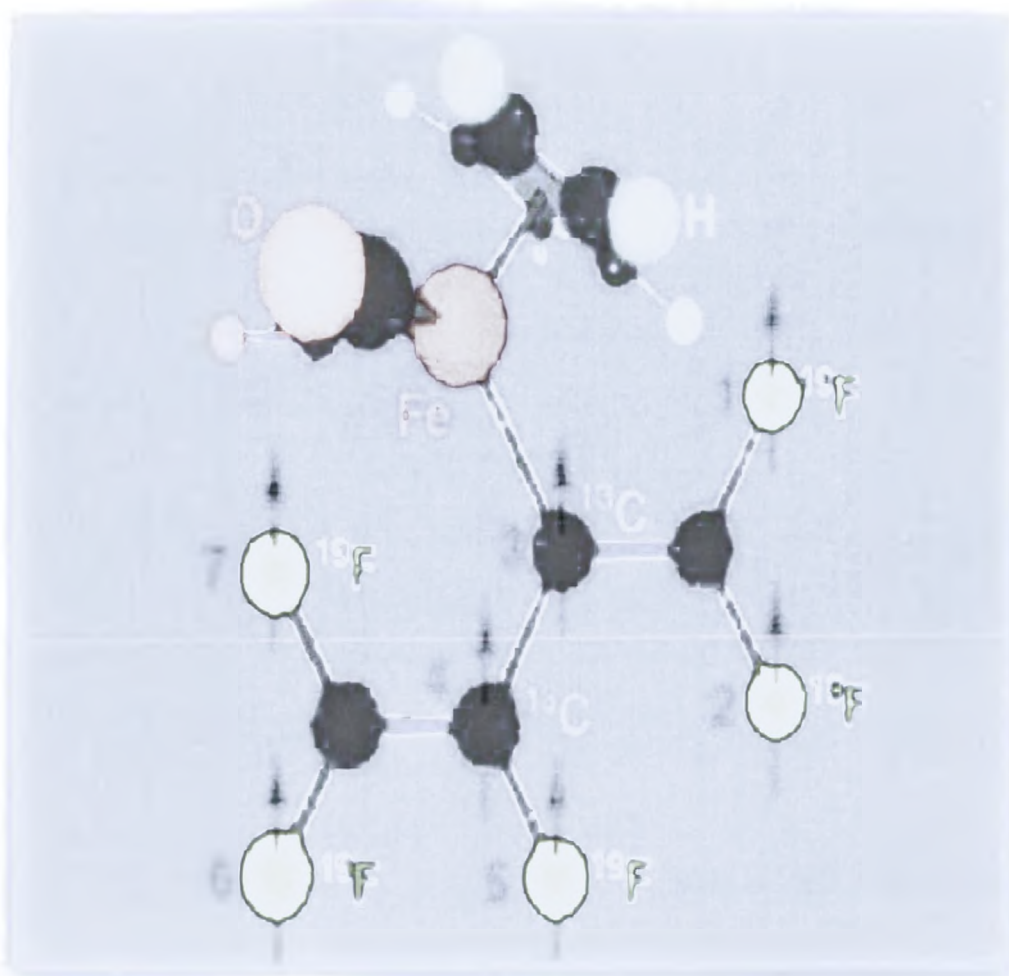


ΤΕΙ ΜΕΣΣΟΛΟΓΓΙΟΥ
ΤΜΗΜΑ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΣΤΗΝ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑ
ΚΑΙ ΤΗΝ ΔΙΟΙΚΗΣΗ

Βιβλιοθήκη ΤΕΙΜ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Κβαντικοί Υπολογιστές



ΠΑΠΠΑ ΑΝΝΑ
ΤΣΑΜΠΟΥΡΑ ΜΕΡΟΠΗ

Επιβλέπων καθηγητής: ΔΡ. ΛΑΜΠΡΟΣ ΔΡΟΣΟΣ

ΤΕΙ ΜΕΣΣΟΛΟΓΓΙΟΥ
ΕΠΙΣΤΗΜΗ
ΑΡΙΘ. Εισαγωγής 50

ΤΕΙ ΜΕΣΟΛΟΓΓΙΟΥ
ΤΜΗΜΑ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΣΤΗΝ ΔΙΟΙΚΗΣΗ
ΚΑΙ ΤΗΝ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ

ΠΑΠΠΑ ANNA
ΤΣΑΜΠΟΥΡΑ ΜΕΡΟΠΗ

Επιβλέπων καθηγητής: ΔΡ. ΛΑΜΠΡΟΣ ΔΡΟΣΟΣ

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Έχοντας ολοκληρώσει την παρούσα πτυχιακή εργασία θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε:

Τον επίβλέποντα Αναπληρωτή Καθηγητή Δρ. Λάμπρο Δρόσο, του Τμήματος Εφαρμοσμένης Πληροφορικής στην Οικονομία και στην Διοίκηση του Τ.Ε.Ι Μεσολογγίου, που με την εμπειρία και τις γνώσεις, τις ιδέες, τις προτάσεις και υποδείξεις του συνέβαλε καθοριστικά στην ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Τον Επίκουρο Καθηγητή της Ακαδημίας Αθηνών κ. Χ. Ευθυμιόπουλο και την κ. Δρ. Μαρία Αδάμ του Τμήματος Εφαρμοσμένης Πληροφορικής στην Οικονομία και στη Διοίκηση του Τ.Ε.Ι Μεσολογγίου, για την σημαντική βοήθεια τους κατά την διάρκεια αυτής της εργασίας.

Οφείλουμε επίσης ευχαριστίες στον Καθηγητή Δημήτριο Π.Κ.Γκίκα του τμήματος Φυσικής, του Πανεπιστημίου Πατρών για την παροχή βιβλιογραφίας και τις σημαντικές παρατηρήσεις του στα πρώτα στάδια της εργασίας αυτής.

Τέλος, θέλουμε να ευχαριστήσουμε το επιστημονικό Δυναμικό του Τμήματος Εφαρμογών Πληροφορικής στην Οικονομία και στην Διοίκηση του Τ.Ε.Ι Μεσολογγίου που όλα αυτά τα χρόνια δημιούργησε όλες τις υποδομές για να φθάσουμε ως αυτό το στάδιο.

Παππά Κ. Άννα
Τσάμπουρα Χ. Μερόπη

Στους κόπους και τις θυσίες των
γονιών μας να μας μεγαλώσουν
και να μας σπουδάσουν.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	3
Πρόλογος	5
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ιστορική Αναδρομή	7
1.1 Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική	7
1.2 Οι πρωτοπόροι της Κβαντικής Θεωρίας	8
1.3 MAX PLANCK: Ο Ιδρυτής της κβαντομηχανικής.....	8
1.3.1 Η αινιγματική εντροπία	8
1.3.2 Ακτινοβολία μέλανος σώματος	8
1.3.3 Διαφωνία με τη θεωρία	8
1.3.4 Ένας συντηρητικός επαναστάτης	8
1.4 Einstein: Ο ιδρυτής της Κβαντομηχανικής	8
1.5 Max Born (1882-1960): Ο συνιδρυτής της Κβαντομηχανικής.....	8
1.5.1 Η ζωή του.....	8
1.6 Arthur Compton (1892-1962): Ο ερμηνευτής της σκέδασης των ακτινών-Χ.....	8
1.6.1 Η ζωή του.....	8
1.7 Τι είναι η Κβαντομηχανική	8
1.9 Η θεμελίωση της κβαντομηχανικής.....	8
1.10 Οι πίνακες και η αρχή της απροσδιοριστίας	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Αποτυχίες της Κλασσικής θεωρίας	8
2.1 Παλαιά Κβαντική Θεωρία.....	8
2.2 Οπτικά φάσματα	8
2.3. Ακτινοβολία Μέλανος Σώματος	8
2.4 Θεωρία του Planck.....	8
2.5 Αρχή της Αβεβαιότητας του Heisenberg	8
2.6 Αρχή της Αβεβαιότητας Ενέργειας και Χρόνου	8
2.7 Αρχή της Αντιστοιχίας	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Κβαντικοί Υπολογιστές	8
3.1 Βασικές Έννοιες	8
3.1.1 Qubit	8
3.1.2 Τελεστής πυκνότητας.....	8
3.2 Αδυναμία αντιγραφής κβαντικής πληροφορίας.....	8
3.3 Κβαντικός υπολογιστής	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Εξέλιξη και από-συμφωνία.....	8
4.1 Εισαγωγή	8
4.2 Μέτρηση.....	8
4.3 Κβαντικές διεργασίες.....	8

4.4 Η μαρκοβιανή προσέγγιση	8
4.5 Εξίσωση master	8
4.6 Από-συμφωνία	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: Παγωμένα παγιδευμένα ιόντα	8
5.1 Περιγραφή της διάταξης	8
5.2 Από-συμφωνία	8
5.3 Μέθοδοι παγίδευσης ιόντων	8
5.4 Ψύξη βαθμών ελευθερίας με χρήση laser	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: Κβαντική Ηλεκτροδυναμική Κοιλότητα	8
6.1 Περιγραφή της διάταξης	8
6.2 Υλοποίηση των βασικών πυλών	8
6.3 Από-συμφωνία	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: Πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός	8
7.1 Περιγραφή της διάταξης	8
7.2 Μετρήσιμα στην μέθοδο του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού	8
7.3 Υλοποίηση των βασικών πυλών	8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8: Άλλες αρχιτεκτονικές	8
8.1 Κβαντικές Κηλίδες	8
8.2 Επαφή Josephson Junction	8
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	8
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	8

Πρόλογος

Η Κβαντομηχανική αποτελεί τη βάση κάθε σχεδόν θεωρίας των συστημάτων του μικρόκοσμου. Αρχικά ήταν άμεσα συνδεδεμένη με την Κλασσική Φυσική και κυρίως με τους κλάδους, της Κλασσικής Μηχανικής, της Στατιστικής Μηχανικής και της Ηλεκτρομαγνητικής Θεωρίας του Maxwell. Η Κλασσική Φυσική, όπως είναι γνωστό, ασχολείται με μακροσκοπικά φαινόμενα, τα οποία είναι παρατηρήσιμα είτε απ' ευθείας είτε με σχετικά απλά όργανα.

Από τις αρχές του 20ου αιώνα οι φυσικοί έστρεψαν την προσοχή και το ενδιαφέρον τους στη μελέτη των μοριακών, ατομικών και πυρηνικών συστημάτων, στα οποία συμβαίνουν μικροσκοπικά φαινόμενα, δηλαδή φαινόμενα που δεν είναι δυνατό να παρατηρηθούν απ' ευθείας. Υπάρχουν λόγοι, καθώς θα αναπτύξουμε αργότερα, για τους οποίους η ίδια η παρατήρηση διαταράσσει αυθαίρετα το υπό παρατήρηση σύστημα και έτσι το σφάλμα της μετρήσεως φυσικών μεγεθών ενός συστήματος δεν μπορεί να ελαττωθεί απεριόριστα όπως στην Κλασσική Φυσική. Σύντομα έγινε αντιληπτό ότι οι νόμοι, οι μέθοδοι και τα πρότυπα της Κλασσικής Φυσικής δεν ήταν αρκετά για να εξηγήσουν τα φαινόμενα της Μοριακής, Ατομικής και Πυρηνικής Φυσικής.

Οι πρώτες προσπάθειες στην Ατομική Φυσική απέβλεπαν στην υπερνίκηση των δυσκολιών της Κλασσικής Θεωρίας με τροποποίηση νόμων ή με αλλαγή των προτύπων. Οι προσπάθειες αυτές οδήγησαν στην ονομαζόμενη Παλαιά Κβαντική Θεωρία, όπως διαμορφώθηκε με τις εργασίες των Planck, Einstein, Bohr, de Broglie και άλλων. Η πρώτη αυτή μορφή της Κβαντικής Θεωρίας άνοιξε ορίζοντες στην επιστήμη, εξήγησε πολλά από τα τότε γνωστά φαινόμενα, άφηνε όμως πολλά κενά στην κατανόηση άλλων. Οι προσπάθειες συνεχίστηκαν για να καταλήξουν σε επιτυχία την περίοδο 1925-1930, οπότε διατυπώθηκε μια νέα μορφή Κβαντικής Θεωρίας με τις εργασίες των Schrodinger, Heisenberg, Dirac και άλλων.

Η μελέτη του κεντρικού αυτού προβλήματος της Κβαντομηχανικής δηλ. της Κβαντικής μέτρησης και των σχετιζόμενων με αυτήν προβλημάτων της αντιστρεπτότητας ή μη των φυσικών διαδικασιών, της αύξησης ή μη της εντροπίας και των ανοιχτών Κβαντικών συστημάτων, σε ένα νέο αποτέλεσε αντικείμενο εκτενούς μελέτη πολλών ερευνητών.

Οι Κβαντικοί υπολογιστές εκμεταλλεύονται κατά κύριο λόγο την ιδιότητα των στοιχειωδών σωματιδίων της υπέρθεσης καταστάσεων. Μπορεί να κάνουν πολλές πράξεις ταυτόχρονα και να λύσουν προβλήματα των οποίων η πολυπλοκότητα αυξάνει εκθετικά και όχι γραμμικά. Επίσης λειτουργούν με δραματικά μεγάλες

ταχύτητες σε σχέση με τους κλασσικούς υπολογιστές. Τέλος σε σχέση με την Κλασική Φυσική μπορούν να περιγράψουν τη διακριτότητα της ενέργειας, τη δυαδικότητα του φωτός και της ύλης και το φαινόμενο σήραγγος.

Η πτυχιακή εργασία αυτή περιλαμβάνει οκτώ Κεφάλαια.

Το **Κεφάλαιο 1** κάνει μια εισαγωγή στην Κβαντομηχανική, αναφέρει τους πρωτοπόρους της Κβαντικής Θεωρίας, με ιδιαίτερη έμφαση στον Max Planck, τον Einstein, τον Max Born και τέλος τον Arthur Compton και τις ανακαλύψεις τους. Επιπλέον ασχολείται με τον ορισμό της Κβαντομηχανικής, τη σημασία της, τη θεμελίωσή της, τις ιδιότητες της μηχανικής των μητρών και την αρχή της απροσδιοριστίας.

Το **Κεφάλαιο 2** εξετάζει τις αποτυχίες της Κβαντικής Θεωρία. Σύμφωνα με την παλαιά Κβαντική Θεωρεία αναλύονται τα διάφορα φαινόμενα που δεν μπορούσε να εξηγήσει η Κλασική Φυσική όπως, τα οπτικά φάσματα, την ακτινοβολία μέλανος σώματος, τη θεωρεία του Planck, την Αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg, και τέλος την Αρχή αντιστοιχίας.

Το **Κεφάλαιο 3** πραγματεύεται τον ορισμό των Κβαντικών υπολογιστών, δίνοντας τις βασικές έννοιες, τα Qubit και τους τελεστές πυκνότητας. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την αδυναμία αντιγραφής της Κβαντικής πληροφορίας και την έννοια των Κβαντικών υπολογιστών.

Στην συνέχεια αναπτύσσονται διάφορες τεχνολογίες υλοποίησης κβαντικών υπολογιστών. Έτσι:

Το **Κεφάλαιο 4** παρουσιάζει την εξέλιξη και του φαινομένου από-συμφωνίας που εμφανίζεται κατά τη διαδικασία μετρήσεων ή άλλων κβαντικών διεργασιών. Επιπλέον την Μαρκοβιανή προσέγγιση, την εξίσωση Master και τα κύρια χαρακτηριστικά της από-συμφωνίας.

Το **Κεφάλαιο 5** ασχολείται με την αρχιτεκτονική των παγωμένων παγιδευμένων ιόντων, την περιγραφή της διάταξης και τις κυριότερες αιτίες του φαινομένου της από-συμφωνίας. Επίσης τις μεθόδους παγίδευσης ιόντων καθώς και την ψύξη βαθμών ελευθερίας με χρήση laser.

Το **Κεφάλαιο 6** αναλύει την Κβαντική Ηλεκτροδυναμική Κοιλότητα με έμφαση στην περιγραφή της διάταξης, την υλοποίηση των βασικών πυλών και τις κυριότερες πηγές αιτίες του φαινομένου της από-συμφωνίας.

Το **Κεφάλαιο 7** προχωρεί στον πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό με την περιγραφή της διάταξης, τα μετρήσιμα της μεθόδου και την υλοποίηση των βασικών πυλών.

Κλείνοντας την Πτυχιακή εργασία με το **Κεφάλαιο 8** παρουσιάζονται άλλες αρχιτεκτονικές όπως οι κβαντικές Κηλίδες και οι επαφές Josephson.

Επίσης στο παράρτημα δίνεται το μαθηματικό υπόβαθρο για την καλύτερη κατανόηση της εργασίας αυτής.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Ιστορική Αναδρομή

1.1 Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική

Η Φυσική είναι μία επιστήμη, η οποία δεν επιδέχεται τελικές θεωρίες. Ανεξάρτητα με το πόσο έγκυρες είναι οι τρέχουσες θεωρίες, η γενίκευσή τους είναι μόνο θέμα χρόνου.

Είναι επίσης, μια επιστήμη, κεντρικά εξαρτημένη από την μαθηματική επεξεργασία της φυσικής πραγματικότητας με ποσοτικό τρόπο, κατάλληλο για πειραματικές επαληθεύσεις.

Μια φυσική θεωρία αποτελείται από τρία μέρη:

- μια μαθηματική θεωρία,
- μια περιοχή της πραγματικότητας, την οποία ζητάμε να περιγράψουμε με την μαθηματική θεωρία, και
- ένα σύνολο αρχών απεικόνισης.

Στην καρδιά της μαθηματικής θεωρίας έχουμε τον δυναμικό νόμο, ενώ οι αρχές απεικόνισης χρειάζονται για να περιγράψουμε την σχέση μεταξύ της μαθηματικής θεωρίας και της περιοχής της φυσικής πραγματικότητας. Συχνά αυτή η τελευταία σχέση φέρεται υπό τον όρο "ερμηνεία" της μαθηματικής θεωρίας.

Ο μαθηματικός φορμαλισμός της Κβαντικής θεωρίας είναι γνωστός. Όπως και άλλες φυσικές θεωρίες, η Κβαντομηχανική μπορεί να αναπτυχθεί ως συνάρτηση μερικών αξιωματικών διατυπώσεων. Η πλέον σημαντική ιστορικά, διατύπωση είναι αυτή του von Neumann που εκτίθεται στο κλασσικό του έργο πάνω στα μαθηματικά θεμέλια της Κβαντομηχανικής

Η ιδέα του von Neumann να διατυπώσει την Κβαντομηχανική σαν λογισμό τελεστών σε χώρο Hilbert ήταν αναμφίβολα μία από τις πιο μεγάλες καινοτομίες στον χώρο της σύγχρονης Μαθηματικής Φυσικής.

Την ίδια εποχή ο Paul Dirac παρουσίασε την θεωρία του χρησιμοποιώντας δέλτα - συναρτήσεις. Αργότερα, ολοκλήρωσε την θεωρία του με μεγαλύτερη μαθηματική αυστηρότητα αξιοποιώντας τη θεωρία των κατανομών, η οποία αναπτύχθηκε από τον L. Schwartz.

Μια άλλη διατύπωση είναι η αλγεβρική, η οποία πρωτοεμφανίστηκε περί το 1930. Δημιουργοί της είναι οι von Neumann, E.Wigner και P.Jordan, οι οποίοι πρότειναν να ορισθούν άμεσα τα παρατηρήσιμα μεγέθη σαν μία αφηρημένη άλγεβρα. Η παραπέρα επεξεργασία της ιδέας αυτής από τον L.Segal οδήγησε στην διατύπωση της Κβαντομηχανικής με C^* - άλγεβρες.

Οι εργασίες των G. Birkhoff και Von Neumann στην Κβαντική λογική το 1936, και αργότερα του G. Mackey, οδήγησαν στην ανάπτυξη της σύγχρονης Κβαντικής λογικής.

Άλλη διατύπωση της Κβαντομηχανικής είναι αυτή της S – matrix προσέγγισης από τον J.A. Wheeler, η οποία θεωρείται ίσως και το πιο κατάλληλο μαθηματικό πλαίσιο για την ερμηνεία της Σχολής της Κοπεγχάγης .

Σημαντική επίσης θεωρείται και η προσέγγιση των ολοκληρωμοντών δρόμου (path –integral) την οποία πρότεινε και ανέπτυξε ο R. Feynmann, με εφαρμογές κύρια στην Κβαντική θεωρία πεδίου.

Η Κβαντομηχανική, σύμφωνα με την επικρατούσα σήμερα άποψη, είναι η θεωρία που μπορεί να εφαρμοστεί σε κάθε είδους φυσικό σύστημα. Ας περιοριστούμε όμως στο να θεωρήσουμε αυτήν ως τη θεμελιώδη σύγχρονη θεωρία των ατόμων, των μορίων, των στοιχειωδών σωματιδίων, της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και της στερεάς κατάστασης, και ας παρατηρήσουμε ότι μέχρι σήμερα καμία Κβαντομηχανική πρόβλεψη δεν έχει πειραματικά απορριφθεί.

Σε αντίθεση όμως με αυτές της τις επιτυχίες, το βασικό της εννοιολογικό πλαίσιο έχει θεωρηθεί από πολλούς επιστήμονες μη ικανοποιητικό και έχουν γίνει επανειλημμένες προσπάθειες να επανερμηνευτεί ή ακόμα και να αντικατασταθεί από μία θεωρία της οποίας η φιλοσοφική και εννοιολογική βάση θα μπορούσε να γίνει περισσότερο αποδεκτή.

Όμως, η εννοιολογική βάση της Κβαντομηχανικής είναι τόσο θεμελιώδης για την όλη προσπάθεια μας να κατανοήσουμε την φύση, ώστε θα έπρεπε οπωσδήποτε οι φυσικοί να κατανοούν τουλάχιστον την φύση των προβλημάτων που υπάρχουν.

Βέβαια, οι ερμηνείες μιας θεωρίας δεν υπόκεινται σε πειραματική επαλήθευση και έτσι άλλα κριτήρια, αναγκαστικά, χρησιμοποιούνται για να γίνει κάποιου είδους σύγκριση τους. Συγκεκριμένα, συνήθως χρησιμοποιούνται τα εξής κριτήρια:

- (1) Οικονομία στην κατασκευή της ερμηνείας με χρήση του ελάχιστου δυνατού αριθμού παραδοχών.
- (2) Συμβατότητα της μη παρατηρήσιμης δομής της ερμηνείας με τους φυσικούς νόμους ακόμα και αν τέτοιοι νόμοι δεν σχετίζονται άμεσα με την θεωρία που ερμηνεύεται,
- (3) Ευλογοφάνεια των μηχανισμών που χρησιμοποιούνται για την ερμηνεία. Η κοινή λογική δεν είναι πάντοτε αξιόπιστος οδηγός στην Φυσική, αλλά συχνά βοηθά στην σχετική εκλογή μεταξύ ίσων εναλλακτικών απόψεων.
- (4) Εμβάθυνση στον υποκείμενο φυσικό μηχανισμό που βρίσκεται πίσω από τον μαθηματικό φορμαλισμό.

Τελικά, η ερμηνεία δεν πρέπει μόνο να σχετίζει τον μαθηματικό φορμαλισμό με τα φυσικά παρατηρήσιμα, αλλά πρέπει επίσης να ορίζει την περιοχή εφαρμοσιμότητας

του φορμαλισμού και πρέπει να ερμηνεύει τα μη παρατηρήσιμα, με τέτοιο τρόπο, ώστε να αποφεύγονται τα παράδοξα δηλ, οι εσωτερικές αντιφάσεις και οι αντιθέσεις της θεωρίας με άλλες καθιερωμένες θεωρίες.

Στη συνέχεια παραθέτουμε τα κύρια εννοιολογικά ζητήματα που έθεσε η ερμηνεία της Κβαντομηχανικής θεωρίας με δικό μας σχολιασμό, που σε καμιά περίπτωση δεν μπορεί να θεωρηθεί πλήρης. Άλλωστε από μόνο του το κάθε ζήτημα έχει δημιουργήσει ήδη μία πολύ εκτεταμένη βιβλιογραφία. Αυτή η εισαγωγή και παράθεση των εννοιολογικών ζητημάτων γίνεται για να φανεί μέσα σ' αυτό το πλέγμα των ζητημάτων η θέση του προβλήματος της Κβαντομηχανικής μέτρησης που είναι και το αντικείμενο της εργασίας.

Το κεντρικό πρόβλημα της ερμηνείας του Κβαντομηχανικού φορμαλισμού είναι η εξήγηση της φυσικής σημασίας της κυματοσυνάρτησης ή ισοδύναμα του καταστατικού διανύσματος (Κ.Δ.). Έτσι οι αρχικές ημικλασσικές ερμηνείες των de Broglie και Schroedinger θεωρούν σαν πραγματικά τα υλικά κύματα της Κβαντομηχανικής και ανάλογα με αυτά της γνωστής Ηλεκτρομαγνητικής του Maxwell. Αυτή η ερμηνεία παρουσιάζει πολλά προβλήματα και σήμερα έχει σχεδόν εγκαταλειφθεί.

Η Σχολή της Κοπεγχάγης (Σ.Κ.) προσεγγίζει αλλιώς το πρόβλημα με την στατιστική ερμηνεία του Born, όπου το Κ.Δ. είναι πλάτος πιθανότητας. Έτσι το Κ.Δ. είναι το εργαλείο για την περιγραφή των πιθανοτήτων των διαφόρων δυνατών αποτελεσμάτων σε ένα Κβαντικό φαινόμενο. Δηλ. το Κ.Δ. δεν είναι φυσική οντότητα, αλλά μάλλον ένα κωδικοποιημένο μαθηματικό μήνυμα που περιγράφει την γνώση μας (Heisenberg) για μία φυσική οντότητα (σύστημα). Όμως η παραπάνω ερμηνεία του Κ.Δ. αμέσως δημιουργεί πολλά ερωτήματα σχετικά με τις φράσεις "η γνώση μας", "το σύστημα". Αλλά "τίνος γνώση" και τι εννοείται με "το σύστημα"; Θα πρέπει, σύμφωνα με την εν λόγω Σχολή, η εξίσωση Schrödinger να είναι η μαθηματική αναπαράσταση της "γνώσης", κάτι που μοιάζει περίεργο και ίσως προκλητικό.

Η "γνώση" μας, προφανώς συνεπάγεται και κάποιον «αποδέκτη», δηλ. εδώ έχουμε την εισαγωγή παρατηρητή με βαθμούς ελευθερίας που δεν αποτελούν μέρος του Κβαντομηχανικού φορμαλισμού.

Ένα άλλο σημαντικό ζήτημα σε σχέση με το Κ.Δ. είναι το αν περιγράφει την συμπεριφορά ξεχωριστών Κβαντικών συστημάτων π.χ. ενός ηλεκτρονίου ή μιας στατιστικής συλλογής όμοια προπαρασκευασμένων συστημάτων (ensemble).

Αν και οι προβλέψεις της θεωρίας γίνονται μόνο για την μέση συμπεριφορά μιας ομάδας ομοίων γεγονότων, η Σχολή της Κοπεγχάγης δέχεται ότι το Κ.Δ. παρέχει πλήρη περιγραφή ενός μόνου συστήματος, σε αντίθεση με την λεγόμενη Στατιστική ερμηνεία, που δέχεται ότι το Κ.Δ. περιγράφει συλλογή όμοια προπαρασκευασμένων συστημάτων.

Άλλο σημαντικό εννοιολογικό ζήτημα είναι αυτό της εισαγωγής του ντετερμινισμού, με την έννοια ότι ενώ στις μέχρι τότε άλλες θεωρίες κάθε φαινόμενο καθορίζεται με ορισμένο τρόπο από τις αιτίες του. στην Κβαντομηχανική αυτό δεν συμβαίνει.

Πράγματι, η Κβαντομηχανική παρέχει τρόπους πρόβλεψης μόνο της μέσης συμπεριφοράς ενός στατιστικού συνόλου Κβαντικών φαινομένων αλλά όχι και της συμπεριφοράς ενός ιδιαίτερου σωματιδίου σ' ένα ιδιαίτερο φαινόμενο.

Σε κάποιες μετρήσεις το αποτέλεσμα δεν είναι δυνατό να καθοριστεί μοναδικά από την κατάσταση του συστήματος πριν την μέτρηση αν και παρέχονται οι σχετικές πιθανότητες των διαφόρων αποτελεσμάτων.

Πρέπει να τονιστεί εδώ, ότι ο ντετερμινισμός της Κλασσικής μηχανικής που οφείλεται σε έλλειψη γνώσης για το σύστημα είναι σε πλήρη αντίθεση με αυτόν της Κβαντομηχανικής, στην οποία είναι ενδογενής και δεν οφείλεται σε έλλειψη γνώσης.

Πολλοί ερευνητές, με επικεφαλής τον Einstein αισθάνθηκαν άβολα μ' αυτόν τον ενδογενή ντετερμινισμό της Κβαντικής θεωρίας. Έτσι έγινε προσπάθεια ανάπτυξης άλλων θεωριών, των λεγομένων "θεωριών με κρυμμένες μεταβλητές" (hidden variables theories), οι οποίες να διασώζουν τον κλασικό ντετερμινισμό και ταυτόχρονα να επιτελούν και άλλες λειτουργίες που έχουν σχέση με τα ζητήματα που έθεσαν οι Einstein – Podolsky – Rosen (EPR). Έτσι οι θεωρίες των κρυμμένων μεταβλητών δέχονται την ύπαρξη ενός υποκβαντικού επιπέδου που υπόκειται της Κβαντικής θεωρίας και την καθορίζει. Μία κρυμμένη μεταβλητή ανήκει σ' αυτό το επίπεδο και είναι αυτή που κατέχει καθορισμένες τιμές όπως οι κλασσικές μεταβλητές. Η Κβαντική συμπεριφορά μοιάζει με την Θερμοδυναμική συμπεριφορά ενός αερίου που αν και καθορίζεται από τις συμπεριφορές των μορίων του, δίνει μη πλήρη περιγραφή της κατάστασης με την έννοια ότι δεν μπορεί να καθορίσει πλήρως την συμπεριφορά του κάθε μορίου. Πάντως, μια σειρά πειραμάτων δεν συμφωνούν με μια κλάση αυτών των θεωριών δηλ. με τις τοπικές θεωρίες κρυμμένων μεταβλητών. Επίσης σε θεωρητικό επίπεδο οι θεωρίες αυτές, αν και αναπαράγουν όλα τα αποτελέσματα της Κβαντομηχανικής, δεν είναι απλούστερες και φυσικά οι ίδιες οι κρυμμένες μεταβλητές δεν ανιχνεύονται.

Σοβαρό εννοιολογικό ζήτημα είναι και αυτό της τοπικότητας (Locality) ή διαχωρισιμότητας (Separability).

Μπορούμε να διακρίνουμε δυο είδη τοπικότητας. Η τοπικότητα πρώτου είδους εμφανίζεται όταν θεωρούμε το Κ.Δ. σαν φυσικό κύμα. Όταν το Κ.Δ. καταρρέει κατά μια μέτρηση, αυτό συμβαίνει σ' όλες τις θέσεις στον χώρο που βρίσκεται. Έτσι δημιουργούνται προβλήματα στην εξήγηση πολλών κβαντικών φαινομένων. Αν για παράδειγμα θεωρήσουμε το γνωστό πείραμα των δύο οπών, η πιθανότητα να ανιχνεύεται ένα σωματίο σε ένα συγκεκριμένο σημείο είναι συνάρτηση του αριθμού

των ανοιχτών οπών, όταν αυτό περνά το διάφραγμα, δηλ. φαίνεται να επηρεάζεται από την οπή από την οποία δεν περνά, δημιουργώντας έτσι την υποψία ότι επηρεάζεται από αυτή με "δράση από απόσταση".

Πιο καθαρή γίνεται η κατάσταση, στην περίπτωση της μη τοπικότητας δευτέρου είδους. Εδώ εξετάζεται η συμπεριφορά συσχετισμένων σωματιδίων, στα οποία γίνονται μετρήσεις. Η κυματοσυνάρτηση των δύο συσχετισμένων σωματιδίων είναι συνάρτηση των συντεταγμένων και του spin και των δύο σωματιδίων και όσο είναι σ' αυτήν την κατάσταση εξακολουθούν να είναι συσχετισμένα, έστω και αν βρίσκονται σε μεγάλη απόσταση και καμία γνωστή αλληλεπιδράσεως δεν υπάρχει μεταξύ τους.

Έστω ότι στο ένα σωματίο γίνεται μέτρηση μιας ιδιότητας του, π.χ. της διεύθυνσης του spin στην κατά D.Bohm παραλλαγή του θεωρήματος των EPR. Τότε, ακαριαία το άλλο αποκτά μια "αντικειμενική spin κατάσταση". Δηλ. παρατηρώντας το spin του ενός σωματιδίου, στιγμιαία θέτουμε το άλλο σωματίο σε μία spin κατάσταση χωρίς να ανταλλαχτεί ύλη ή ενέργεια μεταξύ τους. Σίγουρα εδώ έχουμε μια αποφασιστική μη - τοπική εικόνα της πραγματικότητας, σε αντίθεση με την ειδική θεωρία της σχετικότητας.

Αν όμως θεωρηθεί (Σ.Κ.) ότι απλά η κυματοσυνάρτηση είναι ένα εργαλείο υπολογισμών και δεν σχετίζεται με οτιδήποτε έχει σχέση με την πραγματικότητα του Κβαντικού συστήματος, τότε μάλλον δεν υπάρχει πρόβλημα.

Άμεσα σχετιζόμενο με το προηγούμενο είναι το πρόβλημα της πληρότητας της Κβαντικής θεωρίας και της πραγματικότητας (reality). Το ζήτημα που τέθηκε από τους EPR είναι αν η Κβαντομηχανική δίνει πλήρη και εξαντλητική περιγραφή της πραγματικότητας μέσω των Κβαντομηχανικών τελεστών που δεν μετατίθενται. Σύμφωνα με τους EPR, "κάθε στοιχείο της φυσικής πραγματικότητας, πρέπει να έχει το αντίστοιχό του στην φυσική θεωρία" και με βάση αυτό αποδείχνουν ότι Κβαντομηχανικά "όταν οι τελεστές που αντιστοιχούν σε φυσικά μεγέθη, δεν μετατίθενται, αυτά δεν μπορούν να έχουν ταυτόχρονη πραγματικότητα".

Όμως το μη κατάρρευσαν Κ.Δ. περιγραφεί πλήρως το σωματίο, με την έννοια ότι περιέχει όλες τις προβολές οι οποίες μπορούν να δώσουν κάθε μία από το ζεύγος των κανονικά συζευγμένων μεταβλητών δηλ. οι μεταβλητές έχουν "ταυτόχρονη πραγματικότητα" στο μη καταρρεύσαν Κ.Δ. αλλά όχι και σε μία συνιστώσα του Κ.Δ. που προκύπτει από την κατάρρευσή του.

Έτσι αν το Κ.Δ. δεν είναι φυσική οντότητα αλλά υπάρχει μόνο ως η "γνώση" του παρατηρητή, τότε η "πραγματικότητα" των κανονικά συζευγμένων μεταβλητών είναι μόνο υποκειμενική.

Η σχέση μεταξύ Κλασσικής και Κβαντικής μηχανικής είναι ένα άλλο σημαντικό ζήτημα. Πράγματι, τα αποτελέσματα των μετρήσεων συνήθως εκφράζονται με κλασσικούς όρους σ' ένα ορισμένο επίπεδο περιγραφής. Δηλ. η θέση του δείκτη της

συσκευής μέτρησης υποτίθεται ότι είναι καθορισμένη, όπως η θέση ενός κλασσικού υλικού σημείου στον χώρο. Επίσης, η γενική εφαρμογή της Κβαντικής θεωρίας δηλ. ουσιαστικά της αρχής της επαλληλίας είναι εξαιρετικά σπουδαία για πολλά φαινόμενα των μακροσκοπικών αντικειμένων όπως για παράδειγμα, στην Φυσική στερεάς κατάστασης.

Αν θεωρήσουμε την Κβαντομηχανική ως παγκόσμια θεωρία και την εφαρμόσουμε σε μακροσκοπικά σώματα, οδηγούμαστε σε παράδοξα αποτελέσματα που αντιφάσκουν προς την εικόνα που έχουμε για την πραγματικότητα. Η "γάτα του Schrödinger" είναι το πλέον γνωστό παράδειγμα ενός τέτοιου παραδόξου.

Η Κβαντική θεωρία δεν απαγορεύει την ύπαρξη κυματοσυναρτήσεων, για μακροσκοπικά σώματα, του τύπου,

$$|\Psi\rangle = \alpha |\Psi_{\text{εδώ}}\rangle + b |\Psi_{\text{εκεί}}\rangle \quad (1.1)$$

και από την άλλη μεριά, η εμπειρία μας για την συμπεριφορά των μακροσκοπικών σωμάτων ποτέ δεν μας δίνει κάτι που ν' αντιστοιχεί σε τέτοιες κυματοσυναρτήσεις.

Η θεωρία των πολλών κόσμων είναι μία προσπάθεια διάσωσης της παραπάνω αρχής της επαλληλίας για μακροσκοπικά σώματα, οδηγώντας όμως μάλλον σε πιο "παράδοξα" συμπεράσματα.

Η Σ.Κ. θεωρεί τις κλασσικές έννοιες αναγκαίες και θεμελιώδεις προϋποθέσεις για την περιγραφή της μέτρησης και έτσι απορρίπτει την δυνατότητα ανάλυσης τους με Κβαντομηχανικούς όρους. Αυτή ήταν κατά βάση και η τοποθέτηση του Bohr απέναντι στο πρόβλημα της μέτρησης.

Πρόσφατες έρευνες για το κλασσικό όριο κατέστησαν σαφές ότι μερικοί υπεραγώγιμοι μηχανισμοί (SQUID) είναι μακροσκοπικοί αλλά συμπεριφέρονται μη κλασσικά, πράγμα που είναι αντίθετο προς τις συνήθεις υποθέσεις της Σ.Κ. Αυτό σημαίνει ότι η κλασσική συμπεριφορά ενός μακροσκοπικού αντικειμένου δεν είναι μια ιδιότητα που πρέπει να παίρνεται σαν δεδομένη χωρίς ιδιαίτερη προσοχή. Έτσι γίνεται φανερό ότι χρειάζεται καλύτερη μαθηματική ανάλυση για το πως και πότε η Κλασσική Φυσική προκύπτει από την Κβαντομηχανική.

Σημαντική είναι η άποψη των E. Joos - H. Zeh για την εξάρτηση των μακροσκοπικών συστημάτων από το περιβάλλον τους, με την προϋπόθεση της παγκοσμιότητας της Κβαντικής θεωρίας. Πιο συγκεκριμένα, η σκέδαση φωτονίων και μορίων αποδεικνύεται ουσιαστική ακόμα και στον ενδογαλαξιακό χώρο, στο να περιορίζει τις παρατηρήσιμες ιδιότητες με το να καταστρέφει τοπικά τις φασικές σχέσεις. Η απομένουσα συμφωνία καθορίζει τις κλασσικές ιδιότητες των μακροσκοπικών συστημάτων. Έτσι οι τοπικές κλασσικές ιδιότητες έχουν την αρχή τους στον μη τοπικό χαρακτήρα των κβαντικών καταστάσεων.

Η δυαδικότητα σωματιδίου - κύματος εισήγαγε πολλές, επίσης, συζητήσεις. Στην Κλασσική Φυσική οι έννοιες κύμα και σωματίο είναι πολύ διαφορετικές. Στην Κβαντική μηχανική είναι συμπληρωματικές δηλ κανένα Κβαντικό φαινόμενο δεν περιγράφεται με μία κλασσική έννοια, σωματίο ή κύμα, σύμφωνα με την αρχή της συμπληρωματικότητας που εισήγαγε ο Bohr. Κάθε μια εμφανίζεται σε ιδιαίτερη πειραματική κατάσταση εξαρτώμενη από την διάταξη της όλης συσκευής. Η ιδέα της συμπληρωματικότητας είναι όμως πιο γενική και την βρίσκουμε σε πολλές περιπτώσεις όπου η μέτρηση μιας ιδιότητας ενός φυσικού συστήματος καθιστά μια άλλη, μη παρατηρήσιμη. Από αυτή την άποψη, μερικές ιδιότητες (π.χ. θέση και ορμή) σχηματίζουν συμπληρωματικά ζεύγη και είναι ενδογενείς ιδιότητες της φύσης. Κάθε προσπάθεια να καθορίσουμε μια από αυτές τις μεταβλητές επακριβώς, πρέπει να οδηγεί σε μια συμπληρωματική αβεβαιότητα για την άλλη.

Παραπέρα γενίκευση της αρχής αυτής οδηγεί στην συμπληρωματικότητα αντικείμενου - υποκείμενου, θέση σημαντική για την Φυσική.

Είδαμε παραπάνω, μια σύντομη έκθεση των κυριοτέρων εννοιολογικών ζητημάτων που έθεσε η εμφάνιση της Κβαντομηχανικής. Όπως είναι φανερό δεν είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους και αλληλοεμπλέκονται. Εκείνο όμως το ζήτημα που εμφανίζεται παντού και έτσι αποκτά κεντρική θέση είναι αυτό της Κβαντικής μέτρησης.

Παρά το ότι η Κβαντομηχανική είχε τόσες επιτυχίες στην κατανόηση των φυσικών φαινομένων, διατηρεί μια σημαντική αδυναμία. Οι συνθήκες υπό τις οποίες λαμβάνονται τα πειραματικά δεδομένα δεν είναι σαφείς, στο ίδιο το Κβαντομηχανικό εννοιολογικό πλαίσιο και όπως θα φανεί στο επόμενο κεφάλαιο, ο ίδιος ο δυναμικός νόμος της Κβαντομηχανικής είναι ένα σοβαρό εμπόδιο για την κατανόηση της μέτρησης. Αλλά έτσι, αυτή η δυσκολία υπονομεύει αυτές καθαυτές τις έννοιες της Κβαντομηχανικής.

Ο πιθανοκρατικός χαρακτήρας της Κβαντομηχανικής εμφανίζεται μόνο όταν υπάρχει διαδικασία απόκτησης πειραματικών δεδομένων από το Κβαντομηχανικό σύστημα δηλ. μέτρηση. Αν δεν γίνεται μέτρηση, μάλλον δεν έχει νόημα ή δεν γνωρίζουμε, με την Κβαντική θεωρία, το αν έχουμε πιθανοκρατική ή ντετερμινιστική εξέλιξη.

Παραπέρα, η γραμμικότητα του δυναμικού νόμου της Κβαντομηχανικής, συνεπάγεται δυσκολία στην κατανόηση της μέτρησης και σε πρακτικό επίπεδο. Συνεπώς, δεν υπάρχει απλά μια ανωμαλία στην Κβαντική θεωρία, αλλά επίσης αντίθεση μεταξύ της Κβαντομηχανικής και της πρακτικής μας γνώσης για τον φυσικό κόσμο.

1.2 Οι πρωτοπόροι της Κβαντικής Θεωρίας



M. Planck. Βραβείο Nobel 1918 για την ανακάλυψη του κβάντου δράσης.



N. Bohr Βραβείο Nobel 1922 για τη μελέτη της δομής των ατόμων και της ακτινοβολίας τους.



D. Bohm Σπάνιος συνδυασμός θεωρητικού φυσικού και μυστικιστή. Η Αιτιότητα και Τύχη στη Σύγχρονη Φυσική, αποτελεί έργο σταθμός στην Κβαντική Φυσική.



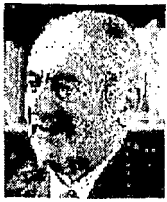
M. Born Βραβείο Nobel 1954 για το θεμελιακό έργο του στην κβαντική μηχανική και ιδιαίτερα στην στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης.



Bose. Διατύπωσε μαζί με τον Einstein τη στατιστική για τα σωματίδια με ακέραιο spin.



L. Broglie Βραβείο Nobel 1929 για την ανακάλυψη της κυματικής φύσης του ηλεκτρονίου



S.Goudsmith Βρήκε το spin του ηλεκτρονίου.



Gamow. Ερμήνευσε την ακτινοβολία α, πρότεινε για τους πυρήνες το πρότυπο της υγρής σταγόνας, θεμελιωτής της σύγχρονης βιολογίας



A.Einstein Βραβείο Nobel 1921 για τα επιτεύγματά του στην ερμηνεία του φωτοηλεκτρικού φαινομένου.



P.Ehrenfest Διατύπωσε μια αρχή και ένα θεώρημα στην στατιστική μηχανική και την κβαντομηχανική που φέρουν το όνομα του.



P.Dirac Βραβείο Nobel 1933 για την ανακάλυψη νέων και παραγωγικών μορφών της ατομικής θεωρίας.



P. Debye Βραβείο Nobel Χημείας 1936 για τα πολικά μόρια και την έρευνα στα διαλύματα.

W.Heisenberg Βραβείο Nobel 1932 για τη συμβολή του στην θεμελίωση της κβαντομηχανικής και στην ανακάλυψη των αλλοτροπικών μορφών του Υδρογόνου.

W.Pauli Βραβείο Nobel 1945 για την ανακάλυψη ης απαγορευτικής αρχής που φέρει το όνομα του.

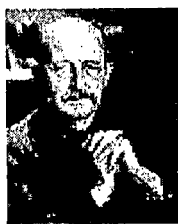
E.Purcell Βραβείο Nobel φυσικής 1952 για την ανάπτυξη μεθόδων μετρήσεων του πυρηνικού μαγνητισμού.

E. Schrödinger Βραβείο Nobel 1933 για την ανακάλυψη νέων και παραγωγικών μορφών της ατομικής θεωρίας.

A. Sommerfeld Πρωτοπόρος της κβαντικής φυσικής, συγγραφέας του έργου "Ατομική δομή και φασματικές γραμμές". Χρησιμοποίησε πρώτος τις φασματικές γραμμές στην έρευνα της ύλης.

E.Wigner Βραβείο Nobel 1963 για την συμβολή του στη θεωρία των στοιχειωδών σωματιδίων και στην ανακάλυψη και εφαρμογή των θεμελιακών αρχών συμμετρίας.

1.3 MAX PLANCK: Ο Ιδρυτής της κβαντομηχανικής



Ήταν πριν 100 χρόνια όταν ο Max Planck δημοσίευσε μια εργασία η οποία γέννησε την μετέπειτα κβαντομηχανική.

Η ιστορία αποκαλύπτει, όμως, ότι ο Planck δεν αναγνώρισε αμέσως τις συνέπειες της εργασίας του και ξεκίνησε τη νέα επιστημονική επανάσταση αντίθετα προς τη θέλησή του.

Σύμφωνα με την καθιερωμένη ιστορία, η κβαντική θεωρία γεννήθηκε όταν αναγνωρίστηκε ότι η κλασική φυσική προβλέπει μια ενεργειακή κατανομή για την ακτινοβολία του μέλανος σώματος η οποία διαφέρει ριζικά από αυτήν που παρατηρήθηκε πειραματικά.

Στο τέλος της δεκαετίας του 1890, ο Γερμανός φυσικός Wilhelm Wien ανέπτυξε μια μαθηματική έκφραση της ενεργειακής κατανομής, που αντιστοιχούσε πολύ καλά με την πειραματική αλλά δεν είχε θεωρητική θεμελίωση.

Όταν ο λόρδος Rayleigh και ο James Jeans ανέλυσαν την ακτινοβολία του μέλανος σώματος από τη σκοπιά της κλασικής φυσικής, το αποτέλεσμα για το φάσμα διέφερε δραστικά και από το πείραμα και από τον νόμο του Wien. Αντιμέτωπος με αυτή την ανωμαλία ο Planck έψαχνε για μια λύση. Κατά την πορεία της αναζήτησης αναγκάστηκε να εισάγει την έννοια των «κβάντων ενέργειας». Με την υπόθεση των ενεργειακών κβάντων, επιτεύχθηκε τέλειο ταίριασμα της θεωρίας και του πειράματος. Έτσι γεννήθηκε η Κβαντομηχανική.

1.3.1 Η αινιγματική εντροπία

Κατά τα τελευταία χρόνια του 19^{ου} αιώνα, πολλοί φυσικοί βρέθηκαν να συζητάνε αν είναι σωστή η μηχανιστική εξήγηση του κόσμου, η οποία μέχρι τότε απολάμβανε σεβασμού. Η ερώτηση που κυριαρχούσε ήταν αν η Νευτώνεια μηχανική που είχε πίσω της επιτυχίες αιώνων θα εξακολουθούσε να μπορεί να περιγράψει όλη τη φύση.

Στις συζητήσεις αυτές, οι οποίες επεκτείνονταν ως τα θεμέλια της φυσικής, η ηλεκτροδυναμική και η θερμοδυναμική αποτελούσαν κεντρικές περιοχές. Όσον αφορά την ηλεκτροδυναμική, το θεμελιώδες πρόβλημα ήταν η σχέση μεταξύ μηχανικής και ηλεκτροδυναμικής, ή μεταξύ ύλης και του υποθετικού αιθέρα. Θα μπορούσαν οι νόμοι της μηχανικής να αναχθούν σ' αυτούς της ηλεκτροδυναμικής;

Οι ειδικοί στη θερμοδυναμική, τον ίδιο καιρό, επικεντρώνονταν στη σχέση μεταξύ των νόμων της μηχανικής και των δύο βασικών νόμων της θερμότητας, την αρχή διατήρησης της ενέργειας και τον δεύτερο νόμο της θερμοδυναμικής. Η συζήτηση

αυτή οδηγούσε στην κατάσταση της στατιστικής-μοριακής φυσικής και ως εκ τούτου εξέταζε την θεμελιώδη ερώτηση αν όλη η ύλη αποτελείται από άτομα. Αν και οι δύο συζητήσεις είχαν πολλά κοινά σημεία, η κβαντική θεωρία ξεπήδησε από την συζήτηση της θερμοδυναμικής.

Ο Max Karl Ernst Ludwig Planck ενδιαφερόταν ζωηρά, σχεδόν ως έμμονη ιδέα, με τον δεύτερο νόμο της θερμοδυναμικής. Σύμφωνα με τον νόμο αυτό (σε μια από τις πολλές διατυπώσεις του) δεν υπάρχει καμιά διαδικασία της οποίας το μοναδικό αποτέλεσμα να είναι η μεταφορά θερμότητας από ένα ψυχρότερο σώμα σε ένα θερμότερο. Με τη βοήθεια της έννοιας της εντροπίας, που εισήχθη από τον Rudolf Clausius το 1865, ο νόμος μπορεί να επαναδιατυπωθεί με την έκφραση ότι η εντροπία ενός μονωμένου συστήματος είτε αυξάνεται είτε παραμένει σταθερή.

Γεννημένος το 1858, και γιος ενός καθηγητή του δικαίου, ο Planck έγινε καθηγητής φυσικής στο πανεπιστήμιο του Βερολίνου το 1889. Η διδακτορική του διατριβή από το πανεπιστήμιο του Μονάχου ήταν πάνω στον δεύτερο θερμοδυναμικό νόμο, ο οποίος αποτέλεσε και θέμα πολλών δημοσιεύσεών του μέχρι το 1905. Οι σκέψεις του Planck επικεντρώνονταν στην ιδέα της εντροπίας και πως θα κατανοήσουμε την μη αντιστρεπτότητα στη βάση της διατύπωσης του δεύτερου νόμου με τη γλώσσα της εντροπίας.

Στα 1890 η συζήτηση για το δεύτερο νόμο επικεντρώθηκε στη στατιστική ή πιθανοκρατική ερμηνεία την οποία ο Ludwig Boltzmann πρότεινε στην αρχική της μορφή το 1872 και την επεξέτεινε το 1877. Σύμφωνα με την μοριακή-μηχανιστική ερμηνεία του Boltzmann, η εντροπία ενός συστήματος είναι το συλλογικό αποτέλεσμα των μοριακών κινήσεων. Ο δεύτερος νόμος έχει μόνο στατιστική ισχύ. Η θεωρία του Boltzmann η οποία προϋποθέτει την ύπαρξη ατόμων και μορίων αμφισβητήθηκε από τον Wilhelm Ostwald και άλλους «ενεργητικολόγους» που ήθελαν να απαλλάξουν τη φυσική από τη χρήση εννοιών όπως τα άτομα και μόρια και να την θεμελιώσουν στην ενέργεια και στα συναφή μεγέθη.

Ποια ήταν η θέση του Planck σ' αυτή τη διαφωνία; Κανείς θα περίμενε ότι θα έπαιρνε το μέρος των νικητών, ή τέλος πάντων αυτών που σύντομα αποδείχτηκαν νικητές δηλαδή του Boltzmann και των ατομιστών. Αλλά δεν συνέβη έτσι. Η πίστη του Planck στην απόλυτη ισχύ του δεύτερου νόμου τον έκανε όχι μόνο να απορρίψει την στατιστική άποψη του Boltzmann για την θερμοδυναμική αλλά επίσης να αμφισβητήσει την ατομική υπόθεση στην οποία στηριζόταν. Ήδη από το 1882 ο Planck συμπέρανε ότι η ατομική δομή της ύλης ερχόταν σε αντίθεση με τον νόμο της αύξησης της εντροπίας. Είχε προβλέψει ότι: «Θα υπάρξει μια σύγκρουση μεταξύ αυτών των δύο υποθέσεων που θα κάνει τη μια από τις δύο να σβήσει».

Όσο για το αποτέλεσμα της διαμάχης έγραψε ότι: « Παρά την μεγάλη επιτυχία της ατομικής θεωρίας στο παρελθόν, τελικά θα πρέπει να την εγκαταλείψουμε και να ταχθούμε υπέρ της υπόθεσης της συνεχούς δομής της ύλης.»

Παρόλα αυτά η αντίθεση του Planck στον ατομισμό εξασθένησε κατά τη δεκαετία του 1890 καθώς αναγνώρισε τη δύναμη της υπόθεσης και την ενοποίηση που θα έφερνε σε μια πληθώρα φυσικών και χημικών φαινομένων. Η στάση του όμως προς τον ατομισμό παρέμεινε σκεπτικιστική και συνέχισε να δίνει προτεραιότητα στη μακροσκοπική θερμοδυναμική και να αγνοεί τη στατιστική θεωρία του Boltzmann. Πράγματι το 1895 ήταν έτοιμος να συμμετάσχει σε ένα μεγάλο ερευνητικό πρόγραμμα για να διερευνηθεί η αντιστρεπτότητα με ένα μοντέλο της μικρομηχανικής ή της μικροηλεκτροδυναμικής που δεν θα περιείχε εκπεφρασμένα την ατομική υπόθεση. Το πρόγραμμα αυτό δεν εξέφραζε μόνο το βαθύ ενδιαφέρον του Planck στην έννοια της εντροπίας αλλά επίσης έδειχνε την αριστοκρατική του στάση προς τη φυσική: Εστίαζε την προσοχή του στις θεμελιώδεις όψεις και περιφρονούσε τις πιο πεζές και εφαρμοσμένες ιδέες. Η εμμονή του στην εντροπία την οποία συμερίζονταν μόνο λίγοι φυσικοί, δεν εμφανιζόταν να είναι κεντρικής σημασίας ή ότι εξασφαλίζει ουσιώδη αποτελέσματα. Και όμως γι αυτόν συνέχιζε να είναι.

1.3.2 Ακτινοβολία μέλανος σώματος

Από τη σκοπιά του Planck και των συγχρόνων του, ήταν φυσικό να αναζητείται μια εξήγηση του νόμου της εντροπίας στην ηλεκτροδυναμική του Maxwell. Εν πάση περιπτώσει η θεωρία του Maxwell ήταν θεμελιώδης και υποτίθεται ότι ερμήνευε τη συμπεριφορά των μικροσκοπικών ταλαντωτών που παράγουν την ακτινοβολούμενη θερμότητα από ένα μαύρο σώμα. Ο Planck αρχικά πίστευε ότι είχε δικαιολογήσει την μη αντιστρεψιμότητα της διαδικασίας ακτινοβολίας μέσω της έλλειψης συμμετρίας ως προς το χρόνο στις εξισώσεις του Maxwell. Δηλαδή ότι οι νόμοι της ηλεκτροδυναμικής διακρίνουν μεταξύ παρόντος και παρελθόντος, μεταξύ χρόνου που κυλάει προς τα εμπρός και χρόνου που κυλάει προς τα πίσω. Όμως το 1897 ο Boltzmann κατέρριψε αυτό το επιχείρημα. Ο Boltzmann έδειξε ότι η ηλεκτροδυναμική δεν εξασφαλίζει “βέλος του χρόνου” περισσότερο από ότι η μηχανική. Ο Planck έπρεπε να βρει άλλο δρόμο για να δικαιολογήσει την μη αντιστρεπτότητα.

Η μελέτη της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος είχε ξεκινήσει το 1859, όταν ο Robert Kirchhoff, ο προκάτοχος της έδρας του Planck στο Βερολίνο σχολίαζε ότι αυτή η ακτινοβολία ήταν θεμελιώδους φύσης. Την δεκαετία του 1890 αρκετοί πειραματικοί και θεωρητικοί φυσικοί ερευνούσαν την φασματική κατανομή της

ακτινοβολίας. Σημαντική πρόοδος είχε επιτευχθεί το 1896 όταν ο Wien βρήκε ένα μαθηματικό νόμο που ήταν σε συμφωνία με τις ακριβείς μετρήσεις που εκτελούνταν στο Physikalisch-Technische Reichsanstalt στο Βερολίνο.

