για να απορροφήσουν την ενέργεια του προσπίπτοντος φωτός, αυτό είναι απίθανο να συμβεί

πριν η ενέργεια από το πρώτο κβάντο έχει διανεμηθεί μέσω συγκρούσεων σε όλα τα ηλεκτρόνια. Συνεπώς δεν θα πρέπει να αναμένουμε να διαφύγουν ηλεκτρόνια από την επιφάνεια του μετάλλου αν η συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός είναι μικρότερη από την κριτική τιμή $\nu_c = W/h$. Πάνω από την κριτική συχνότητα, η διαθέσιμη ενέργεια ενός ηλεκτρονίου που έχει διαφύγει θα είναι $h\nu - W$, σχέση που ερμηνεύει το **2** παραπάνω (γραμμική σχέση ενέργειας εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων και συχνότητας). Τέλος αν αυξηθεί η ένταση του προσπίπτοντος φωτός, τότε αυξάνονται τα διαθέσιμα κβάντα ενέργειας οπότε θα αυξηθούν ανάλογα και τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια.

Ο Einstein ερμήνευσε το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και τιμήθηκε με το βραβείο Νομπέλ, στηριζόμενος στην υπόθεση των κβάντων του Planck. Υπάρχει όμως μια σημαντική ποιοτική διαφορά: ο Einstein, σε αντίθεση με τον Planck, δεν υπέθεσε πως η κβαντική συμπεριφορά οφείλεται σε έναν άγνωστο μηχανισμό αλληλεπίδρασης των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων με τα ηλεκτρόνια αλλά το φως το ίδιο με συχνότητα ν, αποτελείται από σωματίδια (κβάντα), ενέργειας $E = h\nu$, που τα ονόμασε *φωτόνια*. Αυτή η υπόθεση του Einstein ήταν σε πλήρη αντίθεση με τον υπόλοιπο επιστημονικό κόσμο της εποχής που θεωρούσε πως το φώς είναι κύμα. Προφανώς ο Einstein επειρεάστηκε από την Ειδική Θεωρία Σχετικότητας που είχε διατυπώσει την ίδια χρονιά και η βάση της ήταν και πάλι η συμπεριφορά του φωτός. Παρότι η Ειδική Θεωρία Σχετικότητας έγινε άμεσα αποδεκτή από την επιστημονική κοινότητα, η υπόθεση των φωτονίων ήταν πιο δύσκολο να γίνει πιστευτή.

2.3 Το Φαινόμενο Compton

Το φαινόμενο Compton (1923) αναφέρεται στην σκέδαση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (ακτίνων X) από φορτισμένα σωμάτια: μια ηλεκτρομαγνητική δέσμη στέλνεται πάνω σε μεταλλικό στόχο και σκεδάζεται από τα ηλεκτρόνιά του. Ένας ανιχνευτής τοποθετημένος διαδοχικά σε διάφορες γωνίες μετρά την συχνότητα της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας συναρτήσει της γωνίας σκέδασης θ.

Το πειραματικό αποτέλεσμα είναι πως η σκεδαζόμενη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχει συχνότητα μικρότερη από την αρχική και η τιμή της εξαρτάται από την γωνία σκέδασης

$$\delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta).$$

Σύμφωνα με την κλασική θεωρία ο μηχανισμός σκέδασης ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος από ένα φορτισμένο σωμάτιο είναι απλός: το ηλεκτρικό πεδίο

του κύματος θέτει το ηλεκτρόνιο σε αρμονική ταλάντωση με συχνότητα ίση με την συχνότητα του κύματος. Το ταλαντευόμενο ηλεκτρόνιο με τη σειρά του εκπέμπει (μιας και επιταχύνεται) ένα δευτερογενές ηλεκτρομαγνητικό κύμα με συχνότητα ίση με τη συχνότητα ταλάντωσής του η οποία είναι ίση με τη συχνότητα του αρχικού κύματος. Συνεπώς η εκπεμπόμενη συχνότητα θα έπρεπε να είναι ίση με την αρχική, συνεπώς $\delta\lambda = 0$.

Η ερμηνεία του φαινομένου βασίζεται στην κβαντικη ηλεκτροδυναμική και δεν θα μας απασχολήσει στο παρόν μάθημα. Μια απλουστευμένη ερμηνεία μπορεί να δοθεί για μικρά μήκη κύματος (μικρότερα από το μήκος κύματος Compton του ηλεκτρονίου $\lambda_c = \hbar/m_e c$) χρησιμοποιώντας σχετικιστικές κρούσεις φωτονίων με ηλεκρόνια.

2.4 Ατομικά Μοντέλα - Ατομική Φασματοσκοπία

Είδαμε πως η βασική διαφορά μεταξύ κλασικής και κβαντικής φυσικής είναι ο δυϊσμός κύματος - σωματιδίου. Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε πειραματικά δεδομένα που υπονοούν τον κυματοσωματιδιακό δυϊσμό στην περίπτωση του φωτός. Το φως γνωρίζαμε ότι είναι κύμα αλλά μάθαμε πως είναι *κβαντισμένο κύμα*, δηλαδή φωτόνια, άρα έχει και σωματιδιακή φύση.

Υπάρχουν όμως και άλλα φαινόμενα ανεξάρτητα από το φως που ενισχύουν αυτή την υπόθεση του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού, όπως η κβάντωση των ενεργειακών σταθμών των ηλεκτρονίων των ατόμων τα οποία προσδίδουν κυματική συμπεριφορά στα ηλεκτρόνια. Με τον τρόπο αυτό ερμηνεύθηκαν και τα φάσματα εκπομπής διαφόρων στοιχείων. Βλέπουμε λοιπόν πως δεν υπήρχαν μόνο φαινόμενα που υποδηλώνουν πως το φως (που αρχικά το θεωρούσαμε κύμα) έχει και σωματιδιακή συμπεριφορά αλλά τώρα θα δούμε και την περίπτωση σωματιδίων τα οποία επιδεικνύουν και κυματική συμπεριφορά. Έτσι ο δυϊσμός είναι πλήρης.

Θα ξεκινήσουμε την σύντομη αυτή αναφορά από τα ατομικά μοντέλα.

Τα στοιχεία του περιοδικού πίνακα που γνωρίζουμε από τη Χημεία (H, He, Li, Be,...), είναι ουσίες που αποτελούνται από άτομα με *ατομικό αριθμό* (αριθμό πρωτονίων του πυρήνα) Z = (1, 2, 3, 4,...) αντίστοιχα. Πριν την ανακάλυψη του ηλεκτρονίου από τον Thompson (1897), επικρατούσαν οι απόψεις του Δημοκρίτου (μεταξύ όσων πίστευαν στην ύπαρξη των ατόμων) πως τα άτομα ήταν ουδέτερα σωμάτια που δεν διαιρούνται περεταίρω. Μετά την ανακάλυψη του ηλεκτρονίου ο Thompson επηρεασμένος από αυτές τις απόψεις πρότεινε ένα

μοντέλο για τα άτομα που είναι γνωστό ως *σταφιδόψωμο του Thompson*: τα άτομα ήταν μικρές μπαλίτσες θετικά φορτισμένες με φορτίο Ze μέσα στις οποίες υπήρχαν εμφυτευμένα Z ηλεκτρόνια. Όμως ο Rutherford στην Οξφόρδη έδειξε το 1911 πως το θετικό φορτίο των ατόμων είναι συγκεντρωμένο στον πυρήνα που βρίσκεται στο κέντρο του ατόμου. Μετά την ανακάλυψη του νετρονίου από τον Chadwick το 1932, έγινε σαφές πως ο πυρήνας αποτελείται από Z πρωτόνια (το καθένα με θετικό φορτίο ίσο κατ' απόλυτη τιμή με αυτό του ηλεκτρονίου) μαζί με N νετρόνια (ηλεκτρικά ουδέτερα σωμάτια). Τα πρωτόνια και τα νετρόνια έχουν περίπου την ίδια μάζα που είναι 2.000 φορές μεγαλύτερη από αυτή των ηλεκτρονίων. Ο φυσικος αριθμός M=Z+N λέγεται *μαζικός αριθμός*. Άτομα με τον ίδιο ατομικό αλλά διαφορετικό μαζικο αριθμό (συνεπώς με ίδιο αριθμό πρωτονίων αλλά με διαφορετικό αριθμό νετρονίων) αποτελούν *ισότοπα* του ίδιου στοιχείου του περιοδικού πίνακα και έχουν τις ίδιες χημικές ιδιότητες.

Οι πυρηνικές δυνάμεις που συγκρατούν τα πρωτόνια και τα νετρόνια στον πυρήνα έχουν μικρή εμβέλεια, περίπου όση η διάμετρος του πυρήνα $10^{-15}m$. Αυτή η απόσταση είναι πολύ μικρή σε σχέση με την διάμετρο των ατόμων που είναι περίπου $10^{-10}m$, οπότε οι πυρηνικές δυνάμεις δεν έχουν καμία επίδραση στα ηλεκτρόνια τα οποία έλκονται από τον πυρήνα με ηλεκτροστατικές δυνάμεις. Συνεπώς για να καταλάβουμε την δομή των ατόμων μπορούμε να υποθέσουμε πως ο πυρήνας είναι ένα βαρύ σημειακό σωμάτιο με φορτίο Ze που είναι περικυκλωμένο από Z ηλεκτρόνια. Αυτό είναι το μοντέλο του Rutherford για τα άτομα. *Το μοντέλο αυτό δεν είναι συμβατό με την κλασική φυσική* διότι τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε τροχιά γύρω από τον πυρήνα πρέπει να επιταχύνουν και τα επιταχυνόμενα φορτία εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Αν συνέβαινε αυτό όμως τα ηλεκτρόνια θα έχαναν ενέργεια και θα έπεφταν πάνω στον πυρήνα, συνεπώς κλασικά τα άτομα σύμφωνα με το μοντέλο του Rutherford θα έπρέπε να είναι ασταθή οπότε η ύλη που υπάρχει γύρω μας δεν θα έπρεπε να υπάρχει! Το μοντέλο του Rutherford ήταν επιβεβαιωμένο πειραματικά, συνεπώς θα έπρεπε να βρεθεί άλλη εξήγηση για την σταθερότητα των ατόμων και συνεπακόλουθα και της ύλης.

Επιπρόσθετα από το κεφαλαιώδες ζήτημα της σταθερότητας των ατόμων που περιγράψαμε παραπάνω, ένα σωστό ατομικό μοντέλο θα έπρεπε να εξηγεί και το γεγονός ότι τα φάσματα εκπομπής αερίων διαφόρων στοιχειών δεν ήταν συνεχή όπως προέβλεπε η ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Maxwell αλλα *διακριτά*. Για παράδειγμα το φάσμα του υδρογόνου είχε μελετηθεί από τον Rydberg το 1890 και ήταν γνωστό πως οι κυκλικές συχνότητες των γραμμών εκπομπής μπορούσαν να εξαχθούν από τον εμπειρικό τύπο

$$\omega_{mn} = 2\pi R_0 c(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2})$$

όπου $n < m \in \mathbb{N}^*$ και R_0 η σταθερά Rydberg.

Η ερμηνεία του εμπειρικού τύπου του Rydberg δόθηκε από το μοντέλο του ατόμου του Bohr (1911) που αποτελεί μια βελτίωση του μοντέλου του ατόμου του Rutherford. Ο Bohr παρατήρησε πως η σταθερά του Planck έχει διαστάσεις στροφορμής, κάτι που τον οδήγησε στην υπόθεση ότι *οι μόνες επιτρεπτές τροχιές των ηλεκτρονίων είναι εκείνες για τις οποίες η στροφορμή L είναι θετικό ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς του Planck*:

$$L = n\hbar$$

με $n = 1, 2, 3, ...$ Για ευκολία υποθέτουμε πως ένα ηλεκτρόνιο μάζας m κινείται με ταχύτητα $v << c$ σε κυκλική τροχιά με ακτίνα r γύρω από τον πυρήνα (ελλειπτικές τροχιές δίδουν το ίδιο αποτέλεσμα). Η κεντρομόλος δύναμη είναι ίση με την ελκτική δύναμη Coulomb:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r},$$

συνεπώς η ολική ενέργεια είναι

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2}\alpha\frac{\hbar c}{r},$$

όπου

$$\alpha = (\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}) \simeq \frac{1}{137}$$

είναι η αδιάστατη σταθερά *λεπτής υφής*.

Η υπόθεση Bohr δίδει

$$mvr = n\hbar$$

η οποία αν συνδυασθεί με την

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

δίδει

$$r = n^2 a_0,$$

όπου a_0 είναι η *ακτίνα Bohr*

$$a_0 = (\frac{\hbar}{mc\alpha}) = \lambda_c/\alpha$$

και όπου λ_c το μήκος κύματος Compton του ηλεκτρονίου που είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο.

Το τελικό αποτέλεσμα είναι

$$E = E_n := -\frac{|E_0|}{n^2}$$

και

$$E_0 = -\frac{1}{2}\alpha^2(mc^2),$$

όπου $n = 1, 2, 3, ...$

Το δυναμικό Coulomb επιτρέπει κλασικές τροχιές με απεριόριστα μεγάλη κατ΄ απόλυτη τιμή αρνητική (ως ελκτική) ενέργεια αλλά το μοντέλο Bohr έχει τροχιά ελάχιστης ενέργειας ($n = 1$) που λέγεται *βασική κατάσταση*, με ενέργεια $E = E_0$ και η ακτίνα αυτής της τροχιάς είναι η ακτίνα Bohr. Όλες οι υπόλοιπες τροχιές αντιστοιχούν σε διεγερμένες καταστάσεις του ατόμου οι οποίες μπορούν να μεταβούν στην βασική κατάσταση αλλά η βασική κατάσταση είναι σταθερή. *Το ατομικό μοντέλο του Bohr συνεπώς ερμηνεύει την σταθερότητα του ατόμου του υδρογόνου* αλλά με έναν ad hoc τρόπο. Η ενέργεια που απελευθερώνεται από μια μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από το επίπεδο m στο επίπεδο $n < m$ θα είναι $E_{nm} = E_m - E_n$ και εάν αυτή η ενέργεια δαπανηθεί για την δημιουργία ενός φωτονίου, τότε από την σχέση Einstein - Planck $E = \hbar\omega$ η κυκλική συχνότητα του εκπεμπόμενου φωτονίου θα δίδεται από τον εμπειρικό τύπο του Rydberg με

$$R_0 = \frac{\alpha^2 mc}{2h}.$$

Συνεπώς βλέπουμε πως το ατομικό μοντέλο του Bohr έχει δύο βασικές επιτυχίες: εξηγεί την σταθερότητα των ατόμων (τουλάχιστον του ατόμου του υδρογόνου) και εξηγεί ταυτόχρονα την εμπειρική σχέση του Rydberg για το φάσμα εκπομπής του υδρογόνου. Παρά ταύτα το ατομικό μοντέλο του Bohr είναι λάθος (ή ακριβέστερα είναι σωστό ως ημι-κλασικό όριο): προβλέπει λανθασμένα πως το άτομο του υδρογόνου στην βασικη κατάσταση έχει αξονική συμμετρία με τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου ίση με $\hbar$. Εάν αυτό ήταν σωστό τότε το υδρογόνο θα είχε διαφορετικές *φυσικές* ιδιότητες. Στην πραγματικότητα σήμερα ξέρουμε πως το άτομο του υδρογόνου στην βασική κατάσταση είναι σφαιρικά συμμετρικό και το ηλεκτρόνιο έχει μηδέν τροχιακή στροφορμή. Το ατομικο μοντέλο του Bohr είναι προσεγγιστικά ακριβές στο ημι-κλασικό όριο $n \to \infty$ και αυτός είναι ο λόγος που παρότι λανθασμένο, δίδει την σωστή κυκλική συχνότητα στις γραμμές εκπομπής του φάσματος του υδρογόνου (ο

εμπειρικός τύπος του Rydberg προκύπτει από πειραματικά δεδομένα και συνεπώς δεν επιδέχεται αμφισβίτηση).

Σημείωση: Πρόσφατα ο μεγαλοφυής Γάλλος μαθηματικός Alain Connes έδωσε μια νέα ερμηνεία του εμπειρικού τύπου του Rydberg αποδεικνύοντας πως δεν εκφράζει τίποτε διαφορετικό από τον γνωστό κανόνα πολλαπλασιασμού των πινάκων που ξέρουμε από την άλγεβρα.

3 Η Σχολή της Κοπεγχάγης

3.1 Η Μητρομηχανική του Heisenberg

Το 1923 ο Werner Heisenberg έθεσε τις βάσεις για μια νέα ατομική θεωρία. Αφετηρία ήταν μια κριτική εξέταση της έννοιας της ατομικής τροχιάς, από την οποία βγήκε και η περίφημη ομόνυμη *αρχή της απροσδιοριστίας*. Φαντάστηκε μια διαδικασία για να *δει* ένα ηλεκτρόνιο σε τροχιά με τη χρήση κάποιας πηγής φωτός που απαιτεί συγκρούσεις με φωτόνια. Η ορμή που θα μεταφερθεί στο ηλεκτρόνιο που θέλουμε να δούμε από μια τέτοια σύγκρουση με κάποιο φωτόνιο (που θα πρέπει αναγκαστικά να γίνει για να επιτευχθεί η διαδικασία της όρασης), θα είναι κάποιο κλάσμα της ορμής του προσπίπτοντος φωτονίου h/λ. Αυτή η ορμή θα πρέπει να είναι μικρή συγκριτικά με την ορμή του ηλεκτρονίου που σύμφωνα με την θεωρία του Bohr θα είναι $(1/n)(h/a_0)$, αν υποθέσουμε πως το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην nth τροχιά, διότι αν το φωτόνιο έχει πολύ μεγάλη συχνότητα θα καταστρέψει την τροχιά που θέλουμε να παρατηρήσουμε. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να επιλέξουμε μήκος κύματος προσπίπτοντος φωτονίου που να είναι

$$\lambda >> na_0.$$

Όμως η ακτίνα της nth τροχιάς είναι n^2a_0, που σημαίνει ότι γειτονικές τροχιές βρίσκονται σε απόσταση περίπου na_0 μεταξύ τους, οπότε για να τις ξεχωρίσουμε θα πρέπει να έχουμε

$$\lambda << na_0.$$

Προφανώς οι δύο συνθήκες είναι αντιφατικές!

Κατά τον Heisenberg, το πρόβλημα με την θεωρία του Bohr ήταν πως βασίζεται σε μια κλασική έννοια, αυτή της τροχιάς, η οποία σε κβαντικό επίπεδο δεν έχει νόημα, οπότε η νέα θεωρία θα πρέπει να βασιζεται σε μεγέθη που είναι άμεσα μετρήσιμα. *Για να ταιριάσει τα πειραματικά δεδομένα, αναγκάστηκε να αντιστοιχίσει έναν πίνακα σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος.* Στην πραγματικότητα ο Heisenberg δεν είχε καλό μαθηματικό υπόβαθρο και αγνοούσε την άλγεβρα των πινάκων που είχε αναπτυχθεί από τους μαθηματικούς μερικά χρόνια πριν και κυριολεκτικά την ξαναεφηύρε! Αυτό του το επεσήμαναν ορισμένοι συνάδελφοί του φυσικοί της εποχής που είχαν καλύτερο μαθηματικό υπόβαθρο όπως οι Bohr, Jordan, με αποτέλεσμα να αναπτύξουν μαζί την πρώτη ιστορικά μαθηματικά πλήρη μορφή της κβαντομηχανικής που είναι γνωστή ως *μητρομηχανική* (μήτρα σημαίνει πίνακας εδώ). Σήμερα όμως δεν ακολουθείται αυτός ο φορμαλισμός διότι αποφεύγει επίτηδες τελείως την κλασική φυσική διαίσθηση. Στο μάθημα θα ακολουθήσουμε τον φορμαλισμό και την ερμηνεία της κβαντομηχανικής που είναι γνωστή ως *Σχολή της Κοπεγχάγης*. Αυτός ο

φορμαλισμός αναπτύχθηκε κυρίως από τον Δανό φυσικό Niels Bohr (εξ ου και η ονομασία), και στηρίζεται σε κλασικές έννοιες οι οποίες όμως ερμηνεύονται διαφορετικά απ΄ ότι στην κλασική φυσική.

3.2 Η Υπόθεση των Υλικών Κυμάτων του de Broglie

Περίπου την ίδια περίοδο με τον Heisenberg, ο de Broglie ακολουθούσε μια διαφορετική προσέγγιση στο ίδιο θέμα, βασισμένος στον κυματοσωματιδιακό δυϊσμό του φωτός που είχε προτείνει ο Einstein στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Η προσπάθεια του de Broglie ήταν η εξής: αφού το φως που είναι κύμα επιδεικνύει και σωματιδιακή συμπεριφορά, είναι ενδιαφέρον να εξετασθεί αν τα ηλεκτρόνια, που ήταν γνωστό πως είναι σωμάτια, επιδεικνύουν και κυματική συμπεριφορά.

Θεωρούμε ένα κύμα (παλμό) που είναι ομογενές στο επίπεδο Oyz και διαδίδεται κατά την διεύθυνση του άξονα $x'x$, το οποίο περιγράφεται από την συνάρτηση $\Psi(x,t)$ η οποία γράφεται ως γραμμική επαλληλία επίπεδων κυμάτων

$$\Psi_k(x,t) = e^{i[kx-\omega(k)t]},$$

όπου ο κυματαριθμός k συνδέεται με το μήκος κύματος μέσω της σχέσης

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Συνεπώς

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x,t)\tilde{f}(k)dk,$$

για κάποια συνάρτηση $\tilde{f}(k)$.