Σύμφωνα με τον Wien, η ένταση κάθε περιοχής του φάσματος, u , δηλαδή η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα συχνότητας εξαρτάται από τη συχνότητα, f , και την θερμοκρασία, T , σύμφωνα με τη σχέση,

$$u(f, T) = af^5 [\exp(bf/T) - 1] \quad (1.2)$$

όπου a και b είναι σταθερές που προσδιορίζονται εμπειρικά. Ο νόμος του Wien στερείται όμως μιας ικανοποιητικής θεωρητικής βάσης και γι αυτόν τον λόγο δεν έγινε αποδεκτός από τον Planck. Είναι σημαντικό ν' αναφερθεί ότι η μη ικανοποίηση του Planck δεν οφειλόταν στον ίδιο τον τύπο του Wien τον οποίο αποδεχόταν πλήρως αλλά στον τρόπο παραγωγής του από τον Wien. Ο Planck δεν ενδιαφερόταν να παράγει έναν σωστό μεν αλλά εμπειρικό νόμο, αλλά να θεμελιώσει μια ισχυρή απόδειξη του. Κατ' αυτόν τον τρόπο πίστευε, ότι θα μπορούσε να δικαιολογήσει το νόμο της εντροπίας.

Οδηγημένος από την κινητική θεωρία των αερίων του Boltzmann, ο Planck διατύπωσε ότι αποκαλούσε «αρχή στοιχειωδών διαταραχών» η οποία δεν στηριζόταν ούτε στην μηχανική ούτε στην ηλεκτροδυναμική. Την χρησιμοποίησε για να ορίσει την εντροπία ενός ιδανικού ταλαντωτή (δίπολου) αλλά ήταν προσεκτικός να μην ταυτίσει τέτοιους ταλαντωτές με συγκεκριμένα άτομα ή μόρια. Το 1899 ο Planck βρήκε μια έκφραση για την εντροπία των ταλαντωτών από την οποία πρόκυπτε ο νόμος του Wien. Ο νόμος αυτός που μερικές φορές αναφέρεται σαν νόμος των Wien-Planck είχε πια αποκτήσει μια θεμελιώδη υπόσταση. Ο Planck ήταν ικανοποιημένος. Τελικά, ο νόμος είχε το πρόσθετο πιστοποιητικό ότι συμφωνούσε θαυμάσια με τις μετρήσεις ή τουλάχιστον έτσι φαινόταν.

1.3.3 Διαφωνία με τη θεωρία

Η αρμονία μεταξύ θεωρίας και πειράματος δεν διάρκεσε πολύ. Προς κατάπληξη του Planck, τα πειράματα που εκτελέστηκαν στο Βερολίνο έδειξαν ότι ο νόμος των Wien-Planck δεν περιγράφει σωστά το φάσμα στις πολύ χαμηλές συχνότητες. Κάτι πήγαινε λάθος, και ο Planck έπρεπε να επιστρέψει στο γραφείο του για να ψάξει γιατί η φαινομενικά σωστή απόδειξη παρήγαγε ένα λανθασμένο αποτέλεσμα. Το πρόβλημα του φαινόταν ότι βρισκόταν στον ορισμό της εντροπίας του ταλαντωτή.

Με μια αναθεωρημένη έκφραση για την εντροπία ενός απλού ταλαντωτή, ο Planck πέτυχε ένα νέο νόμο της φασματικής κατανομής την οποία παρουσίασε σε μια συνάντηση της Ένωσης Γερμανών Φυσικών στις 19 Οκτωβρίου του 1900. Η φασματική κατανομή δινόταν τώρα από τη σχέση,

$$u(f, T) = \alpha f^5 [\exp(bf/T) - 1]^{-1} \quad (1.3)$$

η οποία προσεγγίζει το νόμο του Wien σε σχετικά υψηλές συχνότητες. Πιο ενδιαφέρον είναι ότι αυτή η πρώτη έκδοση του περίφημου νόμου ακτινοβολίας του Planck συμφωνούσε επίσης τέλεια με το πειραματικό φάσμα στην υπέρυθη περιοχή των χαμηλών συχνοτήτων. Αν και υπήρχε σ' αυτήν μια σταθερά b την οποία ο Planck πίστευε ως θεμελιώδη, η επόμενη μετατόπιση από το b στο h ήταν κάτι παραπάνω από μια απλή μετονομασία της σταθεράς. Η απόδειξη του Planck δεν έκανε χρήση της κβάντωσης των ενεργειών και δεν βασιζόταν επίσης στην πιθανοτική ερμηνεία της εντροπίας του Boltzmann.

Οι εξελίξεις αυτές επρόκειτο να έρθουν δυο μήνες αργότερα σε «μια πράξη απελπισίας» καθώς θυμόταν αργότερα ο Planck. Πριν να προχωρήσουμε σ' αυτή την πράξη απελπισίας χρειάζεται να εξετάσουμε το νόμο των Rayleigh Jeans και την αποκαλούμενη «υπεριώδη καταστροφή» αν και μόνο για να την θεωρήσουμε ως ιστορικά μη ουσιώδη. Τον Ιούνιο του 1900 ο Rayleigh υπέδειξε ότι η κλασική μηχανική, όταν εφαρμοζόταν στους ταλαντωτές ενός μαύρου σώματος, οδηγούσε σε μια ενεργειακή κατανομή η οποία αυξάνει με το τετράγωνο της συχνότητας. Αυτό ερχόταν σε προφανή σύγκρουση με τα δεδομένα. Ο Rayleigh στήριξε την επιχειρηματολογία του στο λεγόμενο θεώρημα ισοκατανομής από το οποίο προκύπτει ότι η μέση ενέργεια των ταλαντωτών που αποτελούν ένα μαύρο σώμα θα δίνεται από τη σχέση kT όπου το k είναι η σταθερά του Boltzmann.

Πέντε χρόνια αργότερα οι Rayleigh και Jeans παρουσίασαν αυτό που είναι και σήμερα γνωστό ως τύπος των Rayleigh και Jeans και γράφεται συνήθως με τη μορφή

$$u(f, T) = (8\pi f^2 / c^3) kT \quad (1.4)$$

όπου το c είναι η ταχύτητα του φωτός.

Το αποτέλεσμα αυτής της σχέσης είναι μια ενεργειακή πυκνότητα που συνεχώς αυξάνεται καθώς αυξάνει η συχνότητα, και γίνεται «καταστροφική», δηλαδή τεράστια στην περιοχή του υπεριώδους. Παρά τον εξέχοντα ρόλο της στα εγχειρίδια της φυσικής, ο τύπος αυτός δεν έπαιξε κανένα ρόλο στην αρχική φάση της κβαντικής θεωρίας. Ο Planck δεν δέχτηκε το θεώρημα της ισοκατανομής ως θεμελιώδες και ως εκ τούτου το αγνόησε. Συμπτωματικά ούτε οι Rayleigh και Jeans δέχτηκαν ότι το θεώρημα έχει γενική ισχύ. Η «υπεριώδης καταστροφή», μια ορολογία που έθεσε πρώτος ο Paul Ehrenfest το 1911 έγινε θέμα συζήτησης σε μια κατοπινή φάση της κβαντικής θεωρίας.

Τον Νοέμβριο του 1900 ο Planck αναγνώρισε ότι η καινούργια του έκφραση για την εντροπία μετά δυσκολίας θα μπορούσε να θεωρηθεί κάτι περισσότερο από μια φιλόδοξη πρόβλεψη. Για να εξασφαλίσει μια πιο θεμελιώδη απόδειξη στράφηκε τώρα

στην πιθανοκρατική ερμηνεία του Boltzmann για την εντροπία την οποία μέχρι τότε είχε αγνοήσει. Αλλά αν και ο Planck τώρα υιοθέτησε την άποψη του Boltzmann, δεν συμμερίστηκε πλήρως τη σκέψη του Αυστριακού φυσικού. Παρέμεινε πεπεισμένος ότι ο νόμος της εντροπίας ήταν απόλυτος και όχι πιθανοκρατικός, κι έτσι επανερμήνευσε την θεωρία του Boltzmann με τον δικό του μη πιθανοκρατικός τρόπο. Ήταν κατά την διάρκεια αυτής της περιόδου που διατύπωσε για πρώτη φορά ότι έγινε γνωστό έκτοτε ως «η εξίσωση Boltzmann»

$$S = K \log W \quad (1.5)$$

η οποία συσχετίζει την εντροπία, S , με την μοριακή αταξία. Για να βρει το W ο Planck έπρεπε να τα καταφέρει να μετρήσει τον αριθμό των τρόπων, με τους οποίους μια δεδομένη ενέργεια μπορεί να κατανεμηθεί μεταξύ ενός πλήθους ταλαντωτών. Στην προσπάθειά του να βρει αυτή τη διαδικασία αρίθμησης, ο Planck εμπνεύστηκε από τον Boltzmann και εισήγαγε αυτό που αποκάλεσε «ενεργειακά στοιχεία». Συγκεκριμένα, την υπόθεση ότι η ολική ενέργεια E των ταλαντωτών του μαύρου σώματος, διαιρείται σε πεπερασμένες ποσότητες ενέργειας, ε , με μια διαδικασία που έμεινε γνωστή σαν «κβάντωση». Σ' αυτή του τη δημοσίευση το 1900 που παρουσιάστηκε στη Γερμανική Ένωση Φυσικών στις 14 Δεκεμβρίου εκατό χρόνια πριν ο Planck θεώρησε την ενέργεια "ως αποτελούμενη από πλήρως καθορισμένο αριθμό πεπερασμένων και ίσων μερών, και για το σκοπό αυτό χρησιμοποιώ τη φυσική σταθερά

$$h = 6.55 \times 10^{-27} (\text{erg sec}) \quad (1.6)$$

Ο ίδιος συνέχισε: «...αυτή η σταθερά όταν πολλαπλασιαστεί με την συνηθισμένη συχνότητα των συντονιστών δίνει το ενεργειακό στοιχείο, ε , σε ergs και διαιρώντας το E με το ε παίρνουμε τον αριθμό P των ενεργειακών στοιχείων που κατανέμονται στους N συντονιστές».

Η κβαντική θεωρία είχε γεννηθεί. Και βέβαια η σταθερά του Planck είχε εμφανιστεί, με το ίδιο σύμβολο και περίπου την ίδια τιμή όπως τη χρησιμοποιούμε σήμερα. Αλλά η καρδιά της κβαντικής θεωρίας είναι η κβάντωση της ενέργειας, και δεν είναι καθόλου προφανές ότι κάτι τέτοιο είχε στο μυαλό του ο Planck. Όπως ο ίδιος εξήγησε σε ένα γράμμα του το 1931, η εισαγωγή των κβάντων ενέργειας το 1900 ήταν "μια καθαρά φορμαλιστική υπόθεση και πραγματικά δεν της έδωσα πολλή σκέψη διότι με οποιοδήποτε τίμημα έπρεπε να φτάσω σε θετικό αποτέλεσμα".

Ο Planck δεν έδωσε έμφαση στη διακριτή φύση των ενεργειακών διαδικασιών και δεν ενδιαφερόταν για τη λεπτομερή συμπεριφορά των αφηρημένων ταλαντωτών του. Πολύ πιο ενδιαφέρουσα από την κβαντική ασυνέχεια (οτιδήποτε και αν σήμαινε αυτό) ήταν η εντυπωσιακή ακρίβεια του νέου νόμου ακτινοβολίας και οι φυσικές σταθερές που εμφανίζονταν σ' αυτόν.

1.3.4 Ένας συντηρητικός επαναστάτης

Αν και ο νόμος ακτινοβολίας του Planck έγινε γρήγορα αποδεκτός, αυτό που θεωρούμε εμείς σήμερα ως την κύρια πνευματική συνεισφορά του, δηλαδή την βάση για την κβάντωση της ενέργειας μόλις που παρατηρήθηκε στην εποχή του. Πολύ λίγοι φυσικοί εξέφρασαν ενδιαφέρον για την απόδειξη του τύπου του Planck, και κατά τη διάρκεια των πρώτων ετών του 20ου αιώνα κανείς δεν θεωρούσε ότι τα αποτελέσματά του έρχονταν σε αντίθεση με τα θεμέλια της κλασσικής φυσικής. Όσο για τον ίδιο τον Planck αγωνίστηκε σκληρά για να κρατήσει τη θεωρία του στο στέρεο έδαφος της κλασσικής φυσικής που αγαπούσε τόσο πολύ. Σαν τον Κοπέρνικο, ο Planck έγινε ένας επαναστάτης ενάντια στη θέλησή του.

Ο Planck ήταν το αρχέτυπο του κλασσικού νου, ένα ευγενές προϊόν του καιρού του και του πολιτισμού του. Σε όλη τη διακεκριμένη καριέρα του ως φυσικός και αξιωματούχος του χώρου των επιστημών, διατήρησε την άποψη ότι ο τελικός σκοπός της επιστήμης ήταν μια ενοποιημένη εικόνα του κόσμου εδραιωμένη σε απόλυτους και παγκόσμιους επιστημονικούς νόμους. Πίστευε σταθερά ότι τέτοιοι νόμοι υπήρχαν και ότι ανακλούσαν τους εσωτερικούς μηχανισμούς της φύσης, δηλαδή μια αντικειμενική πραγματικότητα, όπου οι ανθρώπινες σκέψεις και πάθη δεν είχαν θέση. Ο δεύτερος νόμος της θερμοδυναμικής ήταν πάντα το αγαπημένο του παράδειγμα για το πώς μπορεί προοδευτικά ένας νόμος της φυσικής να ελευθερωθεί από ανθρωπομορφικές συσχετίσεις και να μετατραπεί σε ένα καθαρά αντικειμενικό και παγκόσμιο νόμο. Μετά το 1900 ο Planck αναγνώρισε τον πιθανοκρατικό νόμο της εντροπίας του Boltzmann ως πολύ σημαντικό και θεμελιώδη, αλλά γρήγορα σταμάτησε να παραδέχεται το κεντρικό του μήνυμα, ότι υπάρχει μια πεπερασμένη πιθανότητα (έστω και αν αυτή είναι εξαιρετικά μικρή) να μειωθεί με την πάροδο του χρόνου η εντροπία ενός μονωμένου συστήματος. Μόνο γύρω στο 1912 αυτός εγκατέλειψε τους τελευταίους ενδοιασμούς και παραδέχτηκε την πλήρως στατιστική φύση του δευτέρου νόμου.

Όσον αφορά την κβαντική ασυνέχεια, το κρίσιμο χαρακτηριστικό ότι η ενέργεια δεν μεταβάλλεται συνεχώς αλλά με «άλματα» πίστευε για πολύ χρόνο ότι αυτό ήταν μια μαθηματική υπόθεση, μια τεχνητή επινόηση η οποία δεν αναφερόταν σε πραγματικές ανταλλαγές ενέργειας μεταξύ της ύλης και της ακτινοβολίας. Από αυτή την άποψη δεν υπήρχε λόγος να υποπτευθεί μια κατάρρευση των νόμων της κλασσικής μηχανικής και της ηλεκτροδυναμικής. Το ότι ο Planck δεν έβλεπε τη θεωρία του σαν μια ριζική απαγκίστρωση από την κλασσική φυσική φαίνεται επίσης και από την παράξενη σιωπή του. Μεταξύ του 1901 και του 1906 δεν δημοσίευσε τίποτα απολύτως πάνω στο νόμο της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος ή της κβαντικής θεωρίας. Μόνο γύρω στο 1908, επηρεασμένος σε μεγάλο βαθμό από την

διδασκαλία ανάλυση του Ολλανδού φυσικού Hendrik Lorentz, ο Planck στράφηκε στην άποψη ότι το κβάντο δράσης αντιπροσωπεύει ένα φαινόμενο που δεν μπορεί να γίνει κατανοητό από την κλασσική φυσική.

Τα επόμενα τρία χρόνια ο Planck πείσθηκε ότι η κβαντική θεωρία σημάδεψε την αρχή ενός καινούριου κεφαλαίου στη ιστορία της φυσικής και μ' αυτή την έννοια η φύση της θεωρίας ήταν επαναστατική. « Η υπόθεση των κβάντων δεν θα εξαφανιστεί ποτέ από τον κόσμο» δήλωσε υπερήφανα σε μια ομιλία του το 1911. « Δεν πιστεύω ότι πάω πολύ μακριά αν εκφράσω τη γνώμη ότι μ' αυτήν την υπόθεση μπαίνουν τα θεμέλια για την κατασκευή μιας θεωρίας η οποία κάποια μέρα προορίζεται να φωτίσει τα γρήγορα και λεπτά γεγονότα του μοριακού κόσμου με καινούριο φως.

1.4 Einstein: Ο ιδρυτής της Κβαντομηχανικής



Ήταν πράγματι ο Planck αυτός που εισήγαγε την κβαντική υπόθεση έναν αιώνα πριν; Ο ιστορικός και φιλόσοφος της επιστήμης Thomas Kuhn, ο οποίος ανέλυσε προσεκτικά την πορεία του Planck προς το νόμο της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος και τις συνέπειές του σκέφτηκε σίγουρα ότι η τιμή αυτή δεν ανήκει στον Planck.

Παρόλα αυτά υπάρχουν ενδείξεις τόσο υπέρ όσο και κατά της αμφιλεγόμενης άποψης του Kuhν η οποία έχει συζητηθεί αρκετά από τους ιστορικούς της φυσικής. Υπάρχει μια σημαντική περίπτωση ότι έπρεπε να περιμένουμε λίγα ακόμη χρόνια πριν γιορτάσουμε την κβαντική εκατονταετία. Από την άλλη πλευρά η περίπτωση αυτή αμφισβητείται και θεωρείται λογικοφανές να διαλέξουμε το 2000 ως εκατονταετία και τον Planck ως τον πατέρα της κβαντικής θεωρίας. Επιπρόσθετα υπάρχει μακρά παράδοση να αποδίδουμε την πατρότητα της θεωρίας στον Planck, ο οποίος σε τελευταία ανάλυση πήρε το Nobel φυσικής το 1918 «για την ανακάλυψη των κβάντων της ενέργειας». Τα Ιωβηλαία και οι επιστημότητες ενισχύουν την παράδοση, δεν την αμφισβητούν.

Όπως υποδεικνύει ο Kuhν, πουθενά στις δημοσιεύσεις του 1900 και 1901 δεν έγραψε καθαρά ο Planck ότι η ενέργεια ενός μεμονωμένου ταλαντωτή μπορεί να πάρει μόνο διακριτές τιμές σύμφωνα με τη σχέση,

$$E = nhf \quad (1.7)$$

όπου n είναι ένας ακέραιος. Αν αυτό είναι ότι εννοούσε, γιατί δεν το έλεγε επίσης; Και αν αναγνώριζε ότι είχε εισάγει την ενεργειακή κβάντωση, μια παράξενη, όχι κλασσική έννοια, γιατί παρέμεινε σιωπηλός 4 χρόνια; Επιπλέον στις διαλέξεις του από το 1906 πάνω στη θεωρία της θερμικής ακτινοβολίας, ο Planck συζητούσε για μια συνεχή θεωρία που δεν έκανε αναφορά σε διακριτές ενέργειες ταλαντωτών. Αν «είχε δει το φως» τόσο νωρίς στα 1900, όπως δήλωνε αργότερα, τι τον έκανε να

αλλάζει γνώμη 6 χρόνια αργότερα; Η απάντηση θα μπορούσε να είναι ότι δεν άλλαξε γνώμη γιατί δεν είχε δει το φως;

Αυτά είναι μόνο μερικά σχόλια που κάνει ο Kuhn και εκείνοι οι ιστορικοί της φυσικής που υποστηρίζουν την άποψη αυτή. Σαν όλα τα ιστορικά σχόλια η αντιδικία για την κβαντική ασυνέχεια εδράζεται σε μια σειρά από ενδείξεις και αντίθετες ενδείξεις που μόνο ποιοτικά μπορούν να εκτιμηθούν και ως σύνολο. Δεν μπορούν να τεκμηριωθούν με τον καθαρό τρόπο που ξέρουμε από τη φυσική (ή μάλλον από μερικά βιβλία φυσικής)

Αν δεν ήταν ο Planck αυτός που εισήγαγε την υπόθεση των ενεργειακών κβάντων το 1900 τότε ποιος την εισήγαγε; Ο Lorentz και ο Boltzmann έχουν αναφερθεί ως υποψήφιοι αλλά μια πολύ ισχυρότερη περίπτωση μπορεί να αναφερθεί ότι ήταν ο Einstein αυτός που πρώτος αναγνώρισε την ουσία της κβαντικής θεωρίας. Οι αξιοσημείωτες συμβολές του Einstein στις πρώτες φάσεις της κβαντικής θεωρίας είναι πολύ γνωστές και πέραν πάσης αμφισβήτησης. Η πιο φημισμένη του συνεισφορά είναι η θεωρία που διατύπωσε το 1905 για τα κβάντα φωτός ή φωτόνια. Αλλά επίσης έκανε σπουδαίες συνεισφορές το 1907 στη κβαντική θεωρία των ειδικών θερμοτήτων των στερεών και το 1909 στις ενεργειακές διαταραχές.

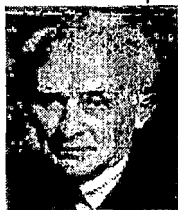
Δεν υπάρχει αμφιβολία ότι ο νεαρός Einstein είδε βαθύτερα από τον Planck και μόνον ο Einstein αναγνώρισε ότι η κβαντική ασυνέχεια ήταν ένα ουσιαστικό μέρος από τη θεωρία του Planck για την ακτινοβολία του μαύρου σώματος. Αν αυτό καθιστά τον Einstein « τον άνθρωπο που ανακάλυψε την κβαντική ασυνέχεια » όπως διατείνεται ο Γάλλος ιστορικός της φυσικής Olivier Darrigol, είναι ένα άλλο θέμα. Το σπουδαίο είναι ότι ο ρόλος του Planck στην ανακάλυψη της κβαντικής θεωρίας ήταν περιπεπλεγμένος και λίγο αμφιλεγόμενος. Να αποδώσουμε μόνο σ' αυτόν την ανακάλυψη, όπως κάνουν μερικά βιβλία φυσικής είναι πολύ απλουστευτικό. Άλλοι φυσικοί, και ιδιαίτερα ο Einstein αναμείχθηκαν με κρίσιμο τρόπο στη δημιουργία της κβαντικής θεωρίας. Η ανακάλυψη θα έπρεπε να αντιμετωπισθεί ως μια εκτεταμένη διαδικασία και όχι ως μια στιγμή ενόρασης που γνωστοποιήθηκε μια συγκεκριμένη ημέρα στο τέλος του 1900.

Η θεωρία του Einstein το 1907 για τις ειδικές θερμοότητες ήταν ένα σημαντικό στοιχείο στη διαδικασία εδραίωσης της κβαντικής θεωρίας σαν ένα σπουδαίο πεδίο της φυσικής. Η αλλαγή της κατάστασης στην κβαντική θεωρία αναγνωρίστηκε και επίσημα στο πρώτο συνέδριο του Solvay το 1911, με « την θεωρία ακτινοβολίας και τα κβάντα » ένα γεγονός που προκάλεσε την φάση απογείωσης της κβαντικής θεωρίας. Οι συμμετέχοντες στο συνέδριο στις Βρυξέλες αναγνώρισαν ότι με την κβαντική θεωρία άλλαζε η πορεία της φυσικής. Που θα οδηγούσε η εξέλιξη κανείς δεν ήξερε. Για παράδειγμα δεν πίστευαν ότι η κβαντική θεωρία είχε κάτι να κάνει με την ατομική δομή. Δυο χρόνια αργότερα, με την έλευση της ατομικής θεωρίας του

Niels Bohr η κβαντική θεωρία πήρε νέα τροπή που προοδευτικά οδήγησε στην κβαντομηχανική και σε νέες βάσεις την εικόνα του φυσικού κόσμου.

1.5 Max Born (1882-1960): Ο συνιδρυτής της Κβαντομηχανικής

Ο Max Born, Γερμανός φυσικός, ήταν ένας από τους τρεις πρωταγωνιστές -οι άλλοι δύο ήταν ο Bohr και ο Heisenberg- στη διαμόρφωση της πιθανοκρατικής ερμηνείας της Κβαντομηχανικής. Σύμφωνα με την ερμηνεία αυτή ο πιθανοκρατικός χαρακτήρας των νόμων της Κβαντομηχανικής δεν οφείλεται σε ατελή γνώση των παραγόντων, που προσδιορίζουν τις μικροσκοπικές κινήσεις αλλά είναι μια εγγενής ιδιότητα της φύσης στο ατομικό και υποατομικό επίπεδο. Η εργασία που δημοσίευσε το 1924 με τίτλο "Για την Κβαντομηχανική", θεωρείται ότι είναι η έναρξη της Πήρε το βραβείο Νόμπελ Φυσικής, το 1954, για την στατιστική περιγραφή της συμπεριφοράς των υποατομικών σωματιδίων της ύλης.



Είχε προσλάβει τον Heisenberg και τον Pascual Jordan για να εργαστούν κοντά του πάνω σε αυτά τα προβλήματα και αυτή η καρποφόρος τριάδα ήταν που έβαλε τις ιδέες του Heisenberg σε μια περισσότερη χρήσιμη φόρμα: την πρώτη μαθηματική εκδοχή της κβαντικής θεωρίας, την Μηχανική των μητρών.

Όμως η πιο αξιωματική προσφορά του Born αφορά τον τρόπο με τον οποίο βλέπουμε σήμερα την Κβαντομηχανική. Τι είναι η κυματοσυνάρτηση; Τι σημαίνει στην πραγματικότητα; Αυτές και πολλές άλλες απαντήσεις έδωσε ο Born.

Ο Born πρότεινε ότι η μόνη παρατηρήσιμη όψη της κυματοσυνάρτησης ήταν το τετράγωνο της, $\psi(x)^2$, κι όχι η ίδια η κυματοσυνάρτηση. Θεώρησε επίσης, σαν σωστή ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης, ότι το τετράγωνο της σε μια δεδομένη θέση του χώρου ήταν ανάλογο με την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε αυτό το σημείο του χώρου. Το τετράγωνο αυτό της κυματοσυνάρτησης ψ^2 ονομάστηκε πυκνότητα πιθανότητας ενώ την

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \quad (1.8)$$

ίδια κυματοσυνάρτηση μπορούμε να τη λέμε, πλάτος της πιθανότητας.

Διαλεύκανε επίσης σπουδαία ζητήματα, όπως η Αρχή της Συμπληρωματικότητας, μέσω της οποίας οι κλασικά αντιφατικές έννοιες "σωματίδιο" ή "κύμα" αναδύθηκαν ως συμπληρωματικές όψεις μιας ενιαίας φυσικής οντότητας, του υλοκύματος.

Παρότι φίλος του Einstein από παλιά, ήρθε σε σύγκρουση μαζί του για το φιλοσοφικό υπόβαθρο και την ερμηνεία της Κβαντικής Μηχανικής. Στο τέλος της ζωής του, δούλεψε πάνω στα θέματα της ενοποίησης των πεδίων.

1.5.1 Η ζωή του

Ο Max Born γεννήθηκε στη πόλη Breslau, στις 11 Δεκεμβρίου 1882, που σήμερα ανήκει στην Πολωνία αλλά τότε ανήκε στη Γερμανία. Ήταν γιος του Καθηγητή Gustav Born ενός ανατόμου, εμβρυολόγου και της Margarete, με καταγωγή από μια πλούσια οικογένεια της Σιλεσίας. Σαν μαθητής είχε λιγότερο ενδιαφέρον για τις φυσικές επιστήμες και περισσότερο για τις ανθρωπιστικές ενώ αργότερα στο Πανεπιστήμιο της Breslau που εισήχθη το 1901, έδειξε ενδιαφέρον για μια μεγάλη γκάμα θεμάτων.

Τα αγαπημένα του θέματα ήταν τα μαθηματικά και η αστρονομία και σκέφτηκε γι' αυτό να ειδικευτεί στην αστρονομία. Πήγε το 1902 στη Χαϊδελβέργη και ακολούθως, το 1903, στη Ζυρίχη. Στη Ζυρίχη σαν κύριο μάθημα πήρε τα προηγμένα μαθηματικά, κοντά στον φημισμένο καθηγητή Hurwitz. Αργότερα πήγε στο Göttingen και τέλος μελέτησε μαθηματικά κάτω από την καθοδήγηση των Klein, Hilbert, Minkowski, και Runge. Συνέχισε με αστρονομία κάτω από την καθοδήγηση του Schwarzschild και φυσική κάτω από τις οδηγίες του Voigt.

Η καριέρα του ξεκίνησε σαν βοηθός, το 1905, του Hilbert συνεχίζοντας όμως να παρακολουθεί διαλέξεις από τον Klein και τον Runge. Όμως ο Klein ενοχλήθηκε γιατί ο Born δεν ήταν τακτικός φοιτητής στις διαλέξεις του, κι έτσι ο Born αποφάσισε να αντικαταστήσει την αστρονομία με τη γεωμετρία ως ένα από τα διδακτορικά θέματά του. Παρευρέθηκε στις διαλέξεις της αστρονομίας του Schwarzschild και έλαβε επιτυχώς το διδακτορικό του το 1907. Επισκέφθηκε για λίγο το Cambridge όπου μελέτησε κάτω από τις οδηγίες του Larmor και J.J. Thomson.

Ο Born αφού επέστρεψε για λίγο στο Breslau (1908), επισκέφτηκε το Göttingen και πάλι το 1909 κι άρχισε μια συνεργασία με τον Minkowski που πέθανε όμως λίγες εβδομάδες αργότερα, αφότου είχε αρχίσει η συνεργασία τους. Δυστυχώς τότε ανέλαβε και το ξεσκόνισμα των έργων του Minkowski πάνω στη φυσική, ενώ δημοσίευσε και πολλά έργα του.

Αφού δούλεψε πάνω στο σχετικιστικό ηλεκτρόνιο, δέχθηκε τότε μια πρόσκληση από τον Αμερικανό φυσικό Michelson να επισκεφθεί το Σικάγο (1912), για να κάνει μερικές διαλέξεις πάνω στη σχετικότητα. Εκεί είχε την ευκαιρία, να κάνει μερικά πειράματα με τον φασματογράφο, δώρο του Michelson.

Το 1912 προσφέρθηκε στον Born μια θέση στο Göttingen για να αρχίσει ένα ερευνητικό πρόγραμμα με τον Von Kármán. Αυτή η εργασία ήταν πάνω στη δυναμική της κρυσταλλικής δομής όπου αυτοί προσδιόρισαν τους βαθμούς ελευθερίας ενός κρυστάλλου με τους κανονικούς τρόπους δόνησης ολόκληρου του σώματος. Η εργασία τους χρησιμοποίησε την τρισδιάστατη ανάλυση Fourier.

Το 1914 του προσφέρθηκε μια θέση στο Βερολίνο, όπου έγινε συνάδελφος του Planck. Ήδη όμως είχε ξεκινήσει ο Α! Παγκόσμιος Πόλεμος και ο Born υπηρέτησε

στο επιστημονικό γραφείο του Στρατού, δουλεύοντας πάνω στη θεωρία του βεληνεκούς του ήχου.

Με τη λήξη του Πολέμου, το 1919, μετακινήθηκε στο Πανεπιστήμιο της Φρανκφούρτης, όπου είχε στη διάθεσή του ένα εργαστήριο. Ο βοηθός του ήταν ο Otto Stern, και το πρώτο του πείραμα εκεί, που αργότερα έγινε ευρέως γνωστό, ήταν αυτό με το οποίο κέρδισε το Νόμπελ Φυσικής.

Το 1921, το έτος που έγινε καθηγητής στο Göttingen, διατύπωσε έναν ακριβή ορισμό της θερμότητας ο οποίος απετέλεσε την πιο ικανοποιητική μαθηματική έκφραση του πρώτου θερμοδυναμικού νόμου.

Επίσης δούλεψε πάνω στα κρυσταλλικά πλέγματα, με αρκετές ανακαλύψεις τόσο από τον ίδιο όσο και από τους μαθητές του. Ακολούθησαν οι εργασίες του πάνω στην κβαντική θεωρία. Εκείνη την εποχή ανάμεσα στους συνεργάτες του, ήταν οι Pauli, Heisenberg, Jordan, Fermi, Dirac, Hund, Hylleraas, Weisskopf, Oppenheimer, Joseph Mayer και Maria Mayer.

Κατά τη διάρκεια των ετών 1925 και 1926 δημοσίευσε με τους Heisenberg και Jordan, έρευνες πάνω στη μηχανική των μιτρών και αμέσως μετά από αυτές, τις μελέτες του για την στατιστική ερμηνεία της κβαντικής μηχανικής.

Το 1926 ο Born συνεργάστηκε με τους Pauli και Heisenberg, που ήταν τότε σπουδαστής του Born, στην κβαντική θεωρία. Ο Heisenberg δούλεψε πάνω στην άλγεβρα των μητρών, με την βοήθεια του Born, και δημιούργησε την γνωστή κβαντομηχανική.

Όμως η εργασία που έκανε ο Born πάνω στην Κβαντομηχανική είναι θεμελιώδους σημασίας, η οποία ξεκίνησε με αυτή τη συνεργασία. Αφού επεξεργάστηκε την αρχική κβαντική θεωρία, η οποία θεωρούσε τα ηλεκτρόνια σαν σωματίδια, τελικά την αντικατέστησε με μια μαθηματική πιθανοκρατική περιγραφή, που αντιπροσωπεύει ακριβέστερα την παρατηρηθείσα συμπεριφορά των ηλεκτρονίων.

Όπως και τόσοι πολλοί άλλοι Γερμανοί επιστήμονες, αναγκάστηκε το 1933 να γίνει μετανάστης λόγω της Εβραϊκής του καταγωγής, και να φύγει αρχικά στην Βόρεια Ιταλία. Αργότερα αποδέχθηκε μια προσφορά που του έγινε να πάει στο Κέμπριτζ. Εκεί δίδαξε τρία χρόνια σαν Λέκτορας πάνω στη μη γραμμική ηλεκτροδυναμική. Κατά τη διάρκεια του χειμώνα 1935-1936 ο Born πέρασε έξι μήνες στο Πανεπιστήμιο της Bangalore της Ινδίας, όπου δούλεψε μαζί με τον Raman.

Συνεργάστηκε με τον Οπενχάιμερ με τον οποίο ανέπτυξε μια μέθοδο ανάλυσης της μοριακής δομής, που βασίζεται στην υπόθεση ότι οι επιπτώσεις των πυρηνικών κινήσεων είναι αμελητέες (Προσέγγιση Born-Oppenheimer).

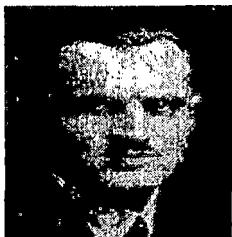
Ο Born επέστρεψε στη Γερμανία μόνο όταν αποσύρθηκε από το Πανεπιστήμιο το 1953, περνώντας τα τελευταία του χρόνια σε μια μικρή πόλη κοντά στο Göttingen. Πέθανε στο Göttingen στις 5 Ιανουαρίου του 1970.

Εκτός από βραβείο Νόμπελ Φυσικής έλαβε πάμπολλες τιμές, όπως του συνεργάτη της Βασιλικής Εταιρείας το 1939, το Μετάλλιο Hughes το 1950 κλπ.

Ήταν μέλος πολλών Ακαδημιών όπως των - Göttingen, Μόσχας, Βερολίνου, Βουκουρεστίου, Εδιμβούργου, Λονδίνου, Λίμας, Κοπεγχάγης, Στοκχόλμης, Ουάσινγκτον, Bangalore Ινδίας και Βοστώνης.

Ο Born έγραψε πολλά εγχειρίδια και μονογραφίες, συνήθως για τους σπουδαστές της φυσικής ή τους εμπειρογνώμονες σε θέματα κβαντικής φυσικής, αλλά και σε μερικούς άλλους δημοφιλείς τομείς της επιστήμης. Ο κατάλογος των δημοσιεύσεών του περιλαμβάνει τουλάχιστον 360 αντικείμενα.

1.6 Arthur Compton (1892-1962): Ο ερμηνευτής της σκέδασης των ακτινών-Χ



Ο Αμερικανός φυσικός Arthur Compton ανακάλυψε και ερμήνευσε το φαινόμενο της μεταβολής του μήκους κύματος των ακτινών-Χ, όταν αυτές σκεδάζονται από ηλεκτρόνια. Η βαθύτερη σημασία του φαινομένου αυτού, που φέρει το όνομα του, είναι ότι τα φωτόνια των ακτινών-Χ φέρουν κβαντισμένη ορμή.

Στο πείραμα του (1923) έδειξε ότι η σκέδαση γινόταν ως οι ακτίνες-Χ να ήταν

$$\text{σωματίδια ενέργειας } E=hf \text{ και ορμής } p=E/c. \quad (1.9)$$

Χρησιμοποίησε δε για την εξήγηση του φαινομένου την διατήρηση της ενέργειας και της ορμής για το σύστημα ηλεκτρονίου - φωτονίου. Η ανακάλυψη του επιβεβαίωσε για άλλη μια φορά τη διπλή φύση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και γι' αυτό το πείραμα του θεωρείται από τα σπουδαιότερα στην ιστορία της Φυσικής.

1.6.1 Η ζωή του

Ο Arthur Compton γεννήθηκε στο Wooster του Οχάιο στις 10 Σεπτεμβρίου του 1892 και ήταν γιος του Elias Compton, καθηγητή της φιλοσοφίας και κοσμήτορα του κολεγίου του Wooster. Εκπαιδεύτηκε σε αυτό το κολέγιο, που πήρε Bachelor στην επιστήμη το 1913, και ξόδεψε τρία έτη στη μεταπτυχιακή μελέτη στο Πανεπιστήμιο Princeton λαμβάνοντας Μάστερ το 1914 και Διδακτορικό το 1916.

Μάλιστα όταν ο Compton αποφοίτησε από το κολέγιο ήθελε να ακολουθήσει θρησκευτική σταδιοδρομία. Αλλά ο πατέρας του τον συμβούλεψε ότι όφειλε να πάει στον επιστημονικό κλάδο, λέγοντας του: "Η εργασία σου σε αυτό το πεδίο μπορεί να γίνει πιο πολύτιμη χριστιανική υπηρεσία από ό,τι εάν επρόκειτο να δουλέψεις σε κανένα υπουργείο ή να γίνεις ιεραπόστολος". Τέτοιες σκέψεις βοήθησαν τον Compton να συμφιλιώσει σε όλη τη ζωή του τις δύο κύριες επιρροές από την

ανατροφή του, την αφοσίωση του στη θρησκεία και τη διανοητική εργασία του. Ο πατέρας του και ο μεγαλύτερος αδελφός του φυσικός Karl, και πολύ καλός φίλος του συνάμα, του εμφύσησαν την αγάπη για την επιστήμη. Μάλιστα ο Karl έγινε και Πρόεδρος του MIT.

Όταν αποφοίτησε, το 1916 παντρεύτηκε μία συμμαθήτριά του από το κολέγιο του Wooster, την Betty McCloskey, η οποία έγινε μια ικανή και ενθουσιώδης συνεργάτης του στις ύστερες δραστηριότητές του.

Πέρασε ένα έτος ως εκπαιδευτικός της φυσικής στο Πανεπιστήμιο της Μινεσότα και τα πειράματα που άρχισαν εδώ τελικά οδήγησαν τον Compton στο να δηλώσει ότι η μαγνήτιση ενός υλικού εξαρτάται όχι από τις τροχιές των ηλεκτρονίων μέσα σε αυτό, αλλά από τα στοιχειώδη χαρακτηριστικά των ιδίων των ηλεκτρονίων και ήταν ο πρώτος που πρότεινε την ύπαρξη της κβαντοποιημένης ιδιοπεριστροφής (spin) των ηλεκτρονίων.

Ακολούθως πήρε μια θέση ως ερευνητής μηχανικός στην επιχείρηση Westinghouse στο Πίτσμπουργκ μέχρι το 1919, και ύστερα πήγε στο Πανεπιστήμιο του Κέιμπριτζ ως Εθνικός Συνεργάτης του Ερευνητικού Συμβουλίου.

Την εποχή αυτή τουλάχιστον το 10% των επιστημόνων της Αμερικανικής Εταιρείας Φυσικής δούλευε στην βιομηχανία. Στην Westinghouse, που πήγε το 1917, συνετέλεσε στο να ανακαλυφθεί ο λαμπτήρας φθορισμού.

Το 1919 στον Compton απονεμήθηκε μία από τις πρώτες υποτροφίες του National Research Council και αυτός επέλεξε να μελετήσει τις ακτίνες-X, στο εργαστήριο Cavendish στην Αγγλία. Αλλά οι συσκευές των ακτίνων-X ήταν εκεί ανεπαρκείς, έτσι εργάστηκε στα συγγενή προβλήματα με τις ακτίνες γάμα. Έλεγε αποφασιστικά τις προηγούμενες μελέτες από άλλους, που έδειχναν μυστήριες μεταβολές λ του μήκους κύματος με τη σκεδαζόμενη γωνία.

Το 1920, διορίστηκε καθηγητής της φυσικής και επικεφαλής του τμήματος Φυσικής στο Πανεπιστήμιο της Ουάσιγκτον στο St. Louis. Το 1923 μετακινήθηκε στο Πανεπιστήμιο του Σικάγου ως καθηγητής της φυσικής και το 1945 ο Compton επέστρεψε στο St. Louis ως κοσμήτορας. Όμως από το 1954 μέχρι την αποχώρησή του, το 1961, ήταν διακεκριμένος καθηγητής της Φυσικής Φιλοσοφίας στο Πανεπιστήμιο της Ουάσιγκτον.

Στην πρώτη περίοδο του στο Princeton, ο Compton επινόησε μια κομψή μέθοδο για να επιδείξει τη γήινη περιστροφή, αλλά σύντομα άρχισε τις μελέτες του στον τομέα των ακτίνων -X. Ανέπτυξε μια θεωρία για τη μελέτη της έντασης των ανακλώμενων ακτίνων-X από τους κρυστάλλους ως μέσο μελέτης της διεύθεσης των ηλεκτρονίων και των ατόμων μέσα σε αυτούς, και το 1918 άρχισε μια μελέτη της σκέδασης των ακτίνων X.

Από την παιδική του ηλικία κατείχε μεγάλη αυτοπεποίθηση, χειρωνακτική ικανότητα, ευστροφία και υπομονή. Όλα αυτά συνδυαζόμενα τον βοήθησαν να τελειοποιήσει τις συσκευές του και να μετρήσει τη μετατόπιση του μήκους κύματος σε συνάρτηση με τη σκεδαζόμενη γωνία.

Αυτό τον οδήγησε, το 1922, στην ανακάλυψή της αύξησης του μήκους κύματος των ακτίνων-Χ, που οφειλόταν στη σκέδαση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας από τα ελεύθερα ηλεκτρόνια του μετάλλου, κάτι που υπονοούσε ότι τα σκεδαζόμενα κβάντα έχουν λιγότερη ενέργεια από τα κβάντα της αρχικής - προσπίπτουσας - ακτίνας. Αυτό το φαινόμενο, που είναι γνωστό σήμερα ως φαινόμενο Compton και που επεξηγεί σαφώς τη σωματιδιακή φύση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, τεκμηριώθηκε κατόπιν από τον Wilson ο οποίος στο θάλαμο νέφους του, μπόρεσε να εμφανίσει την παρουσία των τροχιών των ηλεκτρονίων ανάκρουσης. Στο θάλαμο αυτό γίνεται ορατή η τροχιά των φορτισμένων σωματιδίων μέσω της υγροποίησης των ατμών.

Μελετώντας αυτό το αποτέλεσμα, απέβαλε έγκαιρα διάφορες προσπάθειες για να εξηγηθεί με την κλασική φυσική. Στα τέλη του 1922 κατάλαβε ότι η απάντηση κρυβόταν τόσο στην ειδική σχετικότητα όσο και στην κβαντική μηχανική. Και οι δύο θεωρίες είχαν τότε χρησιμοποιηθεί για λίγο και λίγοι τις καταλάβαιναν.

Μια άλλη απόδειξη της πραγματικότητας αυτού του φαινομένου δόθηκε από τη μέθοδο σύμπτωσης (που αναπτύχθηκε από τους Compton και A.W. Simon, και ανεξάρτητα στη Γερμανία από τους Bothe και Geiger, από την οποία θα μπορούσε να αναγνωριστεί ότι τα μεμονωμένα σκεδαζόμενα φωτόνια των ακτίνων-Χ και τα ηλεκτρόνια ανάκρουσης εμφανίζονται στην ίδια στιγμή, ερχόμενος σε αντίθεση με τις απόψεις, που αναπτύχθηκαν κατόπιν από μερικούς ερευνητές σε μία προσπάθεια να συμφιλιωθούν οι κβαντικές απόψεις με τα συνεχή κύματα της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας. Για αυτήν την ανακάλυψη, στον Compton απονεμήθηκε το βραβείο Νόμπελ Φυσικής για το 1927 (που το μοιράσθηκε με τον Wilson που έλαβε το βραβείο για την ανακάλυψή της μεθόδου του θαλάμου νέφους ή Wilson όπως το ξέρουμε σήμερα).

Επιπλέον, Compton ανακάλυψε (με τον C. Hagenow) το φαινόμενο της συνολικής ανάκλασης των ακτίνων-Χ και της πλήρους πόλωσης τους, οι οποίες τον οδήγησαν σε έναν ακριβέστερο προσδιορισμό του αριθμού ηλεκτρονίων σε ένα άτομο.

Ήταν επίσης ο πρώτος (με τον R. Doan) που έλαβε τα φάσματα των ακτίνων-Χ με κανονικές δικτυωτές δομές, που προσφέρουν μια άμεση μέθοδο για την εύρεση του μήκους κύματος των ακτίνων-Χ. Με τη σύγκριση αυτών των μικρών κυμάτων λ από τα φάσματα, με εκείνα τα μήκη που λαμβάνονται με τη χρησιμοποίηση ενός κρυστάλλου, μπορεί να καθοριστεί πλήρως το διάστημα που χωρίζει τα κρυσταλλικά επίπεδα ενός υλικού. Ο αριθμός του Avogadro, που βρέθηκε από το συνδυασμό της

ανωτέρω τιμής με τη μετρημένη πυκνότητα του κρυστάλλου, οδήγησε σε μια νέα τιμή για το ηλεκτρονικό φορτίο. Αυτό το πείραμα ανάγκασε την αναθεώρηση της τιμής που βρήκε ο Millikan από $4,774$ σε $4,803 \cdot 10^{-10}$ e.s.u. (που σημαίνει ότι έγιναν συστηματικά σφάλματα στη μέτρηση του ιξώδους του αέρα, μια ποσότητα που χρησιμοποιήθηκε στο πείραμα της σταγόνας του λαδιού του Millikan).

Κατά τη διάρκεια του 1930-1940, ο Compton ήταν επικεφαλής μιας παγκόσμιας μελέτης για τις μεταβολές της έντασης των κοσμικών ακτινών ανάλογα με το γεωγραφικό πλάτος, και με αυτόν τον τρόπο επιβεβαιώθηκαν πλήρως οι παρατηρήσεις που έγιναν το 1927 από τον J. Clay στο Άμστερνταμ, ότι επηρεάζει το γεωγραφικό πλάτος την ένταση των κοσμικών ακτινών. Μπόρεσε, εντούτοις, να δείξει ότι η ένταση συσχετίστηκε με το γεωμαγνητικό παρά με το γεωγραφικό πλάτος. Αυτό προκάλεσε εκτενείς μελέτες της αλληλεπίδρασης του γήινου μαγνητικού πεδίου με το εισερχόμενο ιστροπικό ρεύμα των αρχικών φορτισμένων σωματιδίων. Ο Compton έχει γράψει πολλές επιστημονικές μελέτες και είναι ο συγγραφέας του έργου των Δευτερογενών Ακτινοβολιών που παράγονται από τις ακτίνες Χ (1922), ακτίνες-Χ και ηλεκτρόνια (1926, δεύτερη έκδοση 1928), οι ακτίνες-Χ στη θεωρία και το πείραμα (με τον S. K. Allison, 1935, αυτό το έργο είναι η αναθεωρημένη έκδοση των ακτίνων-Χ και ηλεκτρονίων), η Ελευθερία του ατόμου (1935, τρίτη έκδοση 1939), Μαζί στο Κολέγιο (με άλλους, 1940), και την Ανθρώπινη Έννοια της Επιστήμης (1940).

Στον Compton απονεμήθηκαν πολυάριθμες τιμητικές διακρίσεις και άλλα βραβεία συμπεριλαμβανομένου του χρυσού μεταλλίου Rumford (από την Αμερικανική Ακαδημία των Τεχνών και των Επιστημών), το Χρυσό μετάλλιο της ραδιολογικής εταιρείας της Βόρειας Αμερικής (1927), το Μετάλλιο Hughes Medal (Βασιλική Εταιρεία 1928) και το βραβείο Franklin το 1940. Έγινε Πρόεδρος της Αμερικανικής Εταιρείας Φυσικής (1934), της Αμερικανικής Ένωσης των Εργαζομένων Επιστημόνων (1939-1940), και της Αμερικανικής Ένωσης για την πρόοδο της επιστήμης (1942).

Το 1941 ο Compton διορίστηκε Πρόεδρος της Εθνικής Ακαδημίας της Επιτροπής Επιστημών για να αξιολογήσει τη χρήση της ατομικής ενέργειας στον πόλεμο. Οι έρευνές του, που πραγματοποιήθηκαν σε συνεργασία με τον Fermi, Szilard, Wigner και άλλους, οδήγησαν στην καθιέρωση των πρώτων αντιδραστήρων ελεγχόμενης διάσπασης του ουράνιου, και, τελικά, στους μεγάλους αντιδραστήρες παραγωγής πλουτωνίου στο Hanford, της Ουάσιγκτον, που παρήγαγε το πλουτώνιο για τη βόμβα του Ναγκασάκι, τον Αύγουστο του 1945. Διαδραμάτισε επίσης έναν ρόλο στην κυβερνητική απόφαση να χρησιμοποιηθεί η βόμβα. Ένας προσωπικός απολογισμός αυτών των θεμάτων μπορεί να βρεθεί στο βιβλίο του, μια Ατομική Αναζήτηση - ένα προσωπικό αφήγημα, του 1956.

Στο τέλος της ζωής του αφιερώθηκε στα ζητήματα των κοινωνικών επιπτώσεων της επιστήμης και της τεχνολογίας. Πέθανε στις 15 Μαρτίου του 1962, στο Μπέρκλεϋ της Καλιφόρνιας.

1.7 Τι είναι η Κβαντομηχανική

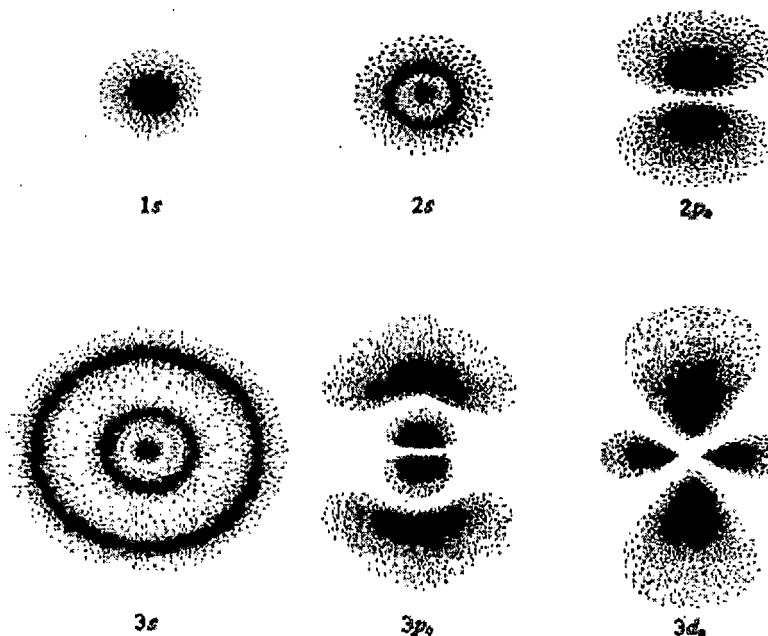
Ο πιο απλός ορισμός για την κβαντομηχανική: είναι η μελέτη της ύλης και της ακτινοβολίας σε ένα ατομικό επίπεδο.

Γιατί αναπτύχθηκε;

Στις αρχές του 20ού αιώνα μερικά πειράματα παρήγαγαν αποτελέσματα που δεν θα μπορούσαν να εξηγηθούν από την Κλασσική φυσική.

Παραδείγματος χάριν, ήταν αρκετά γνωστό ότι τα ηλεκτρόνια ήταν σε τροχιά γύρω από τον πυρήνα ενός ατόμου. Εντούτοις, εάν γινόταν έτσι, με έναν τρόπο που να έμοιαζε με τους πλανήτες που στρέφονται γύρω από τον ήλιο, η Κλασσική φυσική πρόβλεπε ότι τα ηλεκτρόνια θα κινούνταν σπειροειδώς συνεχώς προς τα μέσα και θα συντρίβονταν στον πυρήνα εντός ενός κλάσματος του δευτερολέπτου. Ευτυχώς αυτό δεν συμβαίνει, γιατί η ζωή όπως την ξέρουμε δεν θα υπήρχε. (Η χημεία εξαρτάται από την αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με τα άτομα, και η ζωή εξαρτάται από τη χημεία).

Εκείνη η ανακριβής πρόβλεψη, μαζί με μερικά άλλα πειράματα που η Κλασσική φυσική δεν μπορούσε να εξηγήσει, έδειξε στους επιστήμονες ότι κάτι νέο απαιτείται για να εξηγήσει η επιστήμη, τι συμβαίνει στο ατομικό επίπεδο.



Η νέα αντίληψη που έφερε η κβαντομηχανική για τη μορφή του ατόμου απεικονίζεται στο παραπάνω σχήμα. Η ανωτέρω εικόνα εμφανίζει μερικά σχήματα στο χώρο, στις περιοχές των οποίων υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο υδρογόνου (ο πυρήνας είναι στο κέντρο κάθε σχήματος). Τα σχήματα αυτά ονομάζονται τροχιακά.

Αντί λοιπόν να έχουμε τροχιές έχουμε τροχιακά. Αντί να ξέρουμε με ακρίβεια την ακτίνα των τροχιών, γνωρίζουμε την πιθανότητα να βρούμε ένα ηλεκτρόνιο σε μια δεδομένη θέση και με δεδομένη ενέργεια.

Εάν όμως η Κλασσική Φυσική κάνει λάθος, γιατί την χρησιμοποιούμε ακόμα:

Η Κλασσική Φυσική είναι μια θεωρία που έχει ραγίσει, αλλά αυτή είναι μόνο εντυπωσιακά ραγισμένη, κατά την εξέταση πολύ μικρών μεγεθών (ατομικού μεγέθους, όπου η κβαντομηχανική χρησιμοποιείται) ή πολύ γρήγορων γεγονότων (κοντά στην ταχύτητα του φωτός, όπου αναλαμβάνει η σχετικότητα)

Για τα καθημερινά πράγματα, που είναι πολύ μεγαλύτερα από τα άτομα και πολύ πιο αργά από την ταχύτητα του φωτός, η Κλασσική Φυσική κάνει άριστα την δουλειά της. Στα συν της βέβαια, ότι είναι πολύ ευκολότερο να χρησιμοποιήσετε την Κλασσική Φυσική παρά την κβαντομηχανική και τη σχετικότητα (κάθε μια από την οποία απαιτεί ένα εκτενές ποσό μαθηματικών).

Ποια είναι η σημασία των κβαντομηχανικής;

Τα παρακάτω είναι μεταξύ των σημαντικότερων πραγμάτων που η κβαντομηχανική μπορεί να περιγράψει ενώ η Κλασσική Φυσική δεν μπορεί:

- Διακριτότητα της ενέργειας
- Η δυαδικότητα του φωτός και της ύλης
- Κβαντική σήραγγα

Διακριτότητα της ενέργειας

Εάν εξετάσετε το φάσμα του φωτός που εκπέμπεται από ενεργητικά άτομα (όπως το πορτοκαλο-κίτρινο φως από τους φωτεινούς σηματοδότες που περιέχουν ατμούς νατρίου, ή το λευκό-γαλάζιο φως από τους λαμπτήρες ατμού υδραργύρου) θα παρατηρήσετε ότι αποτελείται από μεμονωμένες γραμμές διαφορετικών χρωμάτων. Αυτές οι γραμμές αντιπροσωπεύουν τα ιδιαίτερα ενεργειακά επίπεδα των ηλεκτρονίων σε εκείνα τα διεγερμένα άτομα.

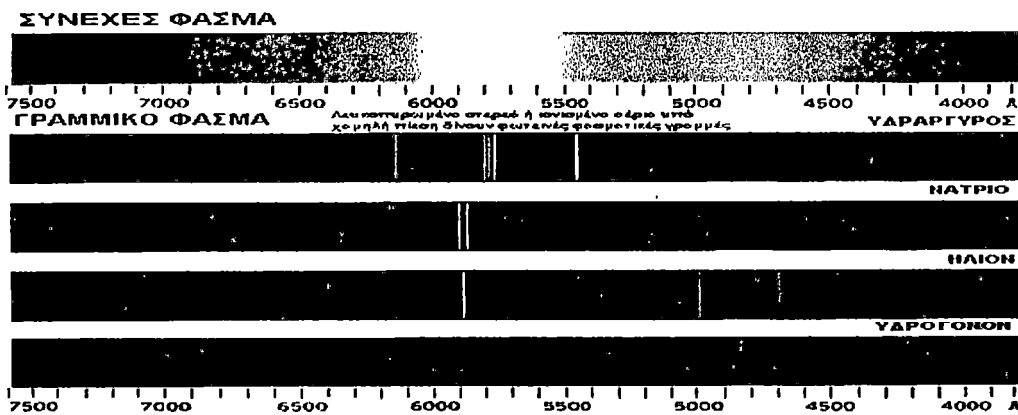
Όταν δηλαδή ένα ηλεκτρόνιο σε μια υψηλή ενεργειακή κατάσταση μεταπίπτει σε μια χαμηλότερη ενεργειακή κατάσταση, το άτομο εκπέμπει τότε ένα φωτόνιο του φωτός που αντιστοιχεί στη ακριβή ενεργειακή διαφορά εκείνων των δύο επιπέδων (διατήρηση της ενέργειας). Όσο μεγαλύτερη είναι η ενεργειακή διαφορά, τόσο πιο

ενεργητικό θα είναι το φωτόνιο, και εάν βρίσκεται στην περιοχή του ορατού φωτός, τόσο πιο κοντά θα είναι το χρώμα του στο ιώδες, στο τέλος του φάσματος.

Εάν τα ηλεκτρόνια δεν ήταν περιορισμένα σε διακριτές ενεργειακές στάθμες, το φάσμα από ένα διεγερμένο άτομο θα είχε τη μορφή μιας συνεχούς διαδοχής χρωμάτων από το κόκκινο ως το ιώδες χωρίς μεμονωμένες-διακριτές γραμμές.

Είναι γεγονός ότι τα ηλεκτρόνια μπορούν να υπάρξουν μόνο σε ιδιαίτερα ενεργειακά επίπεδα, που τα αποτρέπει από το να κινηθούν σπειροειδώς προς τον πυρήνα, όπως προβλέπει η Κλασική Φυσική. Και αυτή είναι η κβάντωση της ενέργειας (παίρνει δηλαδή ορισμένες τιμές), μαζί με μερικές άλλες ατομικές ιδιότητες που είναι κβαντισμένες, η οποία δίνει στην κβαντομηχανική το όνομα της.

ΦΑΣΜΑ ΕΚΠΟΜΠΗΣ



Η δυαδικότητα κύματος-σωματιδίου του φωτός και της ύλης

Το 1690 ο Christian Huygens πρότεινε τη θεωρία ότι το φως αποτελείται από κύματα (κυματική φύση του φωτός), ενώ το 1704 ο Isaac Newton πρότεινε ότι το φως αποτελείται από μικροσκοπικά σωματίδια. Εξάλλου διαφορετικά πειράματα, υποστήριζαν την κάθε μια από τις θεωρίες αυτές.

Εντούτοις, ούτε μια τέλεια θεωρία σωματιδίων, ούτε μια τέλεια κυματική θεωρία δεν θα μπορούσε να εξηγήσει όλα τα φαινόμενα που συνδέονται με το φως! Έτσι οι επιστήμονες άρχισαν να σκέφτονται το φως και ως σωματίδιο και ως κύμα. Το 1923 ο Louis δε Broglie υπέθεσε ότι ένα υλικό σωματίδιο θα μπορούσε επίσης να έχει κυματοειδείς ιδιότητες, και το 1927 αποδείχτηκε πειραματικά από τους Davisson και Germer ότι τα ηλεκτρόνια μπορούν πράγματι να συμπεριφερθούν όπως τα κύματα.

Πώς μπορεί κάτι να είναι και ένα σωματίδιο και ένα κύμα συγχρόνως; Δεν εννοούμε βέβαια να σκεφτεί κάποιος το φως ως ένα ρεύμα σωματιδίων που κινούνται πάνω-κάτω κατά τρόπο κυματοειδή. Πραγματικά, το φως και η ύλη

υπάρχουν ως σωματίδια. Αυτό που συμπεριφέρεται σαν ένα κύμα, είναι η πιθανότητα να βρεθεί αυτό το σωματίδιο σε διάφορες θέσεις.

Το φως που εμφανίζεται μερικές φορές να ενεργεί όπως ένα κύμα, είναι επειδή παρατηρούμε την συσσώρευση πολλών από τα σωματίδια του φωτός (κβάντα), κι έτσι διαμοιράζονται πάρα πολύ οι πιθανότητες για διαφορετικές θέσεις στις οποίες κάθε σωματίδιο θα μπορούσε να είναι.

Κβαντική σήραγγα

Αυτό είναι ένα από τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα που προκύπτει από την κβαντομηχανική. Χωρίς αυτή το *chir* του υπολογιστή δεν θα υπήρχε, και έτσι ένας "προσωπικός" υπολογιστής θα καταλάμβανε πιθανόν ένα ολόκληρο δωμάτιο.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, ένα κύμα είναι αυτό το οποίο καθορίζει την πιθανότητα για το που θα βρίσκεται ένα σωματίδιο. Όταν εκείνο το κύμα πιθανότητας του σωματιδίου αντιμετωπίσει ένα ενεργειακό φράγμα, το μεγαλύτερο μέρος του κύματος θα ανακλαστεί προς τα πίσω, αλλά ένα μικρό μέρος από αυτό το κύμα "θα διαρρέυσει" μέσα στο φράγμα. Εάν το φράγμα είναι αρκετά μικρού πάχους, το κύμα που διέρρευσε μέσα από αυτό, θα συνεχίσει την διάδοση του στη άλλη πλευρά του φράγματος. Ακόμα κι αν το σωματίδιο δεν έχει αρκετή ενέργεια να ξεπεράσει το φράγμα, υπάρχει ακόμα μια μικρή πιθανότητα, να μπορεί αυτό "να ανοίξει" μέσα στο φράγμα μια σήραγγα.

Για παράδειγμα, έστω ρίχνουμε μια λαστιχένια σφαίρα πάνω σε έναν τοίχο. Ξέρουμε ότι δεν έχουμε αρκετή ενέργεια για να την ρίξουμε μέσω του τοίχου, έτσι αναμένουμε την σφαίρα να αναπηδά πάντα πίσω. Η κβαντομηχανική, εντούτοις, λέει ότι υπάρχει μια μικρή πιθανότητα ώστε η σφαίρα να περάσει διαμέσου του τοίχου (χωρίς την καταστροφή του τοίχου) και να συνεχίσει την πτήση της από την άλλη πλευρά!

Με ένα τόσο μεγάλο σώμα όσο μια λαστιχένια σφαίρα, εν τούτοις, η πιθανότητα αυτή είναι τόσο μικρή ώστε και αν ακόμα ρίχνουμε τη σφαίρα για δισεκατομμύρια έτη δεν θα την βλέπαμε ποτέ να περνάει μέσα από τον τοίχο. Αλλά με ένα τόσο μικροσκοπικό σώμα όπως ένα ηλεκτρόνιο, το να ανοίξει μια "σήραγγα" είναι ένα καθημερινό περιστατικό.

1.9 Η θεμελίωση της κβαντομηχανικής

Στην καρδιά της κβαντομηχανικής βρίσκεται η αρχή της απροσδιοριστίας η οποία καθιστά απαγορευτική την ταυτόχρονη μέτρηση με απεριορίστη ακρίβεια δύο συζευγμένων μεταβλητών όπως πχ είναι η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου.

Το 1925, ο Werner Heisenberg εργαζόταν πάνω σε μια νέα μαθηματική περιγραφή της ύλης. Οι συλλογισμοί του τον οδήγησαν στην επιβεβαίωση μιας νέας αρχής που έχει γίνει το σήμα κατατεθέν της κβαντικής θεωρίας. Αυτή είναι η γνωστή αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.

Η εργασία του στηρίχτηκε στην περιγραφή της μηχανικής σύμφωνα με την θεμελίωση του Poisson, παρά σ' εκείνη του Χάμιλτον. Καθώς αποδεικνύεται, μια κεντρική έννοια που εμπλέκεται, είναι μια ποσότητα γνωστή ως *αγκύλη Poisson*, η οποία έχει έναν απλό ορισμό και είναι αρκετά ενδιαφέρουσα όταν μελετούνται τελεστές.

Δύο χρήσιμα μεγέθη για να μελετηθεί οποιοδήποτε αντικείμενο, θα μπορούσαν να είναι η θέση του αντικειμένου και η ορμή του. Ας περιοριστούμε λοιπόν για το πρόβλημα μας, στην μελέτη της κίνησης ενός σωματίου μάζας m που κινείται προς μια κατεύθυνση, για παράδειγμα την κατεύθυνση X . Η τιμή για τη θέση του είναι το $X(t)$ και η τιμή για την ορμή του είναι το $p(X(t))$, και τα δύο εκφρασμένα σε συνάρτηση με το χρόνο t .

Ας υποθέσουμε ότι το σωματίο που μελετάμε εκτελεί αρμονική ταλάντωση.

Η βασική εξίσωση της Κλασικής Φυσικής είναι ο δεύτερος νόμος του Newton:

$$F = m\alpha = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (1.10)$$

Για την απλή αρμονική κίνηση, ισχύει επιπλέον ότι η δύναμη F είναι ανάλογη προς την μετατόπιση, ή αλλιώς $F = -KX(t)$, όπου K είναι ένας συντελεστής ή η σταθερά της δύναμης. Με αυτόν τον ορισμό για την δύναμη F , ο διαφορική εξίσωση του δεύτερου νόμου του Newton μπορεί να λυθεί ως προς το $X(t)$.

1.10 Οι πίνακες και η αρχή της απροσδιοριστίας

Είναι προφανές ότι οι ιδιότητες των σωματιδίων όπως η θέση και η ορμή δεν μπορούν πλέον να αντιπροσωπεύονται από συναρτήσεις του χρόνου όπως στην κλασική μηχανική για τις οποίες ισχύει η αντιμεταθετική ιδιότητα (όπως στη περίπτωση που παρουσιάζεται στη προηγούμενη παράγραφο.) Μάλλον πρέπει να αντιπροσωπεύονται από μαθηματικά αντικείμενα στα οποία η σειρά εφαρμογής τους ΕΙΝΑΙ σημαντική. Οι πίνακες και οι τελεστές είναι δύο μαθηματικές οντότητες που έχουν αυτήν την ιδιότητα.

Ο Heisenberg επέλεξε να ακολουθήσει το μονοπάτι των πινάκων και άρχισε να συνδέει τους πίνακες με τις ιδιότητες της ύλης. Όταν δύο πίνακες, A και B , πολλαπλασιάζονται μαζί, το γινόμενο AB δεν είναι γενικά το ίδιο με το BA . Λέμε ότι

αυτοί δεν αντιμετωπίζονται, ή ότι ο μεταθέτης τους (όπως δίνεται πιο πάνω με την έκφραση της αγκύλης Poisson) είναι διαφορετικός από το μηδέν. Ο Heisenberg κατασκεύασε τους πίνακες έτσι ώστε αυτοί να υπακούουν στον ανωτέρω κανόνα. Αυτή είναι η μηχανική των πινάκων ή μητρών.

Η άλλη επιλογή που έχει αναπτυχθεί επίσης - είναι αυτή που χρησιμοποιεί την Άλγεβρα των τελεστών. Πράγματι, η εξίσωση του Schrödinger εμφανίζεται ως μια εξίσωση τελεστών. Στην περιγραφή της φύσης με την μέθοδο του Schrödinger ο τρόπος επιλογής των τελεστών είναι ο παρακάτω.

Έστω ο τελεστής για τη θέση ότι είναι X . Η δράση του τελεστή X σε μια συνάρτηση ορίζεται ως ο πολλαπλασιασμός του X επί την συνάρτηση, (αυτό δεν φέρνει καμία πραγματική αλλαγή σε σχέση με τον καθορισμό του X σαν συνάρτηση).

Η γραμμική ορμή, αφ' ετέρου, πρόκειται να ερμηνευθεί ως τελεστής που εκφράζει την παραγωγή ως προς X και τον πολλαπλασιασμό με μια σταθερά.

Η μέθοδος αυτή των πινάκων ήταν η κατεύθυνση που πήρε ο Heisenberg, με την βοήθεια του Max Born και του Pascual Jordan για τη θεμελίωση της κβαντομηχανικής. Αν εξετασθεί επιφανειακά, αυτή η μέθοδος, έναντι αυτής του Schrödinger, εμφανίζεται να είναι απολύτως διαφορετική. Όταν αυτές οι δύο προσεγγίσεις παρουσιάστηκαν σχεδόν ταυτόχρονα, προέκυψε λοιπόν το ερώτημα, ποια ήταν σωστή. Πολύ γρήγορα αποδείχτηκε ότι ήταν απολύτως ισοδύναμες. Μάλιστα είναι ενδιαφέρον ότι ο ίδιος ο Schrodinger έδειξε πρώτος την ισοδυναμία των δύο μεθόδων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Αποτυχίες της Κλασσικής θεωρίας

2.1 Παλαιά Κβαντική Θεωρία

Η Κλασσική θεώρηση του κόσμου, ότι δηλαδή αποτελείται από ύλη και ακτινοβολία (κύματα) θα μπορούσε ν' αποτελέσει τη βάση περιγραφής όλων των φυσικών φαινομένων. Ως σημειακά σωματίδια θεωρούνται τα ηλεκτρόνια, τα πρωτόνια, καθένα από τα οποία έχει μάζα, και μοναδιαίο ηλεκτρικό φορτίο. Αυτά αλληλεπιδρούν μέσω των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων ή και δυνάμεων άλλης προελεύσεως. Ωστόσο, ακόμα και πριν από την ανακάλυψη του πρωτονίου η αντίληψη αυτή της Κλασσικής Φυσικής αποδείχτηκε ανεπαρκής για την περιγραφή της κινήσεως των ηλεκτρονίων και της αλληλεπιδράσεως των με την ακτινοβολία. Στις επόμενες παραγράφους του κεφαλαίου αυτού αναλύονται τα διάφορα φαινόμενα που δεν μπόρεσε να εξηγήσει η Κλασσική Φυσική, με αποτέλεσμα να εισαχθούν νέες Ιδέες και θεωρίες που αποτελούν την καλούμενη Παλαιά Κβαντική Θεωρία.

2.2 Οπτικά φάσματα

Τα οπτικά φάσματα των διαφόρων ατόμων ήταν από τα πρώτα πειραματικά δεδομένα που δεν μπορούσαν να εξηγηθούν με την Κλασσική Θεωρία. Είναι γνωστό ότι φως εκπέμπεται από ουσίες οι οποίες είτε βρίσκονται σε ψηλές θερμοκρασίες είτε υφίστανται ηλεκτρικές εκκενώσεις. Το φως μπορεί ν' αναλυθεί και να ληφθεί το φάσμα του, που καθώς γνωρίζουμε είναι γραμμικό και χαρακτηριστικό του ατόμου. Όπως αναφέρθηκε το φως είναι ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και η ύπαρξη του πρέπει να συνδέεται με επιταχύνσεις ηλεκτρικών φορτίων των ατόμων των ουσιών που το εκπέμπουν. Κατά την Κλασσική Φυσική οι παρατηρούμενες συχνότητες του φάσματος θα έπρεπε να είναι όμοιες με τις συχνότητες των περιοδικών κινήσεων των φορτισμένων σωματιδίων. Τέτοιο φάσμα δεν παρατηρείται. Αντί γι' αυτό παρατηρούνται σειρές φασματοσκοπικών γραμμών (π.χ. σειρά Balmer του υδρογόνου) εντελώς διαφορετικές από τις αναμενόμενες κατά την Κλασσική Φυσική. Για την ερμηνεία των οπτικών φασμάτων, όπως θα δούμε, χρειάστηκαν οι έννοιες της Κβαντικής φυσικής.

2.3. ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑ ΜΕΛΑΝΟΣ ΣΩΜΑΤΟΣ

Ένα από τα πρώτα φαινόμενα με τα όποια διαπιστώθηκε η αδυναμία της Κλασικής Φυσικής, είναι το φαινόμενο της ακτινοβολίας του «Μέλανος Σώματος». Το φαινόμενο αυτό έχει σχέση με τη θερμοδυναμική ανταλλαγή ενέργειας ανάμεσα στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και στην ύλη.

Τα πειραματικά δεδομένα του φαινομένου είναι τα έξης:

Η επιφάνεια ενός υλικού σώματος που βρίσκεται σε μια ορισμένη θερμοκρασία T , εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία εξ αιτίας της θερμικής διεγέρσεως των ηλεκτρονίων των ατόμων του Ολικού από το οποίο είναι κατασκευασμένη η επιφάνεια του σώματος. Η ηλεκτρομαγνητική αυτή ακτινοβολία αναφέρεται ως Θερμική Ακτινοβολία. Όλα τα σώματα εκπέμπουν τέτοια ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία στο περιβάλλον τους, αλλά συγχρόνως απορροφούν και ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία απ' αυτό. Όταν ο ρυθμός εκπομπής είναι ίσος με το ρυθμό απορροφήσεως, τότε λέμε ότι έχουμε θερμική Ισορροπία. Η πειραματικά παρατηρούμενη κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας $u(\nu)$ σε συνάρτηση με τη συχνότητα ν δίνεται από το σχήμα 2.1. Από τις καμπύλες του σχήματος 2.1 διαπιστώνουμε τα έξης:

α) Το φάσμα της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από την υλική επιφάνεια είναι συνεχές.

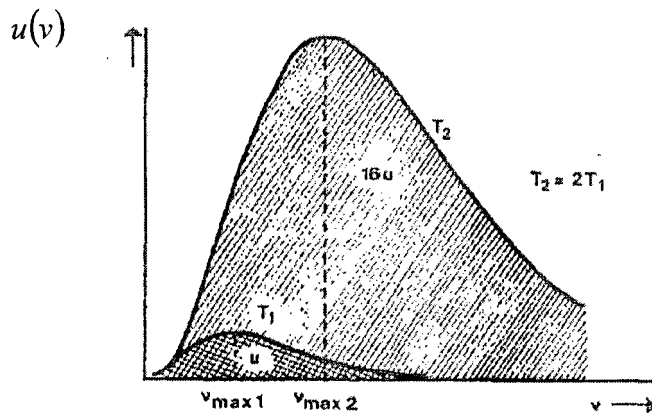
β) Η κατανομή $u(\nu)$ τείνει στο μηδέν για πολύ μικρές και μεγάλες συχνότητες, ενώ εμφανίζει ένα μέγιστο εκπομπής ακτινοβολίας σε μια συχνότητα ν_{\max} που εξαρτάται από τη θερμοκρασία T .

γ) Αυξανόμενης της θερμοκρασίας το όλο φάσμα μετατοπίζεται προς τις μεγαλύτερες συχνότητες. Η παρατήρηση αυτή είναι ο γνωστός από την κλασική θεωρία νόμος των **μετατοπίσεων του Wien**, ο οποίος αναλυτικά εκφράζεται από τη σχέση,

$$\nu_{\max} = AT \quad \text{ή} \quad \lambda_{\max} \cdot T = C_0 \quad (2.1)$$

όπου C_0 είναι μια σταθερά.

Η παραπάνω σχέση εκφράζει ότι, αν αυξηθεί η θερμοκρασία μιας επιφάνειας τότε αυξάνεται και η συχνότητα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που εκπέμπεται. Μ' αυτόν τον τρόπο ερμηνεύεται η μεταβολή του χρώματος ενός σώματος με τη θερμοκρασία. Στις συνηθισμένες θερμοκρασίες τα περισσότερα σώματα είναι ορατά μέσω της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας



Σχ. 2.1. Κατανομές της ενεργειακής πυκνότητας που εκπέμπεται από υλική επιφάνεια βρισκόμενη σε θερμοκρασία T , και T_2 ($T_2 > T$).

πού ανακλάται στην επιφάνεια του σώματος παρά από την ακτινοβολία που εκπέμπεται λόγω θερμικής καταστάσεως αυτού. Εάν ένα σώμα δεν φωτιστεί, δεν μπορεί να γίνει ορατό. Σε πολύ όμως υψηλές θερμοκρασίες το σώμα εκπέμπει ακτινοβολία τέτοιας συχνότητας που να πέφτει στο ορατό φάσμα και να γίνεται ορατό. Έτσι λοιπόν, ένα κομμάτι σίδηρο σε θερμοκρασία δωματίου δεν διακρίνεται μέσα σε ένα τελείως σκοτεινό δωμάτιο, ενώ σε θερμοκρασία μερικών εκατοντάδων βαθμών είναι πυρωμένο και εκπέμπει φως που γίνεται αντιληπτό από το μάτι του ανθρώπου.

δ) Η επιφάνεια η περικλεισμένη από την καμπύλη $u(v)$ ισούται με την ολική ακτινοβολούμενη ενέργεια U . Δηλαδή

$$U = \int_0^{\infty} u(v) dv \quad (2.2)$$

Εάν διπλασιαστεί η θερμοκρασία της επιφάνειας, παρατηρείται ότι η ακτινοβολουμένη ολική ενέργεια και κατά συνέπεια η ακτινοβολουμένη ισχύς (ενέργεια ανά μονάδα χρόνου) δεκαεξαπλασιάζεται. Η παρατήρηση αυτή γενικεύεται από την εμπειρική σχέση:

$$U = \sigma T^4 \quad (2.3)$$

που εκφράζει το γνωστό νόμο του Stefan και Boltzmann, όπου σ είναι η σταθερά Stefan - Boltzmann και ισούται με $5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^{-4}$

ε) Η μορφή και τα γενικά χαρακτηριστικά του φάσματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που εκπέμπεται από μια υλική επιφάνεια θερμοκρασίας T εξαρτώνται από το υλικό της επιφάνειας.

Η λεπτομερειακή μορφή του φάσματος της θερμικής ακτινοβολίας ενός σώματος εξαρτάται και από τη σύνθεση του σώματος. Πειράματα όμως έχουν δείξει ότι υπάρχει μια κατηγορία σωμάτων τα οποία ευρισκόμενα στην αυτή θερμοκρασία εκπέμπουν θερμική ακτινοβολία της οποίας το φάσμα είναι ίδιο για όλα τα σώματα ανεξάρτητα από τη σύσταση, το μέγεθος και το σχήμα τους. Τα σώματα αυτά έχουν την ιδιότητα η επιφάνεια τους ν' απορροφά όλη την ακτινοβολία που προσπίπτει επάνω της, και εφ' όσον δεν ανακλάται ακτινοβολία, να φαίνονται μαύρα. Γι' αυτό το λόγο τα σώματα αυτά λέγονται **μέλανα σώματα**.

Ο ομοιόμορφος χαρακτήρας του φάσματος της θερμικής εκπομπής των σωμάτων αυτών επιτρέπει να χρησιμοποιηθούν ως πρότυπα σωμάτων εκπομπής σε συνδυασμό με τον νόμο του Kirchhoff. Θερμοδυναμικά ο Kirchhoff απέδειξε ότι για δεδομένο μήκος κύματος ο λόγος του ρυθμού εκπομπής ακτινοβολίας από μια υλική επιφάνεια προς το ρυθμό εκπομπής από μια επιφάνεια μέλανος σώματος είναι ίσος προς το συντελεστή απορροφήσεως του υλικού της επιφάνειας, για το δεδομένο μήκος κύματος. Έτσι λοιπόν, αντί να μελετήσει κανείς την ακτινοβολία που εκπέμπεται από μια υλική επιφάνεια, μπορεί να μελετήσει την ακτινοβολία που εκπέμπεται από την επιφάνεια ενός μέλανος σώματος.

Γεννιέται όμως το ερώτημα πώς είναι δυνατό να κατασκευαστεί ένα μέλαν σώμα; Σχεδόν μέλαν σώμα μπορεί να θεωρηθεί κάθε επιφάνεια επικαλυμμένη με βαθύ μαύρο χρώμα. Ένας άλλος τρόπος για να δημιουργηθεί μέλαν σώμα είναι να θεωρήσουμε μια μεταλλική κοιλότητα με μια πολύ μικρή οπή στο τοίχωμα της. Για ένα εξωτερικό παρατηρητή η μικρή αυτή οπή παρουσιάζεται σαν επιφάνεια μέλανος σώματος, γιατί οποιαδήποτε ακτινοβολία (π.χ. φως) που προσπίπτει και διεισδύει από την οπή μέσα στην κοιλότητα απορροφάται σχεδόν ολόκληρη μέσω των αλληπάλληλων ανακλάσεων πάνω στα εσωτερικά τοιχώματα. Η εγκλωβισμένη ακτινοβολία φτάνει σε κατάσταση ισορροπίας, οπότε η ποσότητα ενεργείας, που απορροφάται από τα άτομα του υλικού των τοιχωμάτων της κοιλότητας, είναι ίση με την ποσότητα ενεργείας που εκπέμπεται απ' αυτά. Ένα μικρό ποσοστό από την εγκλωβισμένη αυτή ακτινοβολία είναι δυνατόν να εξέλθει τυχαία από την οπή και να θεωρηθεί σαν ακτινοβολία μέλανος σώματος. Αναλύοντας φασματοσκοπικά την ακτινοβολία που εξέρχεται από την οπή (ακτινοβολία μέλανος σώματος) διαπιστώνουμε ποιοτικά ακριβώς το ίδιο φάσμα (σχ. 2.1) με τα ίδια χαρακτηριστικά, όπως και στην περίπτωση της επιφάνειας που

αναλύσαμε προηγουμένως. Επίσης η μορφή του φάσματος και τα χαρακτηριστικά του είναι ανεξάρτητα από το σχήμα, μέγεθος και υλικό της κοιλότητας.

Ήδη κατά τα τέλη του 19ου αιώνα είχαν γίνει ακριβείς μετρήσεις και η σχέση (2.1) είχε πια καθιερωθεί. Επίσης είχε γίνει κατανοητός ο μηχανισμός της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος, υπήρχαν όμως δυσκολίες στο να βρεθεί η αναλυτική σχέση ανάμεσα στην πυκνότητα ενέργειας και στη συχνότητα, η οποία παριστάνεται, καθώς είναι γνωστό, με την καμπύλη του σχήματος 2.1.

Για ν' αντιληφθούμε τη φυσική δυσκολία, ας θεωρήσουμε τη σχέση (2.1) με την εξής μορφή:

$$\frac{\lambda_{\max}}{c} \cdot KT = \frac{C_0 \cdot K}{c} = X \quad (2.4)$$

όπου c είναι η ταχύτητα του φωτός, K η σταθερά του Boltzmann.

Επειδή το αριστερό σκέλος της εξισώσεως (2.4) έχει διαστάσεις [χρόνος] x [ενέργεια] = [δράση], η σταθερά X έχει τη φυσική έννοια μιας «ποσότητας» δράσης. Από το σημείο αυτό αρχίζουν και οι δυσκολίες. Οι μέχρι τότε γνωστές σταθερές, με οποιοδήποτε τρόπο και αν συνδυάζονταν, δεν μπορούσαν να δώσουν διαστάσεις δράσης, όλες δε αυτές οι σταθερές εξαρτώνται από το υπό εξέταση υλικό.

Από την άλλη μεριά καθώς αναφέραμε πιο πάνω, η ακτινοβολία του μέλανος σώματος είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος, το σχήμα και το υλικό του. Συνεπώς είχε γίνει πια αντιληπτό ότι η νέα σταθερά δεν μπορεί να προέλθει από τις κλασσικές σταθερές και γενικά η σχέση (2.4) δεν γίνεται κατανοητή με βάση την Κλασσική Θεωρία.

Ας εξετάσουμε σύντομα πώς η Κλασσική Θεωρία προσπαθεί να εξηγήσει την ακτινοβολία του μέλανος σώματος. Αναφέραμε προηγουμένως ότι μέσα στη μεταλλική κοιλότητα υπάρχει σε ισορροπία ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, η οποία διαδίδεται μέσα στην κοιλότητα με τη μορφή αρμονικό ταλαντευόμενων στάσιμων κυμάτων. Η κατανομή $u(\nu)d\nu$ της ενέργειας που εκπέμπεται προς τα έξω μέσω της πολύ μικρής οπής είναι ανάλογη με την ολική ενέργεια όλων των στάσιμων κυμάτων που έχουν συχνότητα μεταξύ ν και $\nu+d\nu$. Συνεπώς η $u(\nu)d\nu$ ισούται με τον αριθμό των στάσιμων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων που δημιουργούνται μέσα στην κοιλότητα με συχνότητα μεταξύ ν και $\nu+d\nu$ ανά μονάδα όγκου επί τη μέση τιμή ενέργειας $\langle E \rangle$ κάθε στάσιμου κύματος. Δηλαδή

$$u(\nu)d\nu = N(\nu)d\nu \times \langle E \rangle \quad (2.5)$$

όπου $N(\nu)d\nu$ είναι ο αριθμός των στάσιμων κυμάτων ανά μονάδα όγκου που έχουν συχνότητα ν και $\nu + d\nu$, ο οποίος, καθώς αποδεικνύεται, ισούται με,

$$N(\nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (2.6)$$

Η μέση ενέργεια $\langle E \rangle$ υπολογίζεται με βάση τις εξής παρατηρήσεις: Αναφέραμε προηγουμένως ότι μέσα στην κοιλότητα υπάρχει ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Η ενεργειακή πυκνότητα W ενός τέτοιου πεδίου εκφράζεται ως το άθροισμα δύο όρων, σύμφωνα με την ηλεκτρομαγνητική θεωρία, δηλαδή

$$W = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \quad (2.7)$$

Η παραπάνω έκφραση είναι της ίδιας μορφής (ομοιομορφισμός) με την έκφραση της ολικής ενέργειας ενός αρμονικού ταλαντωτή, για τον οποίο ισχύει :

$$E = E_{κιν} + E_{δυν} \quad (2.8)$$

$$\text{όπου } E_{κιν} = \frac{p^2}{2m} \equiv P^2 \quad \text{και} \quad E_{δυν} = \frac{m\omega^2}{2} q^2 \equiv Q^2$$

$$\text{δηλαδή } E = P^2 + Q^2 \quad (2.9)$$

Συνεπώς, αντί για τα στάσιμα ηλεκτρομαγνητικά κύματα που δημιουργούνται μέσα στην κοιλότητα, μπορούμε να θεωρήσουμε ισοδύναμους «μη αλληλεπιδρώντες αρμονικούς ταλαντωτές ακτινοβολίας» και να εφαρμόσουμε κλασσική στατιστική μηχανική για τον υπολογισμό της μέσης ενέργειας κάθε ταλαντωτή που βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία με τα τοιχώματα.

Από την κλασσική μελέτη της θερμότητας είναι γνωστό ότι σε ένα σύστημα μη αλληλεπιδρώντων αρμονικών ταλαντωτών η πιθανότητα να κατέχει το σύστημα αυτό ενέργεια μεταξύ E και $E + dE$ είναι ανάλογη με το

$$e^{-E/KT} dE \quad (2.10)$$

όπου K είναι η πειραματικά προσδιοριζόμενη σταθερά του Boltzmann που ισούται με $1.38 \times 10^{-16} \text{ erg.deg}^{-1}$, T είναι η απόλυτη θερμοκρασία του συστήματος. Αποδεικνύεται ότι η πιθανότητα ένας αρμονικός ταλαντωτής να έχει ενέργεια μεταξύ E και $E + dE$ δίνεται από τη σχέση:

$$P(E) dE = \frac{e^{-E/KT}}{\int_0^\infty e^{-E/KT} dE} = \frac{e^{-E/KT}}{KT} dE \quad (2.11)$$

Η μέση τιμή $\langle E \rangle$ αποδεικνύεται ότι ισούται με

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty EP(E)dE = \int_0^\infty \frac{Ee^{-E/KT}}{KT} dE = KT \quad (2.12)$$

Με βάση τις σχέσεις (1.15) και (1.13), ή (1.12) γράφεται ως εξής:

$$u(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} KT \cdot d\nu \quad (2.13)$$

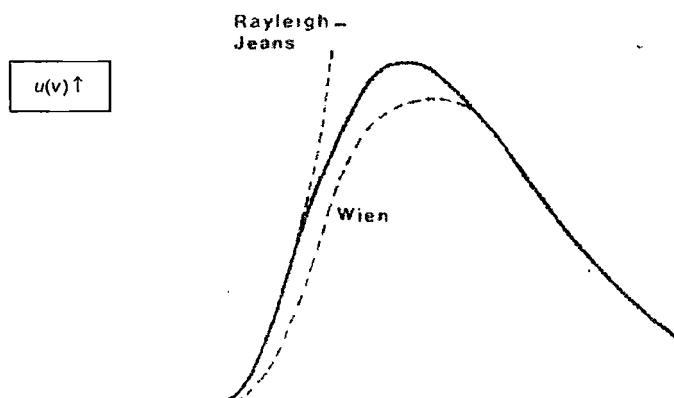
Η εξίσωση (2.13) εκφράζει το νόμο των Rayleigh-Jeans, με τον οποίο οι Rayleigh και Jeans προσπάθησαν να εξηγήσουν κλασσικά τα πειραματικά δεδομένα της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος.

Παρατηρούμε όμως ότι, ενώ για μικρές συχνότητες υπάρχει συμφωνία ανάμεσα στο νόμο των Rayleigh-Jeans και τα πειραματικά δεδομένα, σχήμα 2.2 (γιατί πραγματικά η $u(\nu)$ είναι ανάλογη με το ν^2), για μεγάλες συχνότητες υπάρχει τέλεια ασυμφωνία, γιατί ενώ το πείραμα εμφανίζει ένα μέγιστο και έπειτα εκθετική πτώση της $u(\nu)$, ο νόμος των Rayleigh-Jeans προβλέπει συνεχή αύξηση και για $\nu \rightarrow \infty$ ή $u(\nu) \rightarrow \infty$, αποτέλεσμα που είναι άτοπο. Αυτό ήταν γνωστό ως «καταστροφή του υπεριώδους».

Ο Wien βασιζόμενος στην κλασσική θεωρία μπόρεσε εμπειρικά να αναπαράγει τα πειραματικά δεδομένα δεχόμενος την εξής σχέση,

$$u(\nu) d\nu = V^3 e^{-\alpha_w \nu / T} d\nu \quad (2.14)$$

όπου α_w είναι σταθερά. Η παραπάνω σχέση εκφράζει το νόμο ακτινοβολίας του Wien, ο οποίος αν και συμφωνεί με το πείραμα για μεγάλες συχνότητες (σχήμα 2.2) δεν συμφωνεί για μικρές. Έτσι, η κλασσική αντιμετώπιση του προβλήματος της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος οδηγεί σε εσφαλμένα αποτελέσματα.



Σχ. 2.2. Κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας ταλαντωτών σε συνάρτηση με τη συχνότητα. Η πραγματική κατανομή παριστάνεται με τη συνεχή γραμμή. Οι νόμοι των Rayleigh-Jeans και Wien δίνονται με εστιγμένη γραμμή αντίστοιχα.

Καθώς είδαμε παραπάνω η κλασσική θεωρία δέχεται ότι η ενεργειακή κατανομή $P(E)$ του συστήματος των ταλαντωτών είναι μια συνεχής συνάρτηση, και μέσω του ορισμένου ολοκληρώματος της σχέσης (2.12) βρέθηκε ότι η μέση ενέργεια είναι ανεξάρτητη από την συχνότητα και παίρνει τη σταθερή τιμή KT . Δημιουργείται όμως το ερώτημα κατά πόσον είναι σωστή η υπόθεση αυτή της Κλασσικής Θεωρίας, η μήπως πρέπει, για να επιτευχθεί η συμφωνία της θεωρητικής κατανομής $u(\nu)$ με την πειραματική, να θεωρήσουμε ότι η $\langle E \rangle$ είναι συνάρτηση της συχνότητας, οπότε η ενεργειακή κατανομή δεν μπορεί να είναι συνεχής.

2.4 Θεωρία του Planck

Στο δίλημμα αυτό βρίσκονταν οι επιστήμονες, όταν την 14η Δεκεμβρίου 1900 ο Γερμανός Φυσικός Max Planck (1858-1947) παρουσίασε μια εργασία στο Συνέδριο της Γερμανικής Φυσικής Εταιρείας στο Βερολίνο, σχετικά με την εκπομπή και απορρόφηση ακτινοβολίας. Η ιστορική αυτή ημερομηνία αποτελεί την ημερομηνία γεννήσεως και της Κβαντικής Μηχανικής.

Στην εργασία αυτή, ο Planck εγκαταλείπει την Κλασσική Φυσική και κατά ριζοσπαστικό τρόπο δέχεται ότι: **Κάθε φυσικό μέγεθος που περιγράφεται από μια μεταβλητή η οποία μεταβάλλεται ημιτονοειδώς με το χρόνο (δηλ. εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση, οπότε και η φυσική οντότητα μπορεί ισοδύναμα να θεωρηθεί σαν αρμονικός ταλαντωτής) δεν μπορεί να κατέχει οποιαδήποτε τιμή ολικής ενέργειας, αλλά μόνο ορισμένες διακεκριμένες τιμές $0, 1\varepsilon, 2\varepsilon, \dots, n\varepsilon$. Η ποσότητα ε είναι μια σταθερά ποσότητα ενέργειας που εξαρτάται από την συχνότητα ν σύμφωνα με τη σχέση:**

$$\varepsilon = h\nu \quad (2.15)$$

Η σταθερά h είναι μια παγκόσμια σταθερά, ονομάζεται **σταθερά του Planck**, έχει διαστάσεις δράσης και παίρνει την τιμή

$$h = 6.63 \cdot 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{sec} \quad \text{ή} \quad 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ joule}\cdot\text{sec} \quad (2.16)$$

Με τον τρόπο αυτό ο Planck εισήγαγε την έννοια της **ασυνέχειας** της ενέργειας, δηλαδή την έννοια της κβάντωσης της ενέργειας, όπου το στοιχειώδες ποσό ενέργειας για μια συχνότητα ν είναι $h\nu$ και ονομάζεται **κβάντο** ενέργειας. Φυσική συνέπεια της υποθέσεως του Planck είναι ότι, η οντότητα που, όπως είπαμε, ταλαντούται ημιτονοειδώς θα εκπέμπει και θα απορροφά ενέργεια κατά κβάντουμ $h\nu$, η δε ολική ενέργεια E θα είναι,

$$E = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

Ο Planck θεώρησε ότι τα κβάντα ενέργειας που εκπέμπονται κινούνται πλέον και απλώνονται στο χώρο κατά τον κλασικό τρόπο. Σύμφωνα με τις παραπάνω ιδέες του Planck τα ηλεκτρόνια του υλικού από το οποίο είναι κατασκευασμένη η επιφάνεια μιας κοιλότητας βρισκόμενα σε μια θερμοκρασία T εκτελούν δονήσεις γύρω από μια θέση ισορροπίας, εκτελούν δηλαδή μια αρμονική ταλάντωση και συνεπώς τα θεωρούμε σαν αρμονικούς ταλαντωτές των οποίων η ολική ενέργεια παίρνει ορισμένες μόνο τιμές $E = nh\nu$, όπου ν είναι η συχνότητα ταλαντώσεως και αλληλεπιδρούν με το περιβάλλον τους κατά κβαντικό τρόπο, δηλαδή, απορροφούν και εκπέμπουν ενέργεια κατά κβάντουμ ενεργείας $h\nu$. Το ίδιο πράγμα συμβαίνει και με τα ηλεκτρομαγνητικά στάσιμα κύματα της κοιλότητας, των οποίων το ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο μεταβάλλεται ημιτονοειδώς και συνεπώς τα θεωρούμε κι αυτά σαν κβαντικούς αρμονικούς ταλαντωτές. Μετά τις ιδέες του Planck δεν μπορούμε πλέον να θεωρήσουμε την $P(E)$ σαν μια συνεχή συνάρτηση του E και ανεξάρτητη της συχνότητας ν . Συνεπώς στη σχέση (2.15) δεν μπορούμε να θεωρήσουμε ολοκληρώματα αλλά αθροίσματα, οπότε η (2.15) γράφεται,

$$P(E) = \frac{e^{-nh\nu / KT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu / KT}} \quad (2.18)$$

ενώ η μέση τιμή της ενεργείας $\langle E(\nu) \rangle$ δίνεται από τη σχέση:

$$\langle E(\nu) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} EP(E) \quad (2.19)$$

που αποδεικνύεται ότι ισούται με:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu / KT} - 1} \quad (2.20)$$

Με βάση την παραπάνω έκφραση, η $u(\nu)$ δίνεται πλέον από την σχέση:

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu / KT} - 1} d\nu \quad (2.21)$$

Η έκφραση (2.21) αναφέρεται ως νόμος της ακτινοβολίας του Planck και η γραφική παράσταση της για διάφορες θερμοκρασίες συμφωνεί εντελώς με τα πειραματικά δεδομένα, όπως αυτά παριστάνονται στο σχήμα 2.1.

Διερευνώντας τη σχέση (2.21) παρατηρούμε τα εξής:

α.) Για $h\nu \ll KT$ έχουμε ότι

$$\frac{h\nu}{1+h\nu/KT+\dots-1}=KT \quad (2.22)$$

και

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-h\nu/KT} \quad (2.23)$$

δηλαδή, λαμβάνουμε το νόμο των Rayleigh-Jeans, όπου για $\nu \rightarrow \infty$ ή $u(\nu) \rightarrow 0$ εκθετικός.

β.) Για $h\nu \gg KT$ έχουμε ότι:

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-h\nu/KT} \quad (2.24)$$

δηλαδή λαμβάνουμε το νόμο ακτινοβολίας του Wien και παρατηρούμε ότι για $\nu \rightarrow \infty$ ή $u(\nu) \rightarrow 0$ εκθετικός.

γ.) Εάν ολοκληρώσουμε τη σχέση, θα βρούμε την ολική πυκνότητα ενέργειας U του μέλλοντος σώματος,

$$U = \int_0^\infty \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/KT} - 1} d\nu = a T^4 \quad (2.25)$$

δηλαδή λαμβάνουμε το νόμο των Stefan-Boltzmann, κατά τον οποίο η ολική ενέργεια U της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος είναι ανάλογη με την τέταρτη δύναμη της θερμοκρασίας. Ο νόμος αυτός καθώς είδαμε, είχε διαπιστωθεί πειραματικά κατά τη φασματοσκοπική μελέτη της ακτινοβολίας που εξέρχεται από την οπή της κοιλότητας, η δε σταθερά δίνεται από τη σχέση,

$$a = \frac{8}{15} \frac{\pi^5 K^4}{c^3 h^3} \quad (2.26)$$

Εάν εκφράσουμε την εξίσωση του Planck (2.21) σε συνάρτηση με το μήκος λ και θεωρήσουμε αντί για την κατανομή της πυκνότητας $u(\lambda)$ την κατανομή της αφετικής ικανότητας $E(\lambda)$, ενθυμούμενοι ότι για το κενό, $u(\nu) = (4\pi/a) E(\lambda)$ τότε βρίσκουμε ότι,

$$E(\lambda) d\lambda = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda KT} - 1} d\lambda \quad (2.27)$$

Παραγωγίζοντας ως προς λ την (1.20) και εξισώνοντας με μηδέν, προσδιορίζουμε το λ_{\max} με τη σχέση:

$$\lambda_{\max} T = 0.2014 hc/k \quad (2.28)$$

Έχουμε δηλαδή τη γνωστή εξίσωση (2.4), όπου η σταθερά X είναι ίση με $0.2014h$. Έτσι προέκυψε ο νόμος μετατοπίσεως του Wien, κατά τον οποίο όταν η θερμοκρασία ενός μέλανος σώματος αυξάνει, το μήκος κύματος λ_{\max} στο οποίο η $E(\lambda)$ ή $u(\lambda)$ γίνεται μέγιστη, μετατοπίζεται προς μικρότερα μήκη κύματος, σύμφωνα με την παραπάνω έκφραση. Τέλος, παρατηρούμε ότι η σταθερά X της σχέσης (2.4) πράγματι έχει διαστάσεις δράσης, γιατί το h έχει διαστάσεις δράσης.

Επίσης μετρώντας το λ_{\max} για δοθέν T και γνωρίζοντας την ταχύτητα του φωτός, μπορούμε να προσδιορίσουμε τον λόγο h/K και σε συνδυασμό με την σταθερά a , βρίσκουμε την σταθερά του Planck και την σταθερά του Boltzmann K . Έτσι λοιπόν, ο Planck χρησιμοποιώντας κλασσική στατιστική Boltzmann και εισάγοντας την έννοια της κβαντισμένης ενέργειας μπόρεσε να εξηγήσει πλήρως την ακτινοβολία του μέλανος σώματος.

2.5 Αρχή της Αβεβαιότητας του Heisenberg

Στην Κλασσική Φυσική δεχόμαστε ότι τα διάφορα φυσικά μεγέθη, όπως π.χ. η θέση, η ταχύτητα, η ορμή, η ενέργεια, κ.λ.π. ενός σωματιδίου, είναι δυνατό να προσδιοριστούν με ακρίβεια και ανεξάρτητα το ένα από το άλλο. Αυτό μπορεί να γίνει εφ' όσον το υπό μελέτη σωματίδιο είναι μεγάλο οπότε το πείραμα που κάνουμε για να προσδιορίσουμε την τιμή ενός μεγέθους, π.χ. θέση, δεν επηρεάζει την κατάσταση στην οποία βρίσκεται το σωματίδιο, ως προς την ορμή για παράδειγμα.

Λόγου χάρη, μπορούμε να θεωρήσουμε τον προσδιορισμό της θέσης ενός αεροπλάνου με τη βοήθεια του ραντάρ. Το ραντάρ εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία στην περιοχή των μικροκυμάτων. Τα μικροκύματα ανακλώμενα από το αεροπλάνο δίνουν στο δέκτη του ραντάρ τη θέση και την ταχύτητα του αεροπλάνου. Προφανώς λόγω του όγκου και της μάζας του αεροπλάνου τα μικροκύματα ούτε το μετατόπισαν ούτε του άλλαξαν την ταχύτητα.

Όταν όμως η παρατήρηση γίνεται σε σωματίδιο του μικρόκοσμου, όπου η Κλασσική Φυσική δεν επαρκεί και η μελέτη του σωματιδίου είναι δυνατή μόνο με τους κανόνες της Κβαντικής Θεωρίας, τότε δεν μπορούμε να πετύχουμε πάντοτε τον ακριβή προσδιορισμό των διαφόρων μεγεθών και την ανεξαρτησία της μετρήσεως του ενός από του άλλου, ενώ το ίδιο το πείραμα, όπως θα δούμε σε παράδειγμα αργότερα, προκαλεί μεταβολή στην κατάσταση του σωματιδίου, πράγμα που εμποδίζει τον ακριβή προσδιορισμό της τιμής ενός μεγέθους χαρακτηριστικού της καταστάσεώς του.

Ήδη η δυσκολία προσδιορισμού της θέσης ενός σωματίου με ακρίβεια φάνηκε στην προηγούμενη παράγραφο, όπου διατυπώθηκε ότι η θέση ενός σωματιδίου περιορίζεται μέσα στην περιοχή π.χ, όπου το πλάτος του υλικού κύματος είναι διάφορο από το μηδέν. Συνεπώς υπάρχει μια ανακρίβεια ή αβεβαιότητα ως προς τη θέση του σωματιδίου της τάξης του Δx .

Καθώς αναφέραμε και στην προηγούμενη παράγραφο το κυματοπακέτο το καθοριζόμενο μέσα στην περιοχή Δx είναι το αποτέλεσμα της συμβολής πολλών επιπέδων κυμάτων, που το καθένα χαρακτηρίζεται από ορισμένο μήκος κύματος η κυματαριθμό k , όλα δε βρίσκονται μέσα σε μια περιοχή Δk τέτοιο ώστε, σύμφωνα με τη θεωρία της αναλύσεως κατά Fourier, να ισχύει,

$$(\Delta x)(\Delta k) \geq \frac{1}{2} \quad (2.29)$$

Σύμφωνα όμως με τη σχέση $p = \hbar k$, εάν το μήκος λ ή ο κυματικός αριθμός k , μεταβάλλονται μέσα στην περιοχή $\Delta \lambda$ ή Δk και η αντίστοιχη τιμή της ορμής θα κυμαίνεται μέσα στην περιοχή Δp , δηλαδή,

$$p = \hbar / \lambda = \hbar k \quad \text{και} \quad \Delta p = \hbar \Delta k$$

Συνεπώς η σχέση (2.29) γράφεται

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.30)$$

Η φυσική σημασία της σχέσεως (2.30) είναι η ακόλουθη.

Εάν ένα σωματίδιο βρίσκεται μέσα στην περιοχή από $x - \Delta x/2$ έως $x + \Delta x/2$, όπου Δx είναι η αβεβαιότητα ως προς τη θέση του σωματιδίου, τότε το αντίστοιχο κυματοπακέτο το προερχόμενο από την συμβολή των επί μέρους επιπέδων κυμάτων θα χαρακτηρίζεται από ορμή, η οποία κυμαίνεται μεταξύ $p - \Delta p/2$ και $p + \Delta p/2$ όπου Δp σχετίζεται με το Δx με την εξίσωση (2.30) και παριστάνει την αβεβαιότητα ως προς την ορμή του σωματίου.

Δεδομένου ότι M είναι σταθερά, έπεται ότι όσο μεγαλύτερο είναι το Δx , τόσο μικρότερο είναι το αντίστοιχο Δp και αντίθετα. Με άλλους λόγους, όσο ακριβέστερα γνωρίζουμε τη θέση ενός σωματιδίου, τόσο ανακριβέστερα γνωρίζουμε την ορμή του. Για $\Delta p = 0$ (απόλυτη ακρίβεια στη γνώση της ορμής) $\Delta x = \infty$ (τέλεια ανακρίβεια ως προς τη θέση) και αν $\Delta x = \infty$ τότε, το κυματοπακέτο θα έχει σταθερό πλάτος, πράγμα που σημαίνει, όπως είπαμε στην προηγούμενη παράγραφο, ότι είναι αδύνατος ο προσδιορισμός της θέσης του σωματιδίου. Η ισότητα στη σχέση (2.30)

δίνει τον πιο ευνοϊκό συνδυασμό των Δx και Δp , δηλαδή δίνει το κατώτερο όριο του γινόμενου $\Delta x \Delta p$. Στις περισσότερες περιπτώσεις η αβεβαιότητα τόσο ως προς τη θέση, όσο και ως προς την ορμή, είναι μεγαλύτερη.

Η παρακάτω σχέση (2.31) εκφράζει τη λεγόμενη **αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg**, η οποία μπορεί να διατυπωθεί ως έξης: **Είναι αδύνατος η ταυτόχρονα ακριβής μέτρηση της θέσης και της ορμής ενός σωματιδίου, ανεξάρτητα από τον τρόπο και τα μέσα μετρήσεως αυτών.**

Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg δεν περιορίζεται μόνο στην θέση και την ορμή, αλλά γενικεύεται σε κάθε ζεύγος συζυγών μεγεθών. Έτσι η έκφραση (2.30) μπορεί να γραφεί γενικά:

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.31)$$

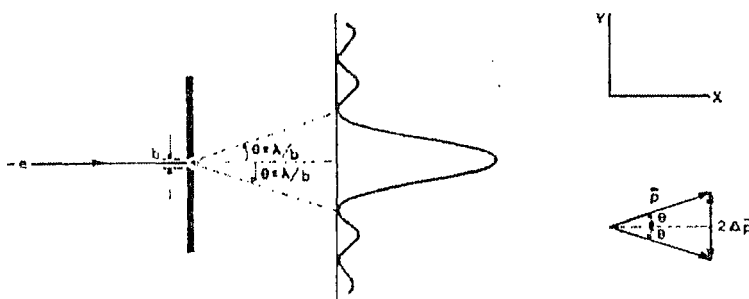
όπου q και p είναι συζυγή μεγέθη, όπως εμφανίζονται από τις εξισώσεις τους.

Η παραπάνω αρχή εκφράζει έναν από τους πλέον θεμελιώδεις νόμους της φύσης και έχει τεράστια σημασία, τόσο για τη γνώση των φυσικών νόμων που διέπουν το μικρόκοσμο όσο και γενικότερα για τη θεώρηση της φύσης από φιλοσοφική σκόπιά.

Στο σημείο αυτό πρέπει να τονιστεί το γεγονός ότι η αρχή της αβεβαιότητας έχει έννοια μόνο για τις περιπτώσεις εκείνες, για τις οποίες τα Δq , και Δp είναι συγκρίσιμα με το \hbar . Δεδομένου ότι το \hbar είναι πολύ μικρό, έπεται ότι μόνο στο μικρόκοσμο έχει εφαρμογή η σχέση (2.31). Αντίθετα στο μακρόκοσμο δεν έχει έννοια.

Προς το παρόν για την κατανόηση της φυσικής σημασίας της αρχής της αβεβαιότητας, ας θεωρήσουμε τα εξής ιδεατό πειράματα.

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να προσδιορίσουμε τη θέση στον άξονα x ενός σωματιδίου (ηλεκτρονίου) ορμής p , παρατηρώντας το σε φωτογραφική πλάκα αφού περάσει δια μέσου μιας οπής διαμέτρου b (σχ. 2.3).



Σχ. (2.3). Μέτρηση της θέσης και της ορμής ενός σωματιδίου διερχομένου δια σχισμής.

Η ακρίβεια, με την οποία είναι δυνατό να προσδιοριστεί η θέση, εξαρτάται από το μέγεθος της οπής, δηλαδή $\Delta x \approx b$ όσο μικρότερη είναι η οπή, τόσο ακριβέστερη γίνεται η θέση του σωματιδίου. Όταν όμως η διάμετρος της οπής είναι της τάξης μεγέθους του μήκους κύματος de Broglie του κυματοπακέτου του συνδεδεμένου με το ηλεκτρόνιο, τότε παρατηρούμε στη φωτογραφική πλάκα το γνωστό διάγραμμα συμβολής με μέγιστο πλάτος καθοριζόμενο υπό τη γωνία 2θ μέσα στην οποία είναι πιθανότερο να κινηθεί το ηλεκτρόνιο μετά τη διέλευση του από την οπή. Η παράλληλη προς το διάφραγμα μετατόπιση του ηλεκτρονίου, κατά τη διέλευση του από την οπή, προϋποθέτει και την παράλληλη προς τον άξονα y μεταβολή Δp της ορμής του, η οποία και εκφράζει την αβεβαιότητα ως προς την ορμή. Καθώς φαίνεται από το σχήμα (2.3).

$$\Delta p \approx p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta \quad (2.32)$$

Σύμφωνα με τη θεωρία της περιθλάσεως που προκαλείται από διάφραγμα κάθετο προς την κίνηση της δέσμης, η γωνία αποκλίσεως θ συνδέεται με τη διάμετρο της οπής b με τη σχέση $\sin \theta = \lambda / b$, οπότε $\Delta p \approx \frac{h}{\lambda}$

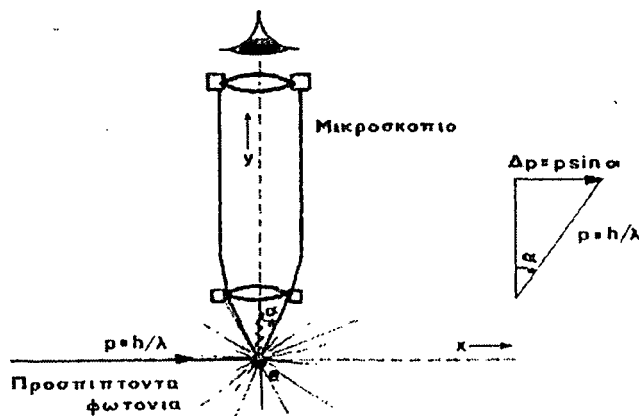
και δεδομένου ότι $\Delta x \approx 0$, έπεται

$$\Delta p \Delta x \approx b \quad (2.33)$$

Το παραπάνω αποτέλεσμα συμφωνεί με το προβλεπόμενο από την αρχή της αβεβαιότητας (εξ. 2. 30). Καθώς δείξαμε πιο πάνω, η αβεβαιότητα ως προς την ορμή είναι αντιστρόφως ανάλογη του μεγέθους της οπής b . Έτσι όταν ελαττώνεται το μέγεθος της οπής, αφ' ενός μεν μικραίνει η αβεβαιότητα ως προς τη θέση, αυξάνει όμως η αβεβαιότητα ως προς την ορμή. Ένα άλλο ιδεατό πείραμα με το οποίο κατανοείται η ορθότητα της αρχής της αβεβαιότητας είναι αυτό που πρότεινε ο Bohr. Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να προσδιορίσουμε τη θέση ενός ηλεκτρονίου χρησιμοποιώντας μικροσκόπιο μεγάλης διακριτικής ικανότητας (σχ. 2.4). Η διακριτική ικανότητα του μικροσκοπίου καθορίζει την ακρίβεια προσδιορισμού της θέσης του ηλεκτρονίου. Από την οπτική είναι γνωστό ότι η διακριτική ικανότητα ενός μικροσκοπίου ισούται κατά προσέγγιση με $\lambda / \sin \alpha$, όπου λ είναι το μήκος κύματος του φωτός (φωτονίων) που προσπίπτει σε αντικειμενικό φακό και α το μισό της γωνίας που προσδιορίζεται από τον αντικειμενικό φακό του μικροσκοπίου. Σύμφωνα με τα παραπάνω το σφάλμα ή η αβεβαιότητα της μετρήσεως ως προς τη θέση του ηλεκτρονίου δίνεται από τη σχέση:

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha} \quad (2.34)$$

Για να γίνει το Δx όσο το δυνατό μικρότερο, πρέπει να γίνει το λ όσο το δυνατό μικρότερο.