Αν η $\omega(k)$ είναι γραμμική συνάρτηση, τότε το κύμα λέγεται αδιάσπαρτο, παράδειγμα αποτελεί το φώς, όπου $\omega(k) = ck$. Στην περίπτωση αυτή

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(kx-ct)}\tilde{f}(k)dk = f(x-ct).$$

Η συνάρτηση f είναι ο αντίστροφος μερασχηματισμός Fourier της $\tilde{f}$ (αν δεν γνωρίζετε το θέμα αυτό, απλά θεωρείστε πως η f ορίζεται από το παραπάνω ολοκλήρωμα). Εάν η f είναι απλή συνάρτηση με μοναδικό μέγιστο στο σημείο $x = x_0$, τότε η $f(x-ct)$ λαμβάνει την μέγιστη τιμή της στο σημείο $x-ct = x_0$, οπότε το $x = x_0 + ct$ είναι το σημείο μεγίστου για την χρονική στιγμή t. Με

άλλα λόγια, το κύμα διαδίδεται κατά μήκος του άξονα $x'x$ με την ταχύτητα του φωτός. Τα πράγματα δεν είναι τόσο απλά όταν η $\omega(k)$ δεν είναι γραμμική, αλλά ας υποθέσουμε πως η συνάρτηση $\tilde{f}(k)$ είναι συγκεντρωμένη γύρω από το σημείο $k = k_0$. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να προσεγγίσουμε την $\omega(k)$ με τους δύο πρώτους όρους του αναπτύγματος Taylor γύρω από την τιμή $k = k_0$:

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + v_g(k_0)(k - k_0),$$

όπου η ποσότητα

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}$$

λέγεται ομαδική ταχύτητα (στον κυματάριθμο k). Η συνάρτηση $\omega(k)$ είναι πρακτικά γραμμική και πάλι, οπότε εφαρμόζουμε την προηγούμενη ανάλυση και βρίσκουμε ότι

$$\Psi(x,t) \simeq e^{-i[\omega(k_0)+v_g k_0]t} f(x - v_g(k_0)t).$$

Εκτός από την επιπλέον φάση, το παραπάνω αποτελεί κύμα (παλμό) που διαδίδεται με ταχύτητα $v_g(k_0)$. Σημειώνουμε πως για γραμμική $\omega(k)$ έχουμε πως $v_g = \omega/k$, οπότε $v_g(k) = c$ όπως αναμένεται για κύμα φωτός.

Σύμφωνα με την υπόθεση φωτονίων του Einstein, ένα κύμα φωτός αποτελείται από σωμάτια (φωτόνια) ενέργειας $E = \hbar\omega$. O de Broglie αναρωτήθηκε αν μπορεί να υπάρχουν *υλικά κύματα* που να αποτελούνται από ηλεκτρόνια, με ενέργεια και πάλι $E = \hbar\omega$. Αν συμβαίνει αυτό, τότε η ταχύτητα των ηλεκτρονίων θα πρέπει να είναι ίση με την ομαδική ταχύτητα του υποτιθέμενου υλικού κύματος των ηλεκτρονίων, οπότε (υποθέτοντας $v_g << c$)

$$p = mv_g = m\frac{d\omega}{dk} = \frac{m}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{m}{\hbar}\frac{dE}{dp}\frac{dp}{dk}.$$

Όμως για ένα ηλεκτρόνιο (με $v_g << c$) έχουμε

$$E = p^2/2m,$$

οπότε $dE/dp = p/m$ και συνεπώς

$$\frac{dp}{dk} = \hbar,$$

που έχει ως λύση την $p = \hbar k$. Συνεπώς

$$E = \hbar\omega$$

και

$$p = \hbar k,$$

όπως ακριβώς και για τα φωτόνια. Η σχέση $p = \hbar k$ είναι ισοδύναμη με την

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

το οποίο λέγεται *μήκος κύματος de Broglie*. Είναι το μήκος κύματος του κύματος που σχετίζεται με μια δέσμη σωματιδίων με ορμή p.

Αν τα ηλεκτρόνια μπορούν πράγματι να συμπεριφερθούν ως κύμα, τότε θα πρέπει να επιδεικνύουν τα ίδια φαινόμενα συμβολής όπως τα κύματα φωτός. Αυτή η θεωρητική πρόβλεψη επιβεβαιώθηκε πειραματικά το 1927 από το πείραμα Davisson - Germer που μελετούσε την σκέδαση ηλεκτρονίων από μια επιφάνεια κρυστάλλου.

4 Η Εξίσωση του Schrödinger

Το 1924, ο Αυστριακός φυσικός Erwin Schrödinger ανέπτυξε τις ιδέες του de Broglie σε έναν εναλλακτικό (ως προς αυτόν του Heisenberg) φορμαλισμό της κβαντομηχανικής που λέγεται *Κυματομηχανική*. Σημειώνοντας πως ένα κύμα φωτός αποτελεί ειδική λύση των εξισώσεων Maxwell, ο Schrödinger ρώτησε την εξής ερώτηση:

Ποιάς εξίσωσης λύση αποτελούν τα υλικά κύματα de Broglie;

Δοθέντος ότι $E = p^2/2m$, είναι εύκολο να επιβεβαιωθεί πως τα υλικά κύματα de Broglie

$$\Psi_P = exp[\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2 t}{2m})]$$

ικανοποιούν την διαφορική εξίσωση, που λέγεται *εξίσωση του Schrodinger*

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

όπου $\hat{p}$ είναι ο διαφορικός τελεστής

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Η διαφορική αυτή εξίσωση είναι *γραμμική*, (δεύτερης τάξης με μερικές παραγώγους), συνεπώς ισχύει η αρχή της επαλληλίας, δηλαδή ικανοποιείται και από τους γραμμικούς συνδυασμούς των λύσεων.

Στη συνέχεια θα δούμε πιο αναλυτικά την εξίσωση αυτή.

Σημείωση: Η περίφημη πια εξίσωση του Schrödinger εμφανίστηκε στο άρθρο με τίτλο "Quantisierung als Eigenwertproblem" (Η Κβάντωση ως Πρόβλημα Ιδιοτιμών) τον Ιανουάριο του 1926 στο επιστημονικό περιοδικό Annalen der Physik. Το 1933 ο Schrödinger τιμήθηκε με το βραβείο Νομπέλ Φυσικής για την ανακάλυψή του αυτή όντας καθηγητής στο πανεπιστήμιο της Οξφόρδης μαζί με τον Dirac από το πανεπιστήμιο του Κέιμπριτζ, ο οποίος Dirac βρήκε την ομώνυμη εξίσωση, (εξίσωση Dirac), που είναι η σχετικιστική έκδοση της εξίσωσης του Schrödinger από την οποία προήλθε η πρόβλεψη για την ύπαρξη της αντιύλης. Η συνεισφορά του Schrödingerστην επιστήμη ήταν εκτεταμένη και πέραν της φυσικής, για παράδειγμα οι J. Watson, F. Crick που ανακάλυψαν την δομή του DNA στην βιολογία, (βραβείο Νομπέλ Φυσιολογίας - Ιατρικής 1962, ίσως η μεγαλύτερη ανακάλυψη της Ιατρικής - Βιολογίας του 20ου αιώνα, η ανακάλυψη έγινε στο πανεπιστήμιο του Κέιμπριτζ), γράφουν πως το κίνητρο

για την μελέτη των γονιδίων προήρθε από ένα βιβλίο του Schrödinger με τίτλο "Τι είναι η Ζωή" ("What is Life") του 1944. Η προσωπική ζωή όμως του Schrödinger δημιουργούσε προβλήματα στον κοινωνικό περίγυρο της εποχής με αποτέλεσμα να μετακινείται διαρκώς. Το 1935, όντας και πάλι στην Οξφόρδη, δημοσίευσε το άρθρο που περιείχε το *παράδοξο της γάτας του Schrödinger* όπου προσπαθούσε να αμυνθεί για την ερμηνεία της κβαντομηχανικής που πρότεινε η σχολή της Κοπεγχάγης και στην οποία αντιδρούσε ο Einstein (μέσω του ιδεατού πειράματος που οδήγησε στο λεγόμενο παράδοξο EPR, από τα αρχικά των ονομάτων Einstein-Podolsky-Rosen).

4.1 Η Ελεύθερη Εξίσωση του Schrödinger

Θεωρούμε την απλούστερη δυνατή περίπτωση μιας ελεύθερης μονοδιάστατης κίνησης. Αν E και p είναι η ενέργεια και η ορμή ενός σωματιδίου, τότε η συχνότητα ω και ο κυματάριθμος k του αντίστοιχου υλικού κύματος θα είναι

$$\omega = E/\hbar$$

και

$$k = p/\hbar$$

αντίστοιχα. Στην κλασική κυματική θεωρία, ένα κύμα με καθορισμένη συχνότητα και κυματάριθμο είναι αναγκαστικά ένα επίπεδο κύμα που περιγράφεται από την συνάρτηση

$$\phi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}.$$

Κατ' αναλογία υποθέτουμε ότι ένα υλικό κύμα θα περιγράφεται από την *κυματοσυνάρτηση*

$$\psi(x,t) = e^{i/\hbar(px-Et)}.$$

Θέλουμε να βρούμε την κυματική εξίσωση που ικανοποιεί η $\psi(x,t)$. Απαιτούμε τα εξής από αυτήν την εξίσωση:
1. Να είναι γραμμική για να ισχύει η αρχή της επαλληλίας.
2. Να έχει σταθερούς συντελεστές, κάτι που προκύπτει από την αρχή της ομοιογένειας του χώρου και του χρόνου. Οι συντελεστές θα πρέπει να εξαρτώνται από τις αμετάβλητες παραμέτρους των σωματίων (όπως η μάζα) και τις απαραίτητες φυσικές σταθερές και όχι από τις μεταβαλόμενες παραμέτρους των σωματίων (όπως η ενέργεια ή η ορμή).
3. Να αναπαράγει την σωστή σχέση ενέργειας - ορμής $E = p^2/2m$.

Η απαίτηση **1.** διασφαλίζει ότι μια τυχαία κυματοσυνάρτηση θα είναι πάντα μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων με διάφορες ορμές. Έτσι το μόνο που μένει

είναι να δούμε τι είδους κυματική εξίσωση ικανοποιεί η

$$\psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}.$$

Την παραγωγίζουμε μια φορά ως προς t και μια ως προς x και παίρνουμε:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi$$

και

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\psi.$$

Αν αντί των διαφορικών τελεστών $\partial/\partial t$ και $\partial/\partial x$ χρησιμοποιήσουμε τους

$$\hat{E} := i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

και

$$\hat{p} := -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

οι παραπάνω σχέσεις παίρνουν την πολύ πιο κομψή μορφή που μοιάζει με την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\hat{E}\psi = E\psi$$

και

$$\hat{p}\psi = p\psi.$$

Για να αποκτήσουμε την σωστή σχέση ενέργειας - ορμής θα πρέπει η ψ να ικανοποιεί την εξίσωση

$$\hat{E}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi,$$

όπου

$$\hat{p}^2 = \hat{p}\hat{p} = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

οπότε η κλασική σχέση ενέργειας - ορμής δίδει για την ψ

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},$$

που είναι γνωστή ως *ελεύθερη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger σε μία (χωρική) διάσταση.*

Παρατηρήσεις:

1. Η κυματική εξίσωση του Schrödinger δεν είναι ακριβώς κυματική εξίσωση διότι έχει πρώτη χρονική παράγωγο και όχι δεύτερη.

2. Η ελέυθερη εξίσωση του Schrödinger ικανοποιείται από τα επίπεδα κύματα, όμως από την αρχή της επαλληλίας και την γραμμικότητα θα ικανοποιείται και από κάθε κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ αφού αυτή γράφεται ως κατάλληλη υπέρθεση επίπεδων κυμάτων.
3. Η ελεύθερη εξίσωση του Schrödinger γράφεται και στην συμβολική γραφή

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}_0\psi$$

όπου

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

είναι ο *τελεστής της ελεύθερης Χαμιλτονιανής*. Υπενθυμίζουμε από την αναλυτική (κλασική) μηχανική των Lagrange - Hamilton ότι Χαμιλτονιανή H ονομάζεται η συνάρτηση με μεταβλητές την θέση και την ορμή

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

που δίδει την ολική ενέργεια (κινητική και δυναμική) του σωματίου.
4. Το σύμβολο E χρησιμοποιείται όταν θέλουμε να αναφερθούμε σε μια συγκεκριμένη σταθερή τιμή της ενέργειας ενώ η Χαμιλτονιανή H χρησιμοποιείται όταν θέλουμε να αναφερθούμε στην συνάρτηση της ολικής ενέργειας (κινητική και δυναμική) με μεταβλητές την θέση και την ορμή. Όταν δεν υπάρχει δυναμικό (ή δυναμική ενέργεια), τότε η Χαμιλτονιανή συμβολίζεται με H_0 και έχει μόνο τον κινητικό όρο

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

και ονομάζεται *ελεύθερη Χαμιλτονιανή*. Στην εξίσωση Schrödinger παραπάνω ο τελεστής $\hat{H}_0$ αναφέρεται στην ελέυθερη Χαμιλτονιανή και προκύπτει από την κλασική έκφραση $H_0 = p^2/2m$ με εφαρμογή του κανόνα αντικατάστασης

$$p \to \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

5. Χρησιμοποιούμε το καπέλο για να διακρίνουμε τους τελεστές από τις συναρτήσεις τουλάχιστον στην αρχή που δεν υπάρχει εξοικείωση. Περισσότερα επ΄ αυτού στην επόμενη παράγραφο όπου θα ασχοληθούμε σύντομα με το μαθηματικό υπόβαθρο της κβαντομηχανικής.

4.2 Γενικότερες Μορφές της Εξίσωσης Schrödinger

Η γραφή της ελεύθερης εξίσωσης Schrödinger στην μορφή

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}_0\psi$$

είναι κατάλληλη για την πιθανή γενίκευση της κίνησης ενός σωματίου σε κάποιο δυναμικό $V(x)$. Σε αυτή την περίπτωση θα πάρουμε

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

όπου τώρα ο τελεστής της Χαμιλτονιανής θα είναι

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

δηλαδή προκύπτει από την έκφραση της κλασικής Χαμιλτονιανής του σωματιδίου εφαρμόζοντας τον κανόνα αντικατάστασης

$$x \to x$$

και

$$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Αναλυτικά η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger σε μία χωρική διάσταση με παρουσία δυναμικού γράφεται

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi.$$

Η γενίκευση της παραπάνω εξίσωσης είναι εύκολη σε τρεις χωρικές διαστάσεις. Η συμβολική γραφή θα είναι προφανώς ίδια

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

με

$$\psi = \psi(\vec{r}, t),$$

όπου ο τελεστής $\hat{H}$ προκύπτει από την κλασική Χαμιλτονιανή

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}),$$

η οποία σε Καρτεσιανές Συνταταγμένες θα είναι

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z),$$

εφαρμόζοντας και πάλι τον κανόνα αντικατάστασης

$$x \to x, y \to y, z \to z$$

και

$$p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, p_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, p_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z},$$

ή συνοπτικά

$$\vec{r} \to \vec{r}$$

και

$$\vec{p} \to -i\hbar\nabla,$$

όπου

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k},$$

όπου $\{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$ η γνωστή καρτεσιανή ορθοκανονική βάση του χώρου $\mathbb{R}^3$.

Ο τελεστής $\hat{H}$ της Χαμιλτονιανής θα είναι συνεπώς

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + V(x, y, z)$$

ή ισοδύναμα

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}),$$

όπου $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ η γνωστή Λαπλασιανή. Έτσι η *τρισδιάστατη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger με παρουσία δυναμικού* είναι

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

Σημείωση 1: Τα παραπάνω δεν αποτελούν απόδειξη της εξίσωσης Schrödinger, αυτή ως φυσικός νόμος δεν αποδεικνύεται, απλά περιγράφουμε την επιχειρηματολογία του Schrödinger σύμφωνα με την οποία τα υλικά κύματα de Broglie θα πρέπει να ικανοποιούν αυτή την εξίσωση. Ο τελικός κριτής θα είναι το πείραμα που θα δείξει αν αυτή η επιλογή είναι σωστή.
Σημείωση 2: Η εξίσωση του Schrödinger *δεν* ικανοποιεί την αρχή σχετικότητας του Einstein αλλά ικανοποιεί την αρχή σχετικότητας του Γαλιλαίου, κάτι που είναι προφανές από το γεγονός πως κατά την διαδικασία εύρεσής της μιμιθήκαμε την κλασική σχέση για την ενέργεια $E = P^2/2m$. Αν επιχειρήσουμε να βρούμε την σχετικιστική έκδοση της εξίσωσης Schrödinger ξεκινώντας από την σχετικιστική κλασική σχέση για την κινητική ενέργεια και στην συνέχεια εφαρμόσουμε τον γνωστό κανόνα αντικατάστασης $\vec{r} \mapsto \hat{r} = \vec{r}$ και $\vec{p} \mapsto \hat{p} = -i\vec{\nabla}$,

θα καταλήξουμε στην λεγόμενη *εξίσωση Klein-Gordon*. Η εξίσωση αυτή όμως περιγράφει μόνο τα *μποζόνια (σωμάτια με ακέραιο σπιν)*. Για την σχετικιστική περιγραφή των *φερμιονίων (σωμάτια με ημιακέραιο σπιν)* απαιτείται η περίφημη *εξίσωση Dirac* η οποία είναι βαθύτερη και δυσκολότερη από την εξίσωση Klein-Gordon.
Σημείωση 3: Στην φυσική μια διαφορική εξίσωση από μόνη της είναι ελλειπής, θα πρέπει να την ερμηνεύσουμε με το κατάλληλο τρόπο ή να της δώσουμε το κατάλληλο φυσικό νόημα. Θα ακολουθήσουμε την λεγόμενη *στατιστική ερμηνεία* της εξίσωσης Schrödinger, ερμηνεία που είναι γνωστή και ως *σχολή της Κοπεγχάγης*. Πριν από αυτό όμως χρειαζόμαστε ορισμένα μαθηματικά.

5 Ένα Μαθηματικό Intermezzo

Θα μπορούσε κανείς να πει πως γενικά το μαθηματικό υπόβαθρο της μηχανικής του Newton και της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας του Maxwell είναι η διανυσματική ανάλυση, δηλαδή ο διαφορικός και ο ολοκληρωτικός λογισμός βαθμωτών ή/και διανυσματικών συναρτήσεων πολλών μεταβλητών. Το μαθηματικό υπόβαθρο της κβαντομηχανικής είναι ένας κλάδος των μαθηματικών που λέγεται *συναρτησιακή ανάλυση*. Πολύ γενικά η συναρτησιακή ανάλυση είναι μια εννοποίηση και γενίκευση της γραμμικής άλγεβρας και της διανυσματικής ανάλυσης. Ένα από τα βασικά αντικείμενα μελέτης της συναρτησιακής ανάλυσης είναι ο λεγόμενος *χώρος Hilbert*. Ο χώρος Χίλμπερτ, [η ονομασία οφείλεται στον John von Neumann to 1929, προς τιμήν του μεγάλου Γερμανού μαθηματικού David Hilbert, (1862-1943)], στην μορφή που χρησιμοποιείται στην κβαντομηχανική, ουσιαστικά είναι ένας *διανυσματικός χώρος (απείρων διαστάσεων) εφοδιασμένος με εσωτερικό γινόμενο.*

5.1 Στοιχεία Συναρτησιακής Ανάλυσης

5.1.1 Χώροι Hilbert

Ξεκινάμε με τον εξής γενικό ορισμό:

Ορισμός 1. *Μετρικός χώρος* (M, d) λέγεται ένα μη-κενό σύνολο M εφοδιασμένο με μια απεικόνιση $d : M \times M \to \mathbb{R}_+$ που λέγεται *μετρική* και η οποία ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες:
1. $d(x, y) \geq 0$ και $d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$,
2. $d(x, y) = d(y, x)$ (συμμετρική ιδιότητα),
3. $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$ (τριγωνική ανισότητα), όπου στα παραπάνω $x, y, z \in M$.

Η μετρική d ορίζει ουσιαστικά την *απόσταση* μεταξύ δύο σημείων $x, y \in M$.

Παραδείγματα μετρικού χώρου αποτελεί το σύνολο των πραγματικών αριθμών, εφοδιασμένο με την μετρική που ορίζεται μέσω της γνωστής απόλυτης τιμής, δηλαδή

$$d(x, y) := |x - y|.$$

Δεύτερο παραδειγμα μετρικού χώρου αποτελεί το σύνολο των μιγαδικών αριθμών εφοδιασμένο με το γνωστό μέτρο των μιγαδικών αριθμών

$$d(z_1, z_2) := |z_1 - z_2|.$$

Μετρικούς χώρους επίσης αποτελούν και τα σύνολα των σημείων του επιπέδου και του χώρου εφοδιασμένα με την απόσταση των σημείων που ορίζεται από το Πυθαγόρειο Θεώρημα, δηλαδή εάν ένα σημείο A του χώρου έχει Καρτεσιανές Συντεταγμένες (x_A, y_A, z_A) και ένα άλλο σημείο B του χώρου έχει καρτεσιανές συντεταγμένες (x_B, y_B, z_B), τότε η απόστασή τους $d(A, B) = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2 + (z_A - z_B)^2}$.