2.4. Πείραμα του Bohr για τον προσδιορισμό της θέσης ηλεκτρονίου με μικροσκόπιο.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι ο παρατηρητής μπορεί να παρατηρήσει το ηλεκτρόνιο, έστω και αν ένα μόνο φωτόνιο ($h\nu$) σκεδαστεί από το ηλεκτρόνιο και ακολούθως εισέλθει στο μικροσκόπιο. Όταν το ηλεκτρόνιο σκεδάσει το παραπάνω φωτόνιο προς το μικροσκόπιο, καθώς φαίνεται από το σχ. 2.4, το ηλεκτρόνιο θα λάβει ορισμένη ορμή από το φωτόνιο (φαινόμενο Compton).

Εφ' όσον το σχεδιασμένο φωτόνιο μπορεί να εισέλθει μέσα στο μικροσκόπιο υπό οποιαδήποτε γωνία μεταξύ $-\alpha < \vartheta < +\alpha$, η ορμή του ηλεκτρονίου κατά τον άξονα x θα είναι γνωστή με σφάλμα (η αβεβαιότητα) Δp που δίνεται από τη σχέση:

$$\Delta p = p \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \sin \alpha \quad (2.35)$$

όπου h/λ είναι η ορμή του φωτονίου.

Το γινόμενο των δυο αβεβαιοτήτων ως προς τη θέση και την ορμή του ηλεκτρονίου κατά τον άξονα x , είναι

$$\Delta x \Delta p \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha} \frac{h}{\lambda} \sin \alpha \approx h \quad (2.36)$$

Έτσι καταλήγουμε στη σχέση (2.30) με τις ιδεατές συνθήκες του πειράματος Bohr. Όταν ελαττώνεται το μήκος κύματος του φωτός, ελαττώνεται η αβεβαιότητα ως προς τη θέση αυξάνει όμως ως προς την ορμή και αντίθετα. Γενικά, όταν με οποιοδήποτε τρόπο προσπαθούμε να επιτύχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια όταν προσδιορισμό του ενός αυτό έχει ταυτόχρονα ως αποτέλεσμα την αύξηση της ακρίβειας του άλλου.

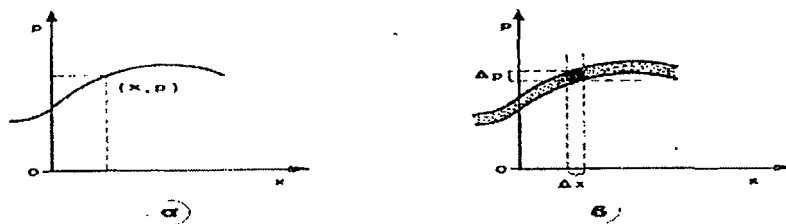
Και τα δυο αυτά παραδείγματα δείχνουν ότι στον κόσμο των ατόμων, των πυρήνων, και γενικά στο μικρόκοσμο, είναι αδύνατη η μέτρηση της θέσης ή της

ορμής χωρίς ταυτόχρονα να διαταράσσεται η κατάσταση του σωματιδίου. Το ίδιο βέβαια συμβαίνει και κατά τον προσδιορισμό της γωνίας και της στροφορμής ενός κινούμενου σωματιδίου και γενικά κατά τον προσδιορισμό ενός μεγέθους και της συζυγούς ορμής του p .

Είναι γνωστό από τη Μηχανική, μια δυναμική κατάσταση ενός σωματιδίου μπορεί να παρασταθεί γραφικά σε διάγραμμα του χώρου των φάσεων. Π.χ. η κίνηση του σωματιδίου κατά μήκος ενός άξονα χαρακτηρίζεται από την ορμή και τη θέση του σωματιδίου σε κάθε χρονική στιγμή. Ο χώρος των φάσεων στην προκειμένη περίπτωση, είναι διδιάστατος χώρος που ορίζεται από τον άξονα της ορμής και τον άξονα της θέσης. Στην κλασσική μηχανική η κινητική κατάσταση του σωματιδίου για μια δεδομένη χρονική στιγμή παριστάνεται με ένα σημείο (x, p) στο χώρο των φάσεων p και x (σχ. 2.5). Η κίνηση του σωματιδίου παριστάνεται με μία καμπύλη (σχ. 2.5α).

Στη Κβαντική Φυσική η ίδια κίνηση δεν μπορεί να παρασταθεί με μια καμπύλη γιατί καθένα σημείο (x, p) παρουσιάζει αντίστοιχα αβεβαιότητα Δp και Δx . Συνεπώς το μόνο που μπορούμε να πούμε είναι ότι το σημείο (x, p) βρίσκεται κάπου μέσα στο τετράγωνο $\Delta x \Delta p$ και η τροχιά μέσα στη γραμμοσκιασμένη ζώνη (σχ. 2.5β).

Σε επόμενες παραγράφους θα μας δοθεί η ευκαιρία να διαπιστώσουμε το σημαντικό ρόλο που παίζει η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg στη συμπεριφορά του μικρόκοσμου.



σχ. 2.5. Κλασσική και κβαντική τροχιά σωματιδίου στο χώρο των φάσεων.

2.6 Αρχή της Αβεβαιότητας Ενέργειας και Χρόνου

Όπως στην προηγούμενη παράγραφο βρήκαμε τη σχέση $\Delta x \Delta p \geq h/2$ που εκφράζει την αρχή της αβεβαιότητας για τις τιμές των μετρήσιμων μεγεθών της θέσης και της ορμής, τις οποίες ένα κινούμενο σωματίδιο μπορεί να έχει σε μια δεδομένη στιγμή, έτσι μπορούμε να βρούμε μια παρόμοια σχέση, που να εκφράζει την αρχή της αβεβαιότητας και για τα μεγέθη της, ενέργειας και του χρόνου.

Έστω ότι θέλουμε να προσδιορίσουμε τη χρονική στιγμή, κατά την οποία ένα σωματίδιο διερχόμενο από δεδομένο σημείο x έχει ενέργεια E . Για τον προσδιορισμό της χρονικής αυτής στιγμής πρέπει να θεωρήσουμε την κυματική μορφή του σωματιδίου, η οποία, όπως ήδη έχουμε αναφέρει στις προηγούμενες παραγράφους, είναι ένα κυματοπακέτο ή ένας παλμός ορισμένης χρονικής διάρκειας Δt . Αλλά για να δημιουργηθεί το κυματοπακέτο απαιτείται η συμβολή πολλών άλλων κυμάτων, των οποίων οι γωνιακές συχνότητες θα κυμαίνονται μέσα στην περιοχή $\Delta \omega$. Από τη θεωρία της αναλύσεως κατά Fourier μπορεί ν' αποδειχτεί ότι το γινόμενο

$$\Delta t \Delta \omega \geq \frac{1}{2} \quad \text{ή} \quad \Delta t \Delta \nu \geq \frac{1}{4\pi}$$

και εφ' όσον $E = h\nu$ έπεται ότι:

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.37)$$

όπου ΔE είναι η αβεβαιότητα στην τιμή ενέργειας, λόγω της υπάρξεως της πεπερασμένης χρονικής διάρκειας Δt που το σωματίδιο έχει την ενέργεια αυτή. Η παραπάνω έκφραση αποτελεί την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg, για την περίπτωση της ενέργειας.

Η φυσική ερμηνεία της είναι εντελώς διαφορετική από εκείνη που διατυπώσαμε για τα μεγέθη θέση-ορμή. Στην τελευταία περίπτωση η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου η γενικότερα ενός συστήματος είναι δυο μεταβλητές που μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα στη δεδομένη χρονική στιγμή t με αβεβαιότητα Δx και Δp αντίστοιχα.

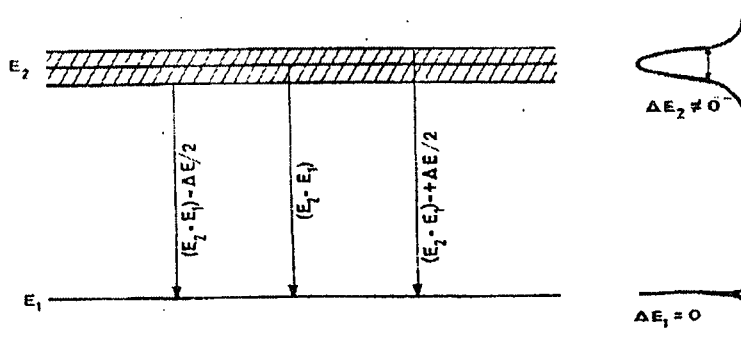
Στη σχέση (2.37) η ενέργεια είναι μια δυναμική μεταβλητή, ενώ ο χρόνος είναι μια παράμετρος. Έτσι καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η σχέση (2.37) συνδέει την αβεβαιότητα (ή το σφάλμα) ΔE στην τιμή της δυναμικής μεταβλητής με το χρονικό διάστημα Δt που χαρακτηρίζει το ρυθμό της μεταβολής της ενέργειας του συστήματος, η γενικότερα το χρόνο εξελίξεως ενός φυσικού συστήματος. Εάν $\Delta t \rightarrow \infty$, δηλαδή ο χρόνος εξελίξεως είναι τόσο μικρός ώστε το σύστημα να θεωρείται ενεργειακά αμετάβλητο, τότε $\Delta E \rightarrow 0$, πράγμα που σημαίνει ότι η αντίστοιχη τιμή ενέργειας είναι με ακρίβεια προσδιορίσιμη. Φυσική συνέπεια από τα παραπάνω είναι η ακόλουθη πρόταση: **Η αβεβαιότητα στη μέτρηση της ενέργειας ΔE ενός συστήματος, που γίνεται μέσα στο χρόνο Δt είναι τόσοση ώστε το γινόμενο $\Delta E \Delta t$ να είναι μεγαλύτερο ή το πολύ ίσο με τη σταθερά $\hbar/2$.**

Μια άλλη εξ ίσου σημαντική εφαρμογή της σχέσης (2.37) είναι η συσχέτιση του χρόνου ζωής και του ενεργειακού εύρους διαφόρων ενεργειακών καταστάσεων των συστημάτων, όπως π.χ. ραδιενεργών πυρήνων, διεγερμένων ατόμων, ασταθών στοιχειωδών σωματιδίων κ.α. Ας θεωρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο περιφερόμενο γύρω από τον πυρήνα ενός ατόμου σε κατάσταση διέγερσης. Το ηλεκτρόνιο μετά από ορισμένο χρόνο με εκπομπή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας θα μεταπέσει σε μια άλλη κατάσταση μικρότερης ενέργειας. Ο χρόνος παραμονής του ηλεκτρονίου στην αρχική κατάσταση διέγερσης ονομάζεται **χρόνος ζωής** αυτής και είναι πεπερασμένος. Εάν τώρα θέλουμε να μετρήσουμε την ενέργεια E της διεγερμένης αυτής κατάστασης, η διάρκεια της μετρήσεως Δt εξαρτάται από το χρόνο ζωής τ . Γιατί εάν ο χρόνος ζωής είναι βραχύς, που σημαίνει ότι ο ρυθμός μεταβολής είναι μεγάλος, δηλαδή γρήγορη εξέλιξη, ο διαθέσιμος χρόνος μετρήσεως είναι μικρός, και το σφάλμα ΔE στην τιμή της ενέργειας E είναι μεγάλο. Για μια ευσταθή κατάσταση, όπως είναι π.χ. η βασική στάθμη του ατόμου, ο χρόνος ζωής είναι σχεδόν άπειρος, δηλαδή εξέλιξη μηδέν, ο χρόνος μετρήσεως Δt μπορεί να είναι αρκετά μεγάλος, οπότε το αντίστοιχο ΔE να είναι σχεδόν μηδέν και επομένως μπορούμε να προσδιορίσουμε με ακρίβεια την τιμή της ενέργειας της βασικής στάθμης. Η αβεβαιότητα στην ενέργεια ΔE λέγεται **Εύρος Ενέργειας** ή **Εύρος Ενεργειακής Στάθμης** (σχ. 2.6) και συνήθως συμβολίζεται με το γράμμα Γ . Στην προκειμένη περίπτωση ισχύει ότι:

$$\hbar\Gamma \geq \hbar \quad (2.38)$$

Το φυσικό νόημα της σχέσης αυτής είναι το εξής:

Όσο πιο αργά μεταβάλλεται ένα φυσικό σύστημα (τ μεγάλο) τόσο πιο ακριβέστερα προσδιορίζεται η ενέργεια του (ΔE μικρό). Και αντιστρόφως όσο πιο γρήγορος είναι ο ρυθμός μεταβολής του (τ μικρό), τόσο πιο μεγάλη είναι η αβεβαιότητα στην ενέργεια (ΔE μεγάλο).



Σχ. 2.6. Εύρος ενεργειακής καταστάσεως

Η σχέση (2.38) είναι από τις σπουδαιότερες της φυσικής του μικρόκοσμου και συνδέει το χρόνο ζωής μιας καταστάσεως με την ακρίβεια της μετρήσεως της αντίστοιχης ενέργειας.

Η αβεβαιότητα στην ενέργεια ΔE έχει ως συνέπεια να μη μπορούμε πια να μιλάμε για ορισμένη τιμή ενέργειας μιας καταστάσεως, αλλά για μια περιοχή ενέργειας από $E - \Delta E/2$ έως $E + \Delta E/2$. Εφ' όσον όμως η ενέργεια μιας διεγερμένης στάθμης δεν είναι με ακρίβεια γνωστή, ούτε και η ενέργεια της μετρούμενης ακτινοβολίας που ελευθερώνεται κατά την μετάπτωση από $E_2 \rightarrow E_1$ δεν είναι με ακρίβεια γνωστή, αλλά περιορίζεται μέσα στο ΔE , δηλαδή περιορίζεται μέσα στην περιοχή $E_2 \rightarrow E_1 \pm \Delta E/2$ (σχ. 2.6), οπού ΔE είναι το ολικό εύρος ενέργειας και των δύο σταθμών E_1 και E_2 .

Έτσι σύμφωνα με την (2.38), το εύρος μιας πειραματικά λαμβανόμενης φασματοσκοπικής γραμμής που προέρχεται από τη μετάπτωση από μια διεγερμένη κατάσταση στη βασική, είναι το μέτρο του χρόνου ζωής αυτής της διεγερμένης καταστάσεως, από την οποία προήλθε η φασματική γραμμή.

Λόγω του φαινομένου Doppler, κατά το οποίο εξ αιτίας της κινήσεως του σωματιδίου έχουμε μεταβολή της συχνότητας της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, έπεται ότι στο ΔE που προαναφέραμε προστίθεται και το σφάλμα λόγω του φαινομένου Doppler. Στις περισσότερες ενεργειακές μεταπτώσεις των ατόμων και μορίων η συμβολή του φαινομένου Doppler στην ανακρίβεια ΔE είναι μεγαλύτερη από τη συμβολή του πεπερασμένου χρόνου ζωής των ενεργειακών καταστάσεων. Το αντίθετο όμως συμβαίνει συνήθως στις μεταπτώσεις από μια στάθμη σε μια άλλη στους πυρήνες των ατόμων.

2.7 Αρχή της Αντιστοιχίας

Καθώς δείξαμε στην προηγούμενη παράγραφο κατά τη μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από μια τροχιά σε μια άλλη που χαρακτηρίζονται αντίστοιχα με τους κβαντικούς αριθμούς n_i και n_f , εκπέμπεται ακτινοβολία ενέργειας $h\nu$.

Κατά την Κλασσική όμως Θεωρία, ηλεκτρόνιο κινούμενο σε κυκλική τροχιά με συχνότητα $\nu_{κλ}$ εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία της ίδιας συχνότητας $\nu_{κλ}$. Διαπιστώνουμε ότι έχουμε την ίδια τιμή συχνότητας. Παρατηρούμε λοιπόν, ότι για πολύ μεγάλους κβαντικούς αριθμούς η Κβαντική Θεωρία δίνει το ίδιο αποτέλεσμα με την Κλασσική Θεωρία. Η παρατήρηση αυτή αποτελεί ειδική περίπτωση της αρχής της αντιστοιχίας, κατά την οποία για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς τα

αποτελέσματα της Κβαντικής Θεωρίας πλησιάζουν τα αποτελέσματα της Κλασσικής Θεωρίας. Έτσι η Κλασσική Θεωρία μπορεί να θεωρηθεί ως οριακή περίπτωση της Κβαντικής Θεωρίας που ισχύει είτε για σωματίδια με πολύ μεγάλες τροχιές (μεγάλους κβαντικούς αριθμούς), είτε για σώματα μεγάλης μάζας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Κβαντικοί Υπολογιστές

3.1 Βασικές Έννοιες

3.1.1 Qubit

Qubit (κβαντικό δυαδικό ψηφίο) ονομάζουμε κάθε κβαντικό σύστημα δύο καταστάσεων. Αν ονομάσουμε τις δύο καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ τότε η τυχαία κατάσταση $|\psi\rangle$ ενός qubit μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + b|1\rangle \quad (3.1)$$

όπου

$$|\alpha|^2 + |b|^2 = 1 \quad (3.2)$$

Κλασσική περίπτωση qubit είναι ένα spin $\frac{1}{2}$, που ως γνωστόν έχει δύο καταστάσεις τις $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ και $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$.

Εν αντιθέσει με τα κλασσικά bit, τα οποία μπορούν να βρεθούν σε δύο μόνο καταστάσεις τις 0 και 1, τα qubit μπορούν να βρεθούν σε μια κατάσταση επιλεγμένη από ένα συνεχές σύνολο καταστάσεων. Εκμεταλλευόμενοι αυτήν την επιπλέον ελευθερία, αλλά και τους νόμους της κβαντομηχανικής, μπορούμε να επιτύχουμε με τους κβαντικούς υπολογιστές περισσότερα από ό,τι με τους κλασσικούς.

Μια άλλη ουσιαστική διαφορά που έχει ένα qubit από ένα bit είναι η εξής: Ενώ μπορούμε πάντα να διαπιστώσουμε με βεβαιότητα ένα bit σε ποια κατάσταση βρίσκεται και επομένως πάντα να διαχωρίσουμε δύο bits που βρίσκονται σε διαφορετικές καταστάσεις, αυτό δεν είναι πάντα δυνατό για τα qubit. Για ένα qubit μπορούμε μόνο να διαχωρίσουμε ορθογώνιες καταστάσεις. Έτσι ας πούμε υπάρχει πείραμα το οποίο να αποφανθεί αν ένα qubit βρίσκεται στην κατάσταση $|0\rangle$ ή $|1\rangle$ (εφ' όσον πάντα γνωρίζουμε ότι το qubit βρισκόταν σε μια από τις δύο καταστάσεις), αλλά δεν υπάρχει κανένας τρόπος να ξεχωρίσουμε αν ένα qubit βρίσκεται στην κατάσταση $|1\rangle$ ή $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

Χρειάζεται να αναφέρουμε ότι αν αναγκάσουμε τα qubit να βρίσκονται μόνο σε μια από τις δύο καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ μόνο, τότε το σύστημα μας είναι πλήρως ισοδύναμο με ένα κλασσικό bit και επομένως και ο κβαντικός υπολογιστής που έχει κατασκευαστεί με τέτοια qubit είναι πλήρως ισοδύναμος με έναν κλασσικό υπολογιστή.

Στους κλασσικούς υπολογιστές αξίζει να σημειωθεί ότι, όταν κωδικοποιηθεί μια σχέση (συσχετισμός) μεταξύ δύο bits και πρέπει ακολούθως να ανακτηθεί αυτή, κάθε bit πρέπει να προσπελαστεί ξεχωριστά. Τα qubits από την άλλη μεριά, όντας κβαντικά αντικείμενα, μπορούν να υπάρξουν σε μια υπέρθεση καταστάσεων (δηλαδή και οι δύο καταστάσεις συγχρόνως) εφ' όσον δεν αλληλεπιδρούν με το περιβάλλον. Μόλις κωδικοποιηθεί μια σχέση μεταξύ δύο qubits, η ίδια αυτή σχέση μπορεί επίσης να υπάρξει σε μια υπέρθεση των καταστάσεων. Όταν ένας κβαντικός υπολογιστής ανακτά τα στοιχεία, επεξεργάζεται το ένα qubit, και η υπέρθεση καταστρέφεται αλλά συγχρόνως η πληροφορία που περιέχει το άλλο qubit μεταβιβάζεται κατά κάποιον τρόπο (κανένας δεν καταλαβαίνει αρκετά το πώς!) σ' αυτόν που επεξεργάζεται το qubit, εφόσον μεταξύ τους υπήρχε συσχετισμός.

3.1.2 Τελεστής πυκνότητας

Ας δούμε τώρα μια διαφορετική αντιμετώπιση της κβαντομηχανικής με τη χρήση όχι κυματοσυναρτήσεων αλλά τελεστών. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$. Τότε ορίζουμε ως *τελεστή πυκνότητας* (density operator) την ποσότητα:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (3.3)$$

Ο τελεστής αυτός περιέχει όλη την πληροφορία που περιείχε η κυματοσυνάρτηση. Θα δείξουμε ότι με τη βοήθεια του τελεστή πυκνότητας μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τη μέση τιμή κάθε παρατηρησίμου \hat{A} από την σχέση,

$$\langle B \rangle = \text{tr}(\rho B) \quad (3.4)$$

Έστω η βάση του χώρου Hilbert του προβλήματος μας που αποτελείται από τις ιδιοκαταστάσεις του τελεστή \hat{A} , δηλαδή:

$$\hat{A}|n\rangle = A_n|n\rangle \quad (3.5)$$

Τότε:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (3.6)$$

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_n \sum_m c_n c_m^* |n\rangle\langle m| \quad (3.7)$$

Άρα όντως με τη βοήθεια του ρ μπορούμε να βρούμε τη μέση τιμή κάθε παρατηρησίμου μεγέθους, άρα ο ρ περιέχει όση πληροφορία περιέχει και η κυματοσυνάρτηση.

Ωστόσο ποτέ δεν θα είχε εισαχθεί ο τελεστής πυκνότητας αν αυτός δεν έδινε κάποια πλεονεκτήματα. Το πλεονέκτημα που μας δίνει ο τελεστής πυκνότητας εν σχέση με την κυματοσυνάρτηση είναι ότι με τη βοήθειά του μπορούμε να διαχειριστούμε συστήματα των οποίων δεν γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση, αλλά γνωρίζουμε ότι αυτή έχει ληφθεί από ένα δείγμα κυματοσυναρτήσεων $|\psi_i\rangle$ με κάποια κατανομή πιθανοτήτων p_i . Τότε ορίζουμε:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (3.8)$$

Επομένως με τον τελεστή πυκνότητας μπορούμε να χειριστούμε περιπτώσεις όπου η ακριβής κυματοσυνάρτηση του συστήματος δεν είναι γνωστή αλλά είναι γνωστή μόνο η κατανομή πιθανότητας της και μάλιστα με τον ίδιο ακριβώς τρόπο με καταστάσεις όπου η κυματοσυνάρτηση είναι γνωστή. Στην περίπτωση όπου η κυματοσυνάρτηση είναι γνωστή λέμε ότι έχουμε μια «καθαρή κατάσταση» (pure state), ενώ στην περίπτωση που δεν γνωρίζουμε ακριβώς την κυματοσυνάρτηση του συστήματος λέμε ότι έχουμε μια «μεικτή κατάσταση» (mixed state). Στην πραγματικότητα δεν πρέπει να βλέπουμε τον τελεστή πυκνότητας μόνο σαν την περιγραφή μιας κλασσικής κατανομής πιθανότητας πάνω σε κυματοσυναρτήσεις. Δεν είναι η επιδίωξη μας με τον τελεστή πυκνότητας να περιγράψουμε μόνο ένα κβαντικό σύστημα του οποίου απλώς δεν γνωρίζουμε ακριβώς την κυματοσυνάρτηση. Κυρίως με τη χρήση του τελεστή πυκνότητας επιθυμούμε να περιγράψουμε δείγματα που αποτελούνται από πολλά πανομοιότυπα κβαντικά συστήματα κάθε ένα από τα οποία περιγράφεται από κάποια κυματοσυνάρτηση, όχι την ίδια για όλα. Είναι προφανές ότι η περιγραφή ενός τέτοιου συστήματος δεν μπορεί να γίνει με τη χρήση μιας κυματοσυνάρτησης αλλά μόνο με τον τελεστή πυκνότητας. Η χρήση τέτοιων δειγμάτων απαιτείται για την κατασκευή ενός κβαντικού υπολογιστή.

Πρέπει τώρα σιγά-σιγά να χτίσουμε όλα τα εργαλεία που είχαμε για τις κυματοσυναρτήσεις, για τους τελεστές πυκνότητας. Για την κυματοσυνάρτηση γνωρίζαμε την χρονική της εξέλιξη από την εξίσωση του Schrödinger. Ποια είναι όμως η χρονική εξέλιξη του τελεστή πυκνότητας. Αυτό θα υπολογίσουμε ακριβώς τώρα.

Είναι:

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = i\hbar \frac{\partial|\psi_i\rangle}{\partial t} \quad (3.9)$$

$$\langle\psi_i|\hat{H} = -i\hbar \frac{\partial\langle\psi_i|}{\partial t} \quad (3.10)$$

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (3.11)$$

άρα:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i p_i i\hbar \frac{\partial |\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\partial t} + \sum_i p_i i\hbar \frac{\partial |\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\partial t} = \\ &= \sum_i p_i \hat{H} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| - \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \hat{H} = \hat{H} \rho - \rho \hat{H} = \left[\hat{H}, \rho \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Μία από τις πιο σημαντικές ιδιότητες του τελεστή πυκνότητας είναι ότι εξ' ορισμού είναι Ερμιτιανός:

$$\rho^* = \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right)^* = \sum_i p_i^* (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^* = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \rho \quad (3.13)$$

Ακριβώς η εξίσωση (3.12) είναι που μας δίνει τη χρονική εξίσωση του τελεστή πυκνότητας, είναι απολύτως ισοδύναμη με την εξίσωση Schrödinger και ονομάζεται «εξίσωση Liouville – Von Neumann».

3.2 Αδυναμία αντιγραφής κβαντικής πληροφορίας

Θα δούμε τώρα κάποιες βασικές διαφορές που έχει η κβαντική πληροφορία εν σχέση με την κλασσική πληροφορία. Κατ' αρχήν ενώ είναι προφανές ότι αν χρησιμοποιούμε ένα qubit μόνο στις δύο καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ τότε μπορούμε χωρίς απώλειες να μετατρέψουμε ένα κλασσικό bit πληροφορίας σε κβαντική πληροφορία και κατόπιν πάλι σε κλασσική πληροφορία κάνοντας μια μέτρηση στη βάση $|0\rangle, |1\rangle$. Είναι πλήρως αδύνατο να κάνουμε το αντίθετο, δηλαδή είναι αδύνατο να πάρουμε ένα qubit κβαντικής πληροφορίας να το μετατρέψουμε σε ένα οσοδήποτε ποσό κλασσικής πληροφορίας και κατόπιν να ανακτήσουμε πάλι το qubit της κβαντικής πληροφορίας. Θα το αποδείξουμε αυτό με έναν περιγραφικό τρόπο.

Έστω ότι έχουμε ένα qubit κβαντικής πληροφορίας και έχουμε τη δυνατότητα να το μετατρέψουμε σε κλασσική πληροφορία και κατόπιν σε κβαντική πληροφορία χωρίς απώλειες. Τότε είναι δυνατόν, αφού η κλασσική πληροφορία μπορεί πάντα να αντιγραφεί, όταν έχουμε μετατρέψει το qubit σε κλασσική πληροφορία να αντιγράψουμε την πληροφορία αυτή και έτσι να ανακτήσουμε στο επόμενο βήμα δύο πανομοιότυπα qubit κβαντικής πληροφορίας, κατασκευάσαμε έτσι έναν ιδανικό κβαντικό κλωνοποιητή πληροφορίας. Ας υποθέσουμε τώρα ότι κλωνοποιούμε ένα qubit. Τότε μπορούμε να κάνουμε μετρήσεις για δύο μετρήσιμα ακόμα και αν αυτά δεν μετατίθενται, αρκεί να μετρήσουμε το ένα στο ένα qubit και το άλλο στο άλλο qubit. Αυτό όμως έρχεται σε αντίθεση με την αρχή της αβεβαιότητας και επομένως

δεν μπορεί να συμβαίνει. Επομένως δεν μπορούμε να μετατρέψουμε κβαντική πληροφορία σε κλασσική και τανάπαλιν χωρίς απώλειες, ούτε να κλωνοποιήσουμε κβαντική πληροφορία.

Το τελευταίο συμπέρασμα είναι η βασική ιδέα της κβαντικής κρυπτογραφίας. Αν υποθέσουμε ότι μετατρέπουμε κλασσική πληροφορία σε κβαντικά qubit και εφαρμόσουμε σε αυτά τα qubit μια απλή πύλη, κατόπιν να τα στείλουμε στον παραλήπτη, ο οποίος γνωρίζει ότι για να αποκωδικοποιήσει το μήνυμα πρέπει να εφαρμόσει την αντίστροφη πύλη και μετά να μετατρέψει την κβαντική πληροφορία σε κλασσική με κάποια μέτρηση. Αν κάποιος παρεμβάλει δεν έχει στα χέρια του τίποτα γιατί δεν ξέρει την πύλη που εφαρμόσαμε. Χωρίς όμως να αποκλείεται ότι οι κλασσικοί χάκερς μπορούν να κάνουν πολλές δοκιμές μέχρι να πετύχουν το σωστό. Ωστόσο αυτό στην περίπτωση μας δεν είναι δυνατό διότι δεν μπορεί να αντιγράψει το μήνυμα για να δοκιμάσει πολλές φορές, επομένως δεν είναι δυνατό να σπάσει ο απλούστατος αυτός κώδικας.

3.3 Κβαντικός υπολογιστής

Μετά από όλα αυτά που έχουμε αναφέρει, μπορούμε πλέον να ορίσουμε τι είναι ένας κβαντικός υπολογιστής. Κβαντικός υπολογιστής λοιπόν είναι ένα φυσικό σύστημα το οποίο.

- Περιέχει έναν κατάλληλο χώρο καταστάσεων, δηλαδή το πλήθος συστημάτων δύο καταστάσεων.
- Έχουμε τη δυνατότητα να προετοιμάσουμε κάθε ένα από αυτά τα συστήματα σε όποια κατάσταση επιθυμούμε.
- Έχουμε τη δυνατότητα να υλοποιούμε κβαντικές πύλες. Αυτό ισοδυναμεί με δυνατότητα κατασκευής:
 1. Της πύλης Hadamard
 2. Της πύλης μετατόπισης φάσης κατά $\pi/4$
 3. Της πύλης controlled-not
- Έχουμε τη δυνατότητα να εκτελούμε μετρήσεις ώστε να διαπιστώσουμε κάθε ένα από τα qubit σε ποια κατάσταση βρίσκεται.
- Τέλος έχουμε κάποιον αλγόριθμο ο οποίος θα μας οδηγήσει στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

Ας κάνουμε μερικές παρατηρήσεις στα παραπάνω. Η κατασκευή της πύλης controlled-not απαιτεί την κατάλληλη σύζευξη των qubit για την επίτευξη του απαραίτητου entanglement. Αυτός είναι ένας από τους βασικούς μας στόχους όταν

προσπαθούμε να υλοποιήσουμε έναν κβαντικό υπολογιστή σε κάποιο φυσικό σύστημα, μια που η υλοποίηση των πυλών ενός qubit γενικά είναι απλό να πραγματοποιηθούν.

Επίσης είναι προφανές ότι με μία μέτρηση είναι εντελώς αδύνατο να προσδιορίσουμε την κατάσταση ενός qubit. Για το σκοπό αυτό κάθε κβαντικός υπολογισμός επαναλαμβάνεται πολλές φορές από την αρχή, ώστε να κάνουμε μετρήσεις πολλές φορές και σε διάφορες βάσεις για να βγάλουμε στατιστικά συμπεράσματα για την κατάσταση που λαμβάνουμε στην έξοδο.

Όσον αφορά τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείται πρέπει να πούμε τα εξής: Όλη η αξία των κβαντικών υπολογιστών είναι ότι υπάρχουν αλγόριθμοι οι οποίοι μπορούν να εκτελέσουν υπολογισμούς πολύ πιο γρήγορα από ότι οι κλασσικοί αλγόριθμοι. Μάλιστα όλη η ερευνητική έξαρση στο χώρο των κβαντικών υπολογιστών συνέβη όταν δημοσιεύτηκε ο πρώτος τέτοιος αλγόριθμος, ο αλγόριθμος του Shor, ο οποίος εκτελεί παραγοντοποίηση ακεραίου αριθμού σε πρώτους αριθμούς. Η διαφορά στην ταχύτητα των αλγορίθμων αυτών είναι ότι μπορούν να λύνουν τα συγκεκριμένα προβλήματα στα οποία αναφέρονται σε χρόνο που είναι πολυωνυμική συνάρτηση του μεγέθους των εισαγόμενων δεδομένων, ενώ οι αντίστοιχοι κλασσικοί αλγόριθμοι επιλύουν τα προβλήματα αυτά σε χρόνο που είναι εκθετική συνάρτηση του μεγέθους των εισαγόμενων δεδομένων. Όπως είναι εύκολα αντιληπτό για πολύ μεγάλο πλήθος δεδομένων η διαφορά είναι τεράστια με αποτέλεσμα οι κβαντικοί υπολογιστές (άμα αυτοί πρώτα κατασκευαστούν) να μπορούν να επιλύσουν προβλήματα που είναι αδύνατο να λυθούν από κλασσικούς υπολογιστές. Σήμερα οι κβαντικοί αλγόριθμοι που πραγματικά έχουν αυτήν τη διαφορά από τους αντίστοιχους κλασσικούς μετρώνται στα δάκτυλα του ενός χεριού και η δημιουργία τέτοιων αλγορίθμων αποτελεί ένα από τα καυτά ερευνητικά ενδιαφέροντα της επιστημονικής κοινότητας.

Τα παραπάνω ορίζουν τις απαιτούμενες δυνατότητες που πρέπει να έχουμε για να πραγματοποιήσουμε υπολογισμούς χρησιμοποιώντας κβαντικά συστήματα. Όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο υπάρχει μία ακόμα απαίτηση, η αντιμετώπιση του φαινομένου του decoherence, η οποία μάλιστα είναι και η τεχνολογικά δυσκολότερα υλοποιήσιμη.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Εξέλιξη και από-συμφωνία

4.1 Εισαγωγή

Μέχρι στιγμής τοποθετήσαμε το πρόβλημα της κατασκευής ενός κβαντικού υπολογιστή. Ωστόσο παραβλέψαμε μια πολύ ουσιαστική λεπτομέρεια. Για να υλοποιήσουμε τις κβαντικές πύλες πρέπει να ελέγξουμε απόλυτα τη δυναμική των συστημάτων μας. Αυτό όμως είναι αδύνατον αφού αυτά είναι ανοιχτά συστήματα. Ας δούμε ποιες μορφές παίρνει αυτή η αλληλεπίδραση των συστημάτων μας με το περιβάλλον.

Υπάρχουν κατ' αρχήν δύο βασικές συνέπειες αυτής της αλληλεπίδρασης.

Η πρώτη επίδραση είναι η απώλεια ενέργειας από το σύστημα (dissipation). Στις περισσότερες περιπτώσεις μπορούμε να απομονώσουμε αρκετά το σύστημα μας από το περιβάλλον ώστε το φαινόμενο αυτό να είναι αρκετά αργό ώστε να μην δημιουργεί προβλήματα.

Η δεύτερη επίδραση είναι η απώλεια της σχετικής φάσης των τμημάτων του συστήματος μας, η απώλεια δηλαδή πληροφορίας. Το φαινόμενο αυτό λέγεται «από-συμφωνία» (decoherence) και είναι ταχύτατο. Μάλιστα χαρακτηριστικοί χρόνοι του φαινομένου αυτού μπορεί να είναι 10^{-43} sec για μακροσκοπικά αντικείμενα. Το φαινόμενο αυτό είναι σήμερα το κυριότερο εμπόδιο στην κατασκευή των κβαντικών υπολογιστών.

4.2 Μέτρηση

Ας υποθέσουμε ότι κάνουμε μια μέτρηση ενός παρατηρησίμου στο σύστημα μας. Τότε κατά τα γνωστά η κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ μετά τη μέτρηση προβάλλεται στη βάση που αποτελείται από τις ιδιοσυναρτήσεις $|i\rangle$ του παρατηρησίμου μας. Μετά τη μέτρηση η κυματοσυνάρτηση του συστήματος μας είναι μια από τις καταστάσεις της βάσης έστω $|\psi'\rangle = |j\rangle$ με πιθανότητα $|\langle\psi|j\rangle|^2$. Η διεργασία αυτή περιγράφεται από τους προβολικούς τελεστές P_i , οι οποίοι ορίζονται:

$$P_i = |i\rangle\langle i| \quad (4.1)$$

Μπορούμε τώρα να παραστήσουμε τη διαδικασία της μέτρησης ως τη δράση των προβολικών τελεστών.

$$|\psi'\rangle = |j\rangle = \frac{|j\rangle\langle j|\psi\rangle}{\langle j|\psi\rangle} = \frac{P_j|\psi\rangle}{\langle j|\psi\rangle} \quad (4.2)$$

Για τους προβολικούς τελεστές εξ' ορισμού ισχύουν οι παρακάτω τρεις ιδιότητες:

$$P_i^* = P_i \quad (\text{a})$$

$$\sum_i P_i = I \quad (\text{b}) \quad (4.3)$$

$$P_i^2 = P_i \quad (\text{c})$$

Η απόδειξη της πρώτης σχέσης είναι εντελώς προφανής. Η δεύτερη ισχύει προφανώς αν επιλέξουμε για βάση τη βάση των ιδιοκαταστάσεων του παρατηρησίμου που μετράμε:

$$\sum_i P_i = \sum_i |i\rangle\langle i| = I \quad (4.4)$$

Αν εφαρμόσουμε έναν οποιοδήποτε unitary μετασχηματισμό, μπορούμε να αλλάξουμε βάση και προφανώς η σχέση εξακολουθεί να ισχύει, αφού $U^*IU = U^*U = I$. Όσο για την τελευταία είναι προφανής αφού :

$$P_i^2 = |i\rangle\langle i|i\rangle\langle i| = |i\rangle\langle i| \quad (4.5)$$

Είναι προφανές από τον ορισμό του τελεστή πυκνότητας, ότι μια μέτρηση σε ένα σύστημα έχει το ακόλουθο αποτέλεσμα για τον τελεστή πυκνότητας.

$$P' = |i\rangle\langle i| = \frac{P_{ip} P_i^*}{\text{tr}(P_{ip} P_i^*)} = \frac{P_{ip} P_i}{\text{tr}(P_{ip} P_i)} \quad (4.6)$$

όπου ο παρονομαστής $\text{tr}(P_{ip} P_i)$, υπάρχει για τη σωστή κανονικοποίηση του P_i . Μάλιστα αυτός ο παρονομαστής ισούται με τη πιθανότητα να προκύψει το αποτέλεσμα i .

Έστω:

$$P = \sum_k P_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \Rightarrow P_i = \sum_k P_k |\langle\psi_k|i\rangle|^2 \quad (4.7)$$

Τότε:

$$\begin{aligned} \text{tr}(P_i P_i) &= \sum_j \langle j|i\rangle\langle i| \left(\sum_k P_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \right) |i\rangle\langle i|j\rangle = \\ &= \sum_j \sum_k P_k \delta_{ij} \langle i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|i\rangle \delta_{ij} = \sum_k P_k |\langle\psi_k|i\rangle|^2 = P_i \end{aligned}$$

Ας ξανασκεφτούμε το πρόβλημα της μέτρησης σε νέα βάση. Είπαμε ότι ο τελεστής πυκνότητας δεν μας ενδιαφέρει τόσο πολύ όταν περιγράφει ένα μόνο σύστημα στο οποίο έχουμε αβεβαιότητα για την κυματοσυνάρτηση, αλλά όταν περιγράφει ένα στατιστικό δείγμα όμοιων συστημάτων, κάθε ένα από τα οποία μπορεί να έχει άλλη κυματοσυνάρτηση. Στην περίπτωση αυτή όταν πράττουμε μία μέτρηση δεν πρέπει να είμαστε τόσο απαιτητικοί ώστε να περιμένουμε να πάρουμε το ίδιο αποτέλεσμα στη μέτρηση κάθε ενός κβαντικού συστήματος. Προφανώς δεν θα συμβεί αυτό, αλλά θα πάρουμε ως αποτέλεσμα ένα σύνολο από συστήματα σε διάφορες καταστάσεις της βάσης του παρατηρησίμου και μάλιστα τόσο περισσότερα σε κάθε κατάσταση όσο πιθανότερο ήταν το αντίστοιχο αποτέλεσμα. Έτσι τελικά αν αρχικά είχαμε N το πλήθος συστήματα μετά τη μέτρηση θα έχουμε $N \text{tr}(P_{ip} P_i)$ συστήματα στην κατάσταση $|i\rangle$, $N \text{tr}(P_{jp} P_j)$ συστήματα στην κατάσταση $|j\rangle$ και ούτω καθ' εξής. Επομένως επιλέγοντας στην τύχη ένα σύστημα μετά τη μέτρηση, αυτό βρίσκεται με πιθανότητα $\text{tr}(P_{ip} P_i)$ στην κατάσταση $|i\rangle$, με πιθανότητα $\text{tr}(P_{jp} P_j)$ στην κατάσταση $|j\rangle$ και τα λοιπά. Άρα ο τελεστής πυκνότητας που περιγράφει το σύστημα των N υποσυστημάτων μετά τη μέτρηση είναι:

$$p' = \sum_i P_i |i\rangle \langle i| = \sum_i \text{tr}(P_{ip} P_i) \frac{P_i P_i}{\text{tr}(P_i P_i)} \sum_i P_{ip} P_i \quad (4.8)$$

Πρέπει να προσθέσουμε ότι το παραπάνω αποτέλεσμα είναι το σωστό αποτέλεσμα ακόμα και αν αναφερόμαστε σε ένα μόνο κβαντικό σύστημα όπου κάνουμε τη μέτρηση αρκεί να φροντίσουμε να μην πληροφορηθούμε το αποτέλεσμα της μέτρησης.

Παρατηρήστε επίσης για μελέτη σε επόμενη παράγραφο ότι η παραπάνω διεργασία μπορεί να γραφεί και:

$$p' = \sum_i P_{ip} P_i^* \quad (4.9)$$

όπου:

$$\sum_i P_i^* P_i = \sum_i P_i P_i = \sum_i P_i^2 = \sum_i P_i = I \quad (4.10)$$

4.3 Κβαντικές διεργασίες

Ας μελετήσουμε τώρα υπό τη γενικότερη δυνατή οπτική γωνία τις κβαντικές διεργασίες. Μία αποδεκτή κβαντική διεργασία είναι μια διεργασία που αντιστοιχεί τελεστές πυκνότητας σε τελεστές πυκνότητας. Συνεπώς μια κβαντική διεργασία f

$$p' = f(p) \quad (4.11)$$

πρέπει να τηρεί τις ακόλουθες απαιτήσεις:

1. Η f πρέπει να είναι γραμμική.
2. Πρέπει ο p' να είναι Ερμιτιανός αν είναι ο p , δηλαδή πρέπει η f να διατηρεί την ερμιτιανότητα.
3. Πρέπει ο p' να έχει ίχνος ίσο με τη μονάδα αν ο p έχει ίχνος ίσο με τη μονάδα, δηλαδή πρέπει η f να διατηρεί το ίχνος.
4. Πρέπει ο p' να έχει θετικές ιδιοτιμές αν ο p έχει θετικές ιδιοτιμές, δηλαδή πρέπει η f να είναι θετική (positive).

Είναι προφανές ότι οι τρεις τελευταίες απαιτήσεις προκύπτουν από τις ικανές και αναγκαίες απαιτήσεις που έχουμε ώστε ένας τελεστής να παριστάνει τελεστή πυκνότητας. Η πρώτη απαίτηση απορρέει από βασικές αρχές και η διερεύνηση της ξεφεύγει από τους σκοπούς αυτής της εργασίας.

Θα δείξουμε ότι ένας υπερτελεστής τηρεί τις παραπάνω προϋποθέσεις.

1. Ένας υπερτελεστής είναι προφανώς γραμμικός.

$$2. (P')^* = \left(\sum_i M_i P M_i^* \right)^* = \sum_i (M_i^*)^* P^* (M_i)^* = \sum_i M_i P M_i^* = P' \quad (4.12)$$

- 3.

$$\begin{aligned} \text{tr}(P') &= \text{tr} \left(\sum_i M_i P M_i^* \right) = \sum_i \text{tr} (M_i P M_i^*) = \sum_i \text{tr} (P M_i^* M_i) = \\ &= \text{tr} \left(P \sum_i M_i^* M_i \right) = \text{tr}(P) = 1 \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$4. \langle P' \rangle = \langle \psi | P' | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_i M_i P M_i^* | \psi \rangle = \sum_i (\langle \psi | M_i) P (M_i^* | \psi \rangle) \geq 0 \quad (4.14)$$

Αποδείξαμε λοιπόν ότι κάθε υπερτελεστής παριστάνει μια κβαντική διεργασία. Ωστόσο με τις τέσσερις προϋποθέσεις που θέσαμε παραπάνω αδυνατούμε να αποδείξουμε ότι κάθε κβαντική διεργασία μπορεί να περιγραφεί από έναν υπερτελεστή. Εμείς επιζητούμε να δείξουμε ότι το παραπάνω είναι δυνατόν μια που είδαμε ότι και η διεργασία μια μέτρησης, αλλά και η διεργασία της ορθομοναδιαίας

(unitary) εξέλιξης ενός συστήματος περιγράφονται από έναν υπερτελεστή. Το πρόβλημα είναι ότι υπήρξαμε λίγο χαλαροί στις απαιτήσεις που θέσαμε για τις κβαντικές διεργασίες και συγκεκριμένα στην απαίτηση της θετικότητας της διεργασίας. Απαιτήσαμε από μια κβαντική διεργασία να διατηρεί τη θετικότητα των ιδιοτιμών του τελεστή πυκνότητας όπου δρα. Ωστόσο αυτό δεν είναι αρκετό, διότι αν ο τελεστής πυκνότητας όπου δρα η ανωτέρω διεργασία είναι τμήμα ενός μεγαλύτερου συστήματος πρέπει να απαιτήσουμε να διατηρείται και το πρόσημο των ιδιοτιμών του τελεστή πυκνότητας που περιγράφει το υπερσύστημα. Τότε η διεργασία λέγεται "εντελώς θετική". (completely positive). Παρακάτω θα δείξουμε ένα παράδειγμα διεργασίας η οποία είναι θετική, αλλά όχι εντελώς θετική, ώστε να φανεί ότι η παραπάνω απαίτηση είναι ουσιαστική.

Ας θεωρήσουμε τη διεργασία της αναστροφής του τελεστή πυκνότητας ενός qubit. Δηλαδή τη διεργασία:

$$\begin{cases} |0\rangle\langle 0| \rightarrow |0\rangle\langle 0| \\ |0\rangle\langle 1| \rightarrow |1\rangle\langle 0| \\ |1\rangle\langle 0| \rightarrow |0\rangle\langle 1| \\ |1\rangle\langle 1| \rightarrow |1\rangle\langle 1| \end{cases}$$

Όταν η παραπάνω διεργασία δρα σε ένα μόνο qubit τότε προφανώς διατηρεί τη θετικότητα των ιδιοτιμών του τελεστή πυκνότητας, αφού διατηρεί και τις ίδιες τις ιδιοτιμές αφού:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Αν όμως θεωρήσουμε ένα σύστημα δύο qubit στην κατάσταση $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$

και εφαρμόσουμε την παραπάνω διεργασία στο πρώτο qubit, τότε:

$$P = \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

$$\frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|) \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|) =$$

$$= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

Ενώ ο αρχικός τελεστής πυκνότητας έχει τις ιδιοτιμές $0,0,0,1$, ο τελικός έχει τις ιδιοτιμές $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. Επομένως ανακαλύψαμε μια διεργασία, η οποία ενώ είναι θετική δεν είναι εντελώς θετική.

Με την απαίτηση μια κβαντική διεργασία να είναι εντελώς θετική και φυσικά και τις προηγούμενες απαιτήσεις, μπορούμε πλέον να αποδείξουμε αυστηρά μαθηματικά ότι κάθε κβαντική διεργασία περιγράφεται από έναν υπερτελεστή. Η απόδειξη είναι περίπλοκη και ξεφεύγει από τους σκοπούς αυτής της εργασίας.

Ας σχολιάσουμε τώρα τους υπερτελεστές ως μαθηματικά αντικείμενα. (Οι unitary μετασχηματισμοί αποτελούν υποσύνολο των υπερτελεστών και συγκεκριμένα αυτών των υπερτελεστών οι οποίοι στην αναπαράσταση αθροίσματος τελεστών έχουν μόνο έναν όρο.) Έτσι λοιπόν δεν μπορεί κανείς να εξασφαλίσει ότι αν κάνει μια κβαντική διεργασία μπορεί και να την αντιστρέψει. Στο σημείο αυτό ανοίγει η μεγάλη συζήτηση για την αντιστρεπτότητα ή μη της κβαντομηχανικής, η οποία αποτελεί ένα από τα πιο καυτά ανοιχτά θεωρητικά ζητήματα σήμερα.

4.4 Η μαρκοβιανή προσέγγιση

Φτάσαμε τώρα στο σημείο να θέλουμε να περιγράψουμε την εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος. Η λογική μας λέει ότι πρέπει να γράψουμε την εξίσωση Schrödinger για το σύμπαν και κατόπιν να κάνουμε trace out το περιβάλλον για να μείνει η εξίσωση που περιγράφει την εξέλιξη του ανοιχτού συστήματος μας και η οποία θα έχει ως λύση έναν υπερτελεστή. Όλα αυτά καλά αλλά δυστυχώς υπάρχει ένα βασικό πρόβλημα. Δεν μπορούμε να εξασφαλίσουμε το ότι η παραπάνω εξίσωση είναι μια διαφορική εξίσωση. Αυτό συμβαίνει διότι το σύστημα μας είναι ανοιχτό και χάνει πληροφορία προς το περιβάλλον. Η πληροφορία αυτή μπορεί εν μέρει να επιστρέφει στο σύστημα μας μετά την πάροδο κάποιου χρόνου και να επηρεάζει την εξέλιξη του. Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής πυκνότητας του συστήματος μας την χρονική στιγμή $t + dt$, δεν εξαρτάται μόνο από τον τελεστή πυκνότητας τη στιγμή t , αλλά και από τη μορφή αυτού σε παλαιότερες χρονικές στιγμές. Στην περίπτωση αυτή λέμε ότι το σύστημα μας έχει "μνήμη" και προφανώς η εξέλιξη του δεν μπορεί να περιγραφεί από μια διαφορική εξίσωση, αλλά από μια εξίσωση καθυστέρησης χρόνου. Η μελέτη ενός τέτοιου συστήματος είναι τρομερά δύσκολη από μαθηματικής πλευράς.

Η προσέγγιση που κάνουμε για να απλοποιήσουμε το πρόβλημα είναι να θεωρήσουμε ότι το σύστημα μας δεν έχει μνήμη και επομένως μπορεί η εξέλιξη του να περιγραφεί από μια διαφορική εξίσωση. Η προσέγγιση αυτή λέγεται "μαρκοβιανή" (markovian) προσέγγιση.

Ας δούμε πότε η προσέγγιση αυτή είναι ικανοποιητική. Η πληροφορία που χάνει το σύστημα μας στο περιβάλλον χάνεται λόγω διεργασιών που συμβαίνουν στο περιβάλλον. Αν υποθέσουμε ότι ένας χαρακτηριστικός χρόνος αυτών των διεργασιών είναι ο t_{erase} και ένας χαρακτηριστικός χρόνος για την εξέλιξη του ανοιχτού συστήματος μας είναι ο $t_{evolution}$ τότε η προσέγγισή μας είναι καλή αν:

$$t_{erase} \ll t_{evolution} \quad (4.19)$$

Η απαίτηση αυτή γενικώς δεν είναι καθόλου παράλογη. Στην ατομική φυσική για παράδειγμα έχουμε $t_{evolution} \approx 10^{-9}$ sec και $t_{erase} \approx 10^{-15}$ sec.

4.5 Εξίσωση master

Ας δούμε τώρα τι μορφής είναι η διαφορική εξίσωση, της οποίας την ύπαρξη εξασφαλίσαμε κάνοντας την μακροβιανή προσέγγιση. Κατ' αρχήν σε αντιστοιχία με την εξίσωση του Schrodinger:

$$p' = -i[H.p] \quad (4.20)$$

Αναζητούμε μια εξίσωση της μορφής:

$$p' = L(p) \quad (4.21)$$

όπου L γραμμικός τελεστής που ονομάζεται Lindbladian.

Ας γράψουμε λίγο διαφορετικά την παραπάνω σχέση:

$$p(t+dt) = p(t) + L[p(t)]dt \quad (4.22)$$

Γνωρίζουμε όμως ότι ο $p(t+dt)$ μπορεί σε κάθε περίπτωση να προκύψει από τον $p(t)$ με μια κβαντική διεργασία, δηλαδή έναν υπερτελεστή. Επομένως:

$$\begin{aligned} p(t+dt) &= \sum_i M_i p(t) M_i^* \Rightarrow \\ \Rightarrow p(t) + L(p)dt &= \sum_i M_i p M_i^* \end{aligned} \quad (4.23)$$

Μελετώντας την παραπάνω μορφή συμπεραίνουμε τα εξής:

Πρέπει οπωσδήποτε ένας από τους τελεστές M_i να ισούται με τον ταυτοτικό, ώστε να πάρουμε στο άθροισμα τον όρο $p(t)$. Αυτός ο τελεστής μπορεί να έχει διόρθωση μόνο της τάξεως του dt διότι αν είναι μεγαλύτερης τάξεως θα δίνει αμελητέους όρους και αν είναι μικρότερης τάξεως θα δίνει όρους πιο σημαντικούς από αυτούς που περιμένουμε. Οι υπόλοιποι τελεστές για να δίνουν όρους της σωστής τάξεως ως προς dt πρέπει να είναι της τάξεως του \sqrt{dt} . Έτσι έχουμε:

$$\begin{cases} M_0 = I + (-iH + K)dt \\ M_i = L_i \sqrt{dt}, i \neq 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

Επομένως η ζητούμενη διαφορική εξίσωση είναι η:

$$p' = L[p] = -i[H, p] + \sum_{i \neq 0} (L_i p L_i^* - \frac{1}{2} L_i^* L_i p - \frac{1}{2} L_i^* L_i p) \quad (4.25)$$

και λέγεται «εξίσωση Master».

Ο πρώτος όρος παρατηρούμε ότι είναι ίδιος με αυτόν στην εξίσωση Schrödinger και επομένως περιγράφει την ορθομοναδιαία (unitary) εξέλιξη του συστήματος. Για το λόγο αυτό ταυτίζουμε τον τελεστή H με την χαμιλτονιανή του ανοιχτού συστήματος μας.

Οι τελεστές L_i λέγονται «τελεστές Lindblad» (lindblad operators) ή "τελεστές κβαντικών αλμάτων" (quantum jump operators). Οι όροι $L_i \rho L_i^*$ περιγράφουν μεταβάσεις του συστήματος μας λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον. Το μεγάλο ερώτημα είναι πώς μπορούμε να βρούμε σε κάθε περίπτωση αυτούς τους τελεστές.

Για να απαντήσουμε το τελευταίο ερώτημα ας σκεφτούμε τι γίνεται με την εξίσωση Liouville - Von-Neumann. Αν εκφράσουμε την εξίσωση αυτή για το φυσικό σύστημα που αποτελείται και από το υπό εξέταση ανοικτό σύστημα αλλά και το περιβάλλον του, και κάνουμε trace out το περιβάλλον η εξίσωση που θα προκύψει θα μας δίνει τη χρονική εξέλιξη του τελεστή πυκνότητας του ανοικτού συστήματος, δηλαδή την εξίσωση Master.

$$p'_{universe} = -i[H_{universe}, p_{universe}]$$

$$p' = tr_{environment}(p'_{universe}) = tr_{environment}(-i[H_{universe}, p_{universe}]) \quad (4.26)$$

$$L(p) = tr_{environment}(-i[H_{universe}, p_{universe}])$$

Άρα μπορεί κανείς να βρει τους τελεστές κβαντικών αλμάτων από τη χαμιλτονιανή του σύμπαντος. Η διαδικασία αυτή παρουσιάζει δύο βασικές δυσκολίες. Πρώτον πρέπει να βρούμε ένα καλό μοντέλο για το άπειρο σύστημα του περιβάλλοντος και δεύτερον η διαδικασία του trace out δεν είναι καθόλου τετριμμένη και η σύνδεση των τελεστών κβαντικών αλμάτων με την αρχική χαμιλτονιανή δεν είναι καθόλου προφανής. Έτσι υπάρχουν δύο εναλλακτικές διαδρομές για τη μελέτη ενός ανοικτού συστήματος με την εξίσωση Master.

Μοντελοποιούμε πρώτα το περιβάλλον, βρίσκουμε τη χαμιλτονιανή του συστήματος και μετά αναζητούμε τους τελεστές της εξίσωσης Master από αυτήν, ή θεωρούμε πρώτα κάποιους τελεστές, οι οποίοι έχουμε την αίσθηση ότι περιγράφουν σωστά το σύστημα και δίνουν επιλύσιμες εξισώσεις και μετά προσπαθούμε να κάνουμε την αντίστροφη διαδικασία, δηλαδή από αυτούς να βρούμε τη χαμιλτονιανή.