Η έννοια της σύγκλισης μιας ακολουθίας που γνωρίζουμε για τις ακολουθίες του $\mathbb{R}$ γενικεύεται άμεσα για την περίπτωση μετρικών χώρων:

Ορισμός 2. Έστω (M, d) μετρικός χώρος. Μια ακολουθία σημείων

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

του M θα λέμε ότι *συγκλίνει* στο M εάν υπάρχει σημείο $x \in M$ τέτοιο ώστε για κάθε $\varepsilon > 0$ να υπάρχει φυσικός αριθμός $n_0(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ τέτοιος ώστε για κάθε $n \geq n_0$ να ισχύει ότι $d(x_n, x) < \varepsilon$. Σε αυτή την περίπτωση θα γράφουμε $x_n \to x$ ή

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x.$$

Εντελώς ανάλογα με την περίπτωση των πραγματικών αριθμών, μπορούμε να ορίσουμε σε κάθε μετρικό χώρο την έννοια της ακολουθίας Cauchy:

Ορισμός 3. Έστω (M, d) μετρικός χώρος. Ονομάζουμε *ακολουθία Cauchy* μια ακολουθία $\{x_n\}$ σημείων του M με την εξής ιδιότητα: για κάθε $\varepsilon > 0$ να υπάρχει φυσικός αριθμός $n_0(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ τέτοιος ώστε για κάθε $m, n \geq n_0$ να ισχύει ότι $d(x_m, x_n) < \varepsilon$.

Κάθε συγκλίνουσα ακολουθία είναι και ακολουθία Cauchy διότι σε κάθε ακολουθία που συγκλίνει, δηλαδή σε κάθε ακολουθία που οι όροι της τείνουν σε κάποιο όριο, αναπόφευκτα οι όροι της θα πλησιάζουν και μεταξύ τους. *Είναι κρίσιμο να καταννοήσουμε πως το αντίστροφο δεν ισχύει πάντα.*

Για παράδειγμα εάν $M = (0, 1]$, τότε η ακολουθία $x_n = 1/n$ είναι Cauchy αλλά όχι συγκλίνουσα διότι το 0 (που είναι το υποτιθέμενο όριό της) δεν ανήκει στο M. Αυτό μας δίδει το κίνητρο για τον εξής σημαντικό ορισμό:

Ορισμός 4. Ένας μετρικός χώρος (M, d) λέγεται *πλήρης* εάν κάθε ακολουθία Cauchy συγκλίνει στο M.

Βλέπουμε λοιπόν πως πολλά στοιχεία από την πραγματική ανάλυση, όπως οι έννοιες του ορίου, της συνέχειας κλπ μπορούν άμεσα να γενικευθούν σε τυ-

χαίους μετρικούς χώρους. Αρκετά όμως με την ανάλυση, στη συνέχεια θα στρέψουμε την προσοχή μας στην άλγεβρα.

Γνωρίζουμε τον ορισμό του *διανυσματικού ή γραμμικού χώρου* από την γραμμική άλγεβρα.

Ορισμός 5. *Γραμμικός χώρος με νόρμα* $(N, ||.||)$ είναι ένας γραμμικός χώρος N (με σώμα το $\mathbb{C}$) εφοδιασμένος με μια απεικόνιση

$$||.|| : N \to \mathbb{R}_+$$

η οποία σε κάθε διάνυσμα $x \in N$ αντιστοιχεί έναν μη - αρνητικό πραγματικό αριθμό που θα συμβολίζεται με $||x||$ και λέγεται *νόρμα του* x και που ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες:
1. $||x|| \geq 0$ και $||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$,
2. $||x + y|| \leq ||x|| + ||y||$,
3. $||\lambda x|| = |\lambda|||x||$, όπου στα παραπάνω $x, y \in N$, $\lambda \in \mathbb{C}$ και $|\lambda| \in \mathbb{R}_+$ το μέτρο του μιγαδικού αριθμού λ.

Παραδείγματα γραμμικών χώρων με νόρμα αποτελούν το $(\mathbb{R}, |.|)$ εφοδιασμένο με την γνωστή απόλυτη τιμή, το $(\mathbb{C}, |.|)$ εφοδιασμένο με το γνωστό μέτρο των μιγαδικών αριθμών καθώς και το $(\mathbb{R}^3, |.|)$ εφοδιασμένο με το γνωστό μέτρο (μήκος) των διανυσμάτων: εάν ένα διάνυσμα $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ έχει καρτεσιανές συντεταγμένες $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$, τότε ως γνωστόν το μέτρο του είναι

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}.$$

Είναι απλό να επιβεβαιωθεί πως ένας γραμμικός χώρος με νόρμα αποτελεί ταυτόχρονα και μετρικό χώρο με μετρική που ορίζεται μέσω της νόρμας:

$$d(x, y) := ||x - y||,$$

κάτι που ισχύει και στους πραγματικούς και μιγαδικούς αριθμούς όπως υπενθυμίσαμε παραπάνω.

Συνδυάζοντας αναλυτικές και αλγεβρικές ιδιότητες έχουμε τον παρακάτω ορισμό:

Ορισμός 6. Ένας γραμμικός χώρος με νόρμα που είναι πλήρης ονομάζεται *χώρος Banach* (Μπανάχ).

Για να φτάουμε τελικά στο ποθούμενο, τον ορισμό του χώρου Hilbert, υπενθυμίζουμε από την γραμμική άλγεβρα (συνιστούμε μια επανάληψη των πραγματικών και μιγαδικών διγραμμικών μορφών και του εσωτερικού γινομένου από την γραμμική άλγεβρα), ότι η ύπαρξη εσωτερικού γινομένου σε έναν γραμμικό χώρο μας επιτρέπει τον ορισμό της έννοιας της *νόρμας (μήκους ή μέτρου)* ενός διανύσματος

$$||x|| := \sqrt{< x|x >},$$

τον ορισμό της *απόστασης* μεταξύ δύο διανυσμάτων

$$d(x, y) := \sqrt{< x - y|x - y >},$$

αλλά και τον ορισμό της έννοιας της *καθετότητας* μεταξύ δύο διανυσμάτων: δύο διανύσματα x, y είναι κάθετα εάν το εσωτερικό τους γινόμενο είναι ίσο με μηδέν

$$x \perp y \Leftrightarrow < x|y >= 0.$$

Σημείωση 1: Στην φυσική συνήθως υιοθετείται ο συμβολισμός του Dirac για το εσωτερικό γινόμενο

$$< x|y >$$

όπου το αριστερό διάνυσμα $< x|$ λέγεται bra και το δεξί διάνυσμα $|y >$ λέγεται ket. Το ket ανήκει στον γραμμικό χώρο που είναι εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο ενώ το bra ανήκει στον *δυϊκό χώρο*. Αυτόν το συμβολισμό θα ακολουθήσουμε στις σημειώσεις αυτές.

Ορισμός 7. *Χώρος Hilbert* H είναι ένας πλήρης, μιγαδικός γραμμικός χώρος με νόρμα, (δηλαδή ένας χώρος Banach), του οποίου η νόρμα προκύπτει από ένα *εσωτερικό γινόμενο*, δηλαδή ο χώρος H είναι εφοδιασμένος με μια μιγαδική συνάρτηση

$$< | >: H \times H \to \mathbb{C}$$

που ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες (στα παρακάτω $x, y, z \in H$ και $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$):
(α). $< \lambda x + \mu y|z >= \lambda < x|z > +\mu < y|z >$, δηλαδή το εσωτερικό γινόμενο είναι γραμμικό στην αριστερή μεταβλητή,
(β). $< x|y >=< y|x >^*$, δηλαδή το εσωτερικό γινόμενο δεν είναι μεταθετικό (συμμετρική διγραμμική μορφή) αλλά η εναλλαγή στην σειρά των παραγόντων δίδει το μιγαδικό συζυγές (που το συμβολίζουμε με αστερίσκο),
(γ). $< x|x >= ||x||^2$.

Σημείωση 2: Εάν από τον ορισμό 7 παραλειφθεί η συνθήκη της πληρότητας ο χώρος λέγεται *προ - Χίλμπερτ*.

Παραδείγματα:

1. Ο χώρος $\mathbb{C}^n$ (πεπερασμένης διάστασης) με εσωτερικό γινόμενο που ορίζεται ως εξής: αν $x \in \mathbb{C}^n$ με $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$, και $y \in \mathbb{C}^n$ με $y = (y_1, y_2, ..., y_n)$, τότε

$$< x|y >= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i^*.$$

2. Ο χώρος l_2 (άπειρης διάστασης) που αποτελείται από τις συγκλίνουσες μιγαδικές ακολουθίες, δηλαδή από τις ακολουθίες $x_n : \mathbb{N} \to \mathbb{C}$ με την ιδιότητα

$$\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2 < \infty$$

όπου το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως εξής: αν $x \in l_2$ με $x = (x_1, x_2, ..., x_n, ...)$, και $y \in l_2$ με $y = (y_1, y_2, ..., y_n, ...)$, τότε

$$< x|y >= \sum_{i=1}^{\infty} x_i y_i^*.$$

Το γεγονός ότι η παραπάνω σειρά συγκλίνει και άρα το αποτέλεσμα είναι μιγαδικός αριθμός προκύπτει από την ανισότητα Cauchy (πλήρης χώρος).

3. Στην κβαντομηχανική ο χώρος στον οποίον ανήκουν οι κυματοσυναρτήσεις είναι ο *μιγαδικός χώρος Hilbert άπειρης διάστασης*, (βλέπε παρακάτω για την διάσταση), των *τετραγωνικά ολοκληρώσιμων (κατά Lebesgue) συναρτήσεων* με πεδίο ορισμού το $\mathbb{R}$ (ή κάποιο κλειστό διάστημα $[a, b] \subset \mathbb{R}$), που συμβολίζεται με $L_2(\mathbb{R})$ (ή κάποιο υποσύνολο αυτού $L_2([a, b])$), και με πεδίο τιμών τους μιγαδικούς αριθμούς.
Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως

$$< f|g >:= \int f^*(x)g(x)dx.$$

Ισχύει προφανώς ότι

$$f(x) \in L_2([a, b]) \Leftrightarrow \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$$

Σχόλια:

1. Υπενθυμίζουμε από την γραμμική άλγεβρα το παράδειγμα του διανυσματικού χώρου απείρων διαστάσεων $C(\mathbb{R})$ [ή $C([a, b])$] των συνεχών συναρτήσεων με πεδίο ορισμού το $\mathbb{R}$ (ή κάποιο διάστημα $[a, b] \subset \mathbb{R}$) και πεδίο τιμών το $\mathbb{C}$. Αυτός

ο χώρος μπορεί να εφοδιασθεί με εσωτερικό γινόμενο της μορφής που είδαμε παραπάνω

$$< f|g >:= \int f^*(x)g(x)dx.$$

Δεν είναι όμως χώρος Χίλμπερτ διότι δεν είναι πλήρης (συνεπώς είναι χώρος προ - Χίλμπερτ). Για να γίνει χώρος Χίλμπερτ θα πρέπει να συμπληρωθεί με τις ασυνεχείς συναρτήσεις με πεπερασμένα πηδήματα. Τότε όμως εμφανίζεται πρόβλημα στον ορισμό του εσωτερικού γινομένου, οι συναρτήσεις δεν είναι ολοκληρώσιμες κατά Ρήμαν. Για αυτό θεωρούμε το ολοκλήρωμα κατά Lebesgue (Λεμπέκ) και έτσι καταλήγουμε στον χώρο $L_2(\mathbb{R})$ που περιγράψαμε στο παράδειγμα **3** παραπάνω Το Θεώρημα Fischer-Riesz αποδεικνύει ότι ο χώρος αυτός είναι πλήρης.
2. Δεν θα μας απασχολήσουν προβλήματα θεωρίας μέτρου και αν το ολοκλήρωμα είναι Riemann ή Lebesgue, θα θεωρούμε "λογικές" συναρτήσεις ως κυματοσυναρτήσεις έτσι ώστε να ορίζεται το ολοκλήρωμα Riemann.
3. Στην φυσική ορολογία είθισται η συζυγής ποσότητα στον ορισμό του εσωτερικού γινομένου να είναι ο αριστερός παράγοντας και όχι ο δεξιός (παραδείγματα 1,2 και 3 παραπάνω).
4. Μπορούν φυσικά να ορισθούν και πραγματικοί χώροι Χίλμπερτ αλλά δεν έχουν πολλές εφαρμογές.

Μια κομβική έννοια στους διανυσματικούς χώρους είναι η έννοια της *βάσης*. Από αυτήν προκύπτει και η έννοια της *διάστασης*. Η ύπαρξη εσωτερικού γινομένου μας επιτρέπει επιπροσθέτως να ορίσουμε *ορθοκανονικές βάσεις*.

Ορισμός 8. Μια *ορθοκανονική βάση* σε έναν χώρο Χίλμπερτ είναι μια συλλογή διανυσμάτων $\{e_k\}_{k\in\mathbb{Z}}$ τέτοιων ώστε:
(α). να έχουν όλα μέτρο 1, $||e_k|| = 1 \forall k \in \mathbb{Z}$,
(β). να είναι ανά δύο κάθετα μεταξύ τους, δηλαδή $< e_i|e_j >= \delta_{ij}$,
(γ). το σύνολο των γραμμικών συνδυασμών της συλλογής αυτής να είναι *πυκνό* μέσα στο H, δηλαδή κάθε διάνυσμα $x \in H$ να μπορεί να γραφεί ως το όριο μιας άπειρης σειράς μελών της βάσης. Η συνθήκη ορθογωνιότητας εγγυάται πως η γραφή αυτή είναι μοναδική.

Παρατηρήσεις:
1. Φυσικά υπάρχει και η έννοια της απλής βάσης στους χώρους Χίλμπερτ που ουσιαστικά είναι η συνθήκη **γ** του παραπάνω ορισμού. Στην πράξη χρησιμοποιούνται συνήθως ορθοκανονικές βάσεις.
2. Συχνά απαιτείται να ελέγξουμε εάν μια συλλογή ορθοκανονικών διανυσμάτων $\{e_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ αποτελούν βάση του χώρου Χίλμπερτ. Ουσιαστικά δηλαδή θα

πρέπει να ελεγχθεί η συνθήκη $\boldsymbol{\gamma}$. Για να συμβαίνει αυτό θα πρέπει για το τυχαίο διάνυσμα x του χώρου Χίλμπερτ να ισχύει η λεγόμενη *ισότητα Parseval*

$$< x|x >= \sum_{i=1}^{\infty} < x|e_i >< e_i|x > .$$

Για τυχαίες συλλογές διανυσμάτων που δεν αποτελούν βάση ισχύει η λεγόμενη *ανισότητα Bessel*:

$$< x|x >\geq \sum_{i=1}^{\infty} < x|e_i >< e_i|x > .$$

3. Στην κβαντομηχανική χρησιμοποιούνται χώροι Χίλμπερτ *διαχωρίσιμοι και άπειρης διάστασης*, (ορισμός Kolmogorov), δηλαδή χώροι με ορθοκανονικές βάσεις που αποτελούνται από άπειρα αλλά *αριθμήσιμα* σε πλήθος διανύσματα. Υπενθυμίζουμε πως ένα σύνολο λέγεται *αριθμήσιμο* αν έχει πληθάριθμο άπειρο μεν αλλά ίσο με τον πληθάριθμο του $\mathbb{N}$ ή του $\mathbb{Z}$, ενώ λέγεται *υπεραριθμήσιμο* αν έχει πληθάριθμο και πάλι άπειρο αλλά ίσο με τον πληθάριθμο του $\mathbb{R}$.
3. Ουσιαστικά υπάρχει *μοναδικός* διαχωρίσιμος απειροδιάστατος μιγαδικός χώρος Χίλμπερτ, κάθε άλλος είναι ισόμορφος με αυτόν, με την ίδια έννοια που υπάρχει για παράδειγμα μοναδικός πραγματικός διανυσματικός χώρος διάστασης n που είναι ο $\mathbb{R}^n$, κάθε άλλος είναι ισόμορφος με αυτόν.

Υπενθυμίζουμε από την γραμμική άλγεβρα πως ένα τυχαίο σύστημα διανυσμάτων (το οποίο είτε μπορεί να αποτελεί και βάση είτε όχι), μπορεί να μετατραπεί σε ορθοκανονικό μέσω της μεθόδου ορθογωνιοποίησης Gram-Schmidt. Αυτό ισχύει και στους χώρους Χίλμπερτ.

Παράδειγμα: Η συνήθης ορθοκανονική βάση στον χώρο Χίλμπερτ της κβαντομηχανικής $L_2([0,1])$ είναι η $\{f_n(x)\}_{n\in\mathbb{Z}}$ με

$$f_n(x) = e^{i2\pi nx}.$$

Αναφέρουμε επίσης και την ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου που είναι γνωστή ως *ανισότητα Schwartz*:
Πρόταση 1. Σε ένα χώρο Χίλμπερτ ισχύει ότι

$$||\psi|| \cdot ||\phi|| \geq | < \psi|\phi > |,$$

με την ισότητα να ισχύει για συγγραμμικά διανύσματα, δηλαδή εάν $\phi = c\psi$, με $c \in \mathbb{C}$.

Η ιδιότητα αυτή αποτελεί γενίκευση αυτού που ισχύει και στα διανύσματα του χώρου

$$|\vec{a}||\vec{b}| \geq |\vec{a} \cdot \vec{b}|,$$

διότι

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}||\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b})$$

και προφανώς $|\cos(\vec{a}, \vec{b})| \leq 1$.

Κλείνουμε την σύντομη αυτή αναφορά στος χώρους Χίλμπερτ με το εξής σχόλιο: για να μπορούμε να γράψουμε

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} f_i e_i,$$

για κάποια συλλογή ορθοκανονικών (ή και όχι) διανυσμάτων $\{e_i\}_{i \in \mathbb{N}}$, όπου οι $f_i =< e_i | f >$ λέγονται *συντελεστές Fourier*, θα πρέπει τα $\{e_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ να αποτελούν βάση και επίσης θα πρέπει να ισχύει

$$\sum_{i=1}^{\infty} |f_i|^2 < \infty.$$

5.1.2 Γραμμικοί Τελεστές

Στην γραμμική άλγεβρα μελετήσαμε διανυσματικούς χώρους πεπερασμένης διάστασης και γραμμικές απεικονίσεις μεταξύ αυτών. Με την ίδια λογική, έχουμε τον παρακάτω ορισμό:

Ορισμός 1. Εάν H είναι ένας μιγαδικός απειροδιάστατος διαχωρίσιμος χώρος Χίλμπερτ, μια απεικόνιση

$$T : H \to H$$

θα λέγεται *γραμμική* εάν ικανοποιείται η εξής ιδιότητα:

$$T(\lambda f + \mu g) = \lambda T(f) + \mu T(g),$$

για κάθε $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ και $f, g \in H$.

Ο ορισμός αυτός ουσιαστικά είναι ο ίδιος με τον ορισμό των γραμμικών απεικονίσεων μεταξύ διανυσματικών χώρων πεπερασμένης διάστασης που μελετήσαμε στην γραμμική άλγεβρα. Εξ' άλλου ένας χώρος Χίλμπερτ είναι και γραμμικός χώρος. *Είθισται όμως οι γραμμικές απεικονίσεις μεταξύ χώρων Χίλμπερτ*

να λέγονται γραμμικοί τελεστές.

Σημείωση 1: Προφανώς υπάρχουν και μη γραμμικοί τελεστές αλλά δεν θα σχοληθούμε στο παρόν μάθημα με αυτούς.

Παραδείγματα γραμμικών τελεστών στον χώρο Χίλμπερτ $L_2([0,1])$:
1. *Ο πολλαπλασιαστικός τελεστής*: Κάθε βαθμωτή ποσότητα $\lambda \in \mathbb{C}$ αλλά και κάθε συνάρτηση $f \in H$ μπορεί τετριμμένα να θεωρηθεί πως ορίζει έναν πολλαπλασιαστικό τελεστή που είναι γραμμικός:

$$\lambda : H \to H, \lambda(f) = \lambda \cdot f,$$

και

$$f : H \to H, f(g) = f \cdot g.$$

2. *Η (μερική) παράγωγος* αποτελεί γραμμικό τελεστή:

$$\frac{d}{dx} : H \to H, \frac{df}{dx} = f'(x).$$

3. *Το αόριστο ολοκλήρωμα (αντιπαράγωγος)* αλλά και το παρακάτω ολοκλήρωμα ορίζουν επίσης έναν γραμμικό τελεστή:

$$T = \int_0^x dt : H \to H, T(f) = g(x) = \int_0^x f(t)dt, x \in [0,1].$$

Οι *αλγεβρικές ιδιότητες* των γραμμικών τελεστών μοιάζουν πολύ με αυτές των γραμμικών απεικονίσεων και των τετραγωνικών πινάκων (υπενθυμίζουμε ότι μια γραμμική απεικόνιση $f : V \to V$ με την επιλογή κάποιας βάσης αναπαρίσταται μέσω ενός *τετραγωνικού* $n \times n$ πίνακα όπου $n = \dim V$). Πιο συγκεκριμένα μπορούμε να ορίσουμε τις παρακάτω πράξεις μεταξύ γραμμικών τελεστών:
1.*Πρόσθεση:* Δύο γραμμικοί τελστές μπορούν να προστεθούν και το αποτέλεσμα είναι ένας επίσης γραμμικός τελεστής:

$$(T_1 + T_2)(f) = T_1(f) + T_2(f),$$

για κάθε $f \in H$.
2.*Βαθμωτός πολλαπλασιασμός:* Ο πολλαπλασιασμός ενός γραμμικού τελεστή επί έναν μιγαδικό αριθμό δίδει πάλι γραμμικό τελεστή:

$$(\lambda T)(f) = \lambda T(f),$$

για κάθε $f \in H$ και για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$.
3.*Πολλαπλασιασμός:* Δύο γραμμικοί τελστές μπορούν να πολλαπλασιασθούν (συντεθούν) και το αποτέλεσμα είναι ένας επίσης γραμμικός τελεστής:

$$(T_1 \cdot T_2)(f) = T_1 \cdot [T_2(f)],$$

για κάθε $f \in H$.

Προσοχή! Όπως και στην περίπτωση των τετραγωνικών πινάκων (και των γραμμικών απεικονίσεων), *ο πολλαπλασιασμός μεταξύ τελεστών δεν είναι αντιμεταθετικός*. Αυτό παίζει κεφαλαιώδη ρόλο στην κβαντομηχανική.

Επίσης ορίζεται ο *μηδενικός τελεστής*, (συμβολίζεται με μηδέν 0), που απεικονίζει κάθε διάνυσμα του χώρου Χίλμπερτ στο μηδενικό διάνυσμα καθώς και ο *ταυτοτικός τελεστής* (συμβολίζεται με ένα 1), που απεικονίζει κάθε διάνυσμα στον εαυτό του. Τέλος, εάν ένας γραμμικός τελεστής T είναι ένα προς ένα και επί, τότε ορίζεται και ο *αντίστροφός* του T^{-1}, με την ιδιότητα

$$T \cdot T^{-1} = T^{-1} \cdot T = 1.$$

Ο αντίστροφος τελεστής, εάν υπάρχει, είναι μοναδικός. Επίσης με προφανή τρόπο ορίζεται και ο *αντίθετος* τελεστής $-T$ ενός γραμμικού τελεστή T που είναι μοναδικός. *Το σύνολο των γραμμικών τελεστών σε έναν χώρο Χίλμπερτ H συμβολίζεται με $L(H)$.*

Σε πλήρη αντιστοιχία με την περίπτωση των γραμμικών απεικονίσεων (και των τετραγωνικών πινάκων) λοιπόν, έχουμε την παρακάτω πρόταση:

Πρόταση 1. Το σύνολο $L(H)$ των γραμμικών τελεστών ενός χώρου Χίλμπερτ H, εφοδιασμένο με τις τρεις παραπάνω πράξεις του βαθμωτού πολλαπλασιασμού, της πρόσθεσης και του πολλαπλασιασμού των γραμμικών τελεστών, αποτελεί μη - μεταθετική (δηλαδή στον πολλαπλασιασμό τελεστών δεν ισχύει η αντιμεταθετική ιδιότητα) *μιγαδική γραμμική άλγεβρα*.

Το γεγονός ότι ο πολλαπλασιασμός μεταξύ τελεστών δεν είναι αντιμεταθετικός, μας δίδει την δυνατότητα να ορίσουμε την παρακάτω έννοια που παίζει βασικό ρόλο στην κβαντομηχανική:

Ορισμός 2. Ο *μεταθέτης* δύο γραμμικών τελεστών $A, B \in L(H)$ συμβολίζεται με $[A, B]$ και ορίζεται ως εξής:

$$[A, B] = AB - BA.$$

Θα μπορούσε κανείς να θεωρήσει τον μεταθέτη ως μια επιπλέον εσωτερική πράξη στο σύνολο $L(H)$. *Ο μεταθέτης ουσιαστικά μετρά πόσο απέχουν δύο τελεστές από το να αντιμετατίθενται.*

Οι βασικές ιδιότητες των μεταθετών συνοψίζονται στην παρακάτω πρόταση (η απόδειξη είναι εύκολη μέσω του ορισμού 2):

Πρόταση 2. Ο μεταθέτης δύο τελεστών ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες:
α. $[A, A] = 0$
β. $[A, B] = -[B, A]$
γ. $[\lambda A + \mu B, C] = \lambda[A, C] + \mu[B, C]$
δ. $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ (ταυτότητα Jacobi)
ε. $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$, για κάθε $A, B, C \in L(H)$ και για κάθε $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$.

Σημείωση 2: Το σύνολο $L(H)$ εφοδιασμένο με την εσωτερική πράξη του μεταθέτη αποτελεί μια *άλγεβρα Lie* (διότι οι ιδιότητες της πρότασης 2 παραπάνω αποτελούν τον ορισμό μιας άλλης μαθηματικής αλγεβρικής δομής που λέγεται άλγεβρα Lie).

Ο χώρος Χίλμπερτ όμως είναι εφοδιασμένος και με *εσωτερικό γινόμενο*. Αυτό μας δίδει την δυνατότητα να ορίσουμε, σε πλήρη αναλογία με την περίπτωση των πινάκων, τον προσαρτημένο τελεστή $T^\dagger$ του τελεστή T:

Ορισμός 3. Ο *προσαρτημένος (ή συναφής)* τελεστής $T^\dagger$ ενός γραμμικού τελεστή T είναι ένας επίσης γραμμικός τελεστής που ορίζεται ως εξής:

$$< x|Ty >=< T^\dagger x|y >,$$

για κάποια τυχαία διανύσματα $x, y \in H$.

Σημείωση 3: Δεν έχουν όλοι οι γραμμικοί τελεστές συναφή τελεστή. Ο συναφής τελεστής αν υπάρχει είναι μοναδικός.

Θα χρησιμοποιούμε την γραφή $< x|T|y >$ με την σύμβαση πως ο τελεστής μεταξύ των κάθετων γραμμών δρα στο διάνυσμα που βρίσκεται δεξιά του. Προφανώς ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$< x|T|y >=< y|T^\dagger|x >^* .$$

Ορισμός 4. Με ανάλογο τρόπο όπως στους μιγαδικούς τετραγωνικούς πίνακες που είδαμε στην γραμμική άλγεβρα, ορίζονται οι έννοιες του *κανονικού*

($TT^\dagger = T^\dagger T$), *μοναδιακού* ($T^\dagger = T^{-1}$) *και αυτοσυναφή (ή αυτοπροσηρτημένου ή Ερμιτιανού)* ($T = T^\dagger$) τελεστή.

Ορισμός 5. Στους γραμμικούς τελεστές ορίζονται επίσης και οι έννοιες των *ιδιοτιμών* και των *ιδιοσυναρτήσεων (ή ιδιοδιανυσμάτων)*, που βρίσκονται από την επίλυση της *εξίσωσης ιδιοτιμών* του τελεστή:

$$T|f>=\lambda|f> .$$

Το πρόβλημα της εύρεσης των ιδιοτιμών διαφόρων τελεστών παίζει κομβικό ρόλο στην κβαντομηχανική. Σε αντίθεση όμως με τα όσα είδαμε στους πίνακες, υπάρχουν γραμμικοί τελεστές που εκτός από διακριτό έχουν και συνεχές φάσμα.

Ένα θεμελιώδες ερώτημα της θεωρίας των χώρων Χίλμπερτ (και της συναρτησιακής ανάλυσης γενικότερα), είναι το εξής: *ποιές συνθήκες πρέπει να ικανοποιεί ένας γραμμικός τελεστής T έτσι ώστε να υπάρχει ο συναφής τελεστής $T^\dagger$ αυτού;*

Για να απαντήσουμε στο ερώτημα αυτό, θα πρέπει να ασχοληθούμε και με τις *αναλυτικές* ιδιότητες του χώρου $L(H)$ διότι μέχρι στιγμής μελετήσαμε τις βασικές αλγεβρικές ιδιότητες αυτού.

Ορισμός 6. Ένας γραμμικός τελεστής $T : H \to H$ λέγεται *συνεχής* εάν ικανοποιεί την εξής συνθήκη: εάν για μια ακολουθία διανυσμάτων $\{x_n\}$ του H ισχύει ότι

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x,$$

τότε θα πρέπει να ισχύει και ότι

$$\lim_{n\to\infty} T(x_n) = T(x).$$

Ορισμός 7. Ένας συνεχής γραμμικός τελεστής $T \in L(H)$ λέγεται *φραγμένος* εάν υπάρχει κάποιος πεπερασμένος μη - αρνητικός πραγματικός αριθμός $K \in \mathbb{R}_+$ τέτοιος ώστε

$$||T(x)|| \leq K||x||,$$

όπου προφανώς $||T(x)|| =< T(x)|T(x) >$ και $||x|| =< x|x >$.

Έχουμε λοιπόν το παρακάτω βασικό θεώρημα:

Θεώρημα 1. Κάθε φραγμένος συνεχής γραμμικός τελεστής έχει συναφή.

Δυστυχώς το παραπάνω θεώρημα δίδει μια ικανή αλλά όχι αναγκαία συνθήκη για την ύπαρξη συναφή τελεστή. Επιπρόσθετα, στην κβαντομηχανική οι τελεστές είναι συνήθως μη - φραγμένοι.

Για λόγους πληρότητας αναφέρουμε και το εξής (αν και λόγω των παραπάνω δεν έχει και μεγάλη χρησιμότητα στην κβαντομηχανική): το σύνολο όλων των φραγμένων συνεχών γραμμικών τελεστών συμβολίζεται με $B(H)$. Προφανώς $B(H) \subset L(H)$.

Ορισμός 8. Στο σύνολο $B(H)$ μπορούμε να ορίσουμε μια νόρμα ως εξής:

$$||T|| = sup\{||T(x)|| : ||x|| \leq 1\}.$$

Οπότε έχουμε το παρακάτω θεώρημα, βασικό στην συναρτησιακή ανάλυση αλλά όχι τόσο χρήσιμο στην κβαντομηχανική:

Θεώρημα 2. Το σύνολο των φραγμένων συνεχών γραμμικών τελεστών $B(H)$ ενός χώρου Χίλμπερτ εφοδιασμένο με την νόρμα του ορισμού 8 αποτελεί χώρο Banach.

Οι βασικές ιδιότητες του συναφή τελεστή συνοψίζονται στην παρακάτω πρόταση:

Πρόταση 3. Για τους συναφείς τελεστές ισχύουν οι παρακάτω βασικές ιδιότητες:
α. $(A^\dagger)^\dagger = A$
β. $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$
γ. $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
δ. $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$, για κάθε $A, B \in L(H)$ και για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$.

Τέλος αναφέρουμε ένα βασικό θεωρήμα που το είδαμε στην γραμμική άλγεβρα για μιγαδικούς πίνακες και που ισχύει και για την περίπτωση των γραμμικών τελεστών:

Θεώρημα 3. Εάν A κανονικός τελεστής, τότε ο A και ο συναφής αυτού $A^\dagger$ έχουν τα ίδια ιδιοδιανύσματα και συζυγείς ιδιοτιμές. Επιπλέον τα ιδιοδιανύσματα του κανονικού τελεστή A που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι μεταξύ τους ορθογώνια.

Πόρισμα του παραπάνω θεωρήματος είναι πως οι Ερμιτιανοί τελεστές έχουν πραγματικές ιδιοτιμές, κάτι που παίζει εξέχοντα ρόλο στην κβαντομηχανική.

Επειδή στην κβαντομηχανική χρησιμοποιούμε *αποκλειστικά Ερμιτιανούς τελεστές* για την περιγραφή των φυσικών μεγεθών, είναι χρήσιμο να ανακεφαλαιώσουμε τις βασικές τους ιδιότητες, οι οποίες αποτελούν γενικεύσεις αντίστοιχων προτάσεων που ισχύουν για Ερμιτιανούς πίνακες σε μιγαδικούς διανυσματικούς χώρους πεπερασμένης διάστασης εφοδιασμένους με εσωτερικό γινόμενο:

• *Οι Ερμιτιανοί τελεστές έχουν πραγματικές ιδιοτιμές και ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις.* Αποτέλεσμα αυτού είναι ότι οι Ερμιτιανοί τελεστές έχουν πραγματικές μέσες τιμές (βλέπε παρακάτω για τον ορισμό της μέσης τιμής ενός τελεστή).

• *Αν F είναι μια πραγματική συνάρτηση, τότε αν A Ερμιτιανός τελεστής, τότε και ο $F(A)$ είναι επίσης Ερμιτιανός τελεστής.* Η ιδιότητα αυτή πιο συγκεκριμένα σημαίνει ότι το άθροισμα Ερμιτιανών τελεστών, το βαθμωτό γινόμενο *πραγματικού* αριθμού επί Ερμιτιανό τελεστή καθώς και το γινόμενο *μετατιθέμενων* Ερμιτιανών τελεστών, αποτελούν επίσης Ερμιτιανούς τελεστές.

Τα πράγματα όμως δεν είναι τόσο απλά: υπάρχουν και σημαντικές διαφορές μεταξύ Ερμιτιανών πινάκων και Ερμιτιανών τελεστών (περίπτωση πεπερασμένης και άπειρης διάστασης):

• *Οι Ερμιτιανοί τελεστές μπορεί να έχουν διακριτό και συνεχές φάσμα* (σύνολο ιδιοτιμών). Η περίπτωση συνεχούς φάσματος δεν εμφανίζεται φυσικά στους πίνακες και στους διανυσματικούς χώρους πεπερασμένης διάστασης.

• *Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός Ερμιτιανού τελεστή που έχει* διακριτό φάσμα *αποτελούν ορθοκανονική βάση του χώρου Χίλμπερτ.*

Οι μοναδιακοί τελεστές διατηρούν το μιγαδικό εσωτερικό γινόμενο, συνεπώς ουσιαστικά αποτελούν γενίκευση των στροφών των διανυσμάτων στο χώρο. Οι βασικές τους ιδιότητες είναι οι εξής:
(α). το γινόμενο μοναδιακών τελεστών αποτελεί μοναδιακό τελεστή,
(β). ο αντίστροφος και ο συζυγής ενός μοναδιακού τελεστή είναι επίσης μοναδιακοί τελεστές,
(γ). οι ιδιοτιμές ενός μοναδιακού τελεστή είναι εν γένει μιγαδικοί αριθμοί με μέτρο 1.

5.1.3 Αναπαραστάσεις Τελεστών Πεπερασμένης Διάστασης

Με την επιλογή μιας βάσης στον χώρο Χίλμπερτ και με την ίδια συνταγή όπως στις γραμμικές απεικονίσεις, ένας γραμμικός τελεστής μπορεί να αναπα-

ρασταθεί με μιγαδικό πίνακα. Αυτή όμως η αναπαράσταση συνήθως δεν είναι ιδιαίτερα χρήσιμη πρακτικά διότι επειδή ο χώρος Χίλμπερτ στην κβαντομηχανική έχει άπειρη διάσταση, θα καταλήξουμε να πάρουμε έναν πίνακα $\infty \times \infty$. Υπάρχουν όμως περιπτώσεις που για κάποια προβλήματα ο χώρος Χίλμπερτ περιορίζεται σε κάποιον γραμμικό υπόχωρο πεπερασμένης διάστασης και σε αυτήν την περίπτωση η αναπαράσταση ενός γραμμικού τελεστή με πίνακα είναι χρήσιμη και οι προτάσεις είναι ίδιες με αυτές που είδαμε για τετραγωνικούς μιγαδικούς πίνακες όσον αφορά την διαγωνιοποίηση, τις ιδιοτιμές, κλπ.

Εάν λοιπόν V είναι ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος εφοδιασμένος με εσωτερικό γινόμενο $< | >$, με $\dim_{\mathbb{C}} V = n$, και $\{\psi_i\}_{i=1,2,\ldots,n}$ μια βάση αυτού, τότε ένας γραμμικός τελεστής A, ως προς τη συγκεκριμένη βάση, αναπαρίσταται ως μιγαδικός τετραγωνικός πίνακας $n \times n$ (μήτρα), με στοιχεία

$$A_{ij} =< \psi_i|A|\psi_j > .$$

Αν επιλέξουμε μια άλλη βάση θα πάρουμε αναπαράσταση του τελεστή με πίνακα *όμοιο* με τον αρχικό.

Οι μιγαδικοί πίνακες έχουν πεπερσμένος πλήθος ιδιοτιμών, ίσο με την διάσταση του διανυσματικού χώρου. Μπορεί να μην διαγωνιοποιούνται αλλά σίγουρα τριγωνοποιούνται, οπότε το ίχνος είναι ίσο με το άθροισμά των ιδιοτιμών και η ορίζουσα είναι ίση με το γινόμενο των ιδιοτιμών. Ισχύει το θεώρημα Caley - Hamilton.

Ο συναφής πίνακας υπάρχει πάντα και είναι ίσος με τον αναστροφοσυζυγή του αρχικού.

Οι Ερμιτιανοί πίνακες είναι αυτοί που ο αναστροφοσυζυγής είναι ίσος με τον ίδιο τον πίνακα, έχουν πραγματικές ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα αποτελούν ορθοκανονική βάση του V.

Επίσης από την γραμμική άλγεβρα υπενθυμίζουμε την πρόταση που λέει ότι δύο διαγωνίσιμοι πίνακες για να διαγωνιοποιούνται με κοινό σύστημα ιδιοδιανυσμάτων θα πρέπει να μετατίθενται.

5.1.4 Μαθηματικές Κατανομές και η Συνάρτηση δ του Dirac

Όταν ο μέγας P.A.M. Dirac στην δεκαετία του 1920 όντας στο πανεπιστήμιο του Κέιμπριτζ περιέγραφε τις παράξενες ιδιότητες της υποθετικής αυτής

συνάρτησης που αργότερα πήρε το όνομά του, (συνάρτηση δ του Dirac), αντιμετωπίσθηκε με πολύ σκεπτικισμό, αν όχι και με κάποια δόση ειρωνίας, από την τότε μαθηματική επιστημονική κοινότητα. Το 1935 ο S. Sobolev εισήγαγε την έννοια της *γενικευμένης συνάρτησης* και τελικά το 1949 ο L. Schwartz παρουσίασε τα βασικά στοιχεία της *θεωρίας των γενικευμένων συναρτήσεων ή κατανομών (generalised functions or distributions)*. [Σημειώνουμε εδώ πως ο όρος κατανομή στην συναρτησιακή ανάλυση δεν ταυτίζεται με την έννοια της κατανομής της θεωρίας πιθανοτήτων και της στατιστικής, οι δεύτερες είναι κοινές συναρτήσεις]. Έτσι η συνάρτηση δ του Dirac βρήκε την κατάλληλη μαθηματική θεωρία για να ενταχθεί περίπου 30 χρόνια μετά!

Η βασική ιδέα της έννοιας της κατανομής ή γενικευμένης συνάρτησης είναι να γενικεύσουμε τις συναρτήσεις συμπεριλαμβάνοντας και αφηρημένα γραμμικά συναρτησοειδή σε κάποιο χώρο καλά συμπεριφερόμενων δοκιμαστικών συναρτήσεων (test functions). Στη συνέχεια, οι τελεστές δρουν στις κατανομές μέσω των δοκιμαστικών συναρτήσεων.

Για παράδειγμα, εάν $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ μια ολοκληρώσιμη συνάρτηση και $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ μια λεία (δηλαδή άπειρα διαφορίσιμη) συνάρτηση με συμπαγές υποστήριγμα (θα εξηγήσουμε παρακάτω), τότε θέτουμε

$$< f, \phi >:= \int_{\mathbb{R}} f\phi dx.$$

Το αποτέλεσμα είναι ένας πραγματικός αριθμός ο οποίος εξαρτάται γραμμικά και με συνεχή τρόπο από την συνάρτηση ϕ. Συνεπώς μπορούμε να θεωρήσουμε ότι συνάρτηση f ορίζει ένα συνεχές γραμμικό συναρτησοειδές στο χώρο που αποτελείται από τις δοκιμαστικές συναρτήσεις ϕ. Ο όρος συναρτησοειδές στα μαθηματικά γενικά σημαίνει απεικόνιση με πεδίο ορισμού κάποιο συναρτησιακό χώρο (ενώ συνάρτηση σημαίνει απεικόνιση με πεδίο ορισμού κάποιο αριθμοσύνολο).

Οι κατανομές μπορούν να *προστεθούν* μεταξύ τους και να *πολλαπλασιαστούν με βαθμωτές ποσότητες*, οπότε συνιστούν *διανυσματικό χώρο*. Ο πολλαπλασιασμός μεταξύ τους είναι προβληματικός.

Επίσης μπορούμε να ορίσουμε και την *παράγωγο* μιας κατανομής ως εξής: θεωρούμε ότι η f που χρησιμοποιήσαμε παραπάνω είναι διαφορίσιμη και ολοκληρώσιμη, οπότε για μια δοκιμαστική συνάρτηση ϕ θα έχουμε

$$\int_{\mathbb{R}} f'\phi dx = -\int_{\mathbb{R}} f\phi' dx,$$

χρησιμοποιώντας τον γνωστό τύπο ολοκλήρωσης κατά παράγοντες. Ο παραπάνω τύπος δηλώνει ότι εάν S μια κατανομή, τότε η παράγωγος αυτής S' θα ορίζεται από τη σχέση

$$< S', \phi >= - < S, \phi' > .$$

Εάν η δοκιμαστική συνάρτηση είναι λεία, τότε η κατανομή είναι επίσης άπειρες φορές διαφορίσιμη.

Το κλασικό παράδειγμα κατανομής είναι η συνάρτηση δ του Dirac, η οποία ορίζεται ως

$$< \delta, \phi >= \phi(0).$$

Ας δούμε τους αυστηρούς ορισμούς (θα θεωρήσουμε ως σώμα το $\mathbb{R}$ και πραγματικές συναρτήσεις αλλά όλοι οι ορισμοί μεταφέρονται εύκολα και στην μιγαδική περίπτωση με σώμα το $\mathbb{C}$ που χρησιμοποιείται στην κβαντομηχανική). Εξηγούμε πρώτα το σύνολο των δοκιμαστικών συναρτήσεων:

Ορισμός 1. Μια συνάρτηση $\phi : U \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ λέμε ότι έχει *συμπαγές υποστήριγμα* εάν υπάρχει συμπαγές $K \subset U$ (για να μην μπλεχτούμε με τους ακριβείς ορισμούς της τοπολογίας, συμπαγές περίπου σημαίνει με πεπερασμένη έκταση, για παράδειγμα το K είναι ένα διάστημα $[a, b]$ με πεπερασμένη μήκος ίσο με $b - a$), τέτοιο ώστε $\phi(x) = 0 \forall x \in U - K$. Δηλαδή το υποστήριγμα μιας συνάρτησης είναι το τμήμα του πεδίου ορισμού της που η συνάρτηση έχει μη-μηδενικές τιμές. Συμβολίζουμε με $D(U)$ το σύνολο των λείων συναρτήσεων $\phi : U \to \mathbb{R}$ με συμπαγές υποστήριγμα.