Θα δώσουμε ένα παράδειγμα για να γίνει αντιληπτή η φυσική σημασία των τελεστών L_i . Ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν αρμονικό ταλαντωτή, ο οποίος είναι συζευγμένος με ένα περιβάλλον που αποτελείται από ένα πλήθος αρμονικών ταλαντωτών στη θερμοκρασία του απόλυτου μηδενός. Όταν μελετάμε τη χρονική εξέλιξη του ταλαντωτή, εκτός από τη unitaly εξέλιξη του λόγω της δικής του χαμιλτονιανής μπορεί να υποστεί και ένα μόνο κβαντικό άλμα λόγω της ύπαρξης του περιβάλλοντος. Το άλμα αυτό είναι η ακτινοβολία στο περιβάλλον. Αυτό συμβαίνει επειδή το περιβάλλον είναι στη θερμοκρασία του απόλυτου μηδενός και επομένως όλοι οι ταλαντωτές του περιβάλλοντος βρίσκονται στη θεμελιώδη κατάσταση και επομένως δεν υπάρχει πιθανότητα απορρόφησης από το περιβάλλον. Στην περίπτωση αυτή υπάρχει μόνο ένας τελεστής κβαντικών αλμάτων και αυτός δεν είναι άλλος από τον τελεστή καταστροφής που είναι αυτός ακριβώς που περιγράφει την εκπομπή ενός κβάντουμ ενέργειας. Στην περίπτωση αυτή λοιπόν:

$$L_1 = a$$

$$p' = L[p] = -i\left[\hbar\omega\left(\alpha^* \alpha + \frac{1}{2}\right), p\right] + \left(\alpha p \alpha^* - \frac{1}{2} \alpha^* \alpha p - \frac{1}{2} \alpha^* \alpha p\right) \quad (4.27)$$

4.6 Από-συμφωνία

Η συστηματική μελέτη της εξέλιξης ενός ανοιχτού συστήματος, είτε από τα πειραματικά δεδομένα, είτε με τη χρήση της εξίσωσης Master μας δείχνει ότι ένα ανοιχτό κβαντικό σύστημα υφίσταται το φαινόμενο της από-συμφωνίας (αποσυμφώνηση). Ας δούμε τα κύρια χαρακτηριστικά αυτού του φαινομένου. Η χρονική εξέλιξη ενός συστήματος που υφίσταται από-συμφωνία είναι η ταχύτατη μεταβολή, και μάλιστα μείωση, των μη διαγώνιων στοιχείων του τελεστή πυκνότητας σε κάποια βάση. Ας πάρουμε ένα παράδειγμα. Ας υποθέσουμε ότι αρχικά έχουμε ένα qubit στην κατάσταση $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, δηλαδή:

$$p = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Αν μειωθούν μέχρι μηδενισμού τα μη διαγώνια στοιχεία θα καταλήξουμε στην κατάσταση

$$p = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| \quad (4.29)$$

η οποία είναι μεικτή κατάσταση.

Η βάση στην οποία συμβαίνει η διαγωνοποίηση λέγεται «ενδεικτική βάση» (pointer base). Ο χρόνος στον οποίο συμβαίνει αυτή η διαγωνοποίηση είναι γενικά ταχύτατος και λέγεται «χρόνος από-συμφωνίας».

Επομένως διαπιστώνουμε ότι αποτέλεσμα της από-συμφωνίας είναι να τρέπει μια κβαντική κατάσταση, η οποία χαρακτηρίζεται εγγενώς από μια κατανομή πιθανοτήτων, σε μια κλασσική κατανομή πιθανοτήτων. Με λίγα λόγια η εξέλιξη γίνεται σαν να εκτελεί το περιβάλλον συνεχώς μετρήσεις του ανοιχτού συστήματος μας στην ενδεικτική βάση.

Το τελευταίο συμπέρασμα μας αποκαλύπτει κάτι το πολύ σπουδαίο. Προσπαθώντας να μελετήσουμε το κυριότερο εμπόδιο στην κατασκευή ενός κβαντικού υπολογιστή, ανακαλύψαμε ότι το εμπόδιο αυτό εξηγεί την κλασικότητα του κόσμου που βλέπουμε.

Καμία αρχή της κβαντομηχανικής δεν αποκλείει το ενδεχόμενο ένα μακροσκοπικό αντικείμενο να βρίσκεται σε μια κατάσταση αβεβαιότητας θέσης ας πούμε. Για παράδειγμα η κβαντομηχανική δεν αποκλείει για την τηλεόραση του δωματίου μας να βρίσκεται στην κατάσταση:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \Psi \left(\vec{r} = \vec{A} \right) \right\rangle + \left| \Psi \left(\vec{r} = \vec{B} \right) \right\rangle \right) \quad (4.30)$$

όπου η θέση \vec{A} βρίσκεται στην άκρη του δωματίου και η θέση \vec{B} βρίσκεται στη μέση του δωματίου σε ένα άλλο τραπέζι. Ποτέ όμως δεν έχουμε διαπιστώσει εμπειρικά την ύπαρξη μιας τέτοιας κατάστασης. Όμως η από-συμφωνία μας δίνει την απάντηση. Ένα μακροσκοπικό αντικείμενο δεν μπορεί ούτε κατά προσέγγιση να θεωρηθεί απομονωμένο. Έτσι αν βρεθεί σε μια κατάσταση όπως η παραπάνω μέσα σε χρόνο μηδέν πρακτικά (10^{-43} sec) θα έχει βρεθεί με πιθανότητα 50% στη μέση του δωματίου και με πιθανότητα 50% στην άκρη του δωματίου, έτσι ώστε τελικά εμείς δεν καταλάβαμε τίποτα. Ποτέ δεν μπορούμε να δούμε την τηλεόραση στην entangled κατάσταση. (Αυτό είναι ακριβώς το πρόβλημα, αλλά και η λύση του, του παραδόξου της γάτας του Schödinger.) Ας δούμε τώρα πως μπορούμε να ποσοτικοποιήσουμε την από-συμφωνία. Δεδομένου τελεστή πυκνότητας ρ αν ορίσουμε την κατανομή πιθανότητας $p_i = p_{ii}$ τότε αποδεικνύεται ότι:

$$I(p_i) - S(\rho) \geq 0 \quad (4.31)$$

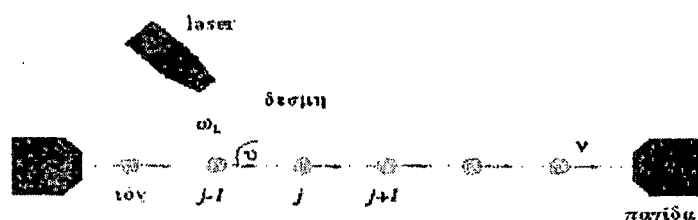
με το ίσον να ισχύει στην περίπτωση που ο ρ είναι διαγώνιος. Επομένως όσο μικρότερη η τιμή του $I(p_i) - S(\rho)$ τόσο πιο διαγώνιος είναι ο ρ , τόσο πιο κοντά στο κλασσικό είναι το σύστημα μας, άρα τόσο πιο από-συμφωνική είναι.

Υλοποίηση κβαντικών υπολογιστών

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: Παγωμένα παγιδευμένα ιόντα

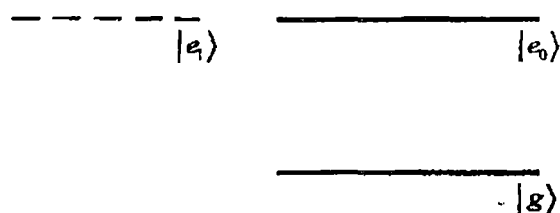
5.1 Περιγραφή της διάταξης

Η αρχιτεκτονική με τα παγωμένα ιόντα σε γραμμική παγίδα είναι η πρώτη ιστορικά που προτάθηκε αλλά και που υλοποιήθηκε.



Σχήμα 5.1: Διάταξη για υλοποίηση κβαντικού υπολογιστή στην αρχιτεκτονική cold trapped ions

Ως καταστάσεις 0 και 1 χρησιμοποιούμε δύο από τις χαμηλότερες ενεργειακά καταστάσεις του ιόντος, $|g\rangle$ και $|e_0\rangle$. Επίσης χρησιμοποιούμε μία ακόμα κατάσταση του ιόντος $|e_1\rangle$ η οποία χαρακτηρίζεται από την ίδια ενέργεια με την $|e_0\rangle$ αλλά έχει διαφορετικό μαγνητικό κβαντικό αριθμό στροφορμής, έτσι ώστε να μπορούμε να διεγείρουμε το ιόν από τη θεμελιώδη του κατάσταση είτε στην $|e_0\rangle$ είτε στην $|e_1\rangle$ κατά βούληση ρυθμίζοντας την πόλωση των παλμών laser. Οι υπόλοιπες καταστάσεις των ιόντων δεν παίζουν κανένα ρόλο, όπως επίσης και η κατάσταση $|e_1\rangle$ θα φροντίσουμε να μην προκύψει ως τελικό αποτέλεσμα σε καμία διεργασία.



Σχήμα 5.2: Τυπικές ενεργειακές στάθμες για την αρχιτεκτονική των παγωμένων παγιδευμένων ιόντων



Σχήμα 5.3: Ενεργειακές στάθμες για το μονοσθενές ιόν Ασβεστίου

Τα ιόντα βρίσκονται παγιδευμένα σε γραμμική παγίδα, έστω στη διεύθυνση του z , και σε ίσες περίπου αποστάσεις. Περισσότερες πληροφορίες για την παγίδευση των ιόντων. Κάθε ιόν βρίσκεται κατά προσέγγιση υπό την επίδραση δυναμικού ανισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή με $V_z \ll V_y, V_x$. Κάθε ιόν ελέγχεται από ένα laser καταλλήλου συχνότητας ώστε να προκαλεί τις κατάλληλες μεταβάσεις.

Το απαραίτητο entanglement επιτυγχάνεται μέσω των κανονικών τρόπων ταλάντωσης του μονοδιάστατου πλέγματος και μάλιστα συγκεκριμένα με τον κατώτατο κανονικό τρόπο ταλάντωσης, δηλαδή ταλάντωση του κέντρου μάζας (CM mode). Οι ταλαντώσεις του πλέγματος υφίστανται λόγω της σύνδεσης των ιόντων με ηλεκτροστατικές δυνάμεις. Μπορούμε δηλαδή να φανταστούμε την αλυσίδα των ιόντων σαν μια συστοιχία σωματιδίων συζευγμένων με ελατήρια των οποίων η προέλευση είναι στην πραγματικότητα οι ηλεκτροστατικές απώσεις.

Για την πραγματοποίηση των κβαντικών πυλών, ρυθμίζουμε τη συχνότητα των laser ώστε να είναι τόσο μικρότερη από τη συχνότητα μετάβασης από τη θεμελιώδη κατάσταση στη διεγερμένη, όσο η συχνότητα του CM mode. Τότε ταυτόχρονα με τις διεγέρσεις και αποδιεγέρσεις των ιόντων έχουμε και διεγέρσεις και αποδιεγέρσεις του CM mode. Συγκεκριμένα η χαμιλτονιανή αυτής της αλληλεπίδρασης είναι η:

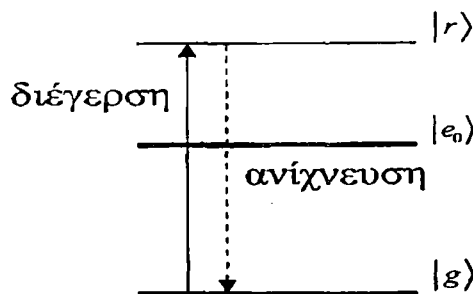
$$\hat{H}_{n,q} = k \left(|e_q\rangle_n \langle g|_n \alpha e^{-i\theta} + |g\rangle_n \langle e_q|_n \alpha^+ e^{i\theta} \right) \quad (5.1)$$

όπου k σταθερά για την οποία θα συζητήσουμε αργότερα, α^+ , α οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των φωτονίων του CM mode, $q=0,1$ ανάλογα με την πόλωση του laser, θ η αρχική φάση του laser και n ο αριθμός του ιόντος όπου δρα το laser. Η χαμιλτονιανή αυτή αν προσέξει κανείς περιγράφει απλώς τα αυτονόητα, δηλαδή διεγερση του ιόντος με ταυτόχρονη απορρόφηση φωτονίου και αποδιέγερση

του ιόντος με ταυτόχρονη εκπομπή φωτονίου. Προφανώς η κατάσταση των υπολοίπων ιόντων παραμένει αμετάβλητη.

Ο CM mode πρέπει αρχικά να είναι εντελώς παγωμένος, να βρίσκεται σε κατάσταση 0 φωνονίων ($|0\rangle$). Υπό την προϋπόθεση αυτή το CM mode μπορεί να βρεθεί, κατά τη διάρκεια των διεργασιών, είτε σε κατάσταση 0 φωνονίων ($|0\rangle$), είτε σε κατάσταση 1 φωτονίου ($|1\rangle$).

Τέλος να μελετήσουμε λίγο και τον τρόπο με τον οποίο κάνουμε τις μετρήσεις για να διαπιστώσουμε σε ποια κατάσταση βρίσκεται το ιόν. Η μέθοδος λέγεται "μέθοδος τοποθέτησης του ηλεκτρονίου στο ράφι (electron shelving). Για να εφαρμοστεί η μέθοδος αυτή χρειάζεται η ύπαρξη μιας ενεργειακής στάθμης $|r\rangle$, η οποία να βρίσκεται σε υψηλότερη ενέργεια από τις στάθμες που χρησιμοποιούμε για $|g\rangle$ και $|e_0\rangle$. Επίσης απαιτείται η ενεργειακή στάθμη αυτή να έχει πολύ μικρό χρόνο ζωής. Η μέθοδος είναι πολύ απλή. Ένα ισχυρό laser διεγείρει την μετάβαση $|g\rangle \rightarrow |r\rangle$. Αν το ιόν βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση $|g\rangle$, τότε διεγείρεται στην κατάσταση $|r\rangle$. Αυτή η κατάσταση όμως έχει πολύ μικρό χρόνο ζωής με αποτέλεσμα την αποδιέγερση του ιόντος στην κατάσταση $|g\rangle$ πάλι (δεν μπορεί να καταλήξει στην $|e_0\rangle$ διότι αυτή είναι μετασταθής). Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται και τελικά μετράμε ένα σήμα φθορισμού, το οποίο προέρχεται από τα φωτόνια της αποδιέγερσης $|r\rangle \rightarrow |g\rangle$. Αντίθετα αν το ιόν ήταν αρχικά στην κατάσταση $|e_0\rangle$, τότε δεν μπορεί να διεγερθεί και δεν παρατηρούμε κανένα σήμα με τη μέθοδο αυτή μπορούμε να διακρίνουμε τις καταστάσεις με ποσοστό επιτυχίας που προσεγγίζει το 100%. Μάλιστα ακόμα και αν το ιόν βρισκόταν αρχικά σε μια κατάσταση $\alpha|g\rangle + b|e_0\rangle$ με επαναλήψεις του πειράματος μπορούμε να εκτιμήσουμε τα $|\alpha|^2$ και $|\beta|^2$.



Σχήμα 5.4: electron shelving

5.2 Υλοποίηση Βασικών Πυλων

Ας δούμε τώρα αν αφήσουμε το σύστημα να αλληλεπιδράσει για χρόνο t ποιος είναι ο ορθομοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός $U = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ που δρα στην αρχική κατάσταση του συστήματος. Ορίζουμε $\frac{kt}{\hbar} = \phi$. Θα χρησιμοποιήσουμε αναπαράσταση με πίνακες.

$$|g\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |e_0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |e_1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = |0\rangle\langle 1| \quad \alpha^\dagger = |1\rangle\langle 0| \quad |0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Άρα

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n,0} &= k(|e_0\rangle_n \langle g|_n \alpha e^{-i\theta} + |g\rangle_n \langle e_0|_n \alpha^\dagger e^{i\theta}) = \\ &= k \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-i\theta} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} e^{i\theta} \right] = \\ &= k \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = k \hat{A} \end{aligned}$$

Ομοίως

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n,1} &= k(|e_1\rangle_n \langle g|_n \alpha e^{-i\theta} + |g\rangle_n \langle e_1|_n \alpha^\dagger e^{i\theta}) = \\ &= k \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-i\theta} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} e^{i\theta} \right] = \\ &= k \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = k \hat{C} \end{aligned}$$

Έχουμε ότι :

$$\hat{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{B} \quad \hat{A}^3 = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}$$

Άρα :

$$\hat{A}^{2n+1} = \hat{A} \quad \hat{A}^{2n} = \hat{B}$$

Όμοια:

$$\hat{C}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{D} \quad \hat{C}^3 = \hat{D}\hat{C} = \hat{C}$$

Άρα:

$$\hat{C}^{2n+1} = \hat{C} \quad \hat{C}^{2n} = \hat{D}$$

Τελικά:

$$\begin{aligned} U_0 &= e^{-\frac{\hat{H}_I}{\hbar}} = e^{-\frac{k\hat{A}}{\hbar}} = e^{-i\phi\hat{A}} = \hat{I} + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-i\phi\hat{A})^n}{n!} = \\ &= \hat{I} + \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i\phi\hat{A})^{2n+1}}{(2n+1)!} + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-i\phi\hat{A})^{2n}}{(2n)!} = \\ &= \hat{I} - \hat{B} - i\hat{A} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n+1}}{(2n+1)!} + \hat{B} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n}}{(2n)!} = \hat{I} - \hat{B} - i\hat{A} \sin \phi + \hat{B} \cos \phi = \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -i \sin \phi e^{i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i \sin \phi e^{-i\theta} & \cos \phi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

και

$$\begin{aligned}
U_1 &= e^{-\frac{\hat{H}_1 t}{\hbar}} = e^{-\frac{k\hat{C}}{\hbar} t} = e^{-i\phi\hat{C}} = \hat{I} + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-i\phi\hat{C})^n}{n!} = \\
&= \hat{I} - \hat{D} - i\hat{C} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n+1}}{(2n+1)!} + \hat{D} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n}}{(2n)!} = \hat{I} - \hat{D} - i\hat{C} \sin \phi + \hat{D} \cos \phi = \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & 0 & 0 & -i \sin \phi e^{i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -i \sin \phi e^{-i\theta} & 0 & 0 & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Για να υλοποιήσουμε την controlled-not gate πράττουμε τα εξής:

1. στο m-οστό ιόν ασκούμε έναν παλμό με $\theta = 0, \phi = \pi/2, q = 0$.
2. στο n-οστό ιόν ασκούμε έναν παλμό με $\theta = 0, \phi = \pi, q = 1$.
3. Επαναλαμβάνουμε το 1.

Αυτές οι πράξεις αντιστοιχούν στην δράση των πανάκων

5.3 Από-συμφωνία

Κυριότερες πηγές από-συμφωνία στην αρχιτεκτονική αυτή είναι αυτές που επιδρούν στους τρόπους ταλάντωσης της αλυσίδας των ιόντων (motional state decoherence). Οι χαρακτηριστικοί χρόνοι αυτού του είδους της από-συμφωνίας μπορούν σε ιδανικές συνθήκες να φτάσουν μέχρι και 0,1 sec. Ο χρόνος αυτός είναι πολύ μεγάλος σε σχέση με τους αντίστοιχους χρόνους σε άλλες αρχιτεκτονικές, ωστόσο και οι διεργασίες σε αυτήν την αρχιτεκτονική είναι αντίστοιχα αργές. Υποτίθεται ότι παγώνουμε τον κατώτατο κανονικό τρόπο ταλάντωσης της αλυσίδας στην κατάσταση $|0\rangle$ και χρησιμοποιούμε την κατάσταση $|1\rangle$ για να μεταφέρουμε πληροφορία σε άλλα ιόντα της αλυσίδας. Η διαδικασία αυτή όμως δεν μπορεί να εφαρμοστεί ιδανικά διότι:

1. Υπάρχει αστάθεια στις παραμέτρους των παγίδων. Προφανώς δεν μπορούν να ελεγχθούν απόλυτα όλες οι παράμετροι και υπάρχουν διαταραχές αλλά και απώλειες φάσεως στα εναλλασσόμενα μεγέθη.
2. Υπάρχει πάντα και κάποια μικροκίνηση των ιόντων.

3. Η άπωση coulomb μεταξύ των ιόντων δεν είναι δύναμη που υπακούει στο νόμο του Hooke, επομένως τρέπει τους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης σε αναρμονικούς.
4. Ακριβώς επειδή η ενέργεια των φωνονίων είναι πολύ μικρή ακόμα και στις τέλειες εργαστηριακές συνθήκες μπορεί να υπάρχει παραμένουσα ακτινοβολία στο περιβάλλον που να προκαλεί διεγέρσεις.
5. Υπάρχουν άλλοι $3N - 1$ τρόποι ταλάντωσης οι οποίοι επειδή δεν μπορεί το δυναμικό της παγίδας να είναι απόλυτα αρμονικό, βρίσκονται σε σύζευξη μεταξύ τους. Επομένως αν δεν έχουμε παγώσει όλους τους τρόπους ταλάντωσης υπάρχει περίπτωση να συμβεί διεγερση του CM mode λόγω ζεύξης με άλλους μη παγωμένους τρόπους ταλάντωσης.
6. Τέλος πρέπει να θεωρήσουμε ότι αν και η διάταξη βρίσκεται σε συνθήκες υπερυψηλού κενού (10^{-8} Pa) μπορούν να συμβούν ανελαστικές κρούσεις με μόρια του περιβάλλοντος αερίου.

Φυσικά πάντα υπάρχει από-συμφωνία που επιδρά στις καταστάσεις των ιόντων (internal state decoherence). Τα ιόντα μέσα στις παγίδες είναι τόσο καλά απομονωμένα που κύριο αίτιο αυτής της μορφής της από-συμφωνίας είναι η ζεύξη με τις καταστάσεις του κενού, δηλαδή μιλάμε για το φαινόμενο της αυθόρμητης αποδιέγερσης. Ωστόσο επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε μετασταθείς καταστάσεις για $|e_0\rangle$ οι οποίες έχουν πολύ μικρή ζεύξη με τις καταστάσεις του κενού και έτσι το φαινόμενο αυτό είναι αμελητέο. Συγκεκριμένα έχουμε πετύχει χαρακτηριστικούς χρόνους από-συμφωνίας της τάξεως των δευτερολέπτων για ιόντα ασβεστίου και της τάξεως των λεπτών ή και ωρών για ιόντα βηρυλλίου.

Τέλος υπάρχουν και πηγές σφαλμάτων που εστιάζονται στον έλεγχο των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ιόντων και των δεσμών laser (operational decoherence). Αυτές εστιάζονται σε:

1. Απαιτείται ακριβής έλεγχος της διάρκειας του παλμού κατά τις αλληλεπιδράσεις, ο οποίος είναι δυνατός μεν αλλά έως ενός σημείου.
2. Επειδή κάθε laser έχει μια γωνιακή κατανομή ισχύος, υπάρχει πάντα πιθανότητα το laser να επηρεάσει και το διπλανό ιόν.
3. Τέλος πάντα υπάρχει περίπτωση να συμβούν μεταπτώσεις μη συντονισμού.

5.4 Μέθοδοι παγίδευσης ιόντων

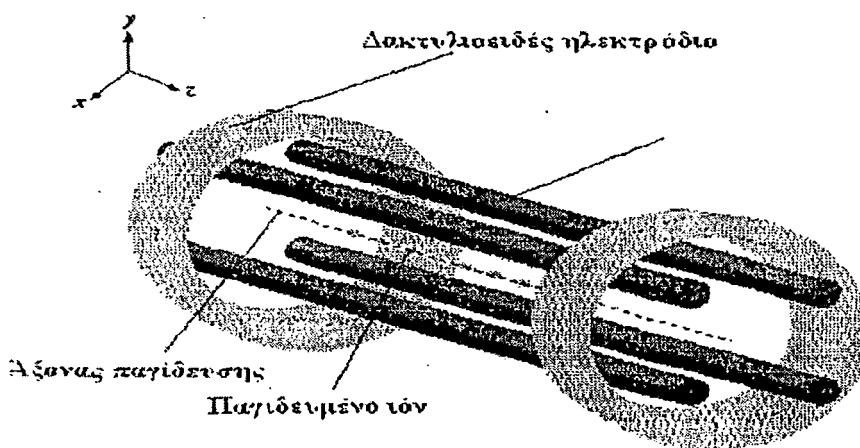
Ας μελετήσουμε τη μέθοδο με την οποία παγιδεύουμε τα ιόντα. Η πρώτη ιδέα είναι να χρησιμοποιήσουμε ηλεκτροστατικό πεδίο στο κενό τέτοιο ώστε το

ηλεκτροστατικό δυναμικό να παρουσιάζει ελάχιστα και μέγιστα, ώστε τα ιόντα να παγιδεύονται σε αυτά (τα θετικά ιόντα στα ελάχιστα και τα αρνητικά ιόντα στα μέγιστα). Ωστόσο οι νόμοι του Maxwell έρχονται αντιμέτωποι με τους σκοπούς μας αφού γνωρίζουμε ότι στο κενό, ισχύει για το ηλεκτροστατικό δυναμικό η εξίσωση του Laplace $\nabla^2 V = 0$. Όπως είναι γνωστό οι λύσεις αυτής της εξίσωσης δεν έχουν ακρότατα, επομένως η δημιουργία παγίδων για ιόντα με τέτοια μέθοδο αποκλείεται. Υπάρχουν σήμερα δύο μέθοδοι παγίδευσης ιόντων, οι παγίδες Penning που χρησιμοποιούν στατικά ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία, και οι παγίδες Paul που χρησιμοποιούν εναλλασσόμενα ηλεκτρικά πεδία. Μάλιστα ο Paul έλαβε το βραβείο Nobel το 1990 για την εργασία του αυτή.

Θα μελετήσουμε από εδώ και κάτω μόνο τη λειτουργία της γραμμικής παγίδας Paul, η οποία και εικονίζεται στο επόμενο σχήμα. Η διάταξη αποτελείται από δύο δακτυλιοειδή ηλεκτρόδια που θεωρούμε ότι απέχουν απόσταση $2z_0$ και έχουν ακτίνα r_0 και τέσσερα ραβδοειδή ηλεκτρόδια που είναι τοποθετημένα όπως φαίνεται στο σχήμα (5.5). Η ευθεία που ενώνει τα κέντρα των δύο δακτυλιοειδών ηλεκτροδίων λέγεται άξονας παγίδευσης και σε αυτόν τον άξονα θα βρίσκεται η αλυσίδα των παγιδευμένων ιόντων. Την αρχή των αξόνων τη θεωρούμε ακριβώς στο κέντρο της παγίδας.

Ας δούμε τώρα πως λειτουργεί αυτή η διάταξη. Ασκούμε σε δύο απέναντι ραβδοειδή ηλεκτρόδια μια τάση της μορφής:

$$\Phi_0 = U_0 + U_0 \cos(\Omega t) \quad (5.2)$$



Σχήμα 5.1: Γραμμικά παγίδα Paul

Τα άλλα δύο ραβδοειδή ηλεκτρόδια είναι γειωμένα. Αν λύσουμε το ηλεκτροστατικό πρόβλημα (την εξίσωση Laplace) βρίσκουμε ότι το ηλεκτροστατικό δυναμικό στη περιοχή του άξονα παγίδευσης ισούται με:

$$\Phi = \frac{U_0 + V_0 \cos(\Omega t)}{2r_0^2} (\chi^2 - y^2) \quad (5.3)$$

Η κίνηση ενός ιόντος που θα βρεθεί στην περιοχή του άξονα παγίδευσης περιγράφεται από τους νόμους του Newton.

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} = q\vec{E} = -q\vec{\nabla}\Phi \quad (5.4)$$

ή

$$\ddot{\chi} + \frac{q}{mr_0^2} [U_0 + V_0 \cos(\Omega t)] \chi = 0 \quad (a)$$

$$\ddot{y} - \frac{q}{mr_0^2} [U_0 + V_0 \cos(\Omega t)] y = 0 \quad (b) \quad (5.5)$$

$$\ddot{z} = 0 \quad (c)$$

Αδιαστατοποιούμε τις εξισώσεις αντικαθιστώντας:

$$\alpha = \frac{4qU_0}{mr_0^2\Omega^2} \quad b = \frac{2qV_0}{mr_0^2\Omega^2} \quad \zeta = \frac{\Omega t}{2} \quad (5.6)$$

και τότε οι εξισώσεις γράφονται:

$$\frac{d^2 x}{d\zeta^2} + [\alpha + 2b\cos(2\zeta)]\chi = 0 \quad (a)$$

(5.7)

$$\frac{d^2 y}{d\zeta^2} + [\alpha + 2b\cos(2\zeta)]y = 0 \quad (b)$$

Εφ' όσον ισχύει ότι $\alpha \ll b^2 \ll 1$ τότε η λύση του συστήματος προσεγγιστικά είναι:

$$\chi(t) = \chi_0 \left[1 + \frac{b}{2} \cos(\Omega t) \right] \cos(\omega_x t + \varnothing_x) \quad (a)$$

(5.8)

$$y(t) = y_0 \left[1 - \frac{b}{2} \cos(\Omega t) \right] \cos(\omega_y t + \varnothing_y) \quad (b)$$

όπου

$$\omega_x = \frac{\Omega}{2} \sqrt{\frac{b^2}{2} + \alpha} \quad \omega_y = \frac{\Omega}{2} \sqrt{\frac{b^2}{2} - \alpha} \quad (5.9)$$

Αφού έχουμε υποθέσει ότι $b^2 \ll 1$ οι παραπάνω εξισώσεις περιγράφουν ταλαντώσεις συχνότητας ω_x και ω_y στους άξονες χ και y αντίστοιχα, οι οποίες παρουσιάζουν μια μικρή διακύμανση στο πλάτος τους με συχνότητα Ω . Η πρώτη

κίνηση ονομάζεται «μόνιμη κίνηση» (secular motion), ενώ οι μικροταλαντώσεις του πλάτους της πρώτης ονομάζονται «μικροκίνηση» (micromotion). Η τελευταία μπορεί να περιοριστεί με διάφορες μεθόδους όπως επιπλέον ηλεκτρόδια. Αν σκεφτούμε μόνο την μόνιμη κίνηση, το ιόν κινείται σαν να βρίσκεται υπό την επίδραση δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή και συγκεκριμένα του:

$$V = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \quad (5.10)$$

Το δυναμικό αυτό ονομάζεται «ψευδοδυναμικό» (pseudo potential). Συνήθως μάλιστα στις εφαρμογές έχουμε $U_0 = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \Rightarrow \omega_x = \omega_y$, επομένως το ψευδοδυναμικό μπορεί να γραφεί:

$$V = \frac{1}{2} m \omega_r^2 r^2 \quad (5.11)$$

$$\omega_r = \omega_x = \omega_y = \frac{\Omega b}{2\sqrt{2}} = \frac{qV_0}{\sqrt{2}mr_0^2\Omega} \quad (5.12)$$

Με τον τρόπο αυτό περιορίσαμε την κίνηση στο επίπεδο το κάθετο στον άξονα παγίδευσης. Πρέπει να περιορίσουμε την κίνηση και στον άξονα παγίδευσης. Για να συμβεί αυτό εφαρμόζουμε δυναμικό U_1 στα δύο δακτυλιοειδή ηλεκτρόδια. Το δυναμικό που προκύπτει κοντά στο κέντρο της παγίδας είναι αρμονικό της μορφής:

$$V = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (5.13)$$

με το ω_z να υπολογίζεται από την σχέση:

$$\frac{1}{2} m \omega_z^2 z_0^2 = \xi q U_1 \quad (5.14)$$

όπου το ξ δίνει το ποσοστό του ηλεκτρικού πεδίου που προκύπτει από τα δακτυλιοειδή ηλεκτρόδια το οποίο βρίσκεται στο εσωτερικό της παγίδας.

Επομένως μετά και από αυτή τη προσθήκη έχουμε πλήρη χωρική παγίδευση του ιόντος μέσα σε ένα αρμονικό ψευδοδυναμικό:

$$V = \frac{1}{2} m \omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (5.15)$$

Ας μελετήσουμε τώρα τις χαρακτηριστικές τιμές των παραπάνω μεγεθών. Χαρακτηριστικές διαστάσεις τις παγίδας είναι $Z_0 \approx 5mm$ και $r_0 \approx 1.2mm$.

Τυπικές τιμές για τις τάσεις που ασκούνται είναι $U_1 \approx 2kV$, $V_0 \approx 300V - 800V$ και $\Omega \approx 100MHz - 115MHz$. Με βάση τις παραπάνω τιμές για μονοθενή ιόντα ασβεστίου προκύπτουν $f_r = \frac{\omega_r}{2\pi} \approx 1,4MHz - 2,0MHz$ και $f_z = \frac{\omega_z}{2\pi} \approx 0,7MHz$. Με

βάση αυτά το βάθος του πηγαδιού ψευδοδυναμικού υπολογίζεται περίπου ίσο με $V_r \approx 820eV$ και $V_r \approx 100eV$.

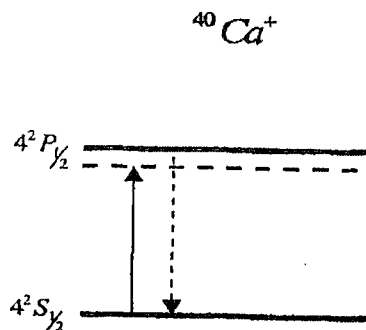
Από τα παραπάνω βλέπουμε ότι το ιόν είναι πολύ πιο παγιδευμένο στην κίνηση του στο επίπεδο το κάθετο στον άξονα παγίδευσης από ότι στον άξονα παγίδευσης. Για το λόγο αυτό θεωρούμε ότι τα ιόντα κινούνται μόνο κατά μήκος του άξονα.

5.5 Ψύξη βαθμών ελευθερίας με χρήση laser

Η πρώτη μέθοδος ψύξης που εφαρμόζεται για τα ψύζουμε τα ιόντα είναι η «ψύξη Doppler» (Doppler cooling). Η μέθοδος αυτή βασίζεται στο φαινόμενο Doppler. Ως γνωστόν ένα άτομο ή ιόν που έχει μια συγκεκριμένη φασματική γραμμή που αντιστοιχεί σε μετάβαση ενέργειας ΔE , απορροφάει σε ελαφρώς μετατοπισμένες συχνότητες, όταν αυτό κινείται ως προς την πηγή του φωτός. Ισχύει μάλιστα για αυτό το φαινόμενο ο γνωστός τύπος από τη ειδική σχετικότητα:

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \frac{u}{c}$$

Εκμεταλλευόμενοι το παραπάνω ακτινοβολούμε το ιόν με φωτόνια ενέργειας $\Delta E - \varepsilon$. Τα φωτόνια αυτά δεν μπορούν να απορροφηθούν από οποιοδήποτε ιόν, αλλά τα ιόντα που απομακρύνονται από την πηγή απορροφούν αυτήν την ακτινοβολία. Κατόπιν τα ιόντα εκπέμπουν ξανά πέφτοντας πάλι στη θεμελιώδη στάθμη. Ωστόσο το φωτόνια που εκπέμπονται, εκπέμπονται σε τυχαίες διευθύνσεις με αποτέλεσμα η μέση μετατόπιση Doppler να είναι μηδέν και επομένως η μέση ενέργεια των εκπεμπόμενων φωτονίων είναι ΔE . Έτσι το ιόν απορρόφησε ενέργεια $\Delta E - \varepsilon$ και εξέπεμψε ενέργεια κατά μέση τιμή ΔE , με αποτέλεσμα σταδιακά να ψύχεται. Τα παραπάνω φαίνονται και στο παρακάτω σχήμα (5.6).

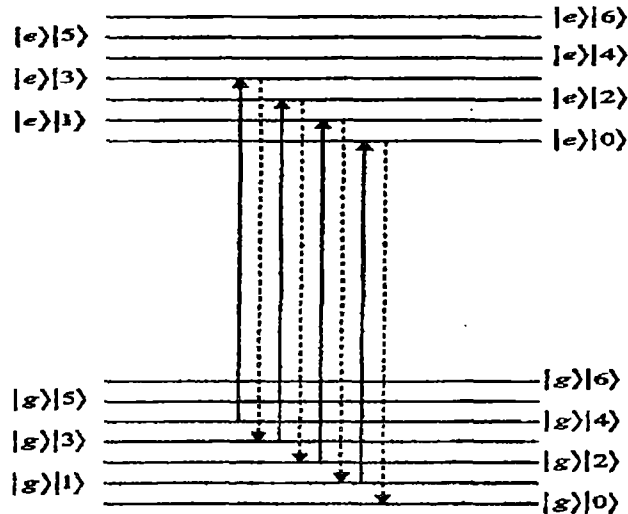


Σχήμα 5.6: Ψύξη Doppler για ιόντα ασβεστίου

Η δεύτερη μέθοδος ψύξης είναι η «sideband ψύξη» (sideband cooling - ψύξη πλευρικής ζώνης συχνοτήτων). Η sideband ψύξη βασίζεται σε μια πάρα πολύ απλή ιδέα, θεωρούμε στο άτομο που χρησιμοποιούμε δύο ενεργειακές στάθμες, την θεμελιώδη και μια διεγερμένη, οι οποίες έχουν ενεργειακή διαφορά ΔE .

Όμως το σύστημα μπορεί να έχει και επιπλέον ενέργεια αν είναι διεγερμένα ένα, δύο ή περισσότερα φωτόνια, για τα οποία θα θεωρήσουμε ότι κάθε ένα από αυτά έχει ενέργεια \mathcal{E} . Έτσι η εικόνα που έχουμε για το ενεργειακό φάσμα του συστήματος είναι αυτή του σχήματος (5.7).

Διεγείρουμε τώρα το άτομο ακτινοβολώντας το με φωτόνια ενέργειας $\Delta E - \mathcal{E}$. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μετάβαση του ατόμου από τη θεμελιώδη του κατάσταση στη πρώτη θεμελιώδη. Επειδή όμως το φωτόνιο έχει ενέργεια κατά ένα φωτόνιο μικρότερη από την απαιτούμενη για μια τέτοια μετάβαση, η μετάβαση αυτή συνοδεύεται και από την καταστροφή ενός φωτονίου.



Σχήμα 5.7: Sideband ψύξη

Το άτομο κατά τα γνωστά δεν μπορεί να μείνει για πολύ στην διεγερμένη κατάσταση αλλά θα πέσει στη θεμελιώδη ακτινοβολώντας ένα φωτόνιο. Δεν απαγορεύεται από κανένα νόμο το άτομο να πέσει σε οποιαδήποτε από τις καταστάσεις της ομάδας της θεμελιώδους στάθμης, δηλαδή δεν απαγορεύεται η εκπομπή του φωτονίου να συνοδεύεται από δημιουργία ή καταστροφή φωτονίων. Μάλιστα επειδή το \mathcal{E} είναι πολύ μικρότερο όχι μόνο από το ΔE αλλά και το $k_B T$, οι πιθανότητες να βρεθεί το σύστημα σε οποιαδήποτε από αυτές τις καταστάσεις, σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann είναι περίπου η ίδια. Αυτό σημαίνει ότι σαν μέσο όρο έχουμε μια εκπομπή που δεν συνοδεύεται ούτε από δημιουργία, ούτε από

καταστροφή φωνονίων, δηλαδή η μέση τιμή της ενέργειας του εκπεμπόμενου φωτονίου είναι ΔE .

Η όλη διαδικασία είχε τελικά ως αποτέλεσμα να έχουμε μείωση της ενέργειας του συστήματος κατά ε , δηλαδή καταστροφή ενός φωτονίου. Αν αφήσουμε να επαναληφθεί πολλές φορές αυτή η διαδικασία θα έχουμε μια εικόνα σαν αυτή του σχήματος (5.7) και θα οδηγηθούμε τελικά στο πλήρες πάγωμα της αλυσίδας των ατόμων. Μάλιστα όταν το άτομο βρεθεί στη κατώτερη κατάσταση $|g\rangle|0\rangle$, δεν μπορεί να απορροφήσει πλέον τα φωτόνια που του δίνουμε αφού δεν υπάρχει κατάσταση $|e\rangle|-1\rangle$ για να ανεβεί σε αυτήν. Επομένως η διαδικασία φυσιολογικά σταματάει όταν έχουμε επιτύχει πλήρη ψύξη.

Γενικώς πρώτα εφαρμόζουμε ψύξη Doppler και κατόπιν ψύξη sideband. Αυτό συμβαίνει διότι προφανώς δεν γίνεται να εφαρμόσουμε κατ' ευθείαν ψύξη sideband όταν το εύρος της φασματικής γραμμής της ψυκτικής μετάβασης Γ είναι μεγαλύτερο από την ενέργεια ενός φωτονίου. Τότε είναι προφανές ότι δεν μπορούμε με ακρίβεια να εκτελέσουμε μεταβάσεις που μας οδηγούν στη διεγερμένη κατάσταση μείον ένα φωτόνιο. Το εύρος των φασματικών γραμμών είναι μεγάλο για το λόγο που εξηγήσαμε στην αρχή της παραγράφου λόγω φαινομένου Doppler όταν τα ιόντα κινούνται με μεγάλες ταχύτητες. Επομένως ξεκινώντας με θερμά ιόντα εφαρμόζουμε ψύξη Doppler όσο ισχύει $\Gamma > \omega_{ph}$ και κατόπιν ψύχουμε εντελώς τα ιόντα με ψύξη sideband.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: Κβαντική Ηλεκτροδυναμική Κοιλότητα

6.1 Περιγραφή της διάταξης

Τα qubit στην αρχιτεκτονική της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής κοιλότητας (cavity QED) υλοποιούνται σε δύο ειδών συστήματα.

1. Άτομα, όπου $0 \leftrightarrow 1$ = θεμελιώδης κατάσταση $0 \leftrightarrow 1$ πρώτη διεγερμένη κατάσταση.
2. Κοιλότητα (cavity), όπου $0 \leftrightarrow 1$ = κατάσταση \leftrightarrow φωτονίων.

Η όλη διάταξη βρίσκεται σε θερμοκρασία μικρότερη του 1°K ώστε η από-συμμεωνία λόγω θερμικών φαινομένων να είναι ικανοποιητικά αργό.

Τα δύο παραπάνω είδη qubit μπορούν να χρησιμοποιηθούν με δύο τρόπους:

1. Ως qubit τα άτομα και ως φορείς πληροφορίας η κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλότητα.
2. Ως qubit η κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλότητα και ως φορείς πληροφορίας τα άτομα.

Γενικώς προτιμάται η πρώτη επιλογή, γιατί σε αυτήν μπορούμε πολύ εύκολα να κάνουμε τις μετρήσεις με τη μέθοδο του (electron shelving), ενώ στη δεύτερη επιλογή το να μετρήσει κανείς αν μια κοιλότητα έχει ή δεν έχει ένα φωτόνιο δεν είναι καθόλου εύκολο ζήτημα.

Η αλληλεπίδραση άτομο cavity μπορεί να είναι είτε «on-resonant» είτε «off-resonant» ανάλογα με το αν η ενεργειακή διαφορά της θεμελιώδους στάθμης του ατόμου και της πρώτης διεγερμένης συμπίπτει με κάποια από τις χαρακτηριστικές καταστάσεις (modes) της κοιλότητας ή όχι. Οι χαρακτηριστικές καταστάσεις της cavity οι μορφές των ηλεκτρομαγνητικών πεδίων που μπορούν να υπάρξουν μέσα σε αυτή. Οι καταστάσεις αυτές είναι περιορισμένες στο πλήθος ακριβώς επειδή η κοιλότητα επιβάλλει συνοριακές συνθήκες στα ηλεκτρομαγνητικά πεδία.

Οι χαρακτηριστικές καταστάσεις εξαρτώνται από τις διαστάσεις και το σχήμα της κοιλότητας. Οι χαμιλτονιανές των δύο αυτών αλληλεπιδράσεων είναι οι παρακάτω:

$$H_{on} = i\hbar\Omega_1 (\sigma_- \alpha^+ - \sigma_+ \alpha) \quad (a)$$

(6.1)

$$H_{off} = \frac{\hbar\Omega_2}{2} \alpha^+ \alpha (|e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g|) \quad (b)$$

όπου:

1. Ω_1 η συχνότητα του φωτονίου
2. Ω_2 η συχνότητα της μετάβασης από την πρώτη διεγερμένη κατάσταση

του ατόμου στη θεμελιώδη

3. $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$, ο τελεστής δημιουργίας του ατόμου.

4. $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$, ο τελεστής καταστροφής του ατόμου.

5. α^+ , α τελεστές δημιουργίας και καταστροφής αντίστοιχα του φωτονίου στην κοιλότητα.

Επίσης χρησιμοποιούνται οι ζώνες Ramsey, οι οποίες δεν είναι άλλο από 2D πεδία με τα οποία στρέφουμε κατά βούληση τις ατομικές καταστάσεις, γύρω από τον άξονα που ορίζει η διεύθυνση του πεδίου.

Χρησιμοποιώντας το φαινόμενο Stark μπορούμε να φέρουμε το σύστημα είτε σε κατάσταση on-resonant είτε σε κατάσταση off-resonant κατά βούληση.

6.2 Υλοποίηση των βασικών πυλών

Χρησιμοποιώντας on-resonant αλληλεπίδραση μπορούμε να μεταφέρουμε την κατάσταση του ατόμου στην κοιλότητα και αντίστροφα. Ας το δούμε αυτό αναλυτικά.

$$\sigma_+ = |e\rangle\langle g| \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (a)$$

$$\sigma_- = |g\rangle\langle e| \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (b) \quad (6.2)$$

$$\alpha^+ = |1\rangle\langle 0| \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (c)$$

$$\alpha = |0\rangle\langle 1| \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (d)$$

Άρα :

$$\begin{aligned} H_{om} &= i\hbar\Omega_1 (\sigma_- \alpha^+ - \sigma_+ \alpha) = \\ &= i\hbar\Omega_1 \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= i\hbar\Omega_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = i\hbar\Omega_1 \hat{A} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Εύκολα βρίσκουμε ότι:

$$\hat{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\hat{B} \quad (a)$$

$$\hat{A}^3 = -\hat{A}\hat{B} = -\hat{A} \quad (b)$$

(6.4)

$$\hat{A}^4 = -\hat{A}\hat{A} = \hat{B} \quad (c)$$

$$\hat{A}^5 = \hat{B}\hat{A} = \hat{A} \quad (d)$$

Άρα:

$$\hat{A}^{2n+1} = (-1)^n \hat{A} \quad (a)$$

(6.5)

$$\hat{A}^{2n} = (-1)^n \hat{B} \quad (b)$$

Επομένως ο ορθομοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός που θα υποστεί το σύστημα άτομο \otimes κοιλότητα αν εκτεθεί για t σε τέτοια αλληλεπίδραση είναι:

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} H_{int} t} = e^{\Omega t \hat{A}} = e^{\phi \hat{A}}$$

$$= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi^n \hat{A}^n}{n!} = \hat{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^{2n+1} \hat{A}^{2n+1}}{(2n+1)!} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi^{2n} \hat{A}^{2n}}{(2n)!} =$$

$$= \hat{I} - \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n+1}}{(2n+1)!} + \hat{B} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n}}{(2n)!} - \hat{B} = \hat{I} - \hat{B} - i \sin \phi \hat{A} + \cos \phi \hat{B} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\phi) & \sin(\phi) & \sin(\phi) \\ 0 & 0 & -\sin(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Αν φροντίσουμε ο χρόνος αλληλεπίδρασης να είναι τέτοιος ώστε $\phi = \pi/2$ τότε :

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε αρχικά την κοιλότητα στην κατάσταση $|0\rangle$ και το άτομο σε μία αρχική κατάσταση $\Psi = a|g\rangle + b|e\rangle$. Τότε

$$\Psi_m = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

$$\Psi_m = U\Psi_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

δηλαδή η κατάσταση του ατόμου στην κοιλότητα.

Αντίστοιχα αν είχαμε αρχικά το άτομο στην θεμελιώδη κατάσταση και την κοιλότητα σε μία κατάσταση $\Psi = a|0\rangle + b|1\rangle$. Τότε

$$\Psi_m = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

$$\Psi_m = U\Psi_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

Αρκεί πλέον να κάνουμε μια στροφή της κατάστασης κατά π γύρω από τον άξονα Z , οπότε η κατάσταση του ατόμου θα γίνει:

$$\sigma_z \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

Για να υλοποιήσουμε τώρα τη πύλη controlled – not πρέπει να πετύχουμε διαδικασία η οποία να αλλάξει την κατάσταση του διερχόμενου ατόμου ανάλογα με την κατάσταση της κοιλότητας. Αυτό το επιτυγχάνουμε με off-resonant αλληλεπίδραση. Συγκεκριμένα:

$$\begin{aligned}
H_{\text{off}} &= \frac{\hbar\Omega_2}{2} \alpha^+ \alpha (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) = \\
&= \frac{\hbar\Omega_2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\
&= \frac{\hbar\Omega_2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\Omega_2}{2} \hat{A}
\end{aligned} \tag{6.13}$$

Παρατηρούμε ότι:

$$\hat{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{B} \tag{a} \tag{6.14}$$

$$\hat{A}^3 - \hat{B}\hat{A} = \hat{A} \tag{b}$$

Επομένως:

$$\hat{A}^{2n+1} = \hat{A} \tag{a} \tag{6.15}$$

$$\hat{A}^{2n} = \hat{B} \tag{b}$$

Επομένως ο unitary μετασχηματισμός που θα υποστεί τα συστήματα κοιλότητα ⊗ άτομο αν εκτεθεί για χρόνο t σε τέτοια αλληλεπίδραση είναι:

$$\begin{aligned}
U &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_{\text{off}} t} = e^{-i \frac{\Omega_2 t}{2} \hat{A}} = e^{-i\phi \hat{A}} = \\
&= \hat{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\phi)^n \hat{A}^n}{n!} = \hat{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\phi)^{2n+1} \hat{A}^{2n+1}}{(2n+1)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\phi)^{2n} \hat{A}^{2n}}{(2n)!} = \\
&= \hat{I} - i \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n+1}}{(2n+1)!} + \hat{B} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n}}{(2n)!} - \hat{B} = \hat{I} - \hat{B} - i \sin \phi \hat{A} + \cos \phi \hat{B} = \\
&\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \phi + i \sin \phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \phi - i \sin \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix} \tag{6.16}
\end{aligned}$$

Αν φροντίσουμε ο χρόνος αλληλεπίδρασης να είναι τέτοιος ώστε $\phi = \pi/2$ τότε:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \tag{6.17}$$

Πριν το άτομο εισέλθει στην κοιλότητα το βάζουμε να διέλθει από μια ζώνη Ramsey, η οποία θα προκαλέσει μια στροφή κατά $-\pi/2$ γύρω από τον άξονά y . Ομοίως αφού αυτό εξέλθει από την cavity θα το περάσουμε από μια ζώνη Ramsey, η οποία θα προκαλέσει μια στροφή γύρω από τον άξονα y κατά $\pi/2$.

Η πρώτη στροφή θα είναι μια μεταβολή της κατάστασης του ατόμου που δίνεται από τον πίνακα:

$$U_1 = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_y} = \frac{I + i\sigma_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.18)$$

ενώ η δεύτερη :

$$U_2 = e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y} = \frac{I - i\sigma_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

Άρα η συνολική διαδικασία που υπέστη το σύστημα cavity \otimes άτομο δίνεται από τον unitary μετασχηματισμό:

$$\begin{aligned} U_2 U U_1 &= \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.20)$$

Το αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας είναι τελικά το εξής. Αν το άτομο βρίσκεται αρχικά σε μια κατάσταση $\Psi = a|g\rangle + b|e\rangle$ και η κοιλότητα βρίσκεται στην κατάσταση $|0\rangle$ τότε:

$$\Psi_{in} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

$$\Psi_{fin} = U \Psi_{in} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (6.22)$$

Ενώ αν η κοιλότητα βρίσκεται στην κατάσταση $|1\rangle$, τότε :

$$\Psi_{in} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \\ b \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

$$\Psi_{f,m} = U\Psi_{in} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \\ b \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes i \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

Η κατάσταση του ατόμου $i \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$ είναι μη διαχωρίσιμη από την κατάσταση $\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$ αφού διαφέρουν μόνο κατά μια global φάση. Έτσι πλέον επιτύχαμε την αναστροφή του qubit του ατόμου ελεγχόμενα από το qubit της κοιλότητας.

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω για να υλοποιήσουμε την πύλη controlled-not αρκεί,

1. Μεταφέρουμε την κατάσταση του controlled qubit από το άτομο στην cavity.
2. Υποβάλλουμε στην ανωτέρω διαδικασία το target qubit.
3. Επαναφέρουμε την κατάσταση του controlled qubit από την cavity σε ένα άτομο αρχικά στην κατάσταση $|g\rangle$.

6.3 Από-συμφωνία

Η αρχιτεκτονική που χρησιμοποιεί η κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλότητα είναι η πιο καθαρή από άποψη από-συμφωνίας. Τα αίτια της από-συμφωνίας είναι περιορισμένα στον αριθμό. Γενικώς υπάρχουν οι υπόλοιπες ενεργειακές στάθμες του ατόμου, αλλά η επίδραση αυτών στις διεργασίες που απαιτούνται για την πραγματοποίηση των πυλών είναι αμελητέα. Ομοίως υπάρχουν και άλλες καταστάσεις (modes) της κοιλότητας αλλά η ζεύξη αυτών των καταστάσεων με τις υπόλοιπες καθώς και με το άτομο είναι αμελητέα.

Στην πραγματικότητα η από-συμφωνία στην αρχιτεκτονική της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής κοιλότητας προέρχεται πρακτικά μόνο από τις ατέλειες της κοιλότητας. Επομένως την κατάσταση της κοιλότητας με την οποία αλληλεπιδρά το άτομο δεν πρέπει να τη θεωρούμε ως έναν αρμονικό ταλαντωτή, αλλά ως έναν αρμονικό ταλαντωτή με απώλειες σε ένα άπειρο σύνολο ταλαντωτών. Τα αποτελέσματα που εξάγουμε είναι ότι γίνεται και απώλεια και από-συμφωνία, αλλά το δεύτερο είναι πολύ ταχύτερο από το πρώτο.

Εδώ θα σχολιάσουμε μερικές μεθόδους για την αντιμετώπιση του προβλήματος.

Μερικές από τις μεθόδους που έχουν χρησιμοποιηθεί είναι:

1. Μέθοδος καταστροφής του κβαντικού φαινομένου σήραγγας με εξωτερικό χρονομεταβαλλόμενο πεδίο.
2. Εξωτερικοί παλμοί, οι οποίοι αναστρέφουν συνεχώς την κατάσταση του ατόμου.
3. Ισχυρό εξωτερικό εναλλασσόμενο πεδίο σε ζεύξη με την κατάσταση της cavity που χρησιμοποιούμε.
4. Οδήγηση του συστήματος σε υπόχωρο του διαθέσιμου χώρου Hilbert, του οποίου οι καταστάσεις παρουσιάζουν μειωμένο το φαινόμενο της απόσπρωφνίας (decoherence free subspaces).

Ας μελετήσουμε συνοπτικά το φαινόμενο. Η χαμιλτονιανή ενός συστήματος σαν αυτό που περιγράψαμε είναι της μορφής:

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) = & -\frac{\hbar}{2} \left[\Delta_o \hat{\sigma}_3 + s(t) \hat{\sigma}_1 \right] + \hbar g \left(\hat{B}^* \hat{B} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega \left(\hat{B}^* + \hat{B} \right) \hat{\sigma}_1 + \\ & + \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i \left(\hat{b}_i^* \hat{b}_i + \frac{1}{2} \right) + \hbar \left(\hat{B}^* + \hat{B} \right) \sum_{i=0}^N \kappa_i \left(\hat{b}_i^* + \hat{b}_i \right) \end{aligned} \quad (6.25)$$

όπου $s(t)$ είναι το εξωτερικό πεδίο, ο πρώτος όρος είναι η χαμιλτονιανή του ατόμου, ο δεύτερος είναι η χαμιλτονιανή της κατάστασης της κοιλότητας που χρησιμοποιούμε, ο τρίτος είναι η ζεύξη της τελευταίας με το άτομο, ο τέταρτος είναι το περιβάλλον και ο πέμπτος είναι η ζεύξη της κοιλότητας με το περιβάλλον.

Η επίδραση του περιβάλλοντος στο σύστημα του ατόμου και της κοιλότητας περιγράφεται από τη φασματική συχνότητα:

$$J(\omega) = 2\pi \sum_{i=0}^N \kappa_i^2 \delta(\omega - \omega_i) \quad (6.26)$$

Όμως το περιβάλλον αποτελείται από ένα άπειρο και συνεχές σύνολο ταλαντωτών. Αν θεωρήσουμε ωμική συμπεριφορά στη φασματική πυκνότητα και θεωρήσουμε και μια συχνότητα αποκοπής, τότε παίρνουμε:

$$J(\omega) = \frac{2\Gamma}{\Omega} \omega e^{-\frac{\omega}{\omega_c}} \quad (6.27)$$

Αν τώρα κάνουμε trace out την cavity, μια που και αυτή περιγράφεται από αρμονικούς ταλαντωτές, τότε το άτομο να βρίσκεται σε ζεύξη με ταλαντωτές που έχουν φασματική πυκνότητα:

$$J_{eff}(\omega) = \frac{16\Gamma}{\Omega} \frac{g^2 \omega \Omega^2}{(\Omega^2 \omega^2)^2 + 4\omega^2 \Gamma^2} \quad (6.28)$$

Η παραπάνω σχέση είναι και το μεγάλο μας πρόβλημα. Το bath ταλαντωτών που νιώθει το άτομο έχει υψηλή φασματική πυκνότητα στην περιοχή της συχνότητας της κοιλότητας. Επειδή ακριβώς πρέπει για πρακτικούς λόγους να επιλέγουμε τη συχνότητα της κοιλότητας παρεμφερή με αυτή του ατόμου, συνεπάγεται ότι το άτομο βρίσκεται σε συντονισμό και κατά συνέπεια σε υψηλή ζεύξη με το περιβάλλον που βλέπει αυτό.