Πρόταση 1. Το σύνολο $D(U)$ εφοδιασμένο με την εσωτερική πράξη της γνωστής πρόσθεσης συναρτήσεων και την εξωτερική πράξη του βαθμωτού πολλαπλασιασμού πραγματικού αριθμού επί συνάρτηση συνιστά *πραγματικό διανυσματικό χώρο* (άπειρης διάστασης).

Ορισμός 2. *Ο δυϊκός χώρος του διανυσματικού χώρου $D(U)$ συμβολίζεται με $D'(U)$ και λέγεται χώρος των κατανομών του U.* (Για την ακρίβεια απαιτείται να ορίσουμε και μια τοπολογία στον $D(U)$ και να πάρουμε τις συνεχείς γραμμικές απεικονίσεις $S : D(U) \to \mathbb{R}$ ως στοιχεία του $D'(U)$, συνεπώς ο $D'(U)$ δεν ταυτίζεται ακριβώς με τον αλγεβρικά δυϊκό χώρο του $D(U)$ αλλά δεν θα σχοληθούμε με όλες αυτές τις λεπτομέρειες στο παρόν μάθημα).

Ορισμός 3. Ορίζεται μια απεικόνιση

$$<, >: D'(U) \times D(U) \to \mathbb{R}$$

μέσω της σχέσης

$$(S_f, \phi) \mapsto < S_f, \phi >= \int_U f\phi dx \in \mathbb{R},$$

όπου f μια ολοκληρώσιμη συνάρτηση $f : U \to \mathbb{R}$ (το σύνολο των ολοκληρώσιμων συναρτήσεων περιέχει το σύνολο των συνεχών συναρτήσεων ως υποσύνολο, το οποίο με τη σειρά του περιέχει το σύνολο των λείων συναρτήσεων επίσης ως υποσύνολο, οπότε το S_f σίγουρα είναι στοιχείο του $D'(U)$ αν η f είναι ολοκληρώσιμη συνάρτηση). Η παραπάνω σχέση μοιάζει πολύ με εσωτερικό γινόμενο αλλά δεν είναι ακριβώς εσωτερικό γινόμενο γιατί περιλαμβάνει τον δυϊκό χώρο $D'(U)$ ως αριστερό παράγοντα. Γνωρίζουμε όμως ότι οι διανυσματικοί χώροι $D(U)$ και $D'(U)$ ως δυϊκοί μεταξύ τους είναι ισόμορφοι.

Ορισμός 4. *Η παράγωγος* S' του S ορίζεται μέσω της σχέσης

$$< S', \phi >= - < S, \phi' >$$

και είναι επίσης στοιχείο του $D'(U)$.

Ορισμός 5. Μια λεία συνάρτηση $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ λέγεται *ταχέως φθίνουσα (rapidly decreasing)*, εάν κάθε τάξης παράγωγος $\phi^{(a)}(x)$ αυτής πολλαπλασιασμένη με οποιαδήποτε πεπερασμένη δύναμη $|x|^b$ του $|x|$ τείνει στο μηδέν για $x \to \infty$, δηλαδή

$$\lim_{x\to\infty} |x|^b \phi^{(a)}(x) = 0.$$

Ορισμός 6. Θεωρώντας ως χώρο δοκιμαστικών συναρτήσεων τον χώρο των ταχέως φθινουσών συναρτήσεων, οι κατανομές που προκείπτουν ως στοιχεία του αντίστοιχου δυϊκού χώρου με την διαδικασία που περιγράψαμε παραπάνω λέγονται *μετριασμένες κατανομές (tempered distributions)*. Αυτές χρησιμοποιούνται στην γενική μελέτη των μετασχηματισμών Fourier.

Η συνάρτηση δ του Dirac λοιπόν αποτελεί tempered distribution. Θα δώσουμε κάποιους ορισμούς και κάποιες ιδιότητες αυτής μιας και χρησιμοποιείται συχνά στην κβαντομηχανική στην περίπτωση γραμμικών Ερμιτιανών τελεστών με συνεχές φάσμα.

Ένας διαισθητικός ορισμός της συνάρτησης δ είναι ο εξής:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & \text{εάν} \quad x = 0, \\ 0, & \text{εάν} \quad x \neq 0. \end{cases}$$

η οποία ικανοποιεί ταυτόχρονα και τον περιορισμό

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1.$$

Ορισμός 7. Η συνάρτηση δ του Dirac ορίζεται ως εξής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0),$$

για κάθε συνεχή συνάρτηση f. Αυτός ο ορισμός μας λέει πως η συνάρτηση δ είναι μια κατανομή με συμπαγές υποστήριγμα, το υποστήριγμα είναι το σύνολο $\{0\}$.

Ισοδύναμος ορισμός με τον παραπάνω είναι και ο

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a),$$

αν θέσουμε $a = 0$.

Οι ιδιότητες της συνάρτησης δ δίδονται στην παρακάτω πρόταση:

Πρόταση 2. Η συνάρτηση δ του Dirac ικανοποιεί τις εξής βασικές ιδιότητες:

(α). $x\delta(x) = 0$,

(β). $\delta(x) = \delta(-x)$,

(γ). $\delta(\lambda x) = \frac{1}{\lambda}\delta(x)$,

(δ). $\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$,

(ε). $\int \delta(a-x)\delta(x-b)dx = \delta(a-b)$,

(στ). $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk = 2\pi\delta(x)$,
που αποτελεί τον μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης δ,

(ζ). $\int_{0}^{\infty} e^{-sx}\delta(x-a)dx = e^{-as}$,
που αποτελεί τον μετασχηματισμό Laplace της συνάρτησης δ,

(η). Η παράγωγος της συνάρτησης δ δίδεται από την σχέση που περιγράψαμε παραπάνω για τις κατανομές

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f'(x) dx = -f'(0),$$

οπότε

$$\frac{d^m}{dx^m}\delta(x) = (-1)^m \delta(x) \frac{d^m}{dx^m},$$

(ϑ). Η αντιπαράγωγος της συνάρτησης δ δίδεται από την σχέση

$$\int_{-\infty}^{x} \delta(t) dt = \frac{1 + sgn(x)}{2},$$

όπου $sign(x) = \begin{cases} +1, & \text{εάν} \quad x > 0, \\ 0, & \text{εάν} \quad x = 0, \\ -1, & \text{εάν} \quad x < 0. \end{cases}$

5.1.5 Τριάδες Gelfand

Για την περιγραφή τελεστών με συνεχές φάσμα απαιτείται η χρήση γενικευμένων χώρων Χίλμπερτ που λέγονται *συναρμολογημένοι χώροι Χίλμπερτ (rigged Hilbert spaces)* η *τριάδες Γκέλφαντ (Gelfand triples)*. Οι χώροι αυτοί ουσιαστικά ενσωματώνουν συναρτήσεις και κατανομές μαζί.

Το κίνητρο για την γενίκευση αυτή είναι η εξής παρατήρηση: Αφού μια συνάρτηση σαν την $x \mapsto e^{ix}$ η οποία εύκολα φαίνεται πως αποτελεί ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $i(d/dx)$ (τελεστής της ορμής) δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, θα πρέπει να γενικεύσουμε τον χώρο Χίλμπερτ συμπεριλαμβάνοντας και τις κατανομές αλλά θα πρέπει να γενικευθεί και η θεωρία των ιδιοσυναρτήσεων.

Η έννοια του συναρμολογημένου χώρου Χίλμπερτ επιτυγχάνει ακριβώς αυτό. Ένας συναρμολογημένος χώρος Χίλμπερτ αποτελείται από έναν χώρο Χίλμπερτ H μαζί με έναν υπόχωρο $\Phi \subseteq H$ για τον οποίο η φυσική απεικόνιση του περιέχεσθαι $\Phi \hookrightarrow H$ είναι *συνεχής*. Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε πως ο Φ είναι πυκνός στο H για την νόρμα του H. Στην συνέχεια θεωρούμε την απεικόνιση του περιέχεσθαι για τους δυϊκούς χώρους $H^* \hookrightarrow \Phi^*$. Ο χώρος Φ γενικά νοείται ως ο χώρος των δοκιμαστικών συναρτήσεων, ο δυϊκός χώρος Φ^* νοείται ως ο χώρος των κατανομών και τα γραμμικά συναρτησοειδή του υποχώρου Φ της μορφής $\phi \mapsto < v, \phi >$ με $v \in H$ νοούνται ως οι κατανομές.

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα αναπαράστασης του Riesz, μπορούμε να ταυτίσουμε (ως ισόμορφους) τους χώρους H και H^*, συνεπώς ο συναρμολογημένος χώρος Χίλμπερτ ή τριάδα Γκέλφαντ, είναι η παρακάτω μορφή σάντουϊτς

$$\Phi \subseteq H \subseteq \Phi^*.$$

Ο αυστηρός ορισμός είναι ο εξής:

Ορισμός 1. Ένας *συναρμολογημένος χώρος Χίλμπερτ ή τριάδα Γκέλφαντ* αποτελείται από ένα ζεύγος (H, Φ) όπου H ένας χώρος Χίλμπερτ, Φ ένας πυκνός υπόχωρος του H τέτοιος ώστε ο Φ να αποκτά δομή τοπολογικού διανυσματικού χώρου για την οποία η απεικόνιση του περιέχεσθαι $i : \Phi \hookrightarrow H$ είναι συνεχής. Εάν ταυτίσουμε τον H με τον δυϊκό του χώρο H^*, η συναφής απεικόνιση της απεικόνισης i (που ορίζεται όπως και ο συναφής τελεστής) είναι η $i^* : H^* \hookrightarrow \Phi^*$. Το δυϊκό ζευγάρωμα $<,>$ μεταξύ των στοιχείων του Φ και του Φ^* πρέπει να είναι συμβατό με το εσωτερικό γινόμενο $<|>$ του H, δηλαδή

$$< u, v >_{\Phi \times \Phi^*} = < u|v >_H,$$

όταν $u \in \Phi \subset H$ και $v \in H \simeq H^* \subset \Phi^*$.

5.2 Συνδυαστική και Βασικές Στατιστικές Έννοιες

Ας υπενθυμίσουμε μερικές βασικές εξισώσεις της *συνδυαστικής*:

Έστω κάποιο σύνολο αποτελούμενο από n αντικείμενα. Μπορούμε να επιλέξουμε k αντικείμενα εξ αυτών με τέτοιο τρόπο ώστε να μας ενδιαφέρει η διάταξη (σειρά της επιλογής) ή όχι, στην πρώτη περίπτωση μιλάμε για *διάταξη*, στην δεύτερη για *συνδυασμό*.

Η επιλογή μπορεί να γίνει είτε *με επανάθεση* (το ίδιο αντικείμενο μπορεί να επιλεγεί περισότερες από μία φορές) είτε *χωρίς επανάθεση*. Συνολικά λοιπόν έχουμε 4 περιπτώσεις:

Συνδυασμοί με επανάθεση: Το πλήθος των πιθανών συνδυασμών των n ανά k με επανάθεση είναι

$$k^n.$$

Συνδυασμοί χωρίς επανάθεση: Το πλήθος των πιθανών συνδυασμών των n ανά k χωρίς επανάθεση είναι

$$\frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

Διατάξεις με επανάθεση: Το πλήθος των πιθανών διατάξεων των n ανά k με επανάθεση είναι

$$\frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!}.$$

Διατάξεις χωρίς επανάθεση: Το πλήθος των πιθανών διατάξεων των n ανά k χωρίς επανάθεση είναι

$$\frac{n!}{(n-k)!}.$$

Έστω A ένα στατιστικό μέγεθος με πιθανές *διακριτές* τιμές $a_1, a_2, a_3, ..., a_n, ...$ που σχηματίζουν μια ακολουθία. Αν σε ένα συνολικό αριθμό N μετρήσεων η κάθε τιμή a_i εμφανίζεται n_i φορές, τότε η *μέση τιμή* του μεγέθους A δίδεται από τον τύπο

$$< A >= \frac{n_1 a_1 + n_2 a_2 + ... + n_k a_k}{N} = \sum_{i=1}^{k} a_i f_i,$$

όπου k οι διαφορετικές τιμές του μεγέθους A και $f_i = n_i/N$ οι *συχνότητες* εμφάνισης των πιθανών τιμών του στατιστικού μεγέθους A. Στο όριο $N \to \infty$ οι σχετικές συχνότητες f_i τείνουν στις αντίστοιχες *πιθανότητες* p_i της εμφάνισης των πιθανών τιμών a_i, οπότε ο τύπος για την μέση τιμή μιας διακριτής στατιστικής μεταβλητής A θα είναι

$$< A >= \sum_i a_i p_i.$$

Εάν $F(A)$ είναι μια συνάρτηση του στατιστικού μεγέθους A, αυτή θα εκφράζει επίσης κάποιο στατιστικό μέγεθος με πιθανές τιμές $F_i = F(a_i)$ και τις ίδιες πιθανότητες p_i, οπότε η μέση τιμή της θα είναι ίση με

$$< F(A) >= \sum_i F(a_i) p_i.$$

Στην περίπτωση που το στατιστικό μέγεθος A παίρνει *συνεχείς τιμές*, οι αντίστοιχες εκφράσεις για τον υπολογισμό των μέσων τιμών θα είναι

$$< A >= \int_{-\infty}^{+\infty} a p(a) da$$

και

$$< F(A) >= \int_{-\infty}^{+\infty} F(a) p(a) da,$$

όπου $p(a)$ είναι η *συνάρτηση της πυκνότητας της πιθανότητας*, δηλαδή η ποσότητα $p(a)da$ εκφράζει την πιθανότητα έρευσης των τιμών του στατιστικού μεγέθους A στο απειροστό διάστημα από a έως $a + da$.

Τόσο οι πιθανότητες p_i όσο και η συνάρτηση της πυκνότητας της πιθανότητας θα πρέπει να είναι *κανονικοποιημένες*

$$\sum_i p_i = 1$$

και

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(a)da = 1.$$

Το μέγεθος που υποδηλώνει πόσο διασκορπισμένες είναι οι τιμές κάποιου στατιστικού μεγέθους A γύρω από την μέση τιμή $< A >$ είναι η *διασπορά* ή η θετική τετραγωνική ρίζα της διασποράς που λέγεται *τυπική απόκλιση*. Στην κβαντομηχανική η τυπική απόκλιση (διασπορά) συμβολίζεται με ΔA (ή αντίστοιχα με $(\Delta A)^2$), ενώ στην θεωρία πιθανοτήτων συμβολίζεται με σ_A (ή σ_A^2 αντίστοιχα). Η διασπορά $(\Delta A)^2$ αποτελεί μια ποσοτική έκφραση της *αβεβαιότητας* στον προσδιορισμό της τιμής του φυσικού μεγέθους A. Ο ορισμός της διασποράς δίδεται από την σχέση

$$(\Delta A)^2 :=< (A- < A >)^2 >,$$

αλλά στην πράξη πιο εύκολος είναι ο υπολογισμός με την χρήση του τύπου

$$(\Delta A)^2 =< A^2 > - < A >^2 .$$

Η ποσότητα $< A^2 >$ υπολογίζεται από τις σχέσεις

$$< A^2 >= \sum_i a_i^2 p_i$$

και

$$< A^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 p(a)da.$$

Θέτουμε στην συνέχεια το εξής ερώτημα: εάν δοθούν οι ποσότητες $< A >$ και ΔA ενός στατιστικού μεγέθους A που παίρνει έστω συνεχείς τιμές, μπορούμε να προσδιορίσουμε μονοσήμαντα την αντίστοιχη συνάρτηση της πυκνότητας της πιθανόητας $p(a)$ του στατιστικού μεγέθους A;

Η απάντηση είναι θετική, εάν γνωρίζουμε τις στατιστικές ροπές κάθε τάξης της στατιστικής ποσότητας A. Στη συνέχεια θα εξηγήσουμε πως γίνεται αυτό.

Αρχίζουμε με τον σχετικό ορισμό της στατιστικής ροπής:

Ορισμός 1. *Στατιστική ροπή τάξης* n, που συμβολίζεται με $I_n(A)$, ενός στατιστικού μεγέθους A ονομάζεται η μέση τιμή της nth δύναμης του στατιστικού μεγέθους, ήτοι $I_n(A) =< A^n >$.

Εάν υποθέσουμε πως το στατιστικό μέγεθος A παίρνει συνεχείς τιμές, θα έχουμε

$$I_n(A) =< A^n >= \int_{-\infty}^{+\infty} a^n p(a) da.$$

Γνωρίζοντας τις στατιστικές ροπές κάθε τάξης μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή μιας συνάρτησης $F(A)$ που αναπτύσσεται σε δυναμοσειρά. Για παράδειγμα έστω $F(A, \xi) = e^{i\xi A}$, όπου ξ τυχαία πραγματική παράμετρος. Τότε

$$f(\xi) :=< e^{i\xi A} >=< \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} A^n >= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} < A^n >= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} I_n(A).$$

Η συνάρτηση $f(\xi) =< e^{i\xi A} >$ ονομάζεται *χαρακτηριστική συνάρτηση* της στατιστικής κατανομής και μπορεί να υπολογισθεί από την παραπάνω σειρά εάν τα $I_n(A)$ είναι γνωστά.

Η $f(\xi)$ γράφεται σαν συνάρτηση της πυκνότητας πιθανότητας $p(a)$ ως εξής

$$f(\xi) =< e^{i\xi A} >= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi A} p(a) da,$$

δηλαδή είναι ίση με τον *μετασχηματισμό Fourier* της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $p(a)$, οπότε η τελευταία μπορεί να υπολογισθεί από την $f(\xi)$ μέσω του *αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier:*

$$p(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi a} f(\xi) d\xi.$$

Ο όρος στατιστική ροπή χρησιμοποιείται διότι οι αντίστοιχες εκφράσεις μοιάζουν με τις εκφράσεις που δίδουν τις ροπές αδράνειας μιας κατανομής μάζας (διακριτής ή συνεχούς).

6 Η Επίλυση της Εξίσωσης του Schrödinger

Υποθέτουμε για ευκολία και χωρίς βλάβη της γενικότητας πως έχουμε μία χωρική διάσταση. Θα επιλύσουμε την χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

με τη μέθοδο των *χωριζομένων μεταβλητών*.

Θεωρούμε λοιπόν ότι η κυματοσυνάρτηση Ψ γράφεται στη μορφή

$$\Psi(x,t) = T(t)\psi(x),$$

όπου η συνάρτηση $T(t)$ είναι συνάρτηση μόνο του χρόνου και η συνάρτηση $\psi(x)$ είναι συνάρτηση μόνο της θέσης.

Αντικαθιστούμε την παραπάνω σχέση στην εξίσωση του Schrödinger και παίρνουμε:

$$i\hbar\frac{\partial(T\psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2(T\psi)}{\partial x^2} + V(x)T\psi \Leftrightarrow$$

$$i\hbar\psi\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}T\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)T\psi.$$

Στη συνέχεια διαιρούμε και τα δύο μέλη δια $\Psi = T\psi$ και θα πάρουμε

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

όπου E κάποια *σταθερά*.

Η πρώτη εξίσωση είναι η

$$\frac{i\hbar}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = E$$

η οποία εύκολα ολοκληρώνεται και δίδει

$$i\hbar\frac{T'}{T} = E \Leftrightarrow i\hbar\int\frac{T'}{T}dt = \int Edt \Leftrightarrow \ln T = \frac{-iEt}{\hbar} \Leftrightarrow T(t) = e^{-iEt/\hbar}.$$

Η δεύτερη εξίσωση δίδει

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V = E \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi,$$

που είναι *η εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή της Χαμιλτονιανής ή χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger.*

Συνεπώς η γενική λύση της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger είναι η

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar},$$

όπου E_n και ψ_n οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής αντίστοιχα (λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger).

7 Η Στατιστική Ερμηνεία της Κυματοσυνάρτησης

7.1 Τα Υλικά Κύματα ως Κύματα Πιθανότητας - Ρεύμα Πιθανότητας

Αρχίζουμε με την εξής βασική παρατήρηση: στην κλασική φυσική όλες οι ποσότητες (σταθερές, βαθμωτές ή διανυσματικές) είναι *πραγματικές*. Επίσης όλοι οι συντελεστές των διαφορικών εξισώσεων (είτε είναι σταθεροί είτε όχι) είναι πραγματικοί. Συχνά όμως στην κλασική φυσική, οι λύσεις για παράδειγμα της κυματικής εξίσωσης

$$\nabla^2\phi - \frac{1}{v^2}\frac{\partial\phi}{\partial t^2} = 0$$

γράφονται στην σύντομη γραφή

$$\phi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

που αναπαριστά ένα επίπεδο κύμα. *Η γραφή αυτή χρησιμοποιείται μόνο για λόγους ευκολίας διότι το φανταστικό εκθετικό βολεύει περισσότερο από εκφράσεις με ημίτονα και συνημίτονα. Οι λύσεις της κυματικής εξίσωσης είναι το πραγματικό και το φανταστικό κομμάτι ξεχωριστά, δεν σημαίνει πως η συνάρτηση του κύματος είναι μιγαδική συνάρτηση.*

Στην κβαντομηχανική οι ποσότητες είναι *μιγαδικές*. Αυτό είναι απαίτηση της ίδιας της εξίσωσης του Schrödinger στην οποία εμφανίζεται η φανταστική μονάδα. Πραγματικά, εάν θεωρούσαμε πως η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ είναι πραγματική συνάρτηση, θα είχαμε

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

δηλαδή το αριστερό μέλος θα ήταν καθαρά φανταστικό ενώ το δεξί μέλος θα ήταν πραγματικό, κάτι που θα ήταν μαθηματικά ασυνεπές. *Οι κυματοσυναρτήσεις συνεπώς είναι βαθμωτές συναρτήσεις πραγματικών μεταβλητών αλλά με μιγαδικές τιμές, άρα μιγαδικές συναρτήσεις.*

Το δεύτερο στοιχείο που μας οδηγεί στην στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης είναι ο δυϊσμός κύματος ακτινοβολίας. Εάν θεωρήσουμε πως η κυματοσυνάρτηση ψ που εκφράζει τα υλικά κύματα, αντιπροσωπεύει μια μετρήσιμη φυσική διαταραχή σαν το ηλεκτρομαγνητικό κύμα για παράδειγμα, αυτό θα σήμαινε πως η φυσική οντότητα που περιγράφει η ψ θα ήταν ένα κύμα, δηλαδή διασκορπισμένο στο χώρο. Αυτό βέβαια δεν ισχύει διότι τα σωμάτια, όπως

τα ηλεκτρόνια για παράδειγμα, δεν είναι διασκορπισμένα στο χώρο. Επιπρόσθετα θα είχαμε και το πρόβλημα της κλασικής ερμηνείας του υλικού κύματος διότι περιγράφεται από μιγαδική συνάρτηση.

Η κατάσταση έμοιαζε αδιέξοδη: μια κλασική ερμηνεία των υλικών κυμάτων είχε φυσικά και μαθηματικά προβλήματα. Το 1926 αρχικά ο M. Born και μετέπειτα οι Bohr, Heisenberg, Jordan έδωσαν την περίφημη *στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης* σύμφωνα με την οποία:

Η κυματοσυνάρτηση ψ που είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασικό κύμα αλλά ένα ' κύμα πιθανότητας ' : το τετράγωνο του μέτρου της μιγαδικής κυματοσυνάρτησης $|\psi|^2 = \psi^*\psi$, που είναι πάντα μη - αρνητική πραγματική ποσότητα, μας δίδει την συνάρτηση πυκνότητας της πιθανότητας να βρούμε το σωμάτιο σε μια περιοχή του χώρου.

Η ιδέα ήταν πραγματικά ιδιοφυής: αποφεύγουμε τον σκόπελο της μιγαδικής κυματοσυνάρτησης που επιβάλλεται από την ίδια την μορφή της εξίσωσης του Schrödinger λέγοντας πως φυσικό νόημα δεν έχει η ίδια η μιγαδική κυματοσυνάρτηση αλλά το τετράγωνο του μέτρου της που είναι μη - αρνητική πραγματική ποσότητα, και την ίδια στιγμή ταυτίζοντας το τετράγωνο του μέτρου της κυματοσυνάρτησης με την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας να ευρεθεί το σωμάτιο σε μια συγκεκριμένη περιοχή του χώρου ερμηνεύουμε και τον δυϊσμό κύματος - ακτινοβολίας.

Η παραπάνω στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης συνιστά ένα βασικό στοιχείο της λεγόμενης *σχολής της Κοπεγχάγης* της ερμηνείας της κβαντομηχανικής. Η σχολή της Κοπεγχάγης είναι η κρατούσα αλλά όχι η μοναδική ερμηνεία της εξίσωσης του Schrödinger. Άλλες ερμηνείες που προτάθηκαν κατά καιρούς, όπως η ερμηνεία των κρυφών μεταβλητών, των παράλληλων συμπάντων κλπ είτε καταρρίφθηκαν από μετέπειτα πειράματα είτε εγείρουν περισσότερα ερωτήματα από αυτά που απαντούν. (βλέπε και την Σημείωση στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου 7).

Η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης μας επιβάλει να είναι οι κυματοσυναρτήσεις *τετραγωνικά ολοκληρώσιμες:* εάν (περιοριζόμαστε σε μια χωρική διάσταση για ευκολία και παραλείπουμε την χρονική μεταβλητή)

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = p(x),$$

όπου $p(x)$ η συνάρτηση πυκνότητας της πιθανότητας εύρεσης του σωματίου σε κάποιο σημείο του χώρου, τότε η πιθανότητα να βρούμε το σωμάτιο μεταξύ x

και $x + dx$ θα είναι

$$p(x)dx = |\psi(x)|^2 dx.$$

Η πιθανότητα να βρούμε το σωμάτιο κάπου στο χώρο θα είναι λοιπόν

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx,$$

που σημαίνει πως η κυματοσυνάρτηση ψ πρέπει να είναι οπωσδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη για να μην απειρίζεται το παραπάνω ολοκληρωμα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Στην πραγματικότητα χρειαζόμαστε μια πιο ισχυρή απαίτηση: Θα πρέπει η κυματοσυνάρτηση να είναι *κανονικοποιημένη* για να είναι συμβατή με τα αξιώματα Kolmogorov της θεωρίας πιθανοτήτων:

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

Σημειώνουμε πως εάν μια κυματοσυνάρτηση είναι τεραγωνικά ολοκληρώσιμη, μπορεί *πάντα* να κανονικοποιηθεί πολλαπλασιάζοντάς την με μια πραγματική σταθερά που λέγεται *συντελεστής κανονικοποίησης*.

Γιατί όμως ταυτίζουμε την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας με το *τετράγωνο* του μέτρου της κυματοσυνάρτησης και όχι, για παράδειγμα, με το μέτρο της κυματοσυνάρτησης, δηλαδή γιατί θέσαμε $p(x) = |\psi(x)|^2$ και όχι $p(x) = |\psi(x)|$ που είναι επίσης μη - αρνητική πραγματική ποσότητα;

Η απάντηση είναι για να *διατηρείται η πιθανότητα*. Ήτοι η ολική πιθανότητα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x,t)dx$$

θα πρέπει να είναι *ανεξάρτητη από τον χρόνο* έτσι ώστε εάν η κυματοσυνάρτηση κανονικοποιηθεί σε μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή έστω $t = 0$, να διατηρείται κανονικοποιημένη. Εάν αυτό δεν συμβαίνει, τότε η στατιστική ερμηνεία δεν έχει νόημα. Δηλαδή με απλά λόγια η ποσότητα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$

είναι ανεξάρτητη του χρόνου ενώ η ποσότητα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)| dx$$

όχι. Θέλουμε δηλαδή να αποδείξουμε ότι

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t) dx = 0.$$

Επειδή το t είναι παράμετρος που δεν ολοκληρώνεται, μπαίνει μέσα στο ολοκλήρωμα οπότε παίρνουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx.$$

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση του Schrödinger $i\hbar \partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$ για να απαλλαγούμε από τις μερικές παραγώγους $\partial\psi/\partial t$ και $\partial\psi^*/\partial t$:

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

τις οποίες αν τις αντικαταστήσουμε στην προηγούμενη σχέση, θα πάρουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dx = -\frac{1}{i\hbar} \int (\hat{H}\psi)^* \psi dx + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{H}\psi) dx = 0$$

διότι η τελεστής $\hat{H}$ είναι Ερμιτιανός.

Η παραπάνω σχέση μας δίδει την διατήρηση (ως προς τον χρόνο) της *ολικής* πιθανότητας θέσης. Όμως η πυκνότητα πιθανότητας $p(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t) \cdot \psi(\vec{r},t)$ μπορεί να μεταβάλλεται εν γένει με τέτοιο τρόπο ώστε η ολική πιθανότητα να παραμένει σταθερή. Δηλαδή αν σε κάποιο μέρος του χώρου αυξάνει, θα πρέπει κάπου αλλού να μικραίνει. Με άλλα λόγια η χρονική εξέλιξη θα προκαλεί μια συνεχή μεταφορά πιθανότητας από μια περιοχή του χώρου σε μια άλλη, δηλαδή ένα *ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας*.

Αυτή η κατάσταση θυμίζει την εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{J} = 0.$$

Για να υπολογίσουμε το αντίστοιχο ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας, απλά παραγωγίζουμε ως προς το χρόνο την σχέση $p(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$ και χρησιμοποιούμε

την εξίσωση Schrödinger για να απαλείψουμε τις χρονικές παραγώγους. Κατόπιν θα προσπαθήσουμε να γράψουμε την έκφραση που προκύπτει ως απόκλιση κάποιου διανύσματος:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \cdot \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}(H\psi)^*\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*(H\psi) =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\{\psi^*[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi] - \psi[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V(\vec{r})\psi^*]\}.$$

Οι όροι που περιέχουν το δυναμικό έχουν αντίθετα πρόσημα και φεύγουν, οπότε παραμένει η έκφραση

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2im}[\psi^*(\nabla^2\psi) - \psi(\nabla^2\psi^*)].$$

Αν θυμηθούμε τον κανόνα του Leibniz

$$\nabla(\phi\vec{A}) = \vec{A}(\nabla\phi) + \phi(\nabla\vec{A}),$$

βλέπουμε πως

$$\psi^*(\nabla^2\psi) - \psi(\nabla^2\psi^*) = \nabla[\psi^*(\nabla\psi) - \psi(\nabla\psi^*)],$$

οπότε η εξίσωση συνέχειας στην κβαντομηχανική θα είναι

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla\{\frac{\hbar}{2im}[\psi^*(\nabla\psi) - \psi(\nabla\psi^*)]\} = 0.$$

Συνεπώς το ζητούμενο ρεύμα πιθανότητας είναι

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im}[\psi^*(\nabla\psi) - \psi(\nabla\psi^*)].$$

7.2 Στατιστική Ερμηνεία Φυσικών Μεγεθών

Τα όσα αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο για την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης, επαρκούν για την στατιστική κατανομή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων που αφορούν την *θέση* των σωματίων. Θα πρέπει να γενικευθούν για να συμπεριληφθούν όλα τα φυσικά μεγέθη. Αυτό γίνεται με τον εξής τρόπο: υποθέτοντας την χρήση καρτεσιανών συντεταγμένων, σε κάθε φυσικό μέγεθος, αντιστοιχούμε έναν γραμμικό τελεστή ο οποίος καθορίζεται από την αντίστοιχη συνάρτηση με μεταβλητές την θέση και την ορμή που περιγράφει το αντίστοιχο κλασικό μέγεθος, εφαρμόζοντας τον κανόνα αντικατάστασης που είδαμε στην εξίσωση Schrödinger:

$$x \to \hat{x} = x,$$

$$y \to \hat{y} = y,$$
$$z \to \hat{z} = z,$$
$$p_x \to \hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$
$$p_y \to \hat{p_y} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},$$
$$p_z \to \hat{p_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Κατόπιν, *η μέση τιμή* $< A >$ ενός τελεστή $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p_x}, \hat{p_y}, \hat{p_z})$ που προκύπτει από την συνάρτηση $\vec{A}(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ που περιγράφει το αντίστοιχο κλασικό μέγεθος εφαρμόζοντας τον παραπάνω κανόνα αντιστοίχισης, θα είναι

$$< A >=< \psi|A|\psi >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{A}\psi)dV.$$

(στην παραπάνω σχέση νοείται τριπλό ολοκλήρωμα διότι έχουμε την γενική περίπτωση με τρεις χωρικές διαστάσεις).

Προφανώς θα έχουμε

$$< A^2 >=< \psi|A^2|\psi >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{A}^2\psi)dV.$$

Η αντίστοιχη αβεβαιότητα του φυσικού μεγέθους A θα δίδεται από τον τύπο

$$(\Delta A)^2 =< A^2 > - < A >^2 .$$

Για παράδειγμα, η στροφορμή $\vec{L}$ στην κλασική φυσική ορίζεται μέσω της σχέσης

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}.$$

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες οι συνιστώσες αυτής είναι

$$L_x = yp_z - zp_y,$$
$$L_y = zp_x - xp_z,$$
$$L_z = xp_y - yp_x,$$

οπότε οι κβαντομηχανικοί τελεστές θα είναι οι

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}),$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}),$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}).$$

Από εδώ και πέρα δεν θα χρησιμοποιούμε το καπελάκι για τους τελεστές.

Κλείνουμε αυτή την παράγραφο με τον εξής χρήσιμο ορισμό:
Ορισμός 1. Ένας Ερμιτιανός τελεστής που έχει θετική μέση τιμή (και θετικές ιδιοτιμές) λέγεται *θετικά ορισμένος* (ή θετικός) τελεστής.

Γενικά κάθε θετική συνάρτηση ενός Ερμιτιανού τελεστή αποτελεί θετικό τελεστή, δηλαδή θα έχει θετική μέση τιμή και ιδιοτιμές. Παράδειγμα θετικού τελεστή αποτελεί ο τελεστής της κινητικής ενέργειας

$$E_k = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2.$$

7.3 Ο Ρόλος των Ιδιοσυναρτήσεων

Είδαμε ότι για κάθε γραμμικό τελεστή A υπάρχει η εξίσωση ιδιοτιμών αυτού

$$A|f>= a|f> .$$

Επίσης υπενθυμίζουμε μια ιδιότητα που την είδαμε στους πίνακες αλλά μεταφέρεται και στους γραμμικούς τελεστές: εάν ένας τελεστής $F(A)$ προκύπτει σαν συνάρτηση ενός άλλου τελεστή έστω A (και η F είναι αναλυτική συνάρτηση), τότε οι τελεστές $F(A)$ και A έχουν τις ίδιες ιδιοσυναρτήσεις και οι ιδιοτιμές τους συνδέονται με την ίδια συναρτησιακή σχέση που συνδέονται οι τελεστές μεταξύ τους, δηλαδή αν a είναι μια ιδιοτιμή του A, τότε η $F(a)$ είναι ιδιοτιμή του τελεστή $F(A)$.

Ιδιαίτερο και σημαντικό ρόλο παίζουν στην κβαντομηχανική οι ιδιοσυναρτήσεις των γραμμικών τελεστών που αντιστοιχούν σε φυσικά μεγέθη: *αν ένα σωμάτιο περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση που αποτελεί ταυτόχρονα και ιδιοσυνάρτηση ενός τελεστή που εκφράζει κάποιο φυσικό μέγεθος, τότε η μόνη τιμή που μπορεί να προκύψει κατά την μέτρηση αυτού του μεγέθους είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή και η* απροσδιοριστία *στην μέτρηση αυτού του μεγέθους είναι μηδέν*, δηλαδή μπορούμε να μετρήσουμε το μέγεθος αυτό *με απόλυτη ακρίβεια*. Η απόδειξη είναι απλή:

Έστω A κάποιος γραμμικός τελεστής και η κυματοσυνάρτηση ψ_a που περιγράφει το σωμάτιο είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή A με ιδιοτιμή a, δηλαδή

$$A|\psi_a >= a|\psi_a > .$$

Τότε

$$A^2|\psi_a >= A|a\psi_a >= aA|\psi_a >= a^2|\psi_a >,$$

δηλαδή η ψ_a αποτελεί και ιδιοσυνάρτηση του A^2 με ιδιοτιμή a^2. Για τις μέσες τιμές συνεπώς θα ισχύει

$$< A >=< \psi_a|A|\psi_a >= a < \psi_a|\psi_a >= a1 = a,$$

ενώ

$$< A^2 >=< \psi_a|A^2|\psi_a >= a < \psi_a|A|\psi_a >= a^2 1 = a^2,$$

οπότε

$$(\Delta A)^2 =< A^2 > - < A >^2 = a^2 - a^2 = 0.$$

Οι καταστάσεις που περιγράφονται από τις ιδιοσυναρτήσεις ενός φυσικού μεγέθους λέγονται *ιδιοκαταστάσεις*.

7.4 Το Ανάπτυγμα σε Ιδιοσυναρτήσεις

Έστω A Ερμιτιανός τελεστής με *διακριτό φάσμα* που αντιπροσωπεύει κάποιο φυσικό μέγεθος και έστω $\{\psi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ οι ιδιοσυναρτήσεις του A και $\{a_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ οι αντίστοιχες πραγματικές ιδιοτιμές. Επειδή ο A είναι Ερμιτιανός, οι ιδιοσυναρτήσεις του αποτελούν ορθοκανονική βάση του χώρου Χίλμπερτ:

$$< \psi_i|\psi_j >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij}.$$

Είδαμε νωρίτερα πως εάν η κυματοσυνάρτηση είναι κάποια ιδιοσυνάρτηση του A, τότε η στατιστική του κατανομή είναι άμεσα γνωστή: υπάρχει μοναδικό πιθανό αποτέλεσμα κατά την μέτρηση του φυσικού μεγέθους που αντιστοιχεί στον Ερμιτιανό τελεστή A, η (πραγματική) ιδιοτιμή που αντιστοιχεί στην εν λόγω ιδιοσυνάρτηση. Είναι λογικό λοιπόν να σκεφτούμε να αναπτύξουμε κάθε κυματοσυνάρτηση στην βάση αυτή των ιδιοδιανυσμάτων του A:

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i.$$

Αν πολλαπλασιάσουμε και τα δύο μέλη με ψ_j, θα πάρουμε

$$< \psi_j|\psi >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \psi dx = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \psi_i dx = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \delta_{ji} = c_j,$$

που σημαίνει ότι οι συντελεστές c_i στο ανάπτυγμα της τυχαίας κυματοσυνάρτησης ψ στην βάση $\{\psi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ που ορίζεται από τις ιδιοσυναρτήσεις του Ερμιτιανού τελεστή A θα είναι

$$c_i =< \psi_i|\psi >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi dx.$$

Οι συντελεστές c_i λοιπόν μας δείχνουν πόσο πολύ ή λίγο συνεισφέρει η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση ψ_i στον σχηματισμό της ψ. *Είναι συνεπώς λογικό να αναμένουμε οι συντελεστές c_i να σχετίζονται με την πιθανότητα εμφάνισης των διαφόρων ιδιοτιμών a_i του μεγέθους A.*

Για να ελέγξουμε τον παραπάνω ισχυρισμό, αρκεί να πάρουμε τον τύπο της μέσης τιμής του μεγέθους A και να αντικαταστήσουμε την κυματοσυνάρτηση ψ με το ανάπτυγμά της στην βάση $\{\psi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$:

$$< A >=< \psi|A|\psi >= \int \psi^*(A\psi)dx = \int (\sum_i c_i^* \psi_i^*)[A(\sum_j c_j \psi_j)]dx =$$

$$= \sum_{i,j} c_i^* c_j \int \psi_i^*(A\psi_j)dx.$$

Όμως

$$A\psi_j = a_j \psi_j,$$

οπότε

$$< A >= \sum_{i,j} c_i^* c_j a_j \int \psi_i^* \psi_j dx = \sum_{i,j} c_i^* c_j a_j \delta_{ij} = \sum_j |c_j|^2 a_j.$$

Δείξαμε λοιπόν ότι

$$< A >= \sum_i |c_i|^2 a_i.$$

Όμως η έκρφαση αυτή είναι πανομοιότυπη με την σχέση ορισμού της μέσης τιμής ενός μεγέθους A του οποίου οι πιθανές τιμές είναι a_i με αντίστοιχες πιθανότητες p_i:

$$< A >= \sum_i p_i a_i.$$

Το αποτέλεσμα αυτό μας οδηγεί αυτομάτως στην ακόλουθη ερμηνεία:

Οι μόνες δυνατές τιμές ενός φυσικού μεγέθους A που αντιστοιχεί σε κάποιον Ερμιτιανό τελεστή είναι οι ιδιοτιμές του. Αν η κατάσταση του σωματιδίου σε μια ορισμένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση ψ, τότε η πιθανότητα εμφάνισης σε μια μέτρηση του μεγέθους A της ιδιοτιμής a_i είναι

$$p_i = |c_i|^2,$$

όπου c_i είναι ο συντελεστής της ιδιοσυνάρτησης ψ_i στο ανάπτυγμα

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i$$

της ψ στην βάση που ορίζεται από τις ιδιοσυναρτήσεις $\{\psi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ του Ερμιτιανού τελεστή A.

Για να είναι συνεπής η ερμηνεία αυτή θα πρέπει οι συντελεστές να είναι κανονικοποιημένοι:

$$\sum_{i=1}^{\infty} p_i = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = 1,$$

απαίτηση που ικανοποιείται λόγω της ορθοκανονικότητας της βάσης $\{\psi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ εξαιτίας της αυτοσυζυγίας του τελεστή A:

$$< \psi|\psi >= \int \psi^*(x)\psi(x)dx = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = 1.$$

7.5 Η Περίπτωση του Συνεχούς Φάσματος

Στους Ερμιτιανούς γραμμικούς τελεστές εμφανίζεται και ένα φαινόμενο που δεν υπάρχει στην περίπτωση των πινάκων: η ύπαρξη *συνεχούς φάσματος*. Στην περίπτωση αυτή εμφανίζονται δυσκολίες στην στατιστική ερμηνεία που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο και θα πρέπει να εισάγουμε ορισμένες τροποποιήσεις.

Έστω λοιπόν κάποιος Ερμιτιανός τελεστής A που εκφράζει κάποιο φυσικό μέγεθος, του οποίου η εξίσωση ιδιοτιμών

$$A\psi_a = a\psi_a$$

εμφανίζει συνεχές φάσμα, δηλαδή η τιμή του a εκτείνεται σε κάποιο διάστημα $[a, b] \subset \mathbb{R}$. Για απλότητα θα θεωρήσουμε ότι οι ιδιοτιμές παίρνουν όλες τις

πραγματικές τιμές $(-\infty, +\infty)$. Σημειώνουμε πως αυτό δεν είναι καθόλου σπάνιο στην κβαντομηχανική: οι ακρογωνιαίοι τελεστές της θέσης $\hat{x} = x$ και της ορμής $\hat{p_x} = -i\hbar\partial/\partial x$ έχουν συνεχές φάσμα (ανάλογα παραδείγματα είδαμε και στις Ασκήσεις).