Εφ' όσον οι σταθερές ζεύξης είναι αρκετά μικρές, η μαρκοβιανή προσέγγιση είναι ικανοποιητική και μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση Master. Η λύση της εξίσωσης είναι η:

$$\rho(t) = \frac{1}{2}I + \sum_{i=0}^3 \sigma_i(t) \hat{\sigma}_i \quad (a) \quad (6.29)$$

$$\dot{\sigma}_1(t) = -\Delta_0 \sigma_2(t) \quad (b)$$

$$\dot{\sigma}_2(t) = \Delta_0 \sigma_1(t) - s(t) \sigma_3(t) - \Gamma_1(t) \sigma_2(t) - \Gamma_2(t) \sigma_1(t) - A_y(t) \quad (c)$$

$$\dot{\sigma}_3(t) = s(t) \sigma_2(t) - \Gamma_1(t) \sigma_3(t) - \Gamma_4(t) \sigma_1(t) - A_y(t) \quad (d)$$

οπότε:

$$\Gamma_1(t) = \int dt' M'(t-t') b_i(t, t') \quad (a)$$

$$A_y(t) = \text{Re}(F(t)) \quad (b) \quad (6.30)$$

$$A_z(t) = \frac{1}{2} \int dt' M'(t-t') [u^2(t, t') - u^2(t, t')] \quad (b)$$

Η συνάρτηση $M(t)$ είναι η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του λουτρού (bath) των ταλαντωτών του περιβάλλοντος του ατόμου. Είναι:

$$M(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J_{eff}(\omega) \left[\cos t \left(\frac{\hbar \omega}{2\kappa_B T} \right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right] \quad (a)$$

$$M'(t) = \text{Re}(M(t)) \quad (b) \quad (6.31)$$

$$M''(t) = \text{Im}(M(t)) \quad (c)$$

Στο όριο που η θερμοκρασία του περιβάλλοντος τείνει στο μηδέν και αν χρησιμοποιήσουμε την έκφραση του J_{eff} που θεωρήσαμε προηγουμένως, βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}
M'(t) &= 4\Gamma g^2 \Omega \frac{1}{\Gamma\sqrt{\Omega^2 - \Gamma^2}} e^{-\Gamma t} \cos\left(\sqrt{\Omega^2 - \Gamma^2} t\right) - \\
&\quad - \frac{16\Gamma}{\pi\Omega} g^2 \Omega^2 \int_0^\infty dy \frac{y e^{-y}}{(y^2 + \Omega^2)^2 - 4y^2 \Gamma^2} \\
M''(t) &= -4g^2 \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 - \Gamma^2}} e^{-\Gamma t} \sin\left(\sqrt{\Omega^2 - \Gamma^2} t\right)
\end{aligned}
\tag{6.32}$$

Επίσης είναι:

$$\begin{aligned}
u(t, t') &= \langle 0 | \hat{U}(t, t') | 0 \rangle \cdot \langle 1 | \hat{U}(t, t') | 0 \rangle \\
v(t, t') &= \langle 0 | \hat{U}(t, t') | 1 \rangle \cdot \langle 1 | \hat{U}(t, t') | 1 \rangle \\
b_1 &= \text{Re}(u v^*) \\
b_2 &= -\frac{1}{2} \text{Im}(u^2 - v^2) \\
b_3 &= \frac{1}{2} \text{Re}(u^2 - v^2)
\end{aligned}$$

όπου $\hat{U}(t, t')$ είναι ο ορθομοναδιαίος (unitary) τελεστής που περιγράφει τη χρονική εξέλιξη ενός πλήρως απομονωμένου ατόμου. Ας δούμε τώρα μια γραφική παράσταση των αποτελεσμάτων. Κατ' αρχήν ας υποθέσουμε ότι ξεκινάμε το σύστημα στην πλήρως entangled κατάσταση $\frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle)$. Δηλαδή

$$\sigma_1(0) = 1, \quad \sigma_2(0) = 0, \quad \sigma_3(0) = 0..$$

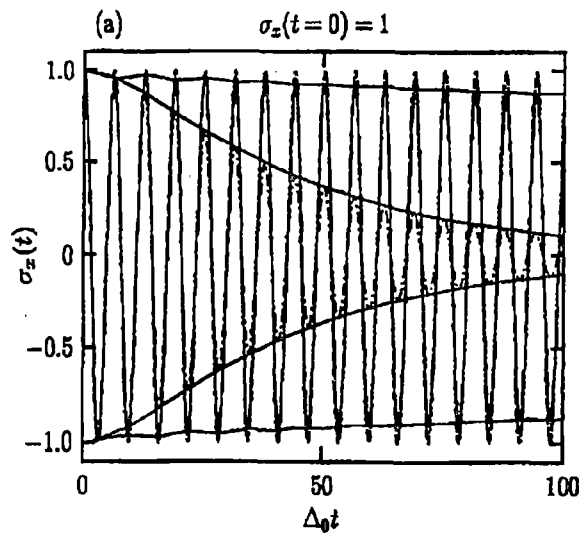
Θα κάνουμε γραφική παράσταση της λύσης της εξίσωσης Master, που γράψαμε παραπάνω, σε τέσσερις περιπτώσεις.

1. Πλήρως απομονωμένο άτομο, δηλαδή $s=0, g=0$.
2. Απομονωμένο σύστημα με εξωτερική διέγερση $s \neq 0, g \neq 0$.
3. Μη απομονωμένο σύστημα χωρίς εξωτερική διέγερση $s = 0, g \neq 0, \Gamma \neq 0$.
4. Μη απομονωμένο σύστημα με εξωτερική διέγερση $s \neq 0, g \neq 0, \Gamma \neq 0$.

Εδώ να αναφέρουμε ότι στο μοντέλο αυτό έχει θεωρηθεί ότι $\Omega = \Delta_0$, $g = 0.05\Delta_0$, $\Gamma = 0.1\Delta_0$. Επίσης και η εξωτερική διέγερση έχει συχνότητα Δ_0 , αλλά και πλάτος κατάλληλο έτσι ώστε το εξωτερικό πεδίο να βρίσκεται σε μέγιστη ζεύξη με το άτομο.

Τα αποτελέσματα που παίρνουμε φαίνονται στην παρακάτω γραφική παράσταση. Στην πρώτη περίπτωση παίρνουμε αρμονικές ταλαντώσεις, οι οποίες αντιστοιχούν σε ορθομοναδιαία (unitary) εξέλιξη του συστήματος. Το ίδιο σχεδόν

αποτέλεσμα παίρνουμε και στη δεύτερη περίπτωση. Το αποτέλεσμα είναι το ίδιο μέχρι σημείου να μην διακρίνεται στη γραφική παράσταση γιατί πέφτει πάνω στην καμπύλη της πρώτης περίπτωσης. Στην τρίτη περίπτωση βλέπουμε φθίνουσες ταλαντώσεις που έχουν πλάτος που παρίσταται από την έντονη καμπύλη στο μέσον του διαγράμματος. Η φθίνουσα ταλάντωση είναι η μαρτυρία της από-συμφώνησης (decoherence). Όμοια παίρνουμε και στην τέταρτη περίπτωση μόνο που το πλάτος φθίνει πολύ πιο αργά. Το πλάτος σε αυτήν την περίπτωση παρίσταται με τη λιγότερο έντονη καμπύλη στο πάνω και κάτω μέρος του διαγράμματος. Βλέπουμε λοιπόν ότι το εξωτερικό πεδίο άλλαξε την κατάσταση έτσι ώστε να μην είναι το άτομο σε συντονισμό με το bath των ταλαντωτών του περιβάλλοντος. Ως αποτέλεσμα η από-συμφώνηση (decoherence) καθυστερεί.



Σχήμα 6.1: Αποτελέσματα του μοντέλ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: Πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός

7.1 Περιγραφή της διάταξης

Η αρχιτεκτονική που χρησιμοποιεί τον πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό (Nuclear Magnetic Resonance - NMR) έχει μια βασική διαφορά από τις υπόλοιπες αρχιτεκτονικές. Η αρχιτεκτονική αυτή λειτουργεί σε -θερμοκρασία δωματίου ενώ όλες οι άλλες αρχιτεκτονικές λειτουργούν σε υπερχαμηλές θερμοκρασίες ($T < 1^\circ\text{K}$).

Σε όλες τις άλλες αρχιτεκτονικές επιδιώκουμε την δημιουργία "καθαρών" καταστάσεων. Αυτό σημαίνει ότι -θέλουμε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες ώστε να μην έχουμε θερμικές μεταβάσεις.

Αντίθετα στην τεχνική NMR, έχουμε ένα δείγμα μορίων που δεν βρίσκονται όλα στην ίδια κατάσταση. Για παράδειγμα για ένα δείγμα συστημάτων δύο καταστάσεων, όταν βρίσκεται σε θερμική ισορροπία ο λόγος του πλήθους των συστημάτων στη διεγερμένη κατάσταση προς το πλήθος των συστημάτων στη θεμελιώδη κατάσταση ισούται, όπως είναι γνωστό από την κατανομή Boltzmann με $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, όπου ΔE η ενεργειακή διαφορά των δύο καταστάσεων. Μάλιστα στις συγκεκριμένες καταστάσεις που χρησιμοποιούμε είναι $\Delta E \ll k_B T$ με αποτέλεσμα να είναι πολύ μικρή η διαφορά των δύο πληθυσμών.

Αν και μικρή αυτή η διαφορά είναι μετρήσιμη αφού έχουμε φροντίσει τα σήματα που λαμβάνουν τα μετρητικά πηνία από τα μόρια που βρίσκονται στη διεγερμένη κατάσταση και από τα μόρια που βρίσκονται στη θεμελιώδη κατάσταση να αλληλοαναιρούνται. Έτσι μια κατάσταση σαν αυτή της θερμικής ισορροπίας μπορούμε να την χρησιμοποιήσουμε ως $|0\rangle$ και μια ανεστραμμένη κατάσταση (κατανομή που αντιστοιχεί σε θερμοκρασία αντίθετη της θερμοκρασίας δωματίου, προφανώς δεν είναι κατάσταση θερμικής ισορροπίας μια τέτοια κατάσταση) να την χρησιμοποιήσουμε ως $|1\rangle$. Βέβαια αυτές δεν είναι καταστάσεις αλλά mixed states που τις ονομάζουμε ψευδοκαταστάσεις. Επίσης επειδή δεν έχουμε ένα μόνο σύστημα αλλά ένα στατιστικό σύνολο συστημάτων δεν μπορούμε σε καμία περίπτωση να χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό Dirac αλλά πρέπει να κάνουμε χρήση του τελεστή πυκνότητας, από όπου πρέπει να αφαιρούμε το κομμάτι που αλληλοεξουδετερώνεται στις μετρήσεις (ίσο πλήθος θεμελιωδών και διεγερμένων καταστάσεων) ώστε ο τελεστής πυκνότητας να εκφράζει το μετρήσιμο μας.

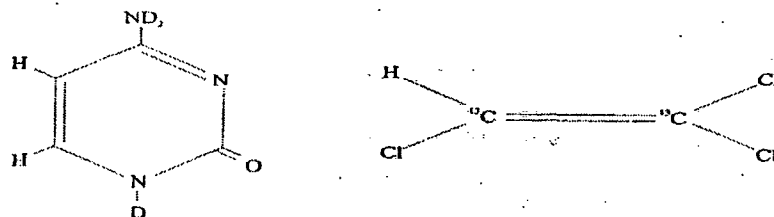
Αυτό που κερδίζουμε χρησιμοποιώντας αυτό το δείγμα καταστάσεων, το οποίο είναι πάντα εκτεθειμένο να κυλήσει στη θερμική ισορροπία είναι το εξής. Γνωρίζουμε ότι ο χρόνος αυθόρμητης εκπομπής είναι αντιστρόφως ανάλογος με τον κύβο της ενεργειακής διαφοράς της αρχικής και τελικής κατάστασης. Έχοντας έτσι επιλέξει ένα πολύ μικρό ΔE ο χρόνος αυτός είναι πολύ μεγάλος. Έτσι αν αφήσουμε το σύστημα προφανώς θα καταλήξει σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας αλλά θα αργήσει αρκετά ώστε να κάνουμε τους υπολογισμούς μας.

Στην πράξη τώρα για την επίτευξη του σκοπού μας χρησιμοποιούμε μόρια που περιέχουν άτομα των οποίων οι πυρήνες έχουν spin $1/2$. Μάλιστα είναι συνήθης πρακτική να αντικαθιστούμε άτομα ^{12}C με άτομα ^{13}C σε οργανικές ενώσεις έτσι ώστε να έχουμε διαθέσιμα πυρηνικά spin $1/2$.

Για τις διαδικασίες ενός qubit χρησιμοποιούμε rf πεδία. Όμως επειδή προφανώς δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε τοπικά τις θέσεις των μορίων, αφού αυτά κινούνται συνεχώς, επιδρούμε όμως επιλέγοντας κατάλληλα τη συχνότητα του εξωτερικού πεδίου ώστε να έχουμε συντονισμό με άλλο άτομο κάθε φορά. Μάλιστα ακόμα και όμοια άτομα λόγω των διαφορετικών θέσεων τους στο μόριο μπορούν και έχουν διαφορετικές συχνότητες συντονισμού.

Όσον αφορά πύλες με δύο qubit, το απαραίτητο entanglement επιτυγχάνεται με τη ζεύξη των δύο spins. Οι ζεύξεις αυτές είναι μικρές και ως αποτέλεσμα οι multi-qubit πύλες είναι αργές και μάλιστα ο χρόνος της απόκρισης τους είναι εκθετικά αυξανόμενος με το πλήθος των qubit της πύλης. Ακριβώς αυτό είναι το κύριο πρόβλημα της αρχιτεκτονικής το οποίο μας περιορίζει σε διατάξεις μέχρι 7 qubit.

Όσον αφορά την από-συμφωνία στην αρχιτεκτονική αυτή δεν έχει νόημα το να προσπαθήσουμε να το περιορίσουμε μια που το σύστημα είναι μακροσκοπικό και επομένως είναι ήδη πλήρως decohered.



Σχήμα 7.1: Μόρια χρησιμοποιούμενα για την υλοποίηση του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού.

7.2 Μετρήσιμα στην μέθοδο του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού

Ας δούμε τώρα πως σχετίζονται οι πραγματικές καταστάσεις με τις ψευδοκαταστάσεις. Όπως αναφέραμε παραπάνω σε κάθε κατάσταση πρέπει να αφαιρούμε αυτό ακριβώς το υπόβαθρο του ίσου πλήθους των συστημάτων στη θεμελιώδη και διεγερμένη κατάσταση αφού αυτό δεν είναι μετρήσιμο. Ας δούμε τι κατάσταση είναι αυτή που χαρακτηρίζεται από ίσο πλήθος συστημάτων σε θεμελιώδη και διεγερμένη κατάσταση.

Για ένα qubit έχουμε:

$$\rho = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.1)$$

Για δύο qubit έχουμε:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{4} |0\rangle \langle 0| \langle 0| \langle 0| + \frac{1}{4} |0\rangle \langle 0| |1\rangle \langle 1| + \frac{1}{4} |1\rangle \langle 1| |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{4} |1\rangle \langle 1| |1\rangle \langle 1| = \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.2)$$

Βλέπουμε δηλαδή ότι σε κάθε περίπτωση αυτό που πρέπει να αφαιρέσουμε είναι ο ταυτοτικός πίνακας διαιρεμένος με τη διάσταση του, ώστε να έχει ίχνος μονάδα. Επομένως το μετρήσιμο μας με τη μέθοδο του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού είναι το

$$\rho - \frac{1}{2^n} \mathbf{E} \quad (7.3)$$

όπου η το πλήθος των qubit. Εύκολα βλέπει κανείς ότι τα μετρήσιμα αυτά έχουν ίχνος μηδέν.

Ας εξετάσουμε μερικά παραδείγματα για καλύτερη κατανόηση των παραπάνω.

Υποθέτουμε ένα qubit στην κατάσταση $|0\rangle$. Τότε:

$$\rho = |0\rangle \langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbf{E} + \frac{1}{2} \sigma_z \quad (7.4)$$

Άρα το μετρήσιμο στην περίπτωση αυτή είναι το $\frac{1}{2} \sigma_z$. Υποθέτουμε ένα qubit

στην κατάσταση $\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$. Τότε:

$$\rho = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbf{E} + \frac{1}{2} \sigma_x \quad (7.5)$$

Άρα το μετρήσιμο στην περίπτωση αυτή είναι το $\frac{1}{2} \sigma_x$. Ας υποθέσουμε δύο qubit στην $|0\rangle|0\rangle$. Τότε:

$$\begin{aligned}
\rho &= |0\rangle|0\rangle\langle 0|\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\
&= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \\
&\quad + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\
&= \frac{1}{4} E \otimes E + \frac{1}{4} \sigma_z \otimes E + \frac{1}{4} E \otimes \sigma_z + \frac{1}{4} \sigma_z \otimes \sigma_z \quad (7.6)
\end{aligned}$$

Άρα το μετρήσιμο σε αυτήν την περίπτωση είναι το

$$\frac{1}{4} \sigma_z \otimes E + \frac{1}{4} E \otimes \sigma_z + \frac{1}{4} \sigma_z \otimes \sigma_z$$

Και μία τελευταία περίπτωση. Έστω δύο qubit που βρίσκονται στην κατάσταση

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$$

$$\begin{aligned}
\rho &= \frac{|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle 0|\langle 0| + \langle 1|\langle 1|}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\
&= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \\
&\quad + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\
&= \frac{1}{4} E \otimes E + \frac{1}{4} \sigma_z \otimes \sigma_z + \frac{1}{4} \sigma_x \otimes \sigma_x - \frac{1}{4} \sigma_y \otimes \sigma_y \quad (7.7)
\end{aligned}$$

Άρα το μετρήσιμο σε αυτήν την περίπτωση είναι το $\frac{1}{4} \sigma_z \otimes \sigma_z + \frac{1}{4} \sigma_x \otimes \sigma_x - \frac{1}{4} \sigma_y \otimes \sigma_y$.

Όπως βλέπουμε η αντιστοιχία των πραγματικών καταστάσεων και των ψευδοκαταστάσεων για δύο qubit, και πόσο μάλλον για περισσότερα, δεν είναι καθόλου απλή.

7.3 Υλοποίηση των βασικών πυλών

Για την υλοποίηση των διαφόρων πυλών χρησιμοποιούμε rf πεδία τα οποία είναι σε συντονισμό με το εκάστοτε qubit. Οι όροι της χαμιλτονιανής που προκύπτουν από τέτοια πεδία είναι ανάλογοι της έντασης του πεδίου και ανάλογοι με κάποιον συνδυασμό των πινάκων του Pauli ανάλογα με τη διεύθυνση του πεδίου. Επίσης δεν πρέπει να ξεχάσουμε ότι υπάρχει ο όρος της αλληλεπίδρασης των δύο spin που είναι ανάλογος του εσωτερικού γινομένου $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$.

Για την υλοποίηση της πύλης controlled-not χρησιμοποιούμε ένα rf πεδίο στη διεύθυνση του άξονα Z σε συντονισμό με το ένα qubit και ένα rf πεδίο στη διεύθυνση του άξονα X σε συντονισμό με το άλλο. Η χαμιλτονιανή αυτού του συστήματος είναι η εξής:

$$\hat{H} = \alpha \hat{\sigma}_z \otimes \hat{E} + B \hat{E} \otimes \hat{\sigma}_z + C \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \quad (7.8)$$

Υπάρχουν ειδικές τεχνικές ώστε από το εσωτερικό γινόμενο $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ να παίζει ρόλο μόνο ο όρος $S_{1z} S_{2z}$. Φροντίζουμε τις εντάσεις των πεδίων έτσι ώστε να έχουμε $b=c=\alpha$. Τότε η χαμιλτόνια θα γράφεται:

$$\hat{H} = \alpha \left(\hat{E} \otimes \hat{E} - \hat{\sigma}_z \otimes \hat{E} - \hat{E} \otimes \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \right) \quad (7.9)$$

όπου προσθέσαμε και έναν όρο ανάλογο του ταυτοτικού που προφανώς μόνο μια ολική αλλαγή φάσης μπορεί να προκαλέσει και θα απλοποιήσει ιδιαίτερα τις πράξεις μας.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \\ &- \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= 4\alpha \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 4\alpha \hat{A} \end{aligned} \quad (7.10)$$

Παρατηρούμε ότι:

$$\hat{A} = \hat{A} \Rightarrow \hat{A}^n = \hat{A} \quad (7.11)$$

Επομένως αν αφήσουμε το σύστημα να εξελιχθεί για χρόνο t ο ορθομοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός που θα υποστεί το σύστημα είναι ο:

$$U = e^{i\frac{1}{\hbar}\hat{H}t} = e^{i\frac{1}{\hbar}4\alpha\hat{A}t} \quad (7.12)$$

Αν φροντίσουμε το χρόνο έτσι ώστε: $\frac{1}{\hbar}4\alpha t = \pi$ θα έχουμε:

$$\begin{aligned} U = e^{i\pi\hat{A}} &= E + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi\hat{A})^n}{n!} = E - \hat{A} + \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^n}{n!} = E - \hat{A} + \hat{A}e^{i\pi} = E - 2\hat{A} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.13)$$

που δεν είναι άλλο από την πύλη «π», είναι απολύτως ισοδύναμη με την πύλη controlled-not.

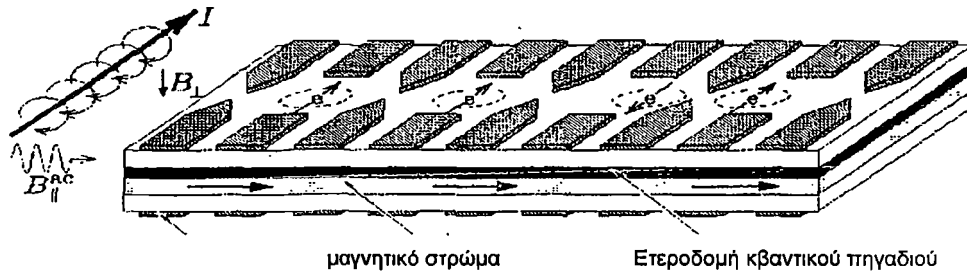
18-10

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8: Άλλες αρχιτεκτονικές

8.1 Κβαντικές Κηλίδες

Τα quantum dots (κβαντικές κηλίδες), είναι ετερόδομες μέσα στο σώμα ενός ημιαγωγού, οι οποίες περιορίζουν την κίνηση των φορέων αγωγιμότητας μέσα σε αυτές. Συγκεκριμένα με την τεχνολογία της μοριακής επιταξίας μπορούμε πολύ εύκολα να κατασκευάσουμε στρώματα ετεροδομών, πρόκειται για την γνωστή τεχνική με την οποία κατασκευάζονται τα ολοκληρωμένα κυκλώματα. Τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας παγιδεύονται στο στρώμα του quantum dot, διότι αυτό είναι έτσι κατασκευασμένο ώστε να αποτελεί πηγάδι δυναμικού. Ο επιπλέον περιορισμός των φορέων στις δύο υπόλοιπες διαστάσεις γίνεται με ηλεκτρικά πεδία και τεχνικές etching (λιθογραφίας). Τα συστήματα αυτά πρέπει να βρίσκονται σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες έτσι ώστε μόνο ένα ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στη ζώνη αγωγιμότητας σε κάθε quantum dot. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα συστοιχίας quantum dots παρατίθεται στο σχήμα (8.1):

Στο σχήμα με γκρι χρώμα παριστάνονται τα ηλεκτρόδια τα οποία περιορίζουν τα ηλεκτρόνια στις περιοχές των quantum dot, οι οποίες είναι οι κυκλικές διακεκομμένες περιοχές. Οι τυπικές διαστάσεις αυτών των περιοχών είναι από 10nm μέχρι 1μm. Ακριβώς επειδή το μήκος κύματος Fermi είναι της αυτής τάξης μεγέθους με τις διαστάσεις του quantum dot, το ενεργειακό φάσμα των παγιδευμένων φορέων είναι σαφώς διακριτό. Επίσης το ενεργειακό φάσμα είναι πολύ ευαίσθητο στα μαγνητικά πεδία. Με βάση τα παραπάνω έχουν προταθεί δύο μέθοδοι για τη χρησιμοποίηση των quantum dot ως qubit. Η μια είναι να χρησιμοποιηθούν οι δύο κατώτερες καταστάσεις του φάσματος των χωρικών βαθμών ελευθερίας των παγιδευμένων ηλεκτρονίων ως καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$, δηλαδή να χρησιμοποιηθούν οι δύο κατώτερες ενεργειακές στάθμες ενός τεχνητού πηγαδιού δυναμικού. Επειδή αυτό το φάσμα εξαρτάται από τις διαστάσεις των quantum dots, μπορούμε να φροντίσουμε η επόμενη ενεργειακή στάθμη να είναι σε πολύ μεγαλύτερες ενέργειες από τις δύο πρώτες, έτσι ώστε αυτές να είναι κατά το δυνατόν απομονωμένες. Για το λόγο αυτό τα quantum dot λέγονται και τεχνητά άτομα διότι ελέγχοντας τις διαστάσεις τους μπορούμε να ρυθμίσουμε τις ενεργειακές στάθμες κατά



Σχήμα 8.1: Συστοιχία Quantum Dots

βούληση. Η άλλη μέθοδος είναι να χρησιμοποιηθεί εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, και να χρησιμοποιηθούν ως καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ οι δύο καταστάσεις του spin του ηλεκτρονίου. Αν και χρονολογικά προηγείται η πρώτη μέθοδος, τα τελευταία χρόνια κερδίζει έδαφος η δεύτερη, γι' αυτό και εμείς αυτή θα σχολιάσουμε.

Το βασικό πλεονέκτημα που παρουσιάζουν τα quantum dots εν σχέση με τις άλλες τεχνικές είναι ότι ακριβώς επειδή οι τεχνικές κατασκευής τέτοιων διατάξεων είναι γνωστές εδώ και καιρό και χρησιμοποιούνται στην κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, μπορούμε να κατασκευάσουμε αρκετά εκλεπτυσμένες διατάξεις. Για παράδειγμα μπορούμε εύκολα να κατασκευάσουμε συστοιχίες με πολλά qubit, σαν αυτή του σχήματος, πράγμα το οποίο δεν είναι καθόλου απλό στις άλλες αρχιτεκτονικές.

Από εδώ και στο εξής θεωρούμε ότι $|\uparrow\rangle = |0\rangle$ και $|\downarrow\rangle = |1\rangle$.

Οι διαδικασίες ενός qubit γίνονται εύκολα με τεχνικές ηλεκτρονικού μαγνητικού συντονισμού (EMR). Στο παραπάνω σχήμα εικονίζονται τα κατάλληλα πεδία για να πετύχουμε το σκοπό αυτό. Όπως είναι γνωστό απαιτείται ένα εναλλασσόμενο μαγνητικό πεδίο κάθετο στο σταθερό μαγνητικό πεδίο που χρησιμοποιούμε για το διαχωρισμό Zeeman των δύο καταστάσεων του spin. Αν θεωρήσουμε το σταθερό μαγνητικό πεδίο στον άξονα z και το εναλλασσόμενο στον άξονα x, τότε κατά τα γνωστά η χαμιλτονιάνη του συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \frac{eg\hbar}{2mc} \left(B_0 \frac{\hat{\sigma}_3}{2} + B_1 \cos \omega t \frac{\hat{\sigma}_1}{2} \right) = \frac{eg\hbar}{4mc} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

Η λύση της εξίσωσης Schrödinger είναι:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle \quad (a)$$

$$\alpha(t) = e^{-i\frac{\omega_c}{2}t} (A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}) \quad (b) \quad (8.2)$$

$$b(t) = -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\frac{\omega_c}{2} - \omega)t} (\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}) \quad (c)$$

$$\text{όπου: } \omega_c = \frac{egB_0}{2mc}, \omega_1 = \frac{egB_1}{4mc}, \lambda_{\pm} = \frac{\omega_c - \omega \pm \sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}}{2}$$

Αν φροντίσουμε τις συχνότητες και τα πεδία έτσι ώστε να είναι $\omega = \omega_c$ τότε $\lambda \pm = \pm \frac{\omega_1}{2}$ και επομένως:

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= e^{-i\frac{\omega_c}{2}t} \left(A_+ e^{i\frac{\omega_1}{2}t} + A_- e^{-i\frac{\omega_1}{2}t} \right) & (a) \\ b(t) &= e^{-i\frac{\omega_c}{2}t} \left(-A_+ e^{i\frac{\omega_1}{2}t} + A_- e^{-i\frac{\omega_1}{2}t} \right) & (b) \end{aligned} \tag{8.3}$$

Οι τελευταίες εκφράσεις εύκολα μπορεί να δείξει κανείς ότι αντιστοιχούν σε πλήρεις στροφές του spin.

Όσον αφορά τις πύλες των δύο qubit, αυτές πραγματοποιούνται χρησιμοποιώντας τη ζεύξη των δύο μαγνητικών ροπών, η οποία παρέχει το απαραίτητο entanglement. Η χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης αυτής είναι:

$$\hat{H} = J(t) \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \tag{8.4}$$

Αν αφήσει κανείς να εξελιχθεί ένα σύστημα με την παραπάνω χαμιλτονιανή, η ορθομοναδιαία εξέλιξη του συστήματος είναι:

$$U = e^{i\frac{1}{\hbar} \int_0^t J(t) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 dt} \tag{a}$$

Αν επιλέξουμε

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^t J(t) dt = \pi \tag{b}$$

τότε παίρνουμε $U = U_{sw}$, όπου U_{sw} είναι ο τελεστής ο οποίος ανταλλάσσει τις καταστάσεις των δύο qubit και συγκεκριμένα:

$$U_{sw} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.6}$$

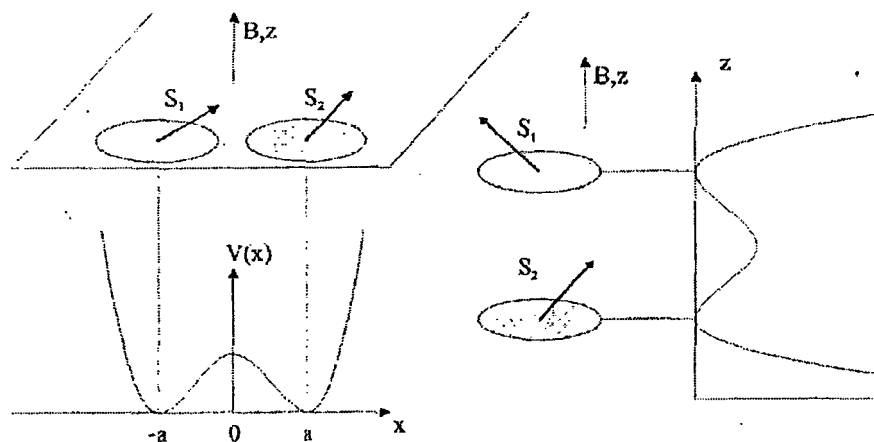
Είναι πολύ εύκολο πλέον να κατασκευάσουμε την πύλη controlled-not ως εξής:

$$U_{c-not} = e^{i\frac{\pi}{2}S_{1z}} e^{-i\frac{\pi}{2}S_{2z}(U_{sw})^{1/2}} e^{i\pi S_{1z}(U_{sw})^{1/2}} \tag{8.7}$$

Η $(U_{sw})^{1/2}$ κατασκευάζεται αν απλώς φροντίσουμε να είναι $\frac{1}{\hbar} \int_0^t J(t) dt = \frac{\pi}{2}$.

Επομένως πλέον το ενδιαφέρον εντοπίζεται στο να προσδιορίσουμε την ποσότητα που χαρακτηρίζει τη ζεύξη, $J(t)$.

Η ζεύξη αυτή είναι μη μηδενική μόνο για γειτονικά quantum dots, αν και αν τοποθετήσουμε τα συστήματα σε κοιλότητες μπορούμε να έχουμε μη μηδενικές ζεύξεις και για μη γειτονικά quantum dots. Εμείς θα θεωρήσουμε τις περιπτώσεις γειτονικών quantum dots. Υπάρχουν δύο τρόποι να υλοποιηθεί αυτή η γεινίαση. Ο ένας τρόπος είναι με πλάγια τοποθετημένα quantum dots (laterally coupled quantum dots) και ο δεύτερος είναι με κάθετα τοποθετημένα quantum dots (vertically coupled quantum dots). Οι δύο διατάξεις φαίνονται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 8.2: Πλάγια συζευγμένα και κάθετα συζευγμένα quantum dots

Ας εξετάσουμε εδώ την πρώτη περίπτωση. Η χαμιλτονιανή του συστήματος των δύο quantum dots είναι η:

$$\hat{H} = H_z + \frac{e^2}{k|r_1 - r_2|} + \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2m} \left(p_i - \frac{e}{c} A(r_i) \right)^2 + V(r_i) \quad (8.8)$$

H_z είναι η χαμιλτονιανή του φαινομένου Zeeman. Το υπόλοιπο κομμάτι είναι προφανές. Τα δύο quantum dots βρίσκονται σε απόσταση μικρή μεταξύ τους ώστε να μπορούν να συμβαίνουν φαινόμενα σήραγγας αλλά αρκετά μεγάλη ώστε το δυναμικό $V(r_i)$ να μπορεί να θεωρηθεί συνδυασμός των δυναμικών δύο αρμονικών ταλαντωτών συχνότητας ω_{QD} . Έτσι έχουμε:

$$V(x, y) = \frac{m\omega_{QD}^2}{2} \left[\frac{1}{4\alpha^2} (x^2 - \alpha^2)^2 + y^2 \right] \quad (8.9)$$

όπου $2a$ είναι η απόσταση των δύο quantum dots. Όταν έχουμε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες τέτοιες ώστε $k_B T \ll \hbar \omega_{QD}$, τότε οι χωρικοί βαθμοί ελευθερίας είναι παγωμένοι έτσι ώστε η παραπάνω χαμιλτονιανή να μπορεί να γράφει:

$$\hat{H} = J(t) \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (8.10)$$

όπου:

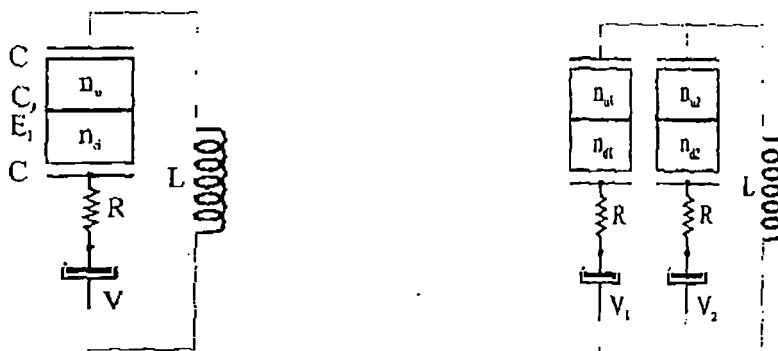
$$J = \frac{\hbar \omega_{QD}}{\sinh\left(2d^2 \frac{2b-1}{b}\right)} \left\{ \frac{3}{4b}(1+bd^2) + c\sqrt{d} \left[e^{-bd^2} I_0(bd^2) - e^{-\frac{d^2(b-1)}{b}} I_0\left(d^2 \frac{b-1}{b}\right) \right] \right\} \quad (8.11)$$

όπου $b = \sqrt{1 + \frac{\omega^2 L}{\omega_{QD}^2}}$, $\omega_L = \frac{eB_0}{2mc}$, $d = \frac{a}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{QD}}}}$ και I_0 η μηδενική τάξεως συνάρτηση Bessel.

Στην αρχιτεκτονική των quantum dots υπάρχει πάντα decoherence το οποίο οφείλεται στη ζεύξη του spin με τους χωρικούς βαθμούς ελευθερίας και συνάρτηση decoherence το οποίο οφείλεται στη ζεύξη του spin του quantum dot με τα spin που υπάρχουν στον υπόλοιπο χώρο εκτός των quantum dots. Για διάφορους λόγους οι πηγές αυτές της από-συμφωνία είναι αρκετά ασθενείς. Στην αρχιτεκτονική που χρησιμοποιείται ως ημιαγωγός το GaAs επειδή και το Ga και το As έχουν πυρηνικό spin $\frac{3}{2}$, η σημαντικότερη πηγή decoherence είναι η ζεύξη που χρησιμοποιούμε ως βάση καταστάσεων τις κατώτερες καταστάσεις των χωρικών βαθμών ελευθερίας υπάρχει decoherence λόγω της ζεύξης αυτών των καταστάσεων με τις ανώτερες.

8.2 Επαφή Josephson Junction

Στην αρχιτεκτονική που χρησιμοποιεί υπεραγωγούς, τα qubit υλοποιούνται σε συστήματα όπως αυτά του παρακάτω σχήματος.



Σχήμα 8.3: Σύστημα ενός και δύο qubit σε αρχιτεκτονική με Josephson junction.

Για τα παρακάτω θεωρούμε $\hbar = 1$ και $2e = 1$.

Υπάρχουν δύο υπεραγώγιμες νησίδες που συνδέονται με μια επαφή σήραγγας. Στο ιδανικό qubit έχουμε $R = 0$ και $L = 0$. Έστω ότι η χωρητικότητα της επαφής είναι C_j και η ενέργεια σύζευξης είναι E_j . Το σύστημα των δύο νησίδων συνδέεται με ιδανική πηγή ηλεκτρεγερτικής δύναμης V μέσω δύο πυκνωτών χωρητικότητας C .

Το φαινόμενο σήραγγας σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες δεν συμβαίνει. Αντίθετα κάτω από μια κρίσιμη θερμοκρασία όλα τα ηλεκτρόνια των νησίδων αποτελούν ζεύγη Cooper. Αυτό συμβαίνει στη θερμοκρασία $T^* \approx \frac{\Delta}{\ln(N_{\text{eff}})}$, όπου Δ το ενεργειακό φράγμα για το χωρισμό ενός ζεύγους Cooper και N_{eff} η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων με ενέργεια κοντά στην ενέργεια Fermi. Για την ακρίβεια αν το πλήθος των ηλεκτρονίων στο σύστημα είναι άρτιο, τότε όλα τα ηλεκτρόνια συμμετέχουν σε ζεύγη Cooper, αν το πλήθος των ηλεκτρονίων είναι περιττό, τότε περισσεύει και ένα ηλεκτρόνιο. Εμείς από εδώ και εις το εξής θα μελετούμε συστήματα που όλα τα ηλεκτρόνια συμμετέχουν σε ζεύγη. Φυσικά αυτό ισχύει για τα μισά από τα διαθέσιμα συστήματα.

Οι καταστάσεις του συστήματος χαρακτηρίζονται από το πλήθος των επιπλέον ζευγών Cooper στην πάνω και κάτω νησίδα n_u και n_d . Επειδή οι νησίδες συνδέονται μέσω πυκνωτών C , το άθροισμα $n_u + n_d$ είναι καθορισμένο αφού δεν μπορούν να διαφύγουν ζεύγη Cooper από το σύστημα. Επομένως η κατάσταση του συστήματος καθορίζεται πλήρως από τη διαφορά $n = \frac{1}{2}(n_u - n_d)$ χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = \frac{\left(n - \frac{CV}{2}\right)^2}{C + 2C_j} E_j \cos \Theta \quad (8.12)$$

όπου Θ είναι η συζυγής μεταβλητή του n .

Γενικώς ισχύει ότι: $\frac{CV}{2} \gg n$. Θεωρούμε διαφορές δυναμικού τέτοιες ώστε μόνο

δύο καταστάσεις να παίζουν κάποιο ρόλο έστω οι $|n\rangle$ και $|n+1\rangle$. Αυτό συμβαίνει αν ρυθμίσουμε τις τάσεις έτσι ώστε οι δύο χαμηλότερα ενεργειακά στάθμες να είναι σχεδόν εκφυλισμένες. Στην περίπτωση αυτή οι υπόλοιπες στάθμες απέχουν συγκριτικά πολύ περισσότερο από τις δύο κατώτερες και δεν παίζουν ρόλο. Τότε αν αντιστοιχίσουμε τις παραπάνω καταστάσεις στις καταστάσεις $|\uparrow\rangle$ και $|\downarrow\rangle$ ενός spin τότε μπορούμε να γράψουμε τη χαμιλτονιανή:

$$H = \frac{CV}{2(C+2C_J)}\sigma_3 - \frac{E_J}{2}\sigma_1 \quad (8.13)$$

όπου σ_3 και σ_1 οι γνωστοί πίνακες του Pauli.

Αν αφήσουμε το σύστημα να εξελιχθεί για χρόνο t , δηλαδή για χρόνο t να ρυθμίσουμε τις τάσεις έτσι ώστε να έχουμε εκφυλισμό των δύο κατώτερων ενεργειακών σταθμών, τότε ο ορθομοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός που υφίσταται το σύστημα είναι ο:

$$U = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{E_J t}{2}\right) & i \sin\left(\frac{E_J t}{2}\right) \\ i \sin\left(\frac{E_J t}{2}\right) & \cos\left(\frac{E_J t}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

Με τέτοιες διεργασίες μπορούμε να υλοποιήσουμε κάθε πύλη του ενός qubit. Οι χρόνοι t είναι της τάξεως των 10^{-10} sec.

Ας αναλύσουμε τώρα το σύστημα των δύο qubit. Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\left(n_i - \frac{C_i V_i}{2}\right)^2}{2C_J} - E_J \cos \Theta_i \right] + \frac{q^2}{4C_i} + \frac{\Phi^2}{2L} - \frac{(n_1 + n_2)q}{2C_J} - \frac{C_i}{4C_J^2} (n_1 - n_2)^2 \quad (8.15)$$

όπου q είναι το συνολικό φορτίο στους εξωτερικούς πυκνωτές και Φ είναι η συζυγής

μεταβλητή του. Επίσης $C_i = \frac{CC_J}{C+2C_J}$

Αν κάνουμε κατάλληλο κανονικό μετασχηματισμό καταλήγουμε στην:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\left(n_i - \frac{C_i V_i}{2}\right)^2}{C+2C_J} - E_J \cos\left(\Theta_i - \frac{C_i}{C_J} \Phi\right) \right] + \frac{q^2}{4C_i} + \frac{\Phi^2}{2L} \quad (8.16)$$

Θεωρούμε τις διακυμάνσεις του Φ μικρές $\frac{C_i}{C_J} \sqrt{\langle \Phi \rangle^2} \ll 2\pi$, οπότε μπορούμε να γράψουμε:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\left(n_i - \frac{CV_i}{2}\right)^2}{C+2C_J} - E_J \cos \Theta_i \right] + \frac{8\pi^2 e^2}{\hbar^2} \frac{C_i}{C_J^2} E_J^2 L (\sin \Theta_1 + \sin \Theta_2)^2 \quad (8.17)$$

Η παραπάνω χαμιλτονιανή περιγράφει σαφώς δύο qubit τα οποία συνδέονται με

ένα δυναμικό σύζευξης το οποίο αν θεωρήσουμε όπως και πριν ότι μόνο οι δύο κατώτερες καταστάσεις παίζουν κάποιο ρόλο τότε μπορούμε να γράψουμε τη χαμιλτονιανή σύζευξης:

$$H_{\text{coupling}} = -\frac{2\pi^2 e^2 C_t^2}{\hbar^2 C_J^2} E_J^2 L(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)})^2 \quad (8.18)$$

Ο ορθομοναδιαίος (unitary) μετασχηματισμός που υφίσταται το σύστημα μετά χρόνο t υπό την επίδραση της παραπάνω χαμιλτονιανής είναι:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{E_J t}{2}\right) & i \sin\left(\frac{E_J t}{2}\right) & 0 \\ 0 & i \sin\left(\frac{E_J t}{2}\right) & \cos\left(\frac{E_J t}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (8.19)$$

Από τον παραπάνω ορθομοναδιαίο (unitary) μετασχηματισμό, μπορούμε με κατάλληλες διεργασίες ενός qubit να πάρουμε την πύλη controlled-not.

Κύρια αίτια της από-συμφωνίας στις διατάξεις αυτές είναι οι ωμικές αντιστάσεις και τα φαινόμενα συντονισμού LC των στοιχείων που απαρτίζουν το σύστημα. Επίσης υπάρχουν και όροι ζεύξης με τις ανώτερες καταστάσεις του συστήματος που θεωρούσαμε αμελητέες κατά τη διάρκεια της ανάπτυξής μας.

8.3 Ανασκόπηση

Σήμερα έχουν προταθεί πολλές αρχιτεκτονικές για την υλοποίηση κβαντικών υπολογιστών. Κύριο χαρακτηριστικό όλων των αρχιτεκτονικών είναι ότι οι χρόνοι της από-συμφωνίας γενικά μειώνονται εκθετικά με το πλήθος των qubit που χρησιμοποιούμε στις διατάξεις μας. Αυτό είναι το κυριότερο εμπόδιο στην ολοκλήρωση του στόχου μας. Σήμερα στις καλύτερες διατάξεις, που είναι αυτές που χρησιμοποιούν των πυρινηκό μαγνητικό συντονισμό, έχουμε πετύχει λείτουργία διάταξης με επτά qubit. Ωστόσο, επειδή όπως αναφέραμε ήδη στο σχετικό κεφάλαιο οι διατάξεις αυτές είναι ήδη decohered και είναι μακροδοκοπικές, δεν υπάρχουν ευοίωνες προοπτικές για την αύξηση του αριθμού των qubit πολύ παραπάνω από εκεί που βρίσκονται σήμερα.

Για να λειτουργήσει ένας κβαντικός υπολογιστής απαιτείται ο χρόνος της από-συμφωνίας t_{dec} να είναι μεγαλύτερος από τον απαιτούμενο χρόνο t_{oper} για να πραγματοποιηθεί μια κβαντική πύλη. Τότε επιτυχώς λειτουργούν οι λβαντικοί error correcting codes και λαμβάνουμε σωστά αποτελέσματα. Μαλιστα γενικός το πλήθος

των πυλών που μπορούμε να πραγματοποιήσουμε ισούται χοντρικά με $\frac{t_{dec}}{t_{oper}}$.

Υπάρχουν λοιπόν δύο κατευθύνσεις οι οποίες μπορούν να βελτιώσουν την κατάσταση, η αύξηση του t_{dec} και η μείωση του t_{oper} . Άλλες αρχιτεκτονικές υπερτερούν στην μία άποψη και άλλες στην άλλη, αλλά αυτό που είναι σίγουρο είναι ότι δεν ξέρουμε ποιά αρχιτεκτονική θα δώσει τελικά λειτουργικούς κβαντικούς υπολογιστές. Στον παρακάτω πίνακα παρατίθενται οι χρόνοι t_{dec} και t_{oper} καθώς και το πλήθος των πυλών που μπορούμε να πραγματοποιήσουμε για διατάξεις του ενός qubit στις περισσότερες από τις υπάρχουσες αρχιτεκτονικές.

Αρχιτεκτονική	t_{dec} (sec)	t_{oper} (sec)	n
Πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός	10^8	10^{-6}	10^{14}
Ηλεκτρικός μαγνητικός συντονισμός	10^{-3}	10^{-7}	10^4
Παγωμένα παγιδευμένα ιόντα	10^{-1}	10^{-14}	10^{13}
Στερεάς κατάστασης χρυσού	10^{-8}	10^{-14}	10^6
Στερεάς κατάστασης GaAs	10^{-10}	10^{-13}	10^3
Quantum dots	10^{-6}	10^{-9}	10^3
Οπτικές cavity QED	10^{-5}	10^{-14}	10^9
Cavity QED μικροκυμάτων	10^0	10^{-4}	10^4
Josephson junctions	10^{-7}	10^{-10}	10^3

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Μαθηματικές Έννοιες στην Κβαντομηχανική

A.Συναρτήσεις Wigner

A.1 Θεωρία συναρτήσεων Wigner

Υπάρχει ένας εναλλακτικός τρόπος για να αναπτύξουμε την κβαντομηχανική χωρίς τελεστές. Στη μέθοδο αυτή αντί για κυματοσυναρτήσεις χρησιμοποιούμε τις λεγόμενες συναρτήσεις Wigner και αντί για τελεστές τις αντίστοιχες κλασσικές συναρτήσεις. Βέβαια το τμήμα που πληρώνουμε για την αλλαγή αυτή είναι ότι πρέπει να τροποποιήσουμε τον τελεστή του γινομένου.

Η αντιμετώπιση αυτή της κβαντομηχανικής, εκτός από άλλες πολυάριθμες εφαρμογές, παρουσιάζει έντονο ενδιαφέρον για τη μελέτη του decoherence. Αυτό συμβαίνει λόγω συγκεκριμένων ιδιοτήτων που έχουν οι συναρτήσεις Wigner και θα δούμε παρακάτω.

Έστω ότι βρισκόμαστε σε κατάσταση με κυματοσυνάρτηση ψ . Ορίζουμε τη συνάρτηση Wigner:

$$f(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int dy \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) e^{-iyp} \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right)$$

Η συνάρτηση αυτή είναι κατ' αρχήν νορμαλισμένη στη μονάδα:

$$\begin{aligned} \int dx dp f(x, p) &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dp \int dy \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) e^{-iyp} \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dy \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) \int dp e^{-iyp} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dy \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) \int dp e^{-iyp} = \\ &= \int dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \end{aligned}$$

Επίσης υπάρχει περιορισμός στις τιμές που μπορεί να πάρει η συνάρτηση αυτή:

$$-\frac{2}{\hbar} \leq f(x, p) \leq \frac{2}{\hbar}$$

Η συνάρτηση Wigner είναι πάντα πραγματική. Μπορεί να πάρει και αρνητικές τιμές, (και μάλιστα γενικώς παίρνει και αρνητικές τιμές), γι' αυτό και δεν μπορεί να

δεχθεί την ερμηνεία μιας κατανομής πιθανοτήτων ως προς τη θέση και την ορμή. Ωστόσο οι ποσότητες:

$$\rho(x) = \int dp f(x, p)$$

$$\sigma(x) = \int dx f(x, p)$$

είναι θετικώς ορισμένες και δέχονται ερμηνεία κατανομής πιθανοτήτων ως προς τη θέση και ως προς την ορμή αντίστοιχα. Ωστόσο βλέπουμε ότι δεν μπορούμε να έχουμε κατανομή και για τη θέση και για την ορμή. Αυτό είναι απολύτως φυσιολογικό αν σκεφτούμε την αρχή απροσδιοριστίας του Heisenberg που μας λέει ότι η θέση και η ορμή δεν είναι ταυτοχρόνως μετρήσιμα μεγέθη.

Ας σχολιάσουμε το πρόσημο της συνάρτησης Wigner. Η μόνη κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχείται σε απολύτως θετική συνάρτηση Wigner είναι η γκαουσιανή, δηλαδή η κατάσταση ελάχιστης αβεβαιότητας. Η κατάσταση αυτή είναι η «κλασικότερη» δυνατή κατάσταση. Όταν φτιάξουμε μια κατάσταση που είναι υπέρθεση τέτοιων καταστάσεων τότε η συνάρτηση Wigner παρουσιάζει διακυμάνσεις γύρω από το μηδέν, παίρνοντας και θετικές και αρνητικές τιμές. Όταν ένα σύστημα έχει υποστεί decoherence, έχει καταλήξει με μια κατανομή πιθανοτήτων σε «κλασσικές» καταστάσεις. Τότε η συνάρτηση παύει να παρουσιάζει τις χαρακτηριστικές διακυμάνσεις γύρω από το μηδέν. Για το λόγο αυτό οι συναρτήσεις Wigner είναι ιδιαίτερα χρήσιμες για τη μελέτη του decoherence.

Ας αναπτύξουμε τώρα τη κβαντομηχανική με συναρτήσεις Wigner. Χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση Wigner μπορούμε να βρούμε τη μέση τιμή κάθε μεγέθους. Αυτό γίνεται με την ακόλουθη σχέση:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx dp f(x, p) A(x, p)$$

όπου A δεν είναι κάποιος τελεστής αλλά απλά το μέγεθος του οποίου τη μέση τιμή αναζητούμε.

Η απόδειξη της παραπάνω σχέσης γίνεται με τη βοήθεια του κανόνα συσχέτισης του Weyl:

$$\hat{A}(x, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dy d\omega dx dp A(x, p) e^{iy(\hat{p}-p)} e^{i\omega(\hat{x}-x)}$$

Η παραπάνω σχέση μοιάζει να είναι προφανής λόγω ότι:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega x} d\omega = 2\pi\delta(x)$$

αλλά τα πράγματα δεν είναι τόσο απλά αφού στον κανόνα συσχέτισης του Weyl εμπλέκονται τελεστές.

Επίσης η εξίσωση που μας δίνει τη χρονική εξέλιξη της συνάρτησης Wigner, δηλαδή η εξίσωση Schrödinger για συναρτήσεις Wigner είναι η:

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} + f * H - H * f = 0$$

όπου:

$$* = e^{\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right)}$$

Εδώ βλέπουμε ότι πληρώνουμε το τίμημα της μετατροπής των τελεστών σε κλασσικές συναρτήσεις με την αντικατάσταση της πράξης της δράσης ενός τελεστή με το «γινόμενο άστρου» (star product). Πράγματι ο κανόνας συσχέτισης του Weyl μας λέει:

$$\hat{A}(x, p) \hat{B}(x, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dy d\omega dx dp [A(x, p) * B(x, p)] e^{iy(\hat{p}-p)} e^{i\omega(\hat{x}-x)}$$

Πάντως μπορούμε γενικά να απλοποιούμε αρκετά τις πράξεις μας χρησιμοποιώντας την ιδιότητα:

$$e^{a \frac{d}{dx}} f(x) = f(x+a)$$

Επίσης να πούμε ότι έχουμε στα χέρια μας και τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger με την οποία μπορούμε να βρούμε τις ιδιοκαταστάσεις ενός προβλήματος.

$$\begin{aligned} H(x, p) * f(x, p) &= H\left(x + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x\right) f(x, p) = \\ &= f(x, p) * H(x, p) = Ef(x, p) \end{aligned}$$

Ας αποδείξουμε εδώ ότι αν οι συναρτήσεις $f(x, p)$ είναι οι συναρτήσεις Wigner των ιδιοσυναρτήσεων της γνωστής μας τελεστικής εξίσωσης Schrödinger τότε ικανοποιούν την παραπάνω εξίσωση.

$$\begin{aligned} H(x, p) * f(x, p) &= \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) * \frac{1}{2\pi} \int dy \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) e^{-iy p} \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{2m} \left(p - i \frac{\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x \right)^2 + V(x) \right] \int dy e^{-iy \left(p + \frac{\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x \right)} \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dy \left[\frac{1}{2m} \left(p - i \frac{\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x \right)^2 + V \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) \right] e^{-iy p} \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dy e^{-iy p} \left[\frac{1}{2m} \left(i \overrightarrow{\partial}_y + i \frac{\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x \right)^2 + V \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) \right] \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \int dy e^{-ipy} \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right)} \right)^2 + V \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) \right] \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int dy e^{-ipy} \psi^* \left(x - \frac{\hbar}{2} y \right) E \psi \left(x + \frac{\hbar}{2} y \right) = Ef(x, p)
\end{aligned}$$

Βλέπουμε ότι μπορούμε να δείξουμε και την ορθογωνιότητα των συναρτήσεων Wigner που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ενέργειες.

$$f_a * H * f_b = E_a f_a * f_b = E_b f_a * f_b$$

$$E_a \neq E_b \Rightarrow f_a * f_b = 0$$

Επίσης

$$f * H * f = E_f f * f = H * f * f$$

$$f * f = cf$$

Αποδεικνύεται ότι $c = \frac{1}{\hbar}$, οπότε γενικά ισχύει:

$$f_a * f_b = \frac{1}{\hbar} \delta_{ab} f_a$$

A.2 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Ας δούμε τώρα ένα παράδειγμα για να καταλάβουμε καλύτερα τη λειτουργία των συναρτήσεων Wigner. Θεωρούμε τον απλό αρμονικό ταλαντωτή. Θεωρούμε επίσης σύστημα μονάδων όπου $\hbar = 1, m = 1, \omega = 1$. Τότε έχουμε:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$$

Αναζητούμε τις ιδιοκαταστάσεις του προβλήματος:

$$H(x, p) * f(x, p) = Ef(x, p)$$

$$\frac{1}{2}(p^2 + x^2) * f(x, p) = Ef(x, p)$$

$$\frac{1}{2} \left[\left(p - \frac{i}{2} \partial_x \right)^2 + \left(x + \frac{i}{2} \partial_p \right)^2 \right] * f(x, p) = Ef(x, p)$$

$$\left[\left(p - \frac{i}{2} \partial_x \right)^2 + \left(x + \frac{i}{2} \partial_p \right)^2 - 2E \right] * f(x, p) = 0$$

Καταλήξαμε σε μια μερική διαφορική εξίσωση. Το φανταστικό μέρος της εξίσωσης αυτής μας δίνει:

$$(x\partial_p - p\partial_x)f(x, p) = 0$$

Χρησιμοποιώντας τη θεωρία των γραμμικών μερικών διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξεως συμπεραίνουμε ότι:

$$f(x, p) = f(x^2 + p^2)$$

Κάνουμε την αντικατάσταση $z = 2(x^2 + p^2)$. Τότε το πραγματικό μέρος της μερικής διαφορικής εξίσωσης γράφεται:

$$\left(\frac{z}{4} = z\partial_z^2 - \partial_z - E\right)f(z) = 0$$

Κάνουμε την αντικατάσταση $f(z) = e^{\frac{1}{2}L(z)}$. Τότε η παραπάνω εξίσωση γράφεται:

$$\left(z\partial_z^2 - (1-z)\partial_z + E - \frac{1}{2}\right)L(z) = 0$$

Αυτή είναι η εξίσωση Laquerre και έχει λύσεις τα πολυώνυμα Laquerre όταν:

$$E = n + \frac{1}{2}$$

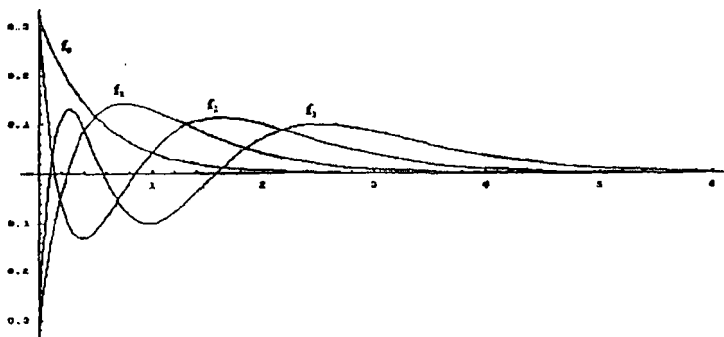
Τότε:

$$L(z) = L_n(z) = \frac{e^z \partial_z^n (e^{-z} z^n)}{n!}$$

και:

$$f_n = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-2H} L_n(4H)$$

Για άλλες τιμές του E οι λύσεις της εξίσωσης δεν συμπεριφέρονται καλά και δεν είναι κανονικοποιήσιμες. Λύσαμε επομένως το πρόβλημα του απλού αρμονικού ταλαντωτή με συναρτήσεις Wigner. Ας δούμε τη γραφική παράσταση των πρώτων λύσεων συναρτήσεως του H .