Κατ' αρχή η τυχαία κυματοσυνάρτηση ψ δεν θα γράφεται στην μορφή απείρου αθροίσματος που είδαμε πριν

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i,$$

αλλά το άθροισμα θα πρέπει να αντικατασταθεί από ολοκλήρωμα της μορφής

$$\psi = \int c(a)\psi_a da.$$

Στη συνέχεια, υποθέτουμε πως η φυσική ερμηνεία της ακολουθίας των συντελεστών c_i ως πιθανοτήτων που είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο

$$p_i = |c_i|^2,$$

τώρα θα πρέπει να ερμηνευθεί διαφορετικά: η αντίστοιχη ποσότητα

$$p(a) = |c(a)|^2$$

θα εκφράζει την *πυκνότητα πιθανότητας* του μεγέθους A, δηλαδή $|c(a)|^2 da = p(a)da$ είναι η πιθανότητα η μετρούμενη τιμή να έχει τιμή από a έως $a + da$, μιας και σε αυτήν την περίπτωση η πιθανότητα να πάρουμε μια συγκεκριμένη τιμή a του μεγέθους A θα είναι μηδέν.

Ο υπολογισμός των συντελεστών $c(a)$ γίνεται με τον ίδιο τρόπο όπως και στην διακριτή περίπτωση: στην διακριτή περίπτωση χρησιμοποιήσαμε την σχέση

$$c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi dx,$$

της οποίας αυτονόητη έκφραση για την περίπτωση συνεχούς φάσματος είναι η σχέση

$$c(a) = \int \psi_a^*(x)\psi(x)dx.$$

Είναι όμως μαθηματικά σωστές αυτές οι προφανείς επεκτάσεις; Η απάντηση είναι *ναι*, αλλά θα πρέπει να γενικευθούν κάποιες έννοιες και ορισμοί. Για να εντοπίσουμε ποιες ακριβώς είναι οι έννοιες που πρέπει να γενικευθούν, θα

πρέπει να επαναλάβουμε την όλη διαδικασία εξαγωγής των σχέσεων της προηγούμενης παραγράφου για την περίπτωση του συνεχούς φάσματος. Για να μην παιδεύουμε τον αναγνώστη, επισημαίνουμε πως το καίριο στοιχείο ήταν η συνθήκη ορθοκανονικότητας

$$< \psi_i|\psi_j >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij}.$$

Η ουσιώδης διαφορά ανάμεσα στις ιδιοσυναρτήσεις του διακριτού και του συνεχούς φάσματος είναι ότι οι μεν πρώτες είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και άρα μπορούν να κανονικοποιηθούν, ενώ οι δεύτερες όχι.

Στην περίπτωση του συνεχούς φάσματος, η συνθήκη ορθοκανονικότητας γράφεται ως εξής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{a_1}^*(x)\psi_{a_2}(x)dx = \delta(a_1 - a_2),$$

όπου $\delta(a_1 - a_2)$ *η περίφημη συνάρτηση* δ *του Dirac.*

Για παράδειγμα, ο τύπος

$$c(a) = \int \psi_a^*(x)\psi(x)dx$$

αποδεικνύεται εύκολα ως εξής: ξεκινάμε από το ανάπτυγμα

$$\psi = \int c(a')\psi_{a'}da',$$

στη συνέχεια πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη με $\psi_a^*(x)$ και ολοκληρώνουμε ως προς x λαμβάνοντας υπόψη έναν από τους ορισμούς της συνάρτησης δ

$$\int \delta(a - a')c(a')da' = c(a).$$

Πραγματικά θα πάρουμε

$$\int \psi_a^*(x)\psi(x)dx = \int da'c(a') \int dx\psi_a^*\psi_{a'}(x) = \int da'c(a')\delta(a - a') = c(a).$$

Η συνάρτηση δ του Dirac αποτελεί την κατάλληλη συνεχή γενίκευση (δηλαδή με δείκτες που παίρνουν συνεχείς τιμές) του συμβόλου δ του Kronecker.

Ποιοτικά μπορεί κανείς να το δει αυτό από το γεγονός ότι το σύμβολο δ του Kronecker ορίζεται ισοδύναμα και μέσω της χαρακτηριστικής του ιδιότητας

$$\sum_m \delta_{nm} c_m = c_n.$$

Αν υποθέσουμε τώρα ότι οι δείκτες n και m παίρνουν συνεχείς τιμές, και τους γράψουμε σαν a και a' αντίστοιχα, τότε η προφανής συνεχής γενίκευση της παραπάνω ιδιότητας του συμβόλου του Kronecker θα είναι

$$\int \delta(a - a') c(a) da' = c(a),$$

όπου το άθροισμα ως προς τον δείκτη m αντικαταστάθηκε από το ολοκλήρωμα ως προς την αντίστοιχη συνεχή μεταβλητή a' και η συνάρτηση δ γράφηκε ως $\delta(a - a')$ αντί $\delta_{aa'}$ διότι εξαρτάται μόνο από την *διαφορά* $a - a'$.

Υπάρχουν όμως κάποιες *"τεχνικές" δυσκολίες* για τις παραπάνω συνεχείς γενικεύσεις, τόσο από την πλευρά της φυσικής όσο και από την πλευρά των μαθηματικών. Θα τις επισημάνουμε και θα δώσουμε μια σύντομη εξήγηση σχετικά με το πως μπορούν να υπερκερασθούν με όσο γίνεται πιο "ανώδυνο" τρόπο.

Ξεκινάμε από την φυσική: είπαμε πως οι ιδιοσυναρτήσεις Ερμιτιανών τελεστών με συνεχές φάσμα *μπορεί* να μην είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Κάτι τέτοιο δυνάμει αποτελεί φυσικά σοβαρό πλήγμα για την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης και την ερμηνεία των τετραγώνων των μέτρων των συντελεστών $|c(a)|^2$ ως πυκνότητα πιθανότητας

$$|c(a)|^2 da = p(a) da.$$

Θεωρούμε λοιπόν πως *οι ιδιοσυναρτήσεις Ερμιτιανών τελεστών με συνεχές φάσμα μπορούν να εκλειφθούν μόνο ως μαθηματικά εύχρηστες εξειδανικεύσεις φυσικά πραγματοποιήσιμων καταστάσεων*, συνεπώς δεν συνιστά καταστροφή της στατιστικής ερμηνείας της κυματοσυνάρτησης το γεγονός ότι μπορεί να μην είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, αφού δεν αντιστοιχούν σε πραγματικές φυσικές καταστάσεις.

Ερχόμαστε τώρα στα μαθηματικά: Η αλήθεια είναι πως η συνεχής σχέση ορθοκανονικότητας

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{a_1}(x) \psi_{a_2}(x) dx = \delta(a_1 - a_2),$$

παρουσιάζει προβλήματα: Κατ' αρχή το αριστερό μέλος μπορεί να μην ορίζεται καν διότι υπάρχουν Ερμιτιανοί τελεστές με συνεχές φάσμα των οποίων οι ιδιοσυναρτήσεις δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Επιπρόσθετα, η συνάρτηση δ δεν είναι συνάρτηση αλλά κατανομή, συνεπώς η παραπάνω σχέση πρέπει να νοηθεί μόνο ως σχέση μεταξύ κατανομών. Αυτό πράγματι μπορεί να γίνει με την χρήση *συναρμολογημένων χώρων Χίλμπερτ (rigged Hilbert spaces ή τριάδων Gelfand)*. Για τον αυστηρό ορισμό των κατανομών απαιτείται η χρήση ενός συνόλου *δοκιμαστικών συναρτήσεων (test functions)* και ο χώρος των κατανομών ορίζεται ως ο *δυϊκός χώρος του συνόλου των δοκιμαστικών συναρτήσεων*. Στην περίπτωση της συνάρτησης δ του Dirac, ο κατάλληλος χώρος δοκιμαστικών συναρτήσεων είναι ο λεγόμενος *χώρος Schwartz των (λείων) συναρτήσεων με συμπαγές υποστήριγμα που φθίνουν γρήγορα (infinitely differentiable rapidly decreasing functions with compact support)*.

7.6 Η Κατάρρευση της Κυματοσυνάρτησης

Για να ολοκληρώσουμε την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης και να δούμε την πλήρη μορφή της λεγόμενης σχολής της Κοπεγχάγης σχετικά με την ερμηνεία της κβαντομηχανικής, χρειαζόμαστε ένα ακόμη στοιχείο και αυτό είναι το τι συμβαίνει κατά την στιγμή της μέτρησης ενός φυσικού μεγέθους.

Το πρώτο που πρέπει να επισημάνουμε είναι πως η μέτρηση είναι πάντα μια διαδικασία αλληλεπίδρασης μεταξύ της μετρητικής συσκευής και του μετρούμενου συστήματος. Από την αλληλεπίδραση αυτή μεταβάλλονται τόσο η κατάσταση της μετρητικής συσκευής, κάτι που γινεται φανερό με την μετακίνηση κάποιου σχετικού δείκτη πάνω σε αυτή, όσο και το μετρούμενο σύστημα το οποίο μεταβαίνει σε μια κατάσταση διαφορετική από την αρχική (πριν τη μέτρηση). Αυτές οι παρατηρήσεις ισχύουν για όλες τις μετρήσεις, κλασικές και κβαντικές.

Στις κλασικές μετρήσεις ισχύουν δύο βασικά χαρακτηριστικά:

1. Η επίδραση της μετρητικής συσκευής πάνω στο μετρούμενο σύστημα μπορεί να μειωθεί κατά βούληση (με την πρόοδο της τεχνολογίας) χωρίς να επηρεασθεί αρνητικά η ακρίβεια της μέτρησης.

2. Ακόμη και αν η επίδραση αυτή δεν είναι αμελητέα, μπορούμε να την υπολογίσουμε και να την λάβουμε υπόψη για την διόρθωση των αποτελεσμάτων.

Σκεφτείτε για παράδειγμα την μέτρηση της έντασης του ηλεκτρικού ρεύματος σε ένα κύκλωμα. Το αμπερόμετρο έχει κάποια εσωτερική αντίσταση, η οποία με την πάροδο της τεχνολογίας μικραίνει συνεχώς. Στη συνέχεια, επειδή το ρεύμα που θα μετρήσουμε θα εξαρτάται από την ολική αντίσταση (αντίσταση κυκλώματος και εσωτερική αντίσταση του αμπερομέτρου), γνωρίζοντας την εσωτερική αντίσταση του οργάνου, μπορούμε ¨να πάμε πίσω' και να διορθώσουμε την μετρούμενη ένταση, ώστε να πάρουμε τελικά την πραγματική ένταση που διαρρέει το κύκλωμα.

Στην κβαντομηχανική τα πράγματα δεν είναι έτσι. Δεν μπορούμε να μειώσουμε κατά βούληση την επίδραση της μετρητικής συσκευής χωρίς να επηρεάσουμε αρνητικά την ακρίβεια της μέτρησης. Σκεφτείτε για παράδειγμα την διαδικασία μέτρησης της θέσης ενός σωματίου χρησιμοποιώντας μια μονοχρωματική δέσμη φωτός. Από την κυματική οπτική γνωρίζουμε πως για να δούμε ένα μικρό αντικείμενο θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε φως με αντίστοιχα μικρό μήκος κύματος. Στην κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία αυτό δεν επηρεάζει καθόλου την ακρίβεια της μέτρησης γιατί μπορούμε παράλληλα να μειώσουμε την ένταση της φωτεινής δέσμης ώστε να αποφύγουμε την διαταραχή της θέσης του σωματίου. Κβαντικά αυτό δεν είναι δυνατό: η ελάχιστη δυνατή επίδραση της φωτεινής δέσμης αντιστοιχεί στην ελαστική κρούση ενός φωτονίου της δέσμης με το σωμάτιο. Η ενέργεια του φωτονίου είναι $E = h\nu = hc/\lambda$, οπότε αν θέλουμε να ελαττώσουμε την διαταραχή θα πρέπει να ελαττώσουμε την ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου, δηλαδή να χρησιμοποιήσουμε μεγάλα μήκη κύματος, οπότε η ακρίβεια της μέτρησης θα μειωθεί. Αντίθετα, αν επιμένοντας σε μια πολύ ακριβή μέτρηση της θέσης χρησιμοποιήσουμε μικρά μήκη κύματος, τότε το προσπίπτον φωτόνιο θα έχει μεγάλη ενέργεια οπότε θα διαταράξει πολύ το σωμάτιο και θα το βγάλει από την αρχική του θέση.

1. Συνεπώς, *στην κβαντομηχανική είναι αδύνατον να μειώσουμε την επίδραση της μετρητικής συσκευής χωρίς να επηρεάσουμε αρνητικά την ακρίβεια της μέτρησης.*

2. *Ούτε μπορούμε να προβλέψουμε την επίδραση της μετρητικής συσκευής ώστε να διορθώσουμε το προκύπτον αποτέλεσμα.*

Το δεύτερο αυτό χαρακτηριστικό προκύπτει από την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης. Ας δούμε γιατί:
Έστω ότι θέλουμε να μετρήσουμε κάποιο φυσικό μέγεθος που περιγράφεται από τον Ερμιτιανό τελεστή A με διακριτές ιδιοτιμές $a_1, a_2, ...$ και με αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις ψ_1, ψ_2,....Μια τυχαία κατάσταση του μετρούμενου συστήματος περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση η οποία στο σύστημα των ιδιοσυναρ-

τήσεων του A γράφεται ως

$$\psi = \sum_{i=1} c_i \psi_i.$$

Σύμφωνα με την στατιστική ερμηνεία, είναι αδύνατον να προβλέψουμε το αποτέλεσμα της μέτρησης εκ των προτέρων, το μόνο που μπορούμε να πούμε είναι πως η μέτρηση θα δώσει οπωσδήποτε μια τιμή εκ των $a_1, a_2, ...$ και αν επαναλάβουμε την μέτρηση πολλές φορές, μπορούμε να υπολογίσουμε την συχνότητα εμφάνισης καθενός εξ αυτών των πιθανών αποτελεσμάτων, που (για μεγάλο αριθμό πειραμάτων/επαναλήψεων), δεν θα είναι άλλη από την πιθανότητα της αντίστοιχης ιδιοτιμής και η οποία όπως είδαμε θα είναι

$$p_i = |c_i|^2.$$

Ας περιοριστούμε σε μια συγκεκριμένη μέτρηση η οποία έδωσε αποτέλεσμα a_i. Σύμφωνα με τα παραπάνω, είναι αδύνατον, από αυτή την μέτρηση και μόνο, να καθορίσουμε την κατάσταση του συστήματος *πριν* τη μέτρηση (είναι σαν να θέλουμε να προσδιορίσουμε ένα διάνυσμα, και μάλιστα διάνυσμα που ανήκει σε διανυσματικό χώρο απείρων διαστάσεων οπότε θα έχει άπειρες συνιστώσες, γνωρίζοντας μόνο μια συνιστώσα του, κάτι τέτοιο είναι αδύνατον). Λόγω της στατιστικής ερμηνείας, δεν υπάρχει αντιστοιχία 1-1 μεταξύ αρχικής και τελικής κατάστασης σε μια μέτρηση. *Η ίδια αρχική κατάσταση μπορεί να δώσει πολλά διαφορετικά αποτελέσματα*, οπότε το αποτέλεσμα μιας συγκεκριμένης μέτρησης δεν μπορεί να μας διαφωτίσει για την κατάσταση του συστήματος πριν τη μέτρηση. Όμως μπορεί να μας πει τουλάχιστον ποια θα είναι η κατάσταση του συστήματος *μετά* τη μέτρηση (για να δικαιολογεί τουλάχιστον το όνομά της ως μέτρηση!)

Για το ποια θα είναι η κατάσταση του συστήματος μετά τη μέτρηση σκεφτόμαστε ως εξής: αν κάνουμε μια μέτρηση του μεγέθους A και πάρουμε την τιμή έστω a_i, είναι λογικό να απαιτήσουμε πως μια δεύτερη μέτρηση του ίδιου μεγέθους αμέσως μετά την πρώτη μέτρηση, θα πρέπει να δώσει με βεβαιότητα, δηλαδή με μηδενική διασπορά, το ίδιο αποτέλεσμα. Αυτό θα συμβεί μόνο αν μετά την πρώτη μέτρηση το σύστημα βρεθεί στην αντίστοιχη ιδιοκατάσταση ψ_i. Συνοψίζοντας λοιπόν έχουμε το εξής:

Αν μια μέτρηση του φυσικού μεγέθους A δώσει την ιδιοτιμή του a_i, τότε η κατάσταση του συστήματος μετά την μέτρηση θα περιγράφεται από την αντίστοιχη με την μετρούμενη ιδιοτιμή ιδιοσυνάρτηση ψ_i.

Αυτή η αρχή είναι γνωστή ως *κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης (colapse of the wave function)*. Είναι μια μη συνεχής διαδικασία σε αντίθεση με την

χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης που περιγράφεται όπως είδαμε από την εξίσωση του Schrödinger που είναι συνεχής διαδικασία. Η παραπάνω ερμηνεία έχει επιβεβαιωθεί μέχρι σήμερα με πληθος πειραμάτων.

Σημείωση: Σύμφωνα με την στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης που περιγράψαμε, δεν έχει νόημα η ερώτηση *που βρίσκεται ένα σωμάτιο μεταξύ δύο μετρήσεων*. Εξ' αιτίας αυτού, ο A. Einstein, που σημειώνουμε πως ήταν ένας από τους βασικούς θεμελιωτές της κβαντομηχανικής λόγω της ερμηνείας του για το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, θεωρούσε πως η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης (σχολή της Κοπεγχάγης), είναι παράλογη ή υπερβολικά απλοϊκή. Σε ένα γράμμα του στον M. Born το 1929 έγραψε την περίφημη πια ιστορική φράση

Ο Θεός δεν παίζει ζάρια

και θεωρούσε πως η στατιστική ερμηνεία ήταν αποτέλεσμα άγνοιας κάποιων *κρυφών μεταβλητών*, τις οποίες εάν τις γνωρίζαμε, θα μπορούσαμε να πούμε *που* βρίσκεται κάποιο σωμάτιο μεταξύ δύο διαδοχικών μετρήσεων. Η ελπίδα του ήταν πως αυτές οι κρυφές μεταβλητές δεν θα ήταν ασύμβατες με την στατιστική ερμηνεία αλλά θα την συμπλήρωναν. Ο Einstein πίστευε πως η ερμηνεία της σχολής της Κοπεγχάγης ήταν πολύ "φθηνή" ενώ στην πραγματικότητα συμβαίνει το ακριβώς αντίθετο: η στατιστική ερμηνεία είναι πολύ "ακριβή" λόγω του *μη τοπικού χαρακτήρα της*. Το 1964 ο Αμερικανός J. Bell (από τον οποίο πήραν το ονομά τους τα γνωστά εργαστήρια Bell), απέδειξε ότι κάποιες προγνώσεις της κβαντομηχανικής δεν μπορούν να αναπαραχθούν από καμία ντετερμινιστική θεωρία (αυτές είναι γνωστές ως *οι ανισότητες Bell της κβαντομηχανικής*). Το 1980 ο Γάλλος Alain Aspect (βραβείο Νομπέλ) επιβεβαίωσε πανιγυρικά της ανισότητες Bell σε σχετικά πειράματα σκέδασης με ηλεκτρόνια, με αποτέλεσμα να καταρρεύσει πλήρως η θεωρία των κρυφών μεταβλητών. Αυτό δεν αποτελεί αποτυχία του Einstein αλλά μάλλον αποτυχία της ανθρώπινης φαντασίας, μιας και όπως είχε πει ο R. Feynman, (βραβείο Νομπέλ 1965),

"...κανείς δεν καταλαβαίνει πραγματικά την κβαντομηχανική."

Οι ανισότητες Bell αποτελούν στις μέρες μας (περί το 1990) το σημείο αφετηρίας της λεγόμενης *κβαντικής κρυπτογραφίας*. Λίγα χρόνια αργότερα, το 1998, ο μη-τοπικός χαρακτήρας της κβαντομηχανικής έδωσε το έναυσμα για μια καινούργια προσέγγιση του προβλήματος της κβάντωσης του πεδίου βαρύτητας που λέγεται *αρχή ολογραφίας* από τους Βρετανούς S. Hawking, R. Penrose και τον Ολλανδό G. 't Hooft (βραβείο Νομπέλ 1999).

8 Η Σχέση Αβεβαιότητας

8.1 Συμβιβαστά και Ασυμβίβαστα Φυσικά Μεγέθη

Ορισμός 1. Δύο μεγέθη ονομάζονται *συμβιβαστά* εάν μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια. Στην αντίθετη περίπτωση λέγονται *ασυμβίβαστα*.

Πρόταση 1. Δύο μεγέθη είναι συμβιβαστά εάν και μόνον εάν οι τελεστές τους μετατίθενται.

Απόδειξη:
(Θα αποδείξουμε μόνο το ένα σκέλος, για το δεύτερο παραπέμπουμε στην βιβλιογραφία). Έστω ότι τα μεγέθη A και B είναι συμβιβαστά, οπότε μετρώνται και τα δύο με απόλυτη ακρίβεια. Είδαμε πως για να μετρηθεί ένα μέγεθος A με απόλυτη ακρίβεια, θα πρέπει το σύστημα να βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση του τελεστή A. Αφού όμως και το μέγεθος B μετράται με απόλυτη ακρίβεια, τότε το σύστημα θα βρίσκεται και σε μια ιδιοκατάσταση του τελεστή B. Αυτό μπορεί να συμβαίνει μόνο εάν οι τελεστές A και B έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων, έστω $\{\psi_n\}$, συνεπώς θα πρέπει να ικανοποιούνται ταυτόχρονα οι εξισώσεις ιδιοτιμών

$$A\psi_n = a_n\psi_n$$

και

$$B\psi_n = b_n\psi_n.$$

Δρούμε στην πρώτη εξίσωση με τον τελεστή B και στην δεύτερη με τον A και παίρνουμε:

$$BA\psi_n = Ba_n\psi_n = a_nB\psi_n = a_nb_n\psi_n$$

και

$$AB\psi_n = Ab_n\psi_n = b_nA\psi_n = b_na_n\psi_n.$$

Τα a_n και b_n είναι πραγματικοί αριθμοί οπότε ο πολλαπλασιασμός είναι αντιμεταθετικός, συνεπώς προκύπτει ότι

$$AB\psi_n = BA\psi_n.$$

Η παραπάνω σχέση αληθεύει για κάθε ιδιοσυνάρτηση ψ_n, οπότε θα αληθεύει και για κάθε κυματοσυνάρτηση ψ που θα γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός $\psi = \sum_n c_n\psi_n$ (αφού οι τελεστές A και B είναι γραμμικοί και Ερμιτιανοί οι ιδιοτιμές τους θα είναι πραγματικές και οι ιδιοσυναρτήσεις τους θα αποτελούν ορθοκανονική βάση του χώρου Χίλμπερτ). Άρα

$$AB = BA \Leftrightarrow [A, B] = 0.$$

8.2 Η Γενικευμένη Σχέση Αβεβαιότητας

Με βάση το αποτέλεσμα της προηγούμενης παραγράφου, έχει ενδιαφέρον να δούμε σε περίπτωση που δύο μεγέθη δεν είναι συμβιβαστά, πότε ελαχιστοποιείται το γινόμενο των αβεβαιοτήτων τους. Θα αποδείξουμε λοιπόν την παρακάτω Πρόταση:

Πρόταση 1. Εάν δύο μεγέθη A δεν B συμβιβαστά, τότε ισχύει η σχέση

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}| < [A, B] > |.$$

Απόδειξη: Οι αβεβαιότητες (ΔA) και (ΔB) ορίζονται από τις σχέσεις

$$(\Delta A)^2 =< A^2 > - < A >^2$$

και

$$(\Delta B)^2 =< B^2 > - < B >^2 .$$

Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι

$$< A >=< B >= 0,$$

διότι σε αντίθετη περίπτωση μπορούμε να εισάγουμε τους τελεστές

$$\tilde{A} = A- < A >$$

και

$$\tilde{B} = B- < B >$$

που έχουν τον ίδιο μεταθέτη με τους A και B

$$[A, B] = [\tilde{A}, \tilde{B}]$$

και μηδενική μέση τιμή

$$< \tilde{A} >=< \tilde{B} >= 0$$

οπότε μπορούμε να συνεχίσουμε την απόδειξη με τους $\tilde{A}$ και $\tilde{B}$ αντί των A και B. Συνεπώς θα έχουμε

$$(\Delta A)^2 =< A^2 >=< \psi|A^2|\psi >=< A\psi|A\psi >= ||A\psi||^2 \Rightarrow \Delta A = ||A\psi||$$

και

$$(\Delta B)^2 =< B^2 >=< \psi|B^2|\psi >=< B\psi|B\psi >= ||B\psi||^2 \Rightarrow \Delta B = ||B\psi||.$$

Στη συνέχεια εφαρμόζουμε την ανισότητα του Schwartz και παίρνουμε

$$(\Delta A)(\Delta B) = ||A\psi|| \cdot ||B\psi|| \geq | < A\psi|B\psi > |.$$

Όμως

$$< A\psi|B\psi > = < \psi|AB|\psi > = < AB >$$

οπότε αν την αντικαταστήσουμε στην προηγούμενη θα πάρουμε

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq | < AB > |.$$

Για να ολοκληρωθεί η απόδειξη θα πρέπει να δείξουμε ότι

$$| < AB > | \geq \frac{1}{2}| < [A, B] > |.$$

Εξ υπόθεσης $AB \neq BA$, ο τελεστής $C = AB$ δεν είναι Ερμιτιανός οπότε η μέση τιμή του θα έχει πραγματικό και φανταστικό μέρος, τα οποία δίδονται από τους τύπους

$$\Re < C > = < \frac{C + C^\dagger}{2} >$$

και

$$\Im < C > = < \frac{C - C^\dagger}{2i} >,$$

κατ΄ αντιστοιχία με τις γνωστές σχέσεις που ισχύουν στους μιγαδικούς αριθμούς. Για

$$C = AB \Rightarrow C^\dagger = (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA,$$

επειδή οι A και B είναι Ερμιτιανοί, θα πάρουμε

$$\Re < AB > = < \frac{AB + BA}{2} >$$

και

$$\Im < AB > = < \frac{AB - BA}{2i} > = \frac{1}{2i} < [A, B] > .$$

Όμως το μέτρο ενός μιγαδικού αριθμού είναι μεγαλύτερο ή ίσο τόσο από την απόλυτη τιμή του πραγματικού όσο και από την απόλυτη τιμή του φανταστικού μέρους του, οπότε θα ισχύει

$$| < AB > | \geq |\Im < AB > | = \frac{1}{2}| < [A, B] > |.$$

Ως παράδειγμα μπορούμε να υπολογίσουμε τον μεταθέτη $[x, p_x]$ και να βρούμε την περίφημη *σχέση αβεβαιότητας του Heisenberg*:

Πράγματι,

$$(xp_x)\psi = x(p_x\psi) = -i\hbar x\psi'$$

ενώ

$$(p_x x)\psi = p_x(x\psi) = -i\hbar(x\psi)' = -i\hbar(\psi + x\psi').$$

Επομένως

$$(xp_x)\psi - (p_x x)\psi = (xp_x - p_x x)\psi = [x, p_x]\psi = i\hbar\psi,$$

οπότε

$$[x, p_x] = i\hbar.$$

Εφαρμόζοντας την σχέση της πρότασης 1 θα πάρουμε

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2},$$

διότι

$$< [x, p_x] >=< i\hbar >=< \psi|i\hbar|\psi >= i\hbar < \psi|\psi >= i\hbar \cdot 1 = i\hbar$$

αφού η κυματοσυνάρτηση ψ είναι κανονικοποιημένη και ο τελεστής $[x, p_x]$ ναι μεν δεν είναι Ερμιτιανός για να έχει πραγματική μέση τιμή αλλά $|i\hbar| = \hbar$.

9 Η Χρονική Μεταβολή των Μέσων Τιμών

Είναι σαφές πως από τη στιγμή που η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ μεταβάλλεται με τον χρόνο, το ίδιο θα συμβαίνει και με την μέση τιμή κάποιου μεγέθους A. Πιο συγκεκριμένα, ισχύει το εξής:

Πρόταση 1. Η χρονική μεταβολή της μέσης τιμής ενός μεγέθους A δίδεται από τη σχέση

$$i\hbar\frac{d<A>}{dt}=<[A,H]>.$$

Απόδειξη:
Η μέση τιμή του μεγέθους A ως γνωστόν δίδεται από τη σχέση

$$<A>=<\psi|A|\psi>=\int\psi^*(A\psi)dV,$$

την οποία παραγωγίζουμε ως προς το χρόνο και παίρνουμε

$$\frac{d<A>}{dt}=\frac{d}{dt}<\psi|A|\psi>=<\frac{\partial\psi}{dt}|A|\psi>+<\psi|A|\frac{\partial\psi}{dt}>,$$

εφαρμόζοντας τον κανόνα του Leibniz για την παράγωγο του γινομένου και υποθέτοντας πως ο τελεστής A δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από το χρόνο (αυτό συμβαίνει σχεδόν πάντα με όλους τους τελεστές εκτός κυρίως της Χαμιλτονιανής).

Από την εξίσωση του Schrödinger υπολογίζουμε ότι

$$\frac{\partial\psi}{dt}=\frac{1}{i\hbar}(H\psi),$$

την οποία την αντικαθιστούμε στην παραπάνω και παίρνουμε

$$\frac{d<A>}{dt}=<\frac{1}{i\hbar}H\psi|A\psi>+<\psi|\frac{1}{i\hbar}AH|\psi>=-\frac{1}{i\hbar}<H\psi|A\psi>+\frac{1}{i\hbar}<\psi|AH|\psi>=$$

$$-\frac{1}{i\hbar}<\psi|HA|\psi>+\frac{1}{i\hbar}<\psi|AH|\psi>=$$

$$=\frac{1}{i\hbar}<\psi|(AH-HA)|\psi>=\frac{1}{i\hbar}<\psi|[A,H]|\psi>=\frac{1}{i\hbar}<[A,H]>.$$

Ορισμός 1. Ένα μέγεθος λέγεται *διατηρητικό* εάν η μέση τιμή του παραμένει σταθερή με το χρόνο.

Πόρισμα 1. Από την Πρόταση 1 έπεται ότι ένα μέγεθος είναι διατηρητικό εάν και μόνον εάν ο τελεστής του μετατίθεται με την Χαμιλτονιανή.

Αναφέρουμε επίσης χωρίς απόδειξη και τις παρακάτω σημαντικές προτάσεις:

Πρόταση 2. Εάν κάποιο μέγεθος διατηρείται κλασικά, θα διατηρείται και η μέση τιμή του αντίστοιχου κβαντικού μεγέθους.

Πρόταση 3. Τα διατηρήσιμα μεγέθη σε κλασικό επίπεδο συνδέονται με κάποια συμμετρία: για παράδειγμα η διατήρηση της ενέργειας συνδέεται με την συμμετρία μεταφοράς χρόνου, η διατήρηση της ορμής συνδέεται με την συμμετρία μεταφοράς χώρου και η διατήρηση της στροφορμής συνδέεται με την συμμετρία ενός συστήματος σε στροφές. Αυτή η πρόταση είναι γνωστή ως *Θεώρημα Noether* και έχει πολύ σπουδαία σημασία για την φυσική. Εξ' αιτίας της πρότασης 2 αυτό ισχύει και σε κβαντικό επίπεδο.

Πρόταση 4. Οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών στο κβαντικό επίπεδο ακολουθούν τις εξισώσεις που διέπουν τα αντίστοιχα κλασικά μεγέθη. Αυτή η πρόταση είναι γνωστή ως *Θεώρημα Ehrenfest*.

Σημείωση 1: Υπάρχουν κάποιες περιπτώσεις που μια κλασική συμμετρία δεν *επιζεί* στο κβαντικό επίπεδο. Τότε μιλάμε για ύπαρξη μιας *ανωμαλίας*. Οι ανωμαλίες παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στην κβαντική θεωρία πεδίων.

10 Ανακεφαλαίωση των Βασικών Αρχών της Κβαντομηχανικής

Συνοψίζουμε τις Βασικές Αρχές της Κβαντομηχανικής (ερμηνεία της Σχολής της Κοπεγχάγης):

1. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

Σε κάθε φυσική κατάσταση ενός συστήματος αντιστοιχεί μια τετραγωνικά ολοκληρώσιμη μιγαδική συνάρτηση, έστω ψ, που λέγεται *κυματοσυνάρτηση*. Το σύνολο όλων αυτών αποτελεί μιγαδικό διαχωρίσιμο χώρο Χίλμπερτ απείρων διαστάσεων. Η κυματοσυνάρτηση δεν έχει άμεσο φυσικό νόημα αλλά περιέχει όλες τις πειραματικά ελέγξιμες πληροφορίες για το φυσικό σύστημα που περιγράφει. Η ποσότητα $\psi^*\psi = |\psi|^2$ εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί ένα σωμάτιο σε κάποια περιοχή του χώρου. Για να είναι συνεπής με αυτή την στατιστική ερμηνεία η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι *κανονικοποιημένη*, δηλαδή

$$\int \psi^*\psi = 1.$$

Η συνθήκη κανονικοποίησης εκφράζει την *διατήρηση της πιθανότητας*.

2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΜΕΓΕΘΩΝ

Σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας γραμμικός Ερμιτιανός τελεστής, έστω A, ο οποίος προκύπτει από την αντίστοιχη κλασική έκφραση του εν λόγω μεγέθους μέσω του κανόνα αντικατάστασης

$$\vec{r} \mapsto \hat{r} = \vec{r}$$

και

$$\vec{p} \mapsto \hat{p} = -i\hbar\nabla$$

Οι μόνες δυνατές τιμές σε μια μέτρηση του μεγέθους αυτού είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή A, που μπορεί να είναι διακριτές ή συνεχείς, αλλά σίγουρα πάντα *πραγματικές* λόγω της αυτοσυνάφειας.

3. ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΟΥ ΦΟΡΜΑΛΙΣΜΟΥ

• Η μέση τιμή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων ενός φυσικού μεγέθους που εκφράζεται από τον γραμμικό Ερμιτιανό τελεστή A, δίδεται από την σχέση

$$< A >=< \psi|A|\psi >= \int \psi^*(A\psi)dV.$$

• Η χρονική εξέλιξη της μέσης τιμής δίδεται από τη σχέση

$$\frac{d < A >}{dt} = \frac{1}{i\hbar} < [A, H] > + < \frac{\partial A}{\partial t} >,$$

όπου H ο τελεστής της Χαμιλτονιανής, ο οποίος προκύπτει από την κλασική έκφραση της ολικής ενέργειας του συστήματος εφαρμόζοντας τον κανόνα αντικατάστασης 2 παραπάνω.

• Αν ο γραμμικός Ερμιτιανός τελεστής A έχει διακριτό φάσμα με ιδιοτιμές $\{a_i\}$ και ιδιοσυναρτήσεις $\{\psi_i\}$, τότε οι ιδιοσυναρτήσεις αποτελούν ορθοκανονική βάση του χώρου Χίλμπερτ. Σε μια κατάσταση υπέρθεσης

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i,$$

όπου

$$c_i =< \psi_i | \psi >,$$

η πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής a_i που αντιστοιχει στην ιδιοσυνάρτηση ψ_i είναι

$$p_i = |c_i|^2.$$

Προφανώς από την συνθήκη κανονικοποίησης θα έχουμε

$$\sum_i p_i = \sum_i |c_i|^2 = 1.$$

4. Ο ΝΟΜΟΣ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΜΕΤΡΗΣΗΣ

Η κατάσταση του φυσικού συστήματος μετά από μια μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους δίδεται από την ιδιοσυνάρτηση της ιδιοτιμής που μετρήθηκε. Αυτό αναφέρεται ως *κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης* κατά τη μέτρηση διότι από την επαλληλία

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i,$$

πριν τη μέτρηση, το σύστημα μεταβαίνει στην κατάσταση

$$\psi = c_i \psi_i$$

μετά τη μέτρηση, υποθέτοντας πως το αποτέλεσμα της μέτρησης ήταν η ιδιοτιμή a_i.

5. Ο ΝΟΜΟΣ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΚΙΝΗΣΗΣ

Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης ενός κβαντομηχανικού συστήματος διέπεται από την εξίσωση του Schrödinger

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

όπου H ο τελεστής της Χαμιλτονιανής του συστήματος.

6. Η ΣΧΕΣΗ ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑΣ

Αν ο μεταθέτης $[A, B]$ δύο γραμμικών Ερμιτιανών τελεστών A και B είναι μηδέν, τότε οι τελεστές αυτοί έχουν κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων και τα αντίστοιχα φυσικά μεγέθη μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια. Γενικότερα ισχύει η παρακάτω *γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας*

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}| < [A, B] > |.$$

11 Ασκήσεις - Φύλλο 1:

(1). (Τ-1-111) Υπολογίστε τις ποσότητες $< x >$ και Δx ενός σωματιδίου του οποίου η κατάσταση σε μια ορισμένη χρονική στιγμή περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = Ne^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}.$$

Υπολογίστε πρώτα την σταθερά κανονικοποίησης N.

(2). (Β-1-335) Να βρείτε ποια συνθήκη πρέπει να ικανοποιούν οι συναρτήσεις ώστε να υπάρχει ο αντίστροφος του γραμμικού τελεστή

$$K = \int_0^x dt, 0 \leq x \leq 1.$$

(3). (Β-1-347) Να δείξετε ότι ο τελεστής

$$A = \int_0^1 dt,$$

είναι Ερμιτιανός (αυτοσυναφής ή αυτοπροσηρτημένος).

(4). (Λ-37) Ο τελεστής μεταφοράς T_a σε μια χωρική διάσταση κατά μήκος $a \in \mathbb{R}$ ορίζεται από τη σχέση

$$T_a f(x) = f(x + a).$$

Εάν A τυχαίος γραμμικός τελεστής, ορίζεται ο επίσης γραμμικός τελεστής e^A ως εξής:

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}.$$

Να δείξετε ότι

$$e^{aD} = T_a,$$

όπου $D = \frac{d}{dx}$.

(5). (Λ-42) Να βρεθούν οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του γραμμικού τελεστή

$$A = x + \frac{d}{dx}.$$

(Οι ιδιοσυναρτήσεις να είναι πεπερασμένες, συνεχείς και μονότιμες).

12 Ασκήσεις - Φύλλο 2:

(Σε όλα τα προβλήματα να υποθέσετε για ευκολία μία χωρική διάσταση).

(1). Δείξτε ότι η μέση τιμή $< p >$ της ορμής ενός σωματιδίου είναι μηδέν όταν το σωμάτιο περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ η οποία είναι
α. πραγματική
β. άρτια ή περιττή.

(2). Να βρεθούν και να κανονικοποιηθούν οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών θέσης και της ορμής.

(3). Να ελέγξετε ότι οι τελεστές της θέσης και της ορμής είναι Ερμιτιανοί (αυτοσυζυγείς).

(4). Να υπολογισθεί η κυματοσυνάρτηση της ορμής $c(p)$ ενός σωματίου με απόλυτα καθορισμένη θέση $x = 0$.

(5). Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματίου σε κάποια χρονική στιγμή είναι

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\lambda/\pi}e^{-\lambda x^2/2},$$

όπου λ κάποια πραγματική σταθερά. Να υπολογίσετε την κυματοσυνάρτηση της ορμής $c(p)$, την μέση τιμή της ορμής $< p >$ και την αβεβαιότητα της ορμής Δp.

(6). Να επιλύσετε την εξίσωση του Schrödinger για σωμάτιο που βρίσκεται σε πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους και πλάτους L.

(7). Να υπολογισθεί ο συντελεστής διέλευσης δέσμης μονοενεργειακών σωματιδίων ενέργειας E που σκεδάζονται από φράγμα δυναμικού ύψους V_0 και πλάτους L, στην περίπτωση που $E < V_0$ (*φαινόμενο σύραγγος*).

Αναφορές

[1] Back, B., Macaulay, V.A. : *Maximum Entropy in Action*, Oxford, (2001).

[2] Ballentine, L.E. : *Quantum Mechanics*, Prentice Hall, (1990).

[3] Bohm, D. : *Quantum Theory*, Prentice Hall, (1968).

[4] Bransden, B. H., Joachaim C. J.: *Quantum Mechanics*, Pearson (2005).

[5] Cohen-Tannoudji, C. : *Quantum Mechanics*, Wiley, (1977).

[6] Davies, V. : *Quantum Mechanics*, Routledge, (1984).

[7] de la Madrid, R. : *The Role of the Rigged Hilbert Space in Quantum Mechanics*, Eur. J. Phys. 26, 287 (2005).

[8] Dieudonné, J. : *Eléments d' Analyse*, Paris (1978).

[9] Dirac, P. A. M. : *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford (reprint 2003).

[10] Feynman, R., Leighton, M., Sands, B. : *The Feynman Lectures in Physics*, Addison-Wesley (1970).

[11] Gasiorowicz, S.: *Quantum Physics*, Wiley (2003).

[12] Grant, I. P. : *Quantum Theory*, Undergraduate Lecture Notes, Mathematical Institute, Oxford University (2004).

[13] Griffiths, D. J. : *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson (2005).

[14] Hannabuss, K. C. : *Introduction to Quantum Theory*, Oxford, (1998).

[15] Hey, A., Walters, P. : *The New Quantum Universe*, Cambridge, (2003).

[16] Isham, C. J. : *Lectures on Quantum Theory: Mathematical and Structural Foundations*, Imperial College, (1995).

[17] Jaynes, E.T. : *Gibbs vs Boltzmann Entropies*, Am. Jour. Phys., Vol.33 No5, 1965 (391-398).

[18] Jackson, J.D. : *Mathematics for Quantum Mechanics*, Benjamin, (1962).

[19] Landau, L.D., Lifschitz, E.M. : *Quantum Mechanics*, Oxford (1968).

[20] Landshoff, P.V., Metherell, A.J.F., Rees, W.G. : *Essential Quantum Physics*, Cambridge, (1997).

[21] Mandl, F. : *Quantum Mechanics*, John Wiley, (1992).

[22] Merzbacher, E. : *Quantum Mechanics*, Wiley, (1998).

[23] Messiah, A. : *Quantum Mechanics*, Vol I and II, North Holland, (1970).

[24] Ohanian, H. : *Principles of Quantum Mechanics*, Prentice Hall, (1989).

[25] Penrose, R. : *The Emperor's New Mind*, Oxford, (1995).

[26] Penrose, R. : *The Road to Reality*, Oxford, (2005).

[27] Polkinghorne, J.C. : *The Quantum World*, Longman, (1984).

[28] Rae, A.I.M. : *Quantum Mechanics*, Institute of Physics Publishing, (2002).

[29] Sakurai, J. J. : *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, (1993).

[30] Shankar, R. : *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, (1994).

[31] Sudbery, A. : *Quantum Mechanics and the Particles of Nature*, Cambridge, (1986).

[32] Schiff, L.I. : *Quantum Mechanics*, McGraw Hill (1968).

[33] Townsend, P.K. : *Lecture Notes on Quantum Mechanics*, DAMTP, Cambridge University. (2006).

[34] Ανδριτσόπουλος, Γ. Ι. : *Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική*, Ιωάννινα, (1984).

[35] Ταμβάκης, Κ. : *Κβαντική Μηχανική*, Ιωάννινα, (1985).

[36] Τραχανάς, Σ. : *Κβαντομηχανική Ι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, (1989).