Σχήμα Α' 1: Πρώτες συναρτήσεις Winger αρμονικού ταλαντωτή

Παρατηρούμε ότι μόνο η f_0 διατηρεί θετικό πρόσημο. Βέβαια δεν πρέπει να ξεχνούμε ότι η θεμελιώδης κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή είναι γκαουσιανή. Επίσης παρατηρούμε ότι όσο πηγαίνουμε σε ανώτερη κατάσταση οπότε και αυξάνει η αβεβαιότητα $(\Delta x)(\Delta p)$ αυξάνουν και οι διακυμάνσεις της συνάρτησης Wigner.

Αξίζει να σημειώσουμε ότι ισχύει όλη η θεωρία του αρμονικού ταλαντωτή όπως τη γνωρίζουμε. Για παράδειγμα μπορούμε να ορίσουμε τις ποσότητες:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip)$$

$$a' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip)$$

Ισχύει για παράδειγμα ότι:

$$\begin{aligned} a * f_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip) * \frac{1}{\pi} e^{-(x^2+p^2)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\left(x + \frac{i}{2} \partial_p \right) + i \left(p - \frac{i}{2} \partial_x \right) \right] e^{-(x^2+p^2)} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [(x - ip) + (ip - x)] e^{-(x^2+p^2)} = 0 \end{aligned}$$

Όμοια μπορούμε να αποδείξουμε και τις υπόλοιπες σχέσεις που σχετίζονται με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής αξιοποιώντας τις ιδιότητες των πολυωνύμων Laquerre.

B. Ο Αλγόριθμος του Shor

B.1 Εισαγωγή

Ο αλγόριθμος του Shor εκτελεί παραγοντοποίηση ακέραιου αριθμού σε πρώτους αριθμούς. Πριν όμως αναλύσουμε τον συγκεκριμένο κβαντικό αλγόριθμο ας δούμε το κλασσικό πρόβλημα.

Η παραγοντοποίηση ακέραιου αριθμού σε πρώτους αριθμούς είναι μια διαδικασία πολύ πιο δύσκολη από την αντίθετή της, δηλαδή τον πολλαπλασιασμό ακέραιων αριθμών. Ενώ για το πρόβλημα του πολλαπλασιασμού ακεραίων υπάρχουν προφανώς αλγόριθμοι πολυωνυμικού χρόνου, δεν υπάρχουν τέτοιοι αλγόριθμοι για την παραγοντοποίηση ακεραίου. Υπάρχουν μόνο αλγόριθμοι εκθετικού χρόνου. Όταν λέμε ότι ένα πρόβλημα είναι πολυωνυμικού ή εκθετικού χρόνου εννοούμε ότι το πλήθος των πράξεων που πρέπει να κάνει ένας υπολογιστής για να το λύσει, επομένως και ο χρόνος που χρειάζεται για να λυθεί το πρόβλημα είναι ασυμπτωτικά πολυωνυμική ή εκθετική συνάρτηση αντίστοιχα του πλήθους των ψηφίων του αριθμού που θέλουμε να παραγοντοποιήσουμε. Για να είμαστε και πιο συγκεκριμένοι ο πιο έξυπνος κλασσικός αλγόριθμος που εκτελεί

παραγοντοποίηση ακέραιου αριθμού, είναι ο αλγόριθμος της κρησάρας και την πραγματοποιεί σε χρόνο:

$$t \sim e^{\left[(\log N)^{\frac{1}{3}} (\log(\log N))^{\frac{3}{2}} \right]}$$

Ο χρόνος αυτός είναι προφανώς συνάρτηση εκθετικού τύπου του $\log N$, που είναι το πλήθος των ψηφίων του N . Ο αλγόριθμος του Shor άλλαξε αυτήν την κατάσταση αφού επιτυγχάνει την παραγοντοποίηση ακεραίου σε χρόνο:

$$t \sim (\log N)^2 (\log(\log N)) (\log(\log(\log N)))$$

ο οποίος προφανώς είναι πολυωνυμική συνάρτηση του $\log N$.

B.2 Περίληψη του αλγόριθμου

Ο Αλγόριθμος του Shor αποτελείται από πέντε βήματα από τα οποία μόνο το δεύτερο απαιτεί τη χρήση κβαντικού υπολογιστή. Όλη η εξυπνάδα λοιπόν του αλγορίθμου εντοπίζεται στο δεύτερο βήμα. Ας δούμε αναλυτικά τα πέντε βήματα:

1. Διαλέγουμε έναν τυχαίο ακέραιο αριθμό m και βρίσκουμε το μέγιστο κοινό διαιρέτη του ζεύγους (N, m) . Το πρόβλημα της εύρεσης του μέγιστου κοινού διαιρέτη είναι πρόβλημα πολυωνυμικού χρόνου. Αν βρούμε $\text{ΜΚΔ}(N, m) \neq 1$, τότε βρήκαμε έναν παράγοντα του N και τελειώσαμε. Αν βρούμε $\text{ΜΚΔ}(N, m) = 1$ τότε προχωράμε στο βήμα 2.
2. Χρησιμοποιούμε έναν κβαντικό υπολογιστή και βρίσκουμε την περίοδο P της συνάρτησης

$$f(x) = m^x \bmod N$$

η οποία αντιστοιχεί φυσικούς αριθμούς σε φυσικούς αριθμούς.

3. Αν ο P είναι περιττός (υπάρχει πιθανότητα $\left(\frac{1}{2}\right)^k$, k το πλήθος των διαφορετικών πρώτων παραγόντων του N , να είναι ο P περιττός) επιστρέφουμε στο βήμα 1. Αν ο P είναι άρτιος τότε προχωρούμε στο βήμα 4.
4. Πλέον ισχύει ότι:

$$\left(m^{\frac{P}{2}} - 1\right) \left(m^{\frac{P}{2}} + 1\right) = m^P - 1 = 0 \bmod N$$

Αν ισχύει ότι $m^{\frac{P}{2}} + 1 = 0 \bmod N$ τότε επιστρέφουμε στο βήμα 1. (Η πιθανότητα

να συμβαίνει αυτό είναι μικρότερη από $\left(\frac{1}{2}\right)^{k-1}$.) Αν $m^{\frac{P}{2}} + 1 \neq 0 \bmod N$ τότε

προχωρούμε στο βήμα 5.

5. Βρίσκουμε το μέγιστο κοινό διαιρέτη του ζεύγους $\left(m^{\frac{p}{2}} - 1, N\right)$. Εύκολα μπορεί

να δειχθεί ότι ο $n = \text{MKΔ}\left(m^{\frac{p}{2}} - 1, N\right)$ είναι μη τετριμμένος πρώτος παράγοντας του N .

Επομένως όλο το ενδιαφέρον μας εντοπίζεται στο πως μπορούμε με έναν κβαντικό υπολογιστή να υπολογίσουμε την περίοδο της συνάρτησης $f(a) = m^a \bmod N$ σε πολυωνυμικό χρόνο.

B.3 Απαιτούμενος κβαντικός υπολογιστής

Απαιτούμε έναν κβαντικό υπολογιστή ο οποίος να μπορεί να χωράει μέχρι και τον αριθμό N^2 . Βρίσκουμε λοιπόν τον ελάχιστο αριθμό L για τον οποίο ισχύει $N^2 \leq 2^L$. Κατασκευάζουμε δύο registers, οι οποίοι να έχουν L qubit ο καθένας. Ο πρώτος register θα περιέχει ορίσματα της f και ο δεύτερος τις τιμές της.

Πριν προχωρήσουμε παρακάτω θα κάνουμε μια παρέμβαση επί του συμβολισμού. Αντί να συμβολίζουμε την κατάσταση του κάθε register με τη δυαδική αναπαράστασή της, θα χρησιμοποιούμε τον αντίστοιχο δεκαδικό αριθμό. Για παράδειγμα:

$$|0\rangle|1\rangle|1\rangle|0\rangle|0\rangle|1\rangle = |011001\rangle = |25\rangle$$

Επίσης θα ορίσουμε τον κβαντικό μετασχηματισμό Fourier Q σημείων, ως τον unitary μετασχηματισμό:

$$F_Q = \frac{1}{\sqrt{Q}} \Omega, \quad \Omega_{ab} = e^{i\frac{2\pi}{Q}ab}$$

Ή αλλιώς:

$$F_Q = \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} \sum_{b=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}ab} |a\rangle|b\rangle$$

Ο κβαντικός μετασχηματισμός Fourier Q σημείων μπορεί να πραγματοποιηθεί σε χρόνο:

$$t \sim (\log N)^2$$

οπότε γίνεται σε πολυωνυμικό χρόνο.

Τέλος να αναφέρουμε και μία βασική ιδιότητα της συνάρτησης f . Αν υποθέσουμε ότι:

$$f(x_1) = f(x_2)$$

Τότε:

$$f(x_1 + 1) = f(x_2 + 1) = mf(x_1) \bmod N$$

Αυτό σημαίνει ότι αν $f(x_1) = f(x_2)$ τότε η διαφορά $x_1 - x_2$ είναι περίοδος της f .

Αυτό σημαίνει ότι σε μια περίοδό της η f είναι 1-1.

B.4 Το κβαντικό κομμάτι του αλγορίθμου

Το κβαντικό κομμάτι του αλγορίθμου του Shor αποτελείται από έξι βήματα.

1. Μηδενίζουμε τους δύο registers έτσι ώστε η αρχική κατάσταση των δύο registers να είναι:

$$|0\rangle|0\rangle$$

2. Εφαρμόζουμε τον μετασχηματισμό Fourier $Q = 2^l$ σημείων στον πρώτο register. Έτσι το σύστημα των δύο registers καταλήγει στην κατάσταση:

$$\begin{aligned} |0\rangle|0\rangle &\xrightarrow{F_Q} \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} \sum_{b=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}ab} |a\rangle|b\rangle|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} \sum_{b=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}ab} |a\rangle \delta_{b0} |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} e^0 |a\rangle|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} |a\rangle|0\rangle \end{aligned}$$

3. Έστω ο unitary μετασχηματισμός U_f ο οποίος εκτελεί την παρακάτω διεργασία:

$$U_f |x\rangle|0\rangle = |x\rangle|f(x)\rangle$$

Εφαρμόζουμε τον U_f στους δύο registers. Τότε παίρνουμε την κατάσταση:

$$\frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} \sum_{b=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}ab} |a\rangle|0\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} |a\rangle|f(a)\rangle$$

4. Εφαρμόζουμε πάλι τον μετασχηματισμό Fourier Q σημείων στον πρώτο register. Έτσι το σύστημα των δύο registers καταλήγει στην κατάσταση:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{a=0}^{Q-1} |a\rangle|f(a)\rangle &\xrightarrow{F_Q} \frac{1}{\sqrt{Q}} \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{c=0}^{Q-1} \sum_{d=0}^{Q-1} \sum_{a=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}cd} |c\rangle|d\rangle|f(a)\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{c=0}^{Q-1} \sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}cd} |c\rangle|f(d)\rangle \end{aligned}$$

5. Εκτελούμε μια μέτρηση στον πρώτο register στη βάση $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots$. Τότε η κατάσταση του συστήματος μετά τη μέτρηση θα είναι:

$$\frac{1}{Q} \sum_{c=0}^{Q-1} \sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}cd} |c\rangle |f(d)\rangle \text{measurement } |x\rangle \frac{\sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle}{\left\| \sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle \right\|}$$

με πιθανότητα:

$$p_x = \frac{\left\| \sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle \right\|^2}{Q^2}$$

και βρήκαμε στην μέτρηση την τιμή x .

B.5 Η στοχαστική πηγή του Shor

Αυτό που καταφέραμε με τα πέντε πρώτα βήματα του κβαντικού μέρους του αλγορίθμου του Shor είναι να δημιουργήσουμε μια κλασσική κατανομή πιθανοτήτων p_x . Η κατανομή αυτή ονομάζεται «στοχαστική πηγή του Shor». Από την κατανομή αυτή θα προσπαθήσουμε να βγάλουμε συμπεράσματα για την περίοδο της συνάρτησης f . Πριν προχωρήσουμε στο τελευταίο βήμα του κβαντικού μέρους του αλγορίθμου του Shor θα μελετήσουμε τις ιδιότητες αυτής της κατανομής πιθανοτήτων.

Κατ' αρχήν θα προσπαθήσουμε να γράψουμε σε καλύτερη μορφή την κυματοσυνάρτηση $\sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle$ εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι η συνάρτηση f είναι περιοδική. Για το λόγο αυτό θεωρούμε ότι $Q = P_q + r$, όπου $0 \leq r < P$ και ορίζουμε και $Q_0 = P_q$. Δηλαδή θεωρήσαμε ότι το Q περιέχει q το πλήθος περιόδους της f και περισσεύει και ένα υπόλοιπο r . Τότε:

$$\sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle = \sum_{d=0}^{Q_0-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle + \sum_{d=Q_0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle$$

Στο πρώτο άθροισμα θεωρούμε ότι $d = y'P + y$, όπου $0 \leq y' \leq q-1$ και $0 \leq y \leq P-1$ ενώ στο δεύτερο άθροισμα θεωρούμε ότι $d = Q_0 + y$ όπου $0 \leq y \leq r-1$. Τότε έχουμε:

$$\begin{aligned}
 \sum_{d=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle &= \\
 &= \sum_{y'=0}^{q-1} \sum_{y=0}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}x(y'p+y)} + \sum_{y=0}^{r-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}x(Q_0+y)} |f(Q_0+Y)\rangle = \\
 &= \left(\sum_{y'=0}^{q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right) \left(\sum_{y=0}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right) + e^{i\frac{2\pi}{Q}xQ_0} \left(\sum_{y=0}^{r-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right) = \\
 &= \left[\left(\sum_{y'=0}^{r-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right) + e^{i\frac{2\pi}{Q}xQ_0} \right] \left(\sum_{y=0}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right) + \\
 &\quad + \left(\sum_{y'=r}^{q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right) \left(\sum_{y=0}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right) = \\
 &= \left(\sum_{y'=0}^q e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right) \left(\sum_{y=0}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right) + \left(\sum_{y'=0}^{q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right) \left(\sum_{y=r}^{p-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy} |f(y)\rangle \right)
 \end{aligned}$$

Έχουμε ήδη δείξει ότι σε μια περίοδο η συνάρτηση f είναι 1-1. Επομένως στα αθροίσματα αυτά όλες οι $|f(y)\rangle$ είναι διαφορετικές μεταξύ τους άρα ορθογώνιες. Επομένως:

$$\left\| \sum_{y'=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle \right\|^2 = r \left| \sum_{y'=0}^q e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right|^2 + (P-r) \left| \sum_{y'=0}^{q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xy'p} \right|^2$$

Αν $\frac{xP}{Q} \in N \Rightarrow xP \neq 0 \pmod{Q}$ τότε όλοι οι όροι των αθροισμάτων είναι μονάδα επομένως:

$$\left\| \sum_{y'=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle \right\|^2 = r(q+1)^2 + (P-r)q^2$$

Αν $\frac{xP}{Q} \notin N \Rightarrow xP \neq 0 \pmod{Q}$ τότε έχουμε να υπολογίσουμε το πεπερασμένο γεωμετρικό άθροισμα:

$$\begin{aligned}
 \left\| \sum_{y'=0}^{Q-1} e^{i\frac{2\pi}{Q}xd} |f(d)\rangle \right\|^2 &= r \left| \frac{e^{i\frac{2\pi}{Q}x(q-1)p-1}}{e^{i\frac{2\pi}{Q}xp} - 1} \right|^2 + (P-r) \left| \frac{e^{i\frac{2\pi}{Q}xqp} - 1}{e^{i\frac{2\pi}{Q}xp} - 1} \right|^2 = \\
 &= r \frac{\sin\left(\frac{\pi}{Q}x(q+1)P\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{Q}xP\right)} + (P-r) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{Q}xqP\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{Q}xP\right)}
 \end{aligned}$$

αφού:

$$|e^{i\phi} - 1|^2 = |\cos \phi - 1 + i \sin \phi|^2 = (\cos \phi - 1)^2 + \sin^2 \phi = 2 - 2 \cos \phi = 4 \sin^2 \frac{\phi}{2}$$

Άρα συνοψίζοντας έχουμε:

$$p_x = \begin{cases} r \frac{\sin\left(\frac{P}{Q} x(q+1)P\right)}{Q^{2 \sin\left(\frac{\pi}{Q} xP\right)} + (P-r) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{Q} xqP\right)}{Q^2 \sin\left(\frac{\pi}{Q} xP\right)}, & xP \neq 0 \pmod{Q} \\ \frac{r(q+1)^2 + (P-r)q^2}{Q^2}, & xP = 0 \pmod{Q} \end{cases}$$

Αυτό που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι ότι αν το P είναι διαιρέτης του Q δηλαδή αν $r = 0$ εύκολα μπορεί κανείς να δείξει ότι:

$$p_x = \begin{cases} 0 & xP \neq 0 \pmod{Q} \\ \frac{1}{P} & xP = 0 \pmod{Q} \end{cases}$$

Επίσης μπορούμε και έχει ιδιαίτερη αξία να δείξουμε ότι:

$$p_x \geq \begin{cases} \frac{4}{\pi^2} \frac{1}{P} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2, & 0 < |\{xP\}_Q| \leq \frac{P}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \\ \frac{1}{P} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2, & \{xP\}_Q = 0 \end{cases}$$

όπου με $\{a\}_Q$ εννοούμε το υπόλοιπο της διαίρεσης του a με το Q , το μικρότερο κατ' απόλυτη τιμή, δηλαδή αυτό για το οποίο ισχύει:

$$-\frac{Q}{2} \leq \{a\}_Q < \frac{Q}{2}$$

Ας ορίσουμε έναν ακόμα συμβολισμό. Με $\lfloor x \rfloor$ συμβολίζουμε το ακέραιο μέρος του x . Προφανώς το $\left\lfloor x + \frac{1}{2} \right\rfloor$ είναι η στρογγυλοποίηση του x . Επίσης προφανώς ισχύει ότι:

$$\frac{\alpha}{Q} = \left\lfloor \frac{\alpha}{Q} + \frac{1}{2} \right\rfloor + \frac{\{\alpha\}_Q}{Q}$$

Ας αποδείξουμε τώρα τις τελευταίες ανισοτικές σχέσεις χρησιμοποιώντας τις ανισότητες $N^2 \leq Q < 2N^2, 0 < P \leq N$ και $Q_0 \leq Q$, καθώς και τους παραπάνω ορισμούς. Πρώτα θα μελετήσουμε την περίπτωση που έχουμε $0 < |\{xP\}_Q| \leq \frac{P}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right)$.

Ισχύει γενικά ότι:

$$\begin{aligned}
\left| \frac{\pi \{Px\}_Q}{Q} (q+1) \right| &= \left| \frac{\pi \{Px\}_Q}{Q} \left(\frac{Q_0}{P} + 1 \right) \right| \leq \frac{\pi P}{Q} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(\frac{Q+P}{P} \right) \leq \\
&\leq \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(\frac{Q+P}{Q} \right) \leq \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(\frac{N^2+N}{2N^2} \right) \leq \\
&\leq \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 + \frac{1}{2N} \right) \leq \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 + \frac{1}{N} \right) \leq \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N^2} \right) < \frac{\pi}{2}
\end{aligned}$$

Συνεπώς είναι προφανές ότι ισχύουν επίσης:

$$\left| \frac{\pi \{Px\}_Q}{Q} q \right| < \frac{\pi}{2}$$

$$\left| \frac{\pi \{Px\}_Q}{Q} \right| < \frac{\pi}{2}$$

Παρακάτω θα χρησιμοποιήσουμε τη γνωστή ανισότητα:

$$\frac{4}{\pi^2} x^2 \leq \sin^2 x \leq x^2$$

που ισχύει όταν $|x| < \frac{\pi}{2}$. Πλέον έχουμε:

$$\begin{aligned}
p_x &= r \frac{\sin\left(\frac{\pi}{Q} x(q+1)P\right)}{Q^2 \sin\left(\frac{\pi}{Q} xP\right)} + (P-r) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{Q} xqP\right)}{Q^2 \sin\left(\frac{\pi}{Q} xP\right)} = \\
&= \frac{r \sin\left(\pi \left[\frac{xP}{Q} + \frac{1}{2} \right] (q+1) + \pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} (q+1)\right)}{Q^2 \sin\left(\pi \left[\frac{xP}{Q} + \frac{1}{2} \right] + \pi \frac{\{xP\}_Q}{Q}\right)} + \\
&+ \frac{(P-r) \sin\left(\pi \left[\frac{xP}{Q} + \frac{1}{2} \right] q + \pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} q\right)}{Q^2 \sin\left(\pi \left[\frac{xP}{Q} + \frac{1}{2} \right] + \pi \frac{\{xP\}_Q}{Q}\right)} = \\
&= \frac{r \sin\left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} (q+1)\right) + (P-r) \sin\left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} q\right)}{Q^2 \sin\left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q}\right)}
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την ανισότητα που θεωρήσαμε προηγουμένως για το ημίτονο και αφού έχουμε αποδείξει ήδη ότι ισχύουν οι προϋποθέσεις για να ισχύει έχουμε:

$$\begin{aligned}
p_x &\geq \frac{r \frac{4}{\pi^2} \left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} (q+1)^2 \right) + (P-r) \frac{4}{\pi^2} \left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} q \right)^2}{Q^2 \left(\pi \frac{\{xP\}_Q}{Q} \right)} = \\
&= \frac{r \frac{4}{\pi^2} (q+1)^2 + (P-r) \frac{4}{\pi^2} q^2}{Q^2} \geq \frac{r \frac{4}{\pi^2} q^2 + (P-r) \frac{4}{\pi^2} q^2}{Q^2} = \\
&= \frac{P \frac{4}{\pi^2} q^2}{Q^2} = \frac{P \frac{4}{\pi^2} \left(\frac{Q-r}{P} \right)^2}{Q^2} = \frac{4}{\pi^2 P} \left(1 - \frac{r}{Q} \right)^2 \geq \frac{4}{\pi^2 P} \left(1 - \frac{1}{N} \right)^2
\end{aligned}$$

Στην περίπτωση που έχουμε $\{xP\}_Q = 0$ τότε ισχύει:

$$\begin{aligned}
p_x &= \frac{r(q+1)^2 + (P-r)q^2}{Q^2} \geq \frac{rQ^2 + (P-r)q^2}{Q} = \frac{Pq^2}{Q^2} = \\
&= \frac{P}{Q^2} \left(\frac{Q-r}{P} \right)^2 = \frac{1}{P} \left(1 - \frac{r}{Q} \right)^2 \geq \frac{1}{P} \left(1 - \frac{1}{N} \right)^2
\end{aligned}$$

Οι τελευταίες ανισοτικές σχέσεις είναι και το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό της στοχαστικής πηγής του Shor. Αν η τιμή του N είναι μεγάλη (και μάλιστα αυτές μόνο οι περιπτώσεις μας ενδιαφέρουν) η κατανομή πιθανοτήτων μας, ευνοεί πάρα πολύ τα ενδεχόμενα για τα οποία ισχύει:

$$|\{xP\}_Q| \leq \frac{P}{2}$$

B.6 Πριν το τελευταίο βήμα...

Πριν προχωρήσουμε στα παρακάτω απαιτούνται λίγες γνώσεις από θεωρία συνεχών κλασμάτων. Κάθε ρητός αριθμός μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$\xi = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \frac{1}{\dots + \frac{1}{a_N}}}}}$$

όπου τα a_n είναι φυσικοί αριθμοί. Οι αριθμοί αυτοί βρίσκονται με την ακόλουθη διαδικασία:

$$\begin{cases} \alpha_0 = \lfloor \xi \rfloor \\ \Delta \xi_0 = \xi - \alpha_0 \end{cases}$$

και εάν $\Delta \xi_n \neq 0$ τότε:

$$\begin{cases} \alpha_n + 1 = \left\lfloor \frac{1}{\Delta \xi_n} \right\rfloor \\ \Delta \xi_{n+1} = \frac{1}{\Delta \xi_n} - \alpha_n + 1 \end{cases}$$

Η ακολουθία αυτή πάντα τελειώνει εάν ο ξ είναι ρητός. Με τον τρόπο αυτό έχουμε μια συνεχή προσέγγιση του αριθμού ξ από τους όρους μιας ακολουθίας η οποία όμως σε κάποιο σημείο, όταν $\Delta \xi_n = 0$, σταθεροποιείται. Συγκεκριμένα:

$$\xi_n = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{\dots + \frac{1}{a_n}}}}$$

Γνωρίζουμε από τη θεωρία των αριθμών ότι οι όροι αυτής της ακολουθίας είναι ανάγωγα κλάσματα, δηλαδή ο μέγιστος κοινός διαιρέτης αριθμητή και παρανομαστή είναι η μονάδα. Μάλιστα εύκολα βρίσκουμε ότι ο αριθμητής και ο παρανομαστής δίνονται από τις παρακάτω εκφράσεις:

$$\xi_n = \frac{p_n}{q_n}$$

$$\begin{cases} p_0 = \alpha_0 \\ q_0 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} p_1 = \alpha_1 \alpha_0 + 1 \\ q_1 = \alpha_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} p_n = \alpha_n p_{n-1} + p_{n-2} \\ q_n = \alpha_n q_{n-1} + q_{n-2} \end{cases}$$

Επίσης να προσθέσουμε ένα θεώρημα από τη θεωρία των συνεχών κλασμάτων. Αν ένα κλάσμα είναι αρκετά κοντά στην τιμή του ξ τότε σίγουρα στη διαδικασία συνεχούς προσέγγισης του ξ από συνεχή κλάσματα περάσαμε από αυτό το κλάσμα. Συγκεκριμένα αν:

$$\left| \xi - \frac{\alpha}{b} \right| \leq \frac{1}{2b^2}$$

τότε:

$$\frac{\alpha}{b} = \xi_n = \frac{p_n}{q_n}$$

Επίσης θα δείξουμε ότι η συνάρτηση d η οποία:

$$d: S_Q \rightarrow S_p$$

όπου:

$$S_Q = \left\{ x \mid -\frac{P}{2} < \{xP\}_Q \leq \frac{P}{2} \right\}$$

$$S_p = \{d \mid 0 \leq d < P\}$$

$$d(x) = \left\lfloor \frac{P}{Q}x + \frac{1}{2} \right\rfloor$$

είναι αντιστρέψιμη με αντίστροφη την:

$$x: S_p \rightarrow S_Q$$

$$x(d) = \left\lfloor \frac{Q}{P}d + \frac{1}{2} \right\rfloor$$

Ιδού η απόδειξη:

$$\frac{Px}{Q} = \left\lfloor \frac{Px}{Q} + \frac{1}{2} \right\rfloor + \frac{\{Px\}_Q}{Q} = d + \frac{\{Px\}_Q}{Q}$$

Άρα:

$$\frac{dQ}{P} = x - \frac{\{Px\}_Q}{P}$$

Ισχύει όμως ότι:

$$-\frac{1}{2} \leq -\frac{\{Px\}_Q}{P} < \frac{1}{2}$$

Επομένως:

$$\left\lfloor \frac{dQ}{P} + \frac{1}{2} \right\rfloor = x$$

Τέλος να δείξουμε ότι αν $|\{xP\}_Q| \leq \frac{P}{2}$, τότε ο ρητός $\frac{d(x)}{P}$ είναι κάποιο συνεχές

κλάσμα στην ανάπτυξη σε συνεχή κλάσματα του $\frac{x}{Q}$.

$$\{Px\}_Q = Px - Q \left\lfloor \frac{Px}{Q} + \frac{1}{2} \right\rfloor = Px - Qd(x)$$

$$|\{Px\}_Q| \leq \frac{P}{2} \Rightarrow |Px| - Qd(x) \leq \frac{P}{2} \Rightarrow \left| \frac{x}{Q} - \frac{d(x)}{P} \right| \frac{2}{Q} \leq \frac{2}{N^2} \leq \frac{2}{P^2}$$

Άρα με βάση το παραπάνω θεώρημα έχουμε ότι:

$$\frac{d(x)}{P} = \frac{p_n}{q_n}$$

Και να ο τρόπος για να βρούμε την περίοδο P . Αν το κλάσμα $\frac{d(x)}{P}$ είναι ανάγωγο κλάσμα, τότε:

$$\begin{cases} p_n = d(x) \\ q_n = P \end{cases}$$

Η πιθανότητα να είναι το κλάσμα $\frac{d(x)}{P}$ ανάγωγο είναι μεγάλη και μεγαλώνει όσο μεγαλώνει η περίοδος P . Επειδή εμάς μας ενδιαφέρουν περιπτώσεις με μεγάλα N όπου γενικά και η περίοδος είναι μεγάλη και η πιθανότητα να είναι το κλάσμα $\frac{d(x)}{P}$ ανάγωγο είναι αντίστοιχα μεγάλη.

B.7 Το τελευταίο βήμα

Δεν μας έμεινε λοιπόν σύμφωνα με τα τελευταία παρά να αναπτύξουμε το κλάσμα $\frac{x}{Q}$ σε συνεχή κλάσματα και να ελέγχουμε συνεχώς αν $q_n = P$ εξετάζοντας αν ισχύει ότι:

$$m^{q^n} = 1 \pmod{N}$$

Αν φτάσουμε σε συνεχές κλάσμα ακριβώς ίσο με $\frac{x}{Q}$ και δεν έχουμε βρει ακόμα την περίοδο τότε πρέπει να επιστρέψουμε στην αρχή του κβαντικού μέρους του αλγορίθμου ώστε να μετρήσουμε άλλον αριθμό x . Ωστόσο όπως αναφέραμε και στη μελέτη της στοχαστικής πηγής του Shor η πιθανότητα να έχουμε $|\{xP\}_Q| \leq \frac{P}{2}$ είναι ιδιαίτερα αυξημένη με αποτέλεσμα να είναι μικρή η πιθανότητα να φτάσουμε εδώ. Ακριβώς αυτή είναι και η αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου του Shor. Δεν μας εγγυάται ότι θα τελειώσει γρήγορα αλλά τελειώνει γρήγορα με πολύ αυξημένες πιθανότητες, ώστε κατά μέσον όρο να τελειώνει σε πολυωνυμικό χρόνο.

B.8 Ένα παράδειγμα

Έστω ότι θέλουμε να παραγοντοποιήσουμε τον αριθμό 77. κατ' αρχήν βρίσκουμε:

$$N = 77$$

$$L = 13$$

$$Q = 2^L = 8192$$

$$N^2 = 5929$$

$$2N^2 = 11858$$

Οπότε όντως:

$$N^2 \leq Q < 2N^2$$

Επίσης:

$$r = 2$$

$$Q_0 = 8190$$

1. Επιλέγουμε $m = 3$. Εύκολα βρίσκουμε ότι:

$$\text{ΜΚΔ}(77,3) = 1$$

οπότε συνεχίζουμε στο επόμενο βήμα.

2. Θέλουμε να βρούμε την περίοδο της συνάρτησης:

$$f(\alpha) = 3^\alpha \bmod 77$$

Πριν προχωρήσουμε στο κβαντικό κομμάτι του αλγόριθμου, ας κάνουμε μια παρασπονδία και ας βρούμε την περίοδο της συνάρτησης αυτής. υπολογίζουμε τις πρώτες τιμές της και:

α	$f(\alpha)$	α	$f(\alpha)$	α	$f(\alpha)$	α	$f(\alpha)$
0	1	8	16	16	25	24	15
1	3	9	48	17	75	25	45
2	9	10	67	18	71	26	58
3	27	11	47	19	59	27	20
4	4	12	64	20	23	28	60
5	12	13	38	21	69	29	26
6	36	14	37	22	53	30	1
7	31	15	34	23	5	31	3

Άρα $P = 30$

- 2.1. Ξεκινάμε το κβαντικό κομμάτι του αλγόριθμου. Προετοιμάζουμε τους registers στην κατάσταση:

$$|0\rangle|0\rangle$$

- 2.2. Εφαρμόζουμε τον μετασχηματισμό Fourier 8192 σημείων στον πρώτο register, οπότε καταλήγουμε στην κατάσταση:

$$\frac{1}{\sqrt{8192}} \sum_{x=0}^{8191} |x\rangle|0\rangle$$

- 2.3. Εφαρμόζουμε τον unitary μετασχηματισμό U_f στους δύο registers, οπότε καταλήγουμε στην κατάσταση:

$$\frac{1}{\sqrt{8192}} (|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|3\rangle + |2\rangle|9\rangle + \dots + |29\rangle|26\rangle + |30\rangle|1\rangle + \dots + |8190\rangle|1\rangle + |8191\rangle|3\rangle)$$

- 2.4. Εφαρμόζουμε πάλι τον μετασχηματισμό Fourier 8192 σημείων στον πρώτο register, οπότε καταλήγουμε στην κατάσταση:

$$\frac{1}{8192} \sum_{x=0}^{8191} |x\rangle \sum_{y=0}^{8191} e^{i \frac{2\pi}{8192} xy} |e^y \bmod 77\rangle$$

- 2.5. Κάνουμε μια μέτρηση στον πρώτο register και βρίσκουμε $x = 5188$. Η

πιθανότητα να βρούμε αυτό το x είναι $p_{5188} = 2,62\%$. Αυτό βέβαια δεν το ξέραμε όταν κάναμε τη μέτρηση, εμείς το υπολογίσαμε από τον τύπο της κατανομής πιθανότητας γνωρίζοντας ήδη το P . Πάντως μπορούμε να συμπεράνουμε ότι καθόλου τυχεροί δεν ήμασταν που βρήκαμε αυτό το αποτέλεσμα, αφού η πιθανότητά του είναι ιδιαίτερα αυξημένη αν σκεφτεί κανείς ότι διαλέγουμε ένα από 8192 ενδεχόμενα. Επίσης πρέπει να παρατηρήσουμε ότι:

$$\{Px\}_Q = \{30 \cdot 5188\}_{8192} = 8 < 15$$

Σε αυτό που είμαστε τυχεροί είναι ότι $d(5188) = 19$ οπότε το κλάσμα $\frac{d}{P}$ είναι ανάγωγο κλάσμα. Και σε αυτό το θέμα πάντως είχαμε ιδιαίτερα αυξημένες πιθανότητες.

2.6. Ξεκινάμε τώρα να κάνουμε ανάλυση σε συνεχή κλάσματα τον αριθμό

$$\xi = \frac{x}{Q} = \frac{5188}{8192}. \text{ Σε κάθε βήμα ελέγχουμε αν το } q_n \text{ είναι η ζητούμενη}$$

περίοδος.

$\alpha_0 = 0$	$\xi_0 = \frac{5188}{8192}$	$p_0 = 0$	$q_0 = 1$
$\alpha_1 = 1$	$\xi_1 = \frac{3004}{5188}$	$p_1 = 1$	$q_1 = 1$
$\alpha_2 = 1$	$\xi_2 = \frac{2184}{3004}$	$p_2 = 1$	$q_2 = 2$
$\alpha_3 = 1$	$\xi_3 = \frac{820}{2184}$	$p_3 = 2$	$q_3 = 3$
$\alpha_4 = 2$	$\xi_4 = \frac{544}{820}$	$p_4 = 5$	$q_4 = 8$
$\alpha_5 = 1$	$\xi_5 = \frac{276}{544}$	$p_5 = 7$	$q_5 = 11$
$\alpha_6 = 1$	$\xi_6 = \frac{268}{276}$	$p_6 = 12$	$q_6 = 19$
$\alpha_7 = 1$	$\xi_7 = \frac{8}{268}$	$p_7 = 19$	$q_7 = 30$

Επομένως στο όγδοο βήμα βρήκαμε την περίοδο της συνάρτησης f . Μπορούμε πλέον να προσχωρήσουμε στο υπόλοιπο κλασικό κομμάτι του αλγόριθμου.

3. Το P είναι άρτιος αριθμός οπότε προχωράμε στο επόμενο βήμα.

$$4. \quad m^2 + 1 \bmod 77 = 3^{15} + 1 \bmod 77 = 35 \neq 0$$

Επομένως προχωράμε στο επόμενο βήμα.

$$5. \quad \text{ΜΚΔ}(3^{15} - 1, 77) = \text{ΜΚΔ}(14348906, 77) = 11$$

Οπότε βρήκαμε έναν μη τετριμμένο διαιρέτη του 77. Ο αλγόριθμος του Shor ολοκληρώθηκε.

Γ. ΠΑΛΑΙΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ

Γ.1 Η παραδοχή του Max Planck

Κάθε φυσικό σύστημα που μεταβάλλεται κατά ημιτονοειδή τρόπο με το χρόνο δεν μπορεί να κατέχει οποιαδήποτε τιμή ενέργειας αλλά μόνο ορισμένες διακριτές τιμές.

Ειδικότερα

$$E = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\Gamma.1)$$

Η σταθερά h καλείται σταθερά του Planck και παίρνει την τιμή

$$h = 6.66 \cdot 10^{-34} \text{ joule sec}$$

Ός ν συμβολίζεται η συχνότητα ταλάντωσης.

Η ποσότητα $\varepsilon = h\nu$ ονομάζεται κβάντουμ ενέργειας.

Παρατηρήσεις

1. Με την εισαγωγή της κβάντωσης της ενέργειας είναι φανερό ότι η απορρόφηση ή η εκπομπή ενέργειας πραγματοποιείται κατά κβάντουμ
2. Τα κβάντουμ ενέργειας διαδίδονται (κατά Planck) κατά τον κλασικό τρόπο.
3. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, η ακριβής έκφραση της ενέργειας ταλαντωτή είναι

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

όπου $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

Γ.2 Η σωματιδιακή φύση της ακτινοβολίας κατά Einstein

Ο Einstein ερμήνευσε τη διάδοση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας όχι μέσω κυμάτων, αλλά σωματιδίων που τα ονόμασε φωτόνια. Τα σωματίδια αυτά έχουν ενέργεια

$$E = h\nu \quad (\Gamma.3)$$

διαδίδονται με την ταχύτητα του φωτός, έχουν μηδενική μάζα ηρεμίας και ορμή

$$P = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\kappa \quad (\Gamma.4)$$

όπου $\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}$ είναι ο κυματαριθμός.

Γ.3 Ο κυματικός χαρακτήρας της ύλης - Υπόθεση De Broglie

Ο De Broglie αντέστρεψε την υπόθεση του Einstein και θεώρησε ότι ένα υλικό σωματίο μάζας m , ενέργειας E και ορμής p αντιστοιχεί σε κύμα μήκους κύματος

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\Gamma.5)$$

και συχνότητας

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (\Gamma.6)$$

Παρατηρήσεις

1. Η υπόθεση De Broglie επικυρώθηκε πειραματικά από τους Davisson – Germer.
2. Πρέπει να διευκρινιστεί ότι το σωματίο αντιστοιχεί σε μια ομάδα οδευόντων κυμάτων που ονομάζεται κυματόδεμα.

Γ.4 Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Σε αντίθεση με την Κλασική Φυσική, στα πλαίσια της Κβαντομηχανικής, η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου δεν είναι δυνατόν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια. Δηλαδή:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2} \quad (\Gamma.7)$$

ή γενικότερα

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{h}{2} \quad (\Gamma.8)$$

όπου q και p ζεύγος συζυγών μεταβλητών.

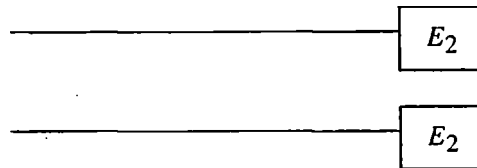
Επίσης ισχύει η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας – χρόνου

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \frac{h}{2} \quad (\Gamma.9)$$

σύμφωνα με την οποία η απροσδιοριστία της ενέργειας ΔE σε μια μέτρηση που διαρκεί χρονικό διάστημα Δt επαληθεύει την ανισότητα (Γ.9).

Παρατηρήσεις

1. Αν κατά κάποιο τρόπο προσδιορίσουμε επακριβώς τη θέση x ενός σωματιδίου ($\Delta x = 0$), η αβεβαιότητα ως προς την ορμή Δp_x λόγω της (Γ.7) γίνεται άπειρη. Γενικότερα, όσο ακριβέστερα γνωρίζουμε μια μεταβλητή, τόσο ανακριβέστερα γνωρίζουμε τη συζυγή της.
2. Η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας χρόνου (Γ.9) έχει τελείως διαφορετική φυσική ερμηνεία από την (Γ.7). Ειδικότερα:
Έστω κάποιο φυσικό σύστημα που για λόγους απλότητας θεωρούμε ότι διαθέτει δύο μόνο ενεργειακές στάθμες.



Αν το σωματίο παραμένει μόνιμα σε κάποια ενεργειακή στάθμη, τότε η ενέργεια του είναι πλήρως καθορισμένη ($\Delta E = 0$) οπότε λόγω (Γ.9) ισχύει $\Delta t = \infty$ ("άπερος" χρόνος ζωής τ της στάθμης).

Αν αντιθέτως $\Delta t = 0$ δηλαδή αν το σύστημα εκτελεί μεταπτώσεις, τότε $\Delta E = \infty$ (πλήρης αδυναμία εντοπισμού του σε μια στάθμη).

3. Πολύ συχνά κάνοντας χρήση της αρχής αβεβαιότητας, πραγματοποιούμε εκτίμηση για την τάξη μεγέθους της θεμελιώδους στάθμης διάφορων κβαντικών συστημάτων, θεωρώντας ότι στη θεμελιώδη κατάσταση ισχύει η προσέγγιση

$$\Delta q \Delta p \cong \frac{\hbar}{2}.$$

Γ.5 Κανόνας κβάντωσης Wilson – Sommerfeld – Bohn

Σύμφωνα με τον κανόνα αυτό ισχύει

$$\oint_c p_q dq = nh$$

όπου p_q είναι η συζυγής ορμή της μεταβλητής q , το κλειστό φασικό ολοκλήρωμα υπολογίζεται μεταξύ των κλασικών ορίων κίνησης, ενώ $n = 1, 2, \dots$.

Παρατήρηση

Παραλλαγή του παραπάνω φασικού ολοκληρώματος αποτελεί ο τύπος της ημικλασικής προσέγγισης WKB (Wilson, Kramers, Brillouin, Jeffreys):

$$\int_{\chi_1}^{\chi_2} \sqrt{2m[E - V(\chi)]} d\chi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

όπου χ_1, χ_2 είναι τα σημεία αναστροφής της κλασικής κίνησης, δηλαδή τα σημεία εκείνα όπου η ενέργεια E εξισώνεται με το δυναμικό $V(\chi)$.

Γ.6 Το μοντέλο Bohr για τα υδρογονοειδή

Υδρογονοειδή ονομάζονται τα συστήματα των οποίων ο πυρήνας αποτελείται από Z πρωτόνια έλκει ένα και μόνο ένα ηλεκτρόνιο. Ο Niels Bohr ερμήνευσε κλασικά τη συμπεριφορά τους εισάγοντας τρεις αυθαίρετες παραδοχές:

➤ Το ηλεκτρόνιο κινείται σε διακριτές κυκλικές τροχιές γύρω από τον ακλόνητο πυρήνα. Κάθε τέτοια τροχιά χαρακτηρίζεται από την αντίστοιχη κβαντισμένη ενέργεια.

➤ Η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι επίσης κβαντισμένη, δηλαδή

$$L = mvr = n\hbar$$

με $n = 1, 2, \dots$

➤ Ακτινοβολία εκπέμπεται ή απορροφάται μόνο κατά τις μεταπτώσεις από τη μια ενεργειακή στάθμη στην άλλη, δηλαδή η αντίστοιχη συχνότητα θα είναι

$$\nu = \frac{\Delta E}{h}$$

Με βάση αυτές τις τρεις παραδοχές και θεωρώντας ως κεντρομόλο την ελκτική δύναμη Coulomb

$$F = -\frac{Ze^2}{r^2}$$

ο Bohr υπολόγισε τις τροχιές και τις ενέργειες:

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{e^2 m Z} \quad E_n = \frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

όπου $n = 1, 2, \dots$

Για $n=1$ και $Z=1$ έχουμε την πρώτη ακτίνα του Bohr

$$r = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$$

Γ.7 Η αρχή της αντιστοιχίας

Σύμφωνα με την αρχή αυτή τα συμπεράσματα της Κβαντομηχανικής συμπίπτουν με αυτά της Κλασικής Μηχανικής για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς. Το κλασικό όριο λαμβάνεται επίσης θεωρώντας $h \rightarrow 0$, $m \rightarrow \infty$.

Δ. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΘΕΜΕΛΙΩΣΗ ΤΗΣ ΣΥΓΧΡΟΝΗΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Δ.1 Τελεστές

Τελεστής \hat{A} ονομάζεται κάθε μαθηματική ποσότητα που μετασχηματίζει μια συνάρτηση $y(x_1, x_2, \dots)$ σε μια άλλη συνάρτηση $\phi(x_1, x_2)$. Δηλαδή:

$$\hat{A}y = \phi$$

Η μορφή του τελεστή εξαρτάται από το χώρο που δρα και μπορεί να γραφεί υπό μορφή μήτρας.

Γραμμικός τελεστής ονομάζεται ο τελεστής εκείνος για τον οποίο ισχύει

$$\hat{A}(c_1 y_1 + c_2 y_2) = c_1 \hat{A}y_1 + c_2 \hat{A}y_2$$

Άθροισμα \hat{C} δύο τελεστών \hat{A} και \hat{B} εννοούμε τον τελεστή για τον οποίο ισχύει

$$\hat{C}y = \hat{A}y + \hat{B}y$$

Γινόμενο \hat{D} δύο τελεστών \hat{A} και \hat{B} εννοούμε τον τελεστή για τον οποίο ισχύει

$$\hat{D}y = \hat{A}\hat{B}y = \hat{A}(\hat{B}y)$$

όπου ο \hat{B} επιδρά πρώτος επί της y .

Γενικά για τους τελεστές δεν ισχύει η αντιμεταθετική ιδιότητα, δηλαδή

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

Μεταθέτης δύο τελεστών \hat{A} και \hat{B} ορίζεται ο τελεστής

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Ιδιότητες μεταθετών

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{A}] &= 0 \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}] \\ [\hat{A}, \lambda \hat{B}] &= \lambda [\hat{A}, \hat{B}] \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \end{aligned}$$

Δ.2 Εξίσωση ιδιοτιμών - Ερμιτιανοί τελεστές

Η σχέση $\hat{A}y = \lambda y$ με λ μια σταθερά ποσότητα, ονομάζεται **εξίσωση ιδιοτιμών**. Ειδικότερα οι y ονομάζονται **ιδιοσυναρτήσεις** και οι λ **ιδιοτιμές**.

Το **εσωτερικό γινόμενο** στους χώρους μιγαδικών συναρτήσεων ορίζεται ως εξής:

$$(y_1, y_2) = \int_V y_1^*(\vec{r}) y_2(\vec{r}) dV$$

όπου το σύμβολο «*» εκφράζει τη μιγαδική συζυγία.

Συναφής \hat{A}^+ ενός τελεστή \hat{A} , ονομάζεται ο τελεστής εκείνος που εξασφαλίζει την ισότητα

$$\int_V y_1^* \hat{A} y_2 dV = \int_V \left(\hat{A}^+ y_1 \right)^* y_2 dV$$

Ιδιότητες συναφών τελεστών

$$\begin{aligned} \left(\hat{A}^+ \right)^+ &= \hat{A} \\ \left(\lambda \hat{A} \right)^+ &= \lambda^* \hat{A}^+ \\ \left(\hat{A} + \hat{B} \right)^+ &= \hat{A}^+ + \hat{B}^+ \\ \left(\hat{A}\hat{B} \right)^+ &= \hat{B}^+ \hat{A}^+ \end{aligned}$$

Ερμιτιανός ονομάζεται ο τελεστής \hat{A} εκείνος για τον οποίο ισχύει $\hat{A}^+ = \hat{A}$, δηλαδή:

$$\int_V y_1^* \hat{A} y_2 dV = \int_V \left(\hat{A} y_1 \right)^* y_2 dV$$

Όπως αποδεικνύεται οι ερμιτιανοί τελεστές έχουν πραγματικές ιδιοτιμές

Unitary (μοναδιαίος) τελεστής ονομάζεται ο τελεστής \hat{U} για τον οποίο ο συναφής του ταυτίζεται με τον αντίστροφο του, δηλαδή $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Δ.3 Εσωτερικό γινόμενο συναρτήσεων

Όπως είδαμε αυτό ορίζεται ως $\int_V y_1^* y_2 dV$.

Αν το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων είναι μηδέν, δηλαδή εάν

$$\int_V y_1^* y_2 dV = 0$$

τότε οι y_1 και y_2 ονομάζονται **ορθογώνιες** στο διάστημα ολοκλήρωσης, ενώ εάν ισχύει

$$\int_V y_1^* y_2 dV = \int_V |y_1|^2 dV = 1$$

η y_1 λέγεται **κανονικοποιημένη**.

Γενικότερα, οι y_i και y_j ονομάζονται **ορθοκανονικοποιημένες**, αν

$$\int_V y_i^* y_j dV = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

όπου δ_{ij} το σύμβολο του Kronecker.

Δ.4 Ο συμβολισμός DIRAC

Ο Dirac συμβόλισε τις συναρτήσεις-διανύσματα των μιγαδικών χώρων με το σύμβολο $|y\rangle$ που ονόμασε ket. Το εσωτερικό γινόμενο δύο ket $|y_1\rangle$ και $|y_2\rangle$ λέγεται bracket, δηλαδή

$$(y_1, y_2) = \langle y_1 | y_2 \rangle$$

όπου όπως φαίνεται, το ket $|y_1\rangle$ μετατρέπεται σε bra $\langle y_1 |$ προκειμένου να σχηματιστεί το εσωτερικό γινόμενο.

Με το νέο συμβολισμό η ερμιτιανότητα π.χ. ενός τελεστή \hat{A} ελέγχεται μέσω της σχέσης

$$\left\langle y_1 \left| \hat{A} y_2 \right. \right\rangle = \left\langle \hat{A} y_1 \left| y_2 \right. \right\rangle$$

Στο συμβολισμό Dirac ένας γενικός τελεστής γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός τελεστών της μορφής $|y_i\rangle \langle y_j|$.

Συνεχίζουμε αυτό το θεωρητικό συμπλήρωμα με την εισαγωγή ενός ευρύτατα χρησιμοποιούμενου συμβολισμού των κβαντικών καταστάσεων που είναι ιδιαίτερα κατάλληλος όταν θέλει κανείς να αναδείξει την αφηρημένη μαθηματική δομή του Κβαντομηχανικού φορμαλισμού. Πρόκειται για τον περίφημο συμβολισμό του Dirac του οποίου η κεντρική ιδέα δεν είναι παρά η επέκταση και σε χώρους άπειρης διάστασης, των εννοιών διάνυσμα στήλης και διάνυσμα γραμμής που αποδεικνύονται εξαιρετικά χρήσιμες σε χώρους πεπερασμένης διάστασης. Έτσι, παραδείγματος χάρη, χρησιμοποιώντας «δίπλα» σε κάθε διάνυσμα στήλης X και το αντίστοιχο διάνυσμα γραμμής X^+ μπορούμε να εκφράσουμε το μεν εσωτερικό γινόμενο (X, Y) υπό τη μορφή X^+Y , τον δε προβολικό τελεστή κατά την κατεύθυνση ενός μοναδιαίου διανύσματος X ως XX^+ .

Η ιδέα του Dirac ήταν ακριβώς να εισαγάγει και για τα διανύσματα του χώρου των κβαντικών καταστάσεων την έννοια του συζύγου διανύσματος θεωρώντας τα αρχικά ως διανύσματα στήλης και τα συζυγή τους ως διανύσματα γραμμής. Σύμφωνα με τον Dirac λοιπόν, κάθε κβαντική κατάσταση ψ θα περιγράφεται από δύο αφηρημένα διανύσματα ταυτόχρονα. Το πρώτο θα θεωρείται (νοερά) ως διάνυσμα στήλης και θα δηλώνεται με το σύμβολο $|\psi\rangle$ ενώ το δεύτερο θα θεωρείται ως διάνυσμα γραμμής και θα παριστάνεται με $\langle\psi|$. Σ' αυτά τα δύο είδη καταστασιακών διανυσμάτων ο Dirac έδωσε και δύο ιδιαίτερες ονομασίες. Αποκάλεσε διανύσματα ket τα πρώτα και διανύσματα bra τα δεύτερα. Οι ονομασίες προέρχονται από τα δύο μισά της Αγγλικής λέξης bracket (=παρένθεση) και οφείλονται στο γεγονός ότι στο συμβολισμό του Dirac το εσωτερικό γινόμενο δύο καταστάσεων ψ και ϕ γράφεται σαν

$$(\psi, \phi) \equiv \langle\psi|\phi\rangle \quad (\Delta.1)$$

όπου το διάνυσμα bra $\langle\psi|$ και το διάνυσμα ket $|\phi\rangle$ μπορούν να ιδωθούν ως τα δυο μισά της «παρένθεσης» (bracket) που δήλωνε το εσωτερικό γινόμενο στον παλιό συμβολισμό.

Ας μελετήσαμε όμως πιο προσεκτικά τους «κανόνες χειρισμού» των διανυσμάτων ket και bra του Dirac. Βασικά το μόνο που χρειάζεται είναι να θυμάται κανείς ότι τα πρώτα παίζουν το ρόλο των διανυσμάτων στήλης και τα δεύτερα το ρόλο των διανυσμάτων γραμμής. Αν λοιπόν ένα διάνυσμα bra βρεθεί μ' ένα διάνυσμα ket στα δεξιά του θα δράσει πάνω του και το αποτέλεσμα θα' ναι ένας αριθμός, ακριβώς όπως

συμβαίνει και κατά την τοποθέτηση ενός διανύσματος στήλης στα δεξιά ενός διανύσματος γραμμής. Και στις δυο περιπτώσεις ο αριθμός που προκύπτει είναι το εσωτερικό γινόμενο. Θα έχουμε δηλαδή

$$\langle \psi | \cdot | \phi \rangle \equiv \langle \psi | | \phi \rangle \equiv \langle \psi | \phi \rangle = (\psi, \phi)$$

όπου σημειώσαμε και τη διαδικασία συμβολιστικής απλοποίησης που παράγει το τελικό σύμβολο $\langle \psi | \phi \rangle$.

Ας δούμε τώρα πώς γράφεται στο συμβολισμό του Dirac η έκφραση της μέσης τιμής ενός φυσικού μεγέθους. Θα έχουμε

$$\langle A \rangle = (\psi, A \psi) \text{ ορ. } \langle \psi | (A | \psi \rangle) \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (\Delta.2)$$

όπου στην τελευταία ισότητα αφαιρέσαμε την παρένθεση θεωρώντας αυτονόητο ότι τελεστής A δρα στο ket που βρίσκεται δεξιά του και στο νέο ket που προκύπτει επενεργεί το bra εξ αριστερών δίνοντας τελικά έναν αριθμό τη μέση τιμή του μεγέθους A .

Συνεχίζοντας τα παραδείγματα εξοικείωσης με τον συμβολισμό Dirac ας γράψουμε τώρα σ' αυτή τη γλώσσα και την εξίσωση ιδιοτιμών $A \psi_n = \alpha_n \psi_n$ ενός τυχόντος μεγέθους A . Χρησιμοποιώντας για την ιδιοκατάσταση ψ_n το απλοποιημένο σύμβολο $|n\rangle$ αντί του $|\psi_n\rangle$ η εξίσωση ιδιοτιμών θα γράφεται σαν

$$A|n\rangle = \alpha_n |n\rangle \quad (\Delta.3)$$

ενώ για το ανάπτυγμα μιας τυχούσας κατάστασης $|\psi\rangle$ σε ιδιοκαταστάσεις του A , Θα έχουμε

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{με} \quad c_n = \langle n | \psi \rangle \quad (\Delta.4)$$

όπου βέβαια το $\langle n | \psi \rangle$ δεν είναι παρά το εσωτερικό γινόμενο (ψ_n, ψ) της παλαιάς γραφής. Βασιζόμενοι στην αναλογία

Διάνυσμα στήλης \rightarrow Διάνυσμα ket

Διάνυσμα γραμμής \rightarrow Διάνυσμα bra

μπορούμε επίσης να δούμε αμέσως ότι ο τύπος $A = \sum_n \alpha_n X_n X_n^+$ θα παίρνει στην περίπτωση μας τη μορφή

$$A = \sum_n \alpha_n |n\rangle \langle n| \quad (\Delta.5)$$

της οποίας η ορθότητα γίνεται φανερή αν αφήσουμε τα δύο μέλη να δράσουν πάνω στο τυχόν $\text{ket } |\psi\rangle$ οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle &= \left(\sum_n a_n |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle \\ &= \sum_n a_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n c_n a_n |n\rangle \end{aligned} \quad (\Delta.6)$$

οπού $c_n = \langle n|\psi\rangle$. Όμως η τελευταία έκφραση στην (Δ.6) είναι αυτή ακριβώς που προκύπτει αν δράσουμε με τον τελεστή A στο ανάπτυγμα (Δ.4) και χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι οι $|n\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις του με ιδιότητες a_n . Όσο για τα «αντικείμενα»

$$P_n = |n\rangle \langle n| \quad (\Delta.7)$$

είναι προφανές ότι θα παριστάνουν τους προβολικούς τελεστές κατά τις κατευθύνσεις των ιδιοδιανυσμάτων $|n\rangle$. Πράγματι έχουμε

$$\begin{aligned} P_n|\psi\rangle &= (|n\rangle \langle n|)|\psi\rangle = |n\rangle \langle n|\psi\rangle = c_n |n\rangle = \\ &= \text{προβολή του } |\psi\rangle \text{ πάνω στο } |n\rangle \end{aligned}$$

Όπως και παλιά, ειδική περίπτωση του φασματικού αναπτύγματος (B.5) είναι το

$$I = 1 = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (\Delta.8)$$

που είναι γνωστό είτε ως σχέση πληρότητας των ιδιοδιανυσμάτων $|n\rangle$, είτε ως φασματική ανάλυση της μονάδας. Η (B.8) χρησιμοποιείται συχνά στην πράξη με τον τρόπο που δείχνει η ακόλουθη σειρά υπολογισμών

$$\begin{aligned} \langle \phi|\psi\rangle &= \langle \phi|1|\psi\rangle = \langle \phi| \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle = \\ &= \sum_n \langle \phi||n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle \phi||n\rangle \langle n|\psi\rangle = \\ &= \sum_n d_n^* c_n \end{aligned} \quad (\Delta.9)$$

οπού ο $c_n = \langle n|\psi\rangle$ και $d_n = \langle n|\phi\rangle$ είναι οι συντεταγμένες των διανυσμάτων $|\psi\rangle$ και $\langle \phi|$ στη βάση $|n\rangle$. Όπως είδατε, αυτό που κάναμε ήταν να «παρεμβάλλαμε τη μονάδα» $I = \sum_n |n\rangle \langle n|$ μεταξύ των $\langle \phi|$ και $|\psi\rangle$ στο εσωτερικό γινόμενο, οπότε προκύπτουν αμέσως οι συντεταγμένες τους c_n και d_n στη βάση $|n\rangle$. Είναι διδακτικό

να δούμε πώς φτάνουμε στο αποτέλεσμα (Δ.9) και με την απλούστερη μέθοδο της ανάπτυξης των $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$ στη βάση $|n\rangle$. Θα έχουμε

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad , \quad |\phi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle \quad (\Delta.10)$$

και επειδή εδώ χρειαζόμαστε όχι το ket $|\phi\rangle$ αλλά το αντίστοιχο διάνυσμα bra $\langle\phi|$, παίρνουμε το συζυγή των δύο μελών της $|\phi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$ και έχουμε

$$|\phi\rangle^+ = \langle\phi| = \left(\sum_m d_m |m\rangle \right)^+ \sum_m d_m^* \langle m|$$

όπου θα είναι

$$\begin{aligned} \langle\phi|\psi\rangle &= \left(\sum_m d_m \langle m| \right) \left(\sum_n c_n |n\rangle \right) \\ &= \sum_{m,n} d_m^* c_n \langle m|n\rangle = \sum_{m,n} d_m^* c_n \delta_{nm} = \sum_n d_n^* c_n \end{aligned}$$

που βέβαια χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι η πράξη της συζυγίας μετατρέπει τα ket σε bra και αντίστροφα. Γενικότερα ισχύει όπως και στην περίπτωση των μήτρων η σχέση

$$(A B C \dots)^+ = \dots C^+ B^+ A^+ \quad (\Delta.11)$$

οπότε κάποια από τα A, B, C... μπορεί να είναι και διανύσματα στήλης ή γραμμής, δηλαδή μη τετραγωνικές μήτρες, αρκεί να τηρούνται οι σχετικοί κανόνες πολλαπλασιασμού. (Μια μήτρα $n \times m$ μπορεί να πολλαπλασιαστεί μόνο με μία του τύπου $m \times k$).

Μια απλή εφαρμογή της (Δ.11) είναι η απόδειξη της Ερμιτιανότητας του προβολικού τελεστή $P_n = |n\rangle\langle n|$. Θα είναι

$$P_n^+ = (|n\rangle\langle n|)^+ = (\langle n|)^+ (|n\rangle)^+ = |n\rangle\langle n| = P_n$$

Το ίδιο απλά αποδεικνύεται και η πραγματικότητα της μέσης τιμής $\langle\psi|A|\psi\rangle$ ενός ερμιτιανού τελεστή A ($A^+ = A$). Θα έχουμε

$$(\langle\psi|A|\psi\rangle)^+ = (\psi)^+ A^+ (\psi)^+ = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad (\Delta.12)$$

και δεδομένου ότι για ένα αριθμό όπως η μέση τιμή $\langle\psi|A|\psi\rangle$ η πράξη της συζυγίας ταυτίζεται με εκείνη της απλής μιγαδικής συζυγίας, η (Δ.12) αποδεικνύει το ζητούμενο.

Σε μια ενδιαφέρουσα διαπίστωση οδηγούμαστε επίσης αν πάρουμε τα συζυγή των δύο μελών της σχέσης

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad (\Delta.13)$$

που εκφράζει τη δράση ενός τυχόντος τελεστή A πάνω στα διανύσματα ket του χώρου των φυσικών καταστάσεων. Η συζυγής της (Δ.13) είναι προφανώς η

$$\langle \psi | A^\dagger = \langle \psi' | \quad (\Delta.14)$$

η οποία αναφέρει το εξής: Ο συζυγής ενός τελεστή πραγματοποιεί στο χώρο των διανυσμάτων bra την ίδια απεικόνιση που πραγματοποιεί ο αρχικός στο χώρο των διανυσμάτων ket .

Αν ειδικότερα ο τελεστής μας είναι Ερμιτιανός τότε θα είναι

$$\langle \psi | A = \langle \psi' | \quad (\Delta.15)$$

και άρα η δράση του πάνω στα διανύσματα bra είναι ταυτόσημη με εκείνη πάνω στα διανύσματα ket . Πολλαπλασιάζοντας τα δύο μέλη της (B.15) από δεξιά με το τυχόν ket $|\phi\rangle$ παίρνουμε

$$\langle \psi | A | \phi \rangle = \langle \psi' | \phi \rangle = \langle \phi | \psi' \rangle^* = \langle \phi | A | \psi \rangle^* \quad (\Delta.16)$$

που δεν είναι παρά ο γνωστός μας ορισμός της Ερμιτιανότητας γραμμένος στη «γλώσσα» Dirac. Αν αυτό δεν σας είναι φανερό σημειώστε ότι

$$\langle \psi | A | \phi \rangle \equiv (\psi, A\phi)$$

και

$$\langle \phi | A | \psi \rangle^* \equiv (\phi, A\psi)^* = (A\psi, \phi)$$

οπότε η (Δ.16) γράφεται σαν

$$(\psi, A\phi) = (A\psi, \phi)$$

η τελευταία είναι η συνήθης σχέση ορισμού ενός Ερμιτιανού τελεστή. Εφαρμόζοντας την (Δ.16) για $|\psi\rangle = |n\rangle$ και $|\phi\rangle = |m\rangle$ όπου $|n\rangle$ τα διανύσματα ket μιας τυχούσας ορθοκανονικής βάσης, παίρνουμε για τα στοιχεία μήτρας του τελεστή A ($A_{nm} = \langle n | A | m \rangle$) τη σχέση

$$A_{nm} = A_{mn}^* \quad (\Delta.17)$$

που είναι, βεβαίως η συνθήκη Ερμιτιανότητας μιας μήτρας. Έχοντας εξοικειωθεί με τη χρήση του συμβολισμού Dirac ας αναφερθούμε τώρα στο βασικό του πλεονέκτημα που δεν είναι άλλο παρά η χρησιμοποίηση αφηρημένων καταστασιακών διανυσμάτων ανεξάρτητων από οποιαδήποτε εκλογή βάσης στο χώρο. Έτσι έχει κανείς την ευχέρεια να εκλέξει «ανά πάσα στιγμή» οποιαδήποτε βάση κρίνει κατάλληλη. Στην Κβαντομηχανική, βεβαίως, οι χρησιμοποιούμενες βάσεις αποτελούνται από τα ιδιοδιανύσματα ενός πλήρους συστήματος φυσικών μεγεθών και η συνηθέστερη εκλογή είναι οι τρεις συνιστώσες του διανύσματος της θέσης. Περιοριζόμενοι για απλότητα στη μονοδιάστατη περίπτωση η σχετική εξίσωση ιδιοτιμών θα είναι

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (\Delta.18)$$

οπού τώρα χρειάστηκε να επαναφέρουμε σε χρήση το παλιό σύμβολο για να ξεχωρίσουμε τον τελεστή από την ιδιοτιμή του.

Στη συνεχή βάση πού σχηματίζουν τα ιδιοδιανύσματα θέσης $|x\rangle$ ($-\infty < x < +\infty$) τυχόν αφηρημένο $\text{ket } |\psi\rangle$ θα αναπαριστάνεται από τις συντεταγμένες του $c_x \equiv c(x)$ πού δίδονται από το εσωτερικό γινόμενο

$$c(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (\Delta.19)$$

πού παριστάνει φυσικά το πλάτος πιθανότητας θέσης του σωματιδίου και ταυτίζεται με τη γνωστή μας κυματοσυνάρτηση θέσης $\psi(x)$. Θα είναι λοιπόν

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (\Delta.20)$$

οπότε η $\psi(x)$ δεν είναι παρά η αναπαράσταση του αφηρημένου καταστατικού διανύσματος $|\psi\rangle$ στη βάση των ιδιοκαταστάσεων της θέσης. Εντελώς ανάλογα, αν ως βάση εκλεγούν τα ιδιοδιανύσματα $|p\rangle$ της ορμής, το αφηρημένο $\text{ket } |\psi\rangle$ θα αναπαριστάνεται από την κυματοσυνάρτηση ορμής

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle \quad (\Delta.21)$$

η οποία δηλώθηκε εδώ χωρίς τη συνήθη περισπωμένη αφού το σύμβολο της μεταβλητής δεν αφήνει αμφιβολία για την αναπαράσταση την οποία χρησιμοποιούμε. Το εσωτερικό γινόμενο στην (Δ.21) μπορεί να υπολογιστεί στην αναπαράσταση θέσης οπού οι καταστάσεις $|\psi\rangle$ και $|p\rangle$ αναπαριστάνονται από τις συναρτήσεις $\psi(x)$ και

$\psi_p(x) = \frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi}}$, οπότε θα έχουμε

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = (\psi_p, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} \psi(x) dx \tilde{\psi}(p)$$

πού είναι το γνωστό μας αποτέλεσμα.

Σ' όλα τα παραπάνω υπονοείται βεβαίως ότι τα στοιχεία των βάσεων $|x\rangle$ και $|p\rangle$ ικανοποιούν τις συνθήκες ορθοκανονικότητας του συνεχούς

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \quad , \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \quad (\Delta.22)$$

και επίσης τις σχέσεις πληρότητας

$$\int dx |x\rangle\langle x| = 1 \quad , \quad \int dp |p\rangle\langle p| = 1 \quad (\Delta.23)$$

πού αποτελούν, προφανώς, το συνεχές ανάλογο της

$$\sum_n |n\rangle\langle n| \quad (\Delta.24)$$

η οποία ισχύει για διακριτές βάσεις. Και μ' αυτή την ευκαιρία ας δούμε πώς γράφεται η αφηρημένη σχέση (Δ.24) σε μια συγκεκριμένη βάση όπως εκείνη των ιδιοδιανυσμάτων της θέσης. Μια και έχουμε να κάνουμε τώρα με τελεστές η αναπαράσταση τους σε μια βάση απαιτεί τη γνώση των στοιχείων μήτρας μεταξύ δύο τυχαίων διανυσμάτων αυτής της βάσης. Στη συγκεκριμένη περίπτωση λοιπόν δεν έχουμε παρά να πάρουμε τα στοιχεία μήτρας των δύο μελών της (Δ.24) μεταξύ των διανυσμάτων $|x\rangle$ και $|x'\rangle$. Έτσι θα έχουμε

$$\begin{aligned}\langle x | \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |x'\rangle &= \langle x | |x'\rangle \\ \Rightarrow \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | x'\rangle &= \langle x | x'\rangle = \delta(x-x') \\ \Rightarrow \sum_n \langle x | n \rangle \langle x' | n \rangle^* &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \delta(x-x')\end{aligned}$$

που είναι η παλιά μας έκφραση για τη σχέση πληρότητας ενός συστήματος ιδιοσυναρτήσεων. Κάνοντας το ίδιο πράγμα για την πρώτη από τις (Δ.23) παίρνουμε

$$\langle x' | \left(\int dx |x\rangle \langle x| \right) |x''\rangle = \langle x' | |x''\rangle = \langle x' | x''\rangle = \delta(x' - x'')$$

ενώ για το ολοκλήρωμα του πρώτου μέλους θα έχουμε

$$\int dx \langle x' | x \rangle \langle x | x''\rangle = \int dx \delta(x' - x) \delta(x - x'') = \delta(x' - x'')$$

που είναι το ζητούμενο αποτέλεσμα. Εδώ δηλαδή μπορέσαμε όχι απλώς να γράψαμε αλλά και να αποδείξουμε τη σχέση πληρότητας.

Ας δούμε τώρα και στη γλώσσα DIRAC πώς κατασκευάζονται οι μήτρες των διαφόρων τελεστών σε μια συγκεκριμένη αναπαράσταση. Για την περίπτωση της αναπαράστασης θέσης, και για ένα τυχόν μέγεθος A , θα είναι

$$A(x, x') = \langle x | A | x'\rangle$$

Έτσι, παραδείγματος χάρη, για $A = \hat{x}$ θα έχουμε

$$\hat{x}(x, x') = \langle x | \hat{x} | x'\rangle = \langle x | x' | x'\rangle = x' \langle x | x'\rangle = x' \delta(x - x') \quad (\Delta.25)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{x} | x'\rangle = x' | x'\rangle$ και τη σχέση ορθογωνιότητας $\langle x | x'\rangle = \delta(x - x')$.

Επίσης θα μπορούσαμε να είχαμε αφήσει τον τελεστή \hat{x} να δράσει στο bra αριστερά του και να χρησιμοποιήσουμε την αντίστοιχη εξίσωση ιδιοτιμών $\langle x | x' = \langle x | x$ που δεν είναι παρά η συζυγής της $\hat{x} | x\rangle = x | x\rangle$ και έχει την ίδια μορφή ακριβώς επειδή ο τελεστής είναι x Ερμιτιανός. Το αποτέλεσμα τότε θα ήταν $x \delta(x - x')$ που είναι όμως ισοδύναμο με το προηγούμενο λόγω της γενικής ιδιότητας της δέλτα συνάρτησης $f(x) \delta(x - a) = f(a) \delta(x - a)$.

Το (Δ.25) είναι το γνωστό μας ήδη αποτέλεσμα και ισοδυναμεί, βέβαια, με τον πολλαπλασιασμό των κυματοσυναρτήσεων επί x . Αυτό το τελευταίο μπορεί να προκύψει και κατ' ευθείαν, αν υπολογίσουμε την κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στο αφηρημένο $\text{ket } \hat{x}|\psi\rangle$, μέσω του εσωτερικού γινομένου

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \langle x|x|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle$$

στο οποίο η δράση του \hat{x} στο bra $\langle x|$ δίνει αμέσως τον παράγοντα x που περιμένουμε.

Για την κατασκευή του τελεστή της ορμής αφετηρία μας θα πρέπει να είναι μεταθετική σχέση

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \langle x|x|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle$$

η οποία, στα πλαίσια μιας πιο αφηρημένης παρουσίασης του Κβαντομηχανικού φορμαλισμού αποτελεί πρωταρχικό αξίωμα αντί της εκπεφρασμένης μορφής των τελεστών x και p που είχαμε χρησιμοποιήσει παλιότερα. Το ερώτημα λοιπόν τώρα είναι το εξής: Δεδομένου ότι στην αναπαράσταση θέσης ο τελεστής x είναι καθορισμένος, ποια πρέπει να είναι η μορφή του τελεστή \hat{p} ώστε να ικανοποιείται η θεμελιώδης μεταθετική σχέση (Δ.26); Το περίεργο είναι ότι αυτό το ερώτημα δεν έχει μοναδική απάντηση.

Έκτος από τον τελεστή $\hat{p} = -i\hbar/dx$ που σε συνδυασμό με τον $\hat{x} = x$ προφανώς ικανοποιεί την (Δ.26), το ίδιο ισχύει και για την γενικότερη έκφραση

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} + f(x) \quad (\Delta.27)$$

οπού $f(x)$ μια τυχούσα πραγματική συνάρτηση του x η οποία δεν επηρεάζει, βεβαίως, την τιμή του θεμελιώδους μεταθέτη αφού μετατίθεται με τον τελεστή θέσης.

Είναι ενδιαφέρον να δούμε ότι το απροσδόκητο αποτέλεσμα (Δ.27) προκύπτει και μ' ένα πιο άμεσο τρόπο υπολογισμού της μήτρας $\hat{p}(x, x') = \langle x|\hat{p}|x'\rangle$ του τελεστή \hat{p} στην αναπαράσταση θέσης. Πράγματι αν πάρουμε τα στοιχεία μήτρας των δύο μελών της (Δ.26) μεταξύ των καταστάσεων $|x\rangle$ και $|x'\rangle$ θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \langle x|\left[\hat{x}, \hat{p}\right]|x'\rangle &= \langle x|\hat{x}\hat{p}|x'\rangle - \langle x|\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\langle x|x'\rangle \\ &= x\langle x|\hat{p}|x'\rangle - x'\langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\delta(x-x') \\ &\Rightarrow (x-x')\hat{p}(x, x') = i\delta(x-x') \end{aligned} \quad (\Delta.28)$$

Πρόκειται για μία σχέση ως προς τη γενικευμένη συνάρτηση $\hat{p}(x, x')$ η οποία, αν θυμηθούμε τις ταυτότητες

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad , \quad x\delta(x) = 0$$

η γενικότερα τις

$$(x-a)\delta'(x-a) = -\delta(x-a) \quad , \quad (x-a)\delta(x-a) = 0$$

φαίνεται αμέσως ότι έχει ως γενική της λύση τη συνάρτηση

$$\hat{p}(x, x') = -i\delta'(x-x') + f(x)\delta(x-x')$$

πού δεν είναι παρά η μητρική μορφή του τελεστή (Δ.27).

Τέλος, θέλουμε να πούμε δυο λόγια για το ακριβές μαθηματικό νόημα των διανυσμάτων *ket* πού «συνοδεύουν» τα διανύσματα *bra* του χώρου των φυσικών καταστάσεων. Γι' αυτό το σκοπό αρκεί να δούμε μ' ένα πιο αφηρημένο τρόπο τη σχέση διανυσμάτων γραμμής και διανυσμάτων στήλης τα όποια θεωρήσαμε ως πρότυπα των διανυσμάτων *bra* και *ket* αντίστοιχα. Θυμηθείτε λοιπόν ότι όταν ένα διάνυσμα γραμμής βρεθεί μ' ένα διάνυσμα στήλης στα δεξιά του θα δράσει πάνω του σύμφωνα με το νόμο πολλαπλασιασμού μήτρων και το αποτέλεσμα θα είναι ένας αριθμός. Συγκεκριμένα

$$(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_n x_n$$

θεωρώντας τώρα το διάνυσμα γραμμής $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ ως δεδομένο και το διάνυσμα

στήλης $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ ως μεταβλητό, η (Δ.29) ορίζει μια γραμμική απεικόνιση από το

χώρο των διανυσμάτων στήλης x στους (μιγαδικούς εν γενεί) αριθμούς. Οι συναρτήσεις (\equiv απεικονίσεις) με μεταβλητές τα στοιχεία ενός διανυσματικού χώρου και πεδίο τιμών τους αριθμούς ονομάζονται στη μαθηματική βιβλιογραφία συναρτησιοειδή και ειδικότερα γραμμικά συναρτησιοειδή αν έχουν επιπλέον και την ιδιότητα της γραμμικότητας. Είναι δηλαδή

$$f(\lambda X + \mu Y) = \lambda f(X) + \mu f(Y) \quad (\Delta.30)$$

οπού λ, μ αριθμοί, X, Y στοιχεία του διανυσματικού χώρου και f το σύμβολο του συναρτησιοειδούς.

Είναι εύκολο να δούμε ότι το σύνολο των γραμμικών συναρτησιοειδών που δρουν πάνω σ' ένα διανυσματικό χώρο αποτελούν πάλι ένα διανυσματικό χώρο που αποκαλείται στη βιβλιογραφία *δυϊκός του αρχικού*. Για χώρους πεπερασμένης διάστασης ειδικότερα, ο *δυϊκός* χώρος έχει την ίδια διάσταση με τον αρχικό και άρα

μπορεί να θεωρηθεί ισόμορφος με το χώρο των διανυσμάτων γραμμής τα οποία γίνονται έτσι η συγκεκριμένη έκφραση του αφηρημένου χώρου των γραμμικών συναρτησιοειδών.

Εντελώς ανάλογα, για τον απειροδιάστατο χώρο των καταστάσεων ενός κβαντικού συστήματος μπορούμε να ορίσουμε τον δυϊκό του χώρο ως το σύνολο όλων των γραμμικών συναρτησιοειδών που δρουν πάνω στα στοιχεία του, (τα διανύσματα ket). Τα στοιχεία αυτού του δυϊκού χώρου θα ονομάζονται διανύσματα bra. Σημειώστε τώρα ότι αν ο αρχικός χώρος ήταν εφοδιασμένος με ένα εσωτερικό γινόμενο (ψ, ϕ) τότε για ένα δεδομένο ψ και μεταβλητό ϕ θα ορίζονταν ένα συγκεκριμένο συναρτησιοειδές και μάλιστα γραμμικό αφού το εσωτερικό γινόμενο ικανοποιεί τη σχέση

$$(\psi, c_1\phi_1 + c_2\phi_2) = c_1(\psi, \phi_1) + c_2(\psi, \phi_2)$$

Με βάση την ύπαρξη αυτού του εσωτερικού γινομένου μπορεί κανείς να αντιστοιχίσει σε κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$ του χώρου των ket ένα διάνυσμα $\langle\psi|$ από το χώρο των bra τέτοιο ώστε να ισχύει η

$$(\psi, \phi) = \langle\psi, |\phi\rangle\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$$

Δηλαδή το bra $\langle\psi|$ που αντιστοιχεί στο ket $|\psi\rangle$ θα είναι εκείνο το συναρτησιοειδές που η δράση του πάνω στο τυχόν ket $|\phi\rangle$ δίνει το ίδιο αποτέλεσμα με το εσωτερικό γινόμενο των διανυσμάτων $|\psi\rangle$ και $|\phi\rangle$. Και είναι προφανές (από την αντιγραμμικότητα του εσωτερικού γινομένου ως προς το πρώτο του διάνυσμα) ότι η αντιστοιχία ket \rightarrow bra θα είναι αντιγραμμική. Θα ισχύει δηλαδή η

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \Rightarrow c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$$

η οποία μας επιτρέπει να θεωρήσουμε τη σχέση διανυσμάτων bra και διανυσμάτων ket ως μία σχέση συζυγίας και να γράφουμε

$$(|\psi\rangle)^+ = \langle\psi| \quad , \quad (\langle\psi|)^+ = |\psi\rangle$$

και ακόμα

$$(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle)^+ = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$$

οπότε έχουμε μια πλήρη δικαιολόγηση —σε αφηρημένο επίπεδο πια— όλων των «κανόνων χειρισμού» των διανυσμάτων ket και bra που προέκυψαν από την αρχική τους θεώρηση ως διανυσμάτων γραμμής και στήλης αντίστοιχα. Αυτή ή θεώρηση είναι βεβαίως απολύτως νόμιμη αρκεί να έχουμε διαλέξει μια συγκεκριμένη βάση στο χώρο μας οπότε το κάθε αφηρημένο ket θα παριστάνεται από ένα (άπειρο) διάνυσμα στήλης και το αντίστοιχο bra από το συζυγές διάνυσμα γραμμής. Ο δυϊκός χώρος μπορεί να δοθεί έτσι και σαν οι χώροι των συζυγών διανυσμάτων ή απλώς ο συζυγής χώρος του αρχικού.

Δ.5 Αναπαράστασεις τελεστών

Εύκολα αποδεικνύεται ότι κάθε γραμμικός τελεστής \hat{A} μπορεί να γραφεί υπό μορφή τετραγωνικού πίνακα A (παριστώσα του τελεστή).

Το στοιχείο (A_{ij}) του πίνακα A υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$(A_{ij}) = \left\langle y_i \left| \hat{A} y_j \right. \right\rangle$$

όπου οι $\{y_i\}$ είναι οι συναρτήσεις βάσης του χώρου επί των οποίων δρα ο τελεστής \hat{A} .

Συναφής λέγεται ο πίνακας A^+ για τον οποίο ισχύει

$$(A_{ij}^+) = (A_{ij})^*$$

δηλαδή για να κατασκευάσουμε τον A^+ ξεκινάμε από τον A , κάνουμε τις στήλες γραμμές και τέλος λαμβάνουμε τους μιγαδικούς συζυγείς των στοιχείων.

Προφανώς αν ισχύει $(A_{ij}^+) = (A_{ij})$ ο πίνακας καλείται **ερμιτιανός** και έχει πραγματικές ιδιοτιμές.

Πολύ συχνά απαιτείται να υπολογίσουμε συναρτήσεις $f(A)$ ενός πίνακα A π.χ. e^A , $\ln A$ κ.λ.π.

Αποδεικνύεται ότι

$$f(A) = P \text{diag}[f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots] P^{-1}$$

όπου

P είναι ο διαγωνιοποιών πίνακας του A ,

P^{-1} είναι ο αντίστροφος του και

$\text{diag}[f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots]$ είναι ο διαγώνιος πίνακας που έχει ως στοιχεία της τιμές $f(\lambda_n)$ με λ_n τις ιδιοτιμές του A .

Ε. ΠΡΟΤΥΠΑ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

Ε.1 Διάκριση των συστημάτων

Η μορφή της λύσης που θα έχει η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (\text{E.1})$$

καθορίζεται από τη σχέση μεταξύ του δυναμικού $V(x)$ και της ενέργειας E .

Ειδικότερα:

- Αν $E > V$, τότε τα συστήματα ονομάζονται ελεύθερα, έχουν συνεχές φάσμα ιδιοτιμών και φυσικά δεν παρουσιάζουν κβάντωση.
- Αν $E < V$, αλλά το δυναμικό δεν περιορίζει την κίνηση του συστήματος, τότε έχουμε και πάλι ελεύθερα συστήματα με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών, αλλά με ορισμένες ιδιαιτερότητες.
- Αν $E < V$ αλλά με περιορισμούς στην κίνηση, τότε τα συστήματα ονομάζονται δέσμια και εμφανίζουν κβάντωση.

Παρατήρηση

Το κλασικά απαγορευμένο ενδεχόμενο $E < V$ δεν παραβιάζει τη διατήρηση της ενέργειας διότι στην Κβαντομηχανική η κλασική σχέση $H = T + V$ ενοείται ως "τελεστική" ισότητα $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Επιπλέον, η ταυτόχρονη γνώση, σε κάποιο σημείο του χώρου, της δυναμικής και της κινητικής ενέργειας προϋποθέτει ακριβείς μετρήσεις της θέσης και της ορμής, παραβιάζοντας την Αρχή της αβεβαιότητας.

E.2 Οι συνθήκες συναρμογής των λύσεων

Πολύ συχνά η εξίσωση (E.1) επιλύεται σε διάφορες περιοχές του χώρου, ανάλογα με τον τρόπο ορισμού του δυναμικού. Οι λύσεις - κυματοσυναρτήσεις που προκύπτουν ανά περιοχή προσδιορίζονται κατά τρόπο που:

- να ικανοποιούν την απαίτηση συνέχειας στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού τόσο αυτές (οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi(x)$) όσο και οι παραγωγοί τους $d\Psi(x)/dx$
- να είναι πεπερασμένες στο $\pm\infty$.
- να είναι φυσικώς αποδεκτές.

Παρατηρήσεις

- 1) Η συνθήκη συναρμογής της παραγώγου δεν εφαρμόζεται στα σημεία που απειρίζεται το δυναμικό. Αντίθετα για την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$ δεν ισχύει αντίστοιχος περιορισμός.
- 2) Παραθέτουμε τις λύσεις δύο πολύ συχνά εμφανιζόμενων στην Κβαντομηχανική διαφορικών εξισώσεων:

- $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \kappa^2\Psi(x) = 0$ με γενική λύση

$$\Psi(\chi) = Ae^{i\kappa\chi} + Be^{-i\kappa\chi}$$

ή ισοδύναμα την

$$\Psi(\chi) = A' \cos \kappa\chi + B' \sin \kappa\chi$$

$$\bullet \frac{d^2\Psi(\chi)}{d\chi^2} - \kappa^2\Psi(\chi) = 0$$

με γενική λύση

$$\Psi(\chi) = Ae^{\kappa\chi} + Be^{-\kappa\chi}$$

ή ισοδύναμα την

$$\Psi(\chi) = A' \cos \kappa\chi + B' \sin \kappa\chi$$

E.3 Οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης

Οι συντελεστές αυτοί αποτελούν μέτρο της πιθανότητας διέλευσης ή ανάκλασης του σωματίου σε σημεία απότομης μεταβολής του δυναμικού. Ειδικότερα είναι:

Συντελεστής Ανάκλησης R

$$R = \frac{\Psi_R^* \Psi_R \kappa_R}{\Psi_I^* \Psi_I \kappa_I} \quad (\text{E.2})$$

Με τα σύμβολα Ψ_R και Ψ_I εννοούμε την κυματοσυνάρτηση του ανακλώμενου και του προσπίπτοντος σωματιδίου αντίστοιχα ενώ ως κ_R και κ_I , εννοούμε τους κυματαριθμούς.

Συντελεστής διέλευσης T

$$T = \frac{\Psi_T^* \Psi_T \kappa_T}{\Psi_I^* \Psi_I \kappa_I} \quad (\text{E.3})$$

Με τα σύμβολα Ψ_T και Ψ_I εννοούμε την κυματοσυνάρτηση του διερχόμενου και του προσπίπτοντος σωματιδίου αντίστοιχα ενώ ως κ_T και κ_I , εννοούμε τους κυματαριθμούς.

Προφανώς ισχύει η σχέση $R+T=1$ διότι το σωματίο ή ανακλάται ή διέρχεται.

E.4 Η εξίσωση της συνέχειας

Όπως και σε πολλούς άλλους κλάδους της Φυσικής (Ρευστομηχανική, Ηλεκτροδυναμική) έτσι και στην Κβαντομηχανική ισχύει η εξίσωση της συνέχειας, που εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας

$$\nabla \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (E.4)$$

όπου ρ η πυκνότητα πιθανότητας, $\rho = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2$,

και \vec{J} ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας που καθορίζεται από τη φύση του δυναμικού

Έτσι αν π.χ. $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ με $V(x)$ πραγματική συνάρτηση, τότε ισχύει

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (E.5)$$

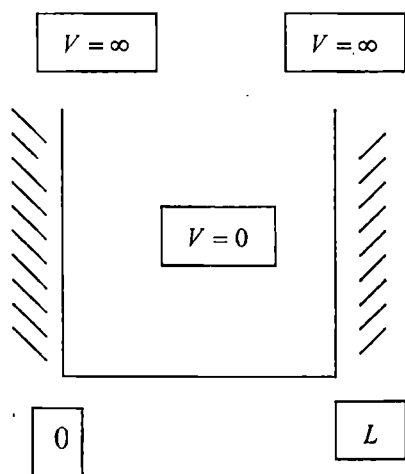
Παρατήρηση

Με βάση τα διάφορα J ορίζουμε εκ νέου τους συντελεστές R και T ως εξής:

$$R = \frac{J_{av}}{J_{\pi\rho}}, \quad T = \frac{J_{\delta i \epsilon \lambda}}{J_{\pi\rho}}$$

E.5 Το πρόβλημα του φρέατος (πηγαδιού) άπειρου βάθους

Το απλό αυτό κβαντομηχανικό πρόβλημα περιγράφει την κίνηση σωματιδίου υπό την επίδραση του δυναμικού



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x > L \text{ και } x < 0 \end{cases}$$

Η εξίσωση του Schrödinger για $0 \leq x \leq L$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' = E\Psi$$

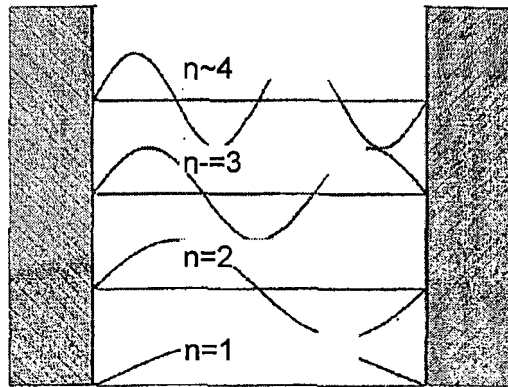
επιλύεται με συνοριακές συνθήκες $\Psi(x=0)=0$ τις $\Psi(x=L)=0$ και έχει ως ιδιοσυναρτήσεις τις

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας είναι

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Οι κυματοσυναρτήσεις έχουν την εξής μορφή:



Παρατηρώντας τα παραπάνω διαγράμματα διαπιστώνουμε ότι:

- η parity των $\Psi_n(x)$ ως προς το σημείο $x = \frac{L}{2}$ είναι $(-1)^{n-1}$, δηλαδή οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλάξ άρτες και περιττές. Η ιδιότητα αυτή παρουσιάζεται σε όλα τα άρτα (κατοπτρικά) δυναμικά $V(x) = V(-x)$
- όσο περισσότερο διεγερμένη είναι μια στάθμη, τόσο περισσότερους κόμβους εμφανίζει η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση. Η ιδιότητα αυτή είναι πολύ γενικότερη, ισχύει για όλα τα κβαντικά συστήματα και είναι γνωστή ως κομβικό θεώρημα. Υπενθυμίζεται ότι για τις ιδιοσυναρτήσεις ισχύει η συνθήκη ορθοκανονικοποίησης των ιδιοσυναρτήσεων $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij}$.

ΣΤ. ΑΠΛΟΣ ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

ΣΤ.1 Η αντίστοιχη εξίσωση του Schrödinger

Ένα από τα σημαντικότερα κβαντικά συστήματα όπου το δυναμικό δεν έχει μορφή $V(x) = V_0$ είναι το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή, όπου μελετάται η συμπεριφορά σωματιδίου μάζας m υπό την επίδραση δυναμικού

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

όπου ω η σταθερή κυκλική συχνότητα του ταλαντωτή.

Η εξίσωση του Schrödinger γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (\Sigma\text{T.1})$$

και η λύση της σε ότι αφορά στις $\Psi_n(x)$ και στις E_n είναι μάλλον πολύπλοκη και απαιτεί την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης του Hermite.

Τα αποτελέσματα συνοπτικά είναι τα ακόλουθα:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\Sigma\text{T.2})$$

Δίνουμε στη συνέχεια τις τρεις πρώτες ίδιο συναρτήσεις

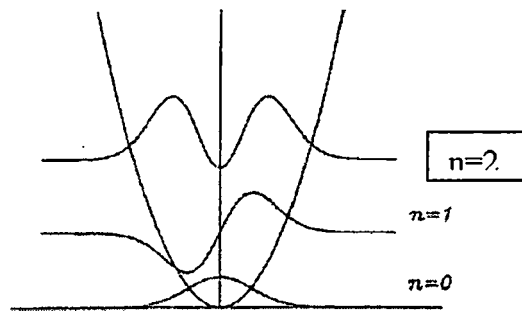
$$\begin{aligned} \Psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \\ \Psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} (2\alpha)^{1/2} x e^{-\alpha x^2/2} \\ \Psi_2(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} 2^{-3/2} (4\alpha x^2 - 2) e^{-\alpha x^2/2} \end{aligned}$$

όπου $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$

Παρατήρηση

Οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή, λόγω της συμμετρίας του δυναμικού, κατανέμονται σε δύο κλάσεις:

- α.) την κλάση των άρτιων κυματοσυναρτήσεων (η: άρτιος) και
- β.) την κλάση των περιπτών (η: περιττός).



ΣΤ.2 Οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας

Εξαιρετικά χρήσιμη αποδεικνύεται η εισαγωγή δυο νέων μη ερμιτιανών τελεστών: του τελεστή δημιουργίας $\hat{\alpha}^+$ και του τελεστή καταστροφής $\hat{\alpha}$.

Ειδικότερα:

$$\hat{\alpha} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (\Sigma\Gamma.3)$$

$$\hat{\alpha}^+ = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (\Sigma\Gamma.4)$$

Θέτοντας $\hbar = m = \omega = 1$ οι παραπάνω τελεστές λαμβάνουν την απλή μορφή

$$\hat{\alpha} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad \hat{\alpha}^+ = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$$

την οποία και θα χρησιμοποιήσουμε στην συνέχεια.

Η δράση των τελεστών αυτών είναι:

$$\hat{\alpha}^+ |n\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1\rangle \quad (\Sigma\Gamma.5)$$

$$\hat{\alpha} |n\rangle = n^{1/2} |n-1\rangle \quad (\Sigma\Gamma.6)$$

Δηλαδή ο τελεστής $\hat{\alpha}^+$ "δημιουργεί" ένα κβάντο ενέργειας, ενώ ο $\hat{\alpha}$ "καταστρέφει" ένα τέτοιο. Σημειώνεται τέλος ότι $\hat{\alpha}|0\rangle = 0$. Εύκολα αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι σχέσεις:

Δηλαδή ο τελεστής $\hat{\alpha}^+$ "δημιουργεί" ένα κβάντο ενέργειας, ενώ ο $\hat{\alpha}$ "καταστρέφει" ένα τέτοιο. Σημειώνεται τέλος ότι $\hat{\alpha}|0\rangle=0$. Εύκολα αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι σχέσεις:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{\alpha}^+ \hat{\alpha} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{\alpha} \hat{\alpha}^+ - \frac{1}{2} \right) \quad (\Sigma\text{T.7})$$

$$\left[\hat{H}, \hat{\alpha}^+ \hat{\alpha} \right] = \left[\hat{H}, \hat{\alpha} \hat{\alpha}^+ \right] = 0 \quad (\Sigma\text{T.8})$$

$$\left(\hat{\alpha}^+ \right)^n |0\rangle = (n!)^{1/2} |n\rangle \quad (\Sigma\text{T.9})$$

$$\hat{\alpha}^+ \hat{\alpha} |n\rangle = n |n\rangle \quad (\Sigma\text{T.10})$$

Παρατηρήσεις

1. Λύνοντας ως προς $\hat{\chi}$ και \hat{p} τις εκφράσεις (ΣΤ.3) και (ΣΤ.4) και θέτοντας $\hbar = m = \omega = 1$ λαμβάνουμε:

$$\hat{\chi} = \frac{\hat{\alpha} + \hat{\alpha}^+}{\sqrt{2}} \quad (\Sigma\text{T.11})$$

$$\hat{p} = \frac{\hat{\alpha} - \hat{\alpha}^+}{i\sqrt{2}} \quad (\Sigma\text{T.12})$$

2. Εύκολα αποδεικνύεται ότι οι τελεστές $\hat{\alpha}$ και $\hat{\alpha}^+$ δεν είναι ερμιτιανοί κατ'

αντίθεση με τον τελεστή $\hat{n} = \hat{\alpha} \hat{\alpha}^+$, ο οποίος έχει πραγματικές ιδιοτιμές (τον αριθμό κατάληψης n)

Z. ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

Z.1 Τελεστές της στροφορμής

Η στροφορμή κλασικά δίνεται από τη σχέση

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (Z.1)$$

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x$$

Κβαντομηχανικά οι τρεις τελεστές είναι

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \right\} \text{καρτεσιανές συντεταγμένες}$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cot \vartheta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cot \vartheta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \right\} \text{σφαιρικές συντεταγμένες}$$

φυσικά ισχύει

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (Z.2)$$

Z.2 Σχέσεις μετάθεσης των τελεστών της στροφορμής

Εύκολα αποδεικνύεται η ισχύς των παρακάτω μεταθετικών σχέσεων

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

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

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

Επίσης

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_i \right] = 0, \quad i = x, y, z$$

Είναι συνεπώς φανερό ότι ταυτοχρόνως μπορούμε να γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια το μέτρο της στροφορμής και το μέτρο μιας εκ των τριών προβολών. Συνήθως η μοναδική αυτή προβολή εκλέγεται να είναι η L_z . Αντίθετα, δεν είναι εφικτή η ταυτόχρονη μέτρηση δύο προβολών της στροφορμής.

Z.3 Εξίσωση ιδιοτιμών των τελεστών \hat{L}^2 και \hat{L}_z

Εφ' όσον $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z \right] = 0$, οι τελεστές \hat{L}^2 και \hat{L}_z έχουν κοινό σύνολο ιδιοδιανυσμάτων. Οι κοινές αυτές ιδιοσυναρτήσεις ονομάζονται **σφαιρικές αρμονικές** $Y(\vartheta, \varphi)$.

Ειδικότερα οι εξισώσεις ιδιοτιμών για τους τελεστές \hat{L}^2 και \hat{L}_z είναι:

$$\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y(\vartheta, \varphi), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Z.3})$$

$$\hat{L}_z Y(\vartheta, \varphi) = m\hbar Y(\vartheta, \varphi), \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad (\text{Z.4})$$

Δηλαδή οι ιδιοτιμές του \hat{L}^2 είναι οι $\ell(\ell+1)\hbar^2$, ενώ του \hat{L}_z οι $m\hbar$. Παρατηρούμε επίσης ότι σε δεδομένο ℓ , αντιστοιχούν $2\ell+1$ διαφορετικές τιμές του κβαντικού m ($m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell$).

Z.4 Οι σφαιρικές αρμονικές

Δίνουμε στη συνέχεια μερικές από τις πρώτες σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$:

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$$

Οι σφαιρικές αρμονικές είναι ορθοκανονικοποιημένες, δηλαδή ισχύουν οι σχέσεις:

i. Κανονικοποίησης

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{\ell,m}|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1$$

ii. Ορθογωνιότητας

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{\ell',m'}^* Y_{\ell,m} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 0, \text{ αν } \ell \neq \ell' \text{ και } m \neq m'$$

Z.5 Τελεστές καταστροφής και δημιουργίας της στροφορμής

Αυτοί ορίζονται ως εξής:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x - i \hat{L}_y \tag{Z.5}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x + i \hat{L}_y \tag{Z.6}$$

Η δράση τους επί των καταστάσεων $|\ell, m\rangle$ είναι:

$$\hat{L}_+ |\ell, m\rangle = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} \hbar |\ell, m + 1\rangle$$

$$\hat{L}_- |\ell, m\rangle = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \hbar |\ell, m - 1\rangle$$

Η δράση τους επί των καταστάσεων $|\ell, m\rangle$ είναι:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \quad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}, \quad \hat{L}_- |\ell, m\rangle = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \hbar |\ell, m - 1\rangle$$

Επίσης επισημαίνεται ότι

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \quad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}$$

Όπως φαίνεται, ο \hat{L}_+ δημιουργεί ένα κβάντο \hbar για το μέγεθος L_z ενώ ο \hat{L}_- καταστρέφει ένα τέτοιο.

Ενθυμούμενοι τη δράση των $\hat{\alpha}$ και $\hat{\alpha}^\dagger$ για τον αρμονικό ταλαντωτή, συμπεραίνουμε ότι μπορούμε να ορίσουμε τελεστές καταστροφής και δημιουργίας κάθε φορά που το φάσμα ιδιοτιμών αποτελείται από ισαπέχουσες ιδιοτιμές.

H. ΤΟ SPIN ΤΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ

H.1 Φυσική ερμηνεία των Spin

Παρ' ότι το spin αρχικά αποδόθηκε σε περιστροφή του κάθε σωματιδίου γύρω από τον εαυτό του, κάτι τέτοιο είναι εντελώς λανθασμένο. Το spin τελικά θεωρείται ως καθαρά κβαντομηχανικό μέγεθος χωρίς κλασικό ανάλογο και αποτελεί χαρακτηριστικό γνώρισμα κάθε σωματιδίου.

H.2 Τελεστές του spin - Η άλγεβρα του spin

Οι τελεστές του spin ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής, δηλαδή:

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y \right] = i\hbar \hat{S}_z, \quad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z \right] = i\hbar \hat{S}_x, \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x \right] = i\hbar \hat{S}_y \quad \text{και} \quad \left[\hat{S}^2, \hat{S}_i \right] = 0$$

Είναι συνεπώς φανερό, ότι ταυτοχρόνως μπορούμε να γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια το μέτρο του spin και το μέτρο μιας εκ των τριών προβολών. Συνήθως η μοναδική αυτή προβολή εκλέγεται να είναι η S_z . Αντίθετα, δεν είναι εφικτή η ταυτόχρονη μέτρηση δύο προβολών του spin.

H.3 Ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα

Όπως σε κάθε φυσικό μέγεθος, έτσι και στο spin αντιστοιχούν ερμιτιανοί τελεστές. Ειδικά για την περίπτωση όπου $s = \frac{1}{2}$, όπως π.χ. για το ηλεκτρόνιο, το "μέτρο" του spin S και η προβολή του στον z-άξονα S_z , συνδέονται με τους κβαντικούς αριθμούς s και m_s σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} S^2 &= s(s+1)\hbar^2 \\ S_z &= m_s \hbar \end{aligned} \tag{H.1}$$

με $s = 1/2$ και $m_s = \pm 1/2$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι εντελώς αντίστοιχες με αυτές της στροφορμής.

Οι τελεστές των τριών προβολών του spin γράφονται υπό μορφή πινάκων 2×2 , δηλαδή

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (\text{H.2})$$

με $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ τις τρεις μήτρες του Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Φυσικά ισχύει:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \quad (\text{H.3})$$

και συνεπώς ισχύει:

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{H.4})$$

➤ Οι ιδιοτιμές και των τριών τελεστών είναι οι $\pm \hbar/2$ με ιδιοδιανύσματα:

για το \hat{S}_x :

a) Ιδιοτιμή $+\frac{\hbar}{2}$, ιδιοδιάνυσμα: $X_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

b) Ιδιοτιμή: $-\frac{\hbar}{2}$, ιδιοδιάνυσμα: $X_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

για το \hat{S}_y :

a) Ιδιοτιμή: $+\frac{\hbar}{2}$ ιδιοδιάνυσμα: $X_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

b) Ιδιοτιμή: $-\frac{\hbar}{2}$ ιδιοδιάνυσμα: $X_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$

Για το \hat{S}_z :

a) Ιδιοτιμή: $+\frac{\hbar}{2}$ ιδιοδιάνυσμα: $X_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

b) Ιδιοτιμή: $-\frac{\hbar}{2}$ ιδιοδιάνυσμα: $X_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Παρατήρηση

Πολύ συχνά το ιδιοδιάνυσμα $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ συμβολίζεται ως α ενώ το ιδιοδιάνυσμα $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ συμβολίζεται ως β .

H.4 Σπινोर και εσωτερικό γινόμενο

Η κυματοσυνάρτηση του Σπιν όταν $s = \frac{1}{2}$ γράφεται υπό μορφή πίνακα – στήλης δύο γραμμών, δηλαδή:

$$\Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (\text{H.5})$$

με $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Η παραπάνω κυματοσυνάρτηση λέγεται σπινोर.

Παρατηρείται ότι $\Psi = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

δηλαδή ο σπινोर γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων του \hat{S}_z που αποτελούν τα διανύσματα βάσης του χώρου.

Αν δοθούν δύο σπινορς $\Psi_1 = \begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix}$ και $\Psi_2 = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$, τότε το εσωτερικό τους γινόμενο ορίζεται ως εξής:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \begin{pmatrix} \alpha^* & b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \alpha^* c + b^* d \quad (\text{H.6})$$

H.5 Η ολική στροφορμή – Σύνθεση στροφορμών

Ως ολική στροφορμή ορίζουμε πλέον το άνυσμα

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (\text{H.7})$$

Στο μέγεθος \vec{J} αντιστοιχούν δύο κβαντικοί αριθμοί j και m_j , ώστε:

$$\begin{aligned} J^2 &= j(j+1)\hbar^2 \\ J_z &= m_j \hbar \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

με $|l-s| \leq j \leq l+s$ και $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ δηλαδή σε κάθε j αντιστοιχούν $2j+1$ τιμές του m_j .

Γενικά μπορούμε πάντα να συνθέτουμε δύο στροφορμές \vec{L}_1 και \vec{L}_2 , δηλαδή

$$\bar{J} = \bar{L}_1 + \bar{L}_2 \quad (\text{H.9})$$

Κάθε κατάσταση $|J, M\rangle$ γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$.

Οι συντελεστές μίξης ονομάζονται συντελεστές Clebsch - Gordan και η σύνθεση γίνεται απαιτώντας $M = m_1 + m_2$. Να υπογραμμίσουμε ότι μπορούμε να αντιστρέψουμε τα παραπάνω και να εκφράσουμε κάθε κατάσταση $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ ως γραμμικό των $|J, M\rangle$.

Παράδειγμα

Σύνθεση στροφορμών για $j_1 = 1$ και $j_2 = 1/2$. Συντελεστές Clebsch - Gordan.

Είναι $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \Rightarrow j = 1/2, 3/2$

J, M j_1, j_2, m_1, m_2	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ 1, 1; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	1					
$ 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$		$\sqrt{\frac{1}{3}}$			$\sqrt{\frac{2}{3}}$	
$ 1, 0; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$		$\sqrt{\frac{2}{3}}$			$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	
$ 1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$			$\sqrt{\frac{2}{3}}$			$\sqrt{\frac{1}{3}}$
$ 1, -1; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$			$\sqrt{\frac{1}{3}}$			$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
$ 1, -1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$				1		

Οι αριθμοί $1, \sqrt{\frac{1}{3}}, \sqrt{\frac{2}{3}}$ κ.λ.π. είναι συντελεστές Clebsch - Gordan. Οι κενές θέσεις στον πίνακα δηλώνουν συντελεστές Clebsch - Gordan ίσους με το μηδέν.

Έτσι π.χ. $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$

Αλλά και
$$\left|1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

Θ. ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Τα κβαντικά προβλήματα τα οποία εξετάστηκαν ως τώρα έχουν ως κοινό χαρακτηριστικό τους ότι η εξίσωση του Schrödinger $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$ είναι δυνατό να επιλυθεί ακριβώς.

Δηλαδή, μπορούμε να υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές E_n και τις ιδιοκαταστάσεις $|\Psi_n\rangle$ με απόλυτη ακρίβεια.

Εντούτοις τα προβλήματα αυτά, είναι εξαιρετικά λίγα και κατά συνέπεια είναι ανάγκη να αναπτυχθούν ορισμένες μέθοδοι, που θα επιτρέπουν την προσεγγιστική επίλυση συνθετότερων και ρεαλιστικότερων φυσικών προβλημάτων.

Οι σπουδαιότερες προσεγγιστικές μέθοδοι είναι οι εξής:

- a. Θεωρία Διαταραχών
- b. Θεωρία Μεταβολών (ή παραλλαγή)

Θ.1 Θεωρία Διαταραχών μη Εκφυλισμένων Καταστάσεων

Ας υποθέσουμε ότι το φυσικό σύστημα που μελετάμε χαρακτηρίζεται από τη Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

όπου \hat{H}_0 η λεγόμενη αδιατάραχη Hamiltonian και \hat{H}_1 η διαταραχή.

Υποθέτουμε επιπλέον ότι:

- i. Το πρόβλημα ιδιοτιμών της \hat{H}_0 λύνεται ακριβώς, δηλαδή γνωρίζουμε τόσο τις ιδιοτιμές $E_n^{(0)}$ όσο και τις ιδιοκαταστάσεις $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ της εξίσωσης

$$\hat{H}_0|\Psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\Psi_n^{(0)}\rangle$$

II. Η \hat{H}_1 είναι «μικρή» σε σύγκριση με τη \hat{H}_0 , δηλαδή ισχύει $\hat{H}_1 \ll \hat{H}_0$ ή ακριβέστερα

$$\left| \langle \Psi_\kappa^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle \right| \ll |E_n^{(0)} - E_\kappa^{(0)}|$$

Ενδιαφερόμαστε να επιλύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών της πλήρους \hat{H} δηλαδή το πρόβλημα $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$, με την προϋπόθεση ότι ισχύουν οι παραπάνω συνθήκες.

Σύμφωνα με τη θεωρία διαταραχών οι ιδιοτιμές E_n και οι ιδιοκαταστάσεις $|\Psi_n\rangle$ γράφονται ως αναπτύγματα της μορφής:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$

$$|\Psi_n\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + |\Psi_n^{(1)}\rangle + |\Psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

Οι δείκτες (0), (1), (2),... εκφράζουν την τάξη της διόρθωσης.

Ειδικά στη θεωρία διαταραχών Rayleigh – Schrödinger ισχύει επιπλέον η σχέση – ανάπτυγμα

$$|\Psi_n^{(\kappa)}\rangle = \sum_{j \neq n} C_{jn}^{(\kappa)} |\Psi_j^{(0)}\rangle$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις αυτές στην εξίσωση Schrödinger και διαχωρίζοντας τους όρους των διάφορων τάξεων βρίσκουμε:

$$0: \left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left(|\Psi_n^{(0)}\rangle \right) = 0$$

$$1: \left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left(|\Psi_n^{(1)}\rangle \right) + \left(\hat{H}_1 - E_n^{(1)} \right) |\Psi_n^{(0)}\rangle = 0$$

$$2: \left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left(|\Psi_n^{(2)}\rangle \right) + \left(\hat{H}_1 - E_n^{(1)} \right) |\Psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(2)} |\Psi_n^{(0)}\rangle = 0$$

⋮ ⋮ ⋮

Δρώντας εν συνέχεια με το bra $\langle \Psi_n^{(0)} |$ στις εξισώσεις αυτές βρίσκουμε μεταξύ άλλων τις ακόλουθες εκφράσεις για τις διορθώσεις πρώτης και δεύτερης τάξης:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{\kappa \neq n} \left\{ \frac{\left| \langle \Psi_n | \hat{H}_1 | \Psi_\kappa^{(0)} \rangle \right|^2}{(E_n^{(0)} - E_\kappa^{(0)})} \right\}$$

καθώς και

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{\kappa \neq n} \left\{ \frac{\langle \Psi_\kappa^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_\kappa^{(0)})} \right\} |\Psi_\kappa^{(0)}\rangle$$

Θ.2 Θεωρία Διαταραχών Εκφυλισμένων Καταστάσεων

Υποθέτουμε τώρα ότι η αδιατάραχτη Hamiltonia \hat{H}_0 χαρακτηρίζεται από την κ -φορές εκφυλισμένη ενεργειακή στάθμη E_n . Αυτό σημαίνει ότι κ ιδιοκαταστάσεις $|\Psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ (όπου $\alpha = 1, 2, \dots, \kappa$) επαληθεύουν την εξίσωση

$$\hat{H}_0 |\Psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$$

Η εφαρμογή μιας διαταραχής \hat{H}_1 είναι δυνατό να άρει τον εκφυλισμό.

Οι κ ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της εξίσωσης $(\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$

βρίσκονται λύνοντας τη λεγόμενη secular ορίζουσα. Ειδικότερα, η ορίζουσα αυτή

είναι:

$$\begin{vmatrix} H_{11}^1 - E_n^{(1)} S_{11} & H_{12}^1 - E_n^{(1)} S_{11} & \dots & H_{1\kappa}^1 - E_n^{(1)} S_{1\kappa} \\ \vdots & & & \\ H_{\kappa 1}^1 - E_n^{(1)} S_{\kappa 1} & \dots & & H_{\kappa\kappa}^1 - E_n^{(1)} S_{\kappa\kappa} \end{vmatrix} = 0$$

όπου $H_{ij}^1 = \langle \Psi_{n,i}^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_{n,j}^{(0)} \rangle$ και $S_{ij} = \langle \Psi_{n,i}^{(0)} | \Psi_{n,j}^{(0)} \rangle$.

Επιλύοντας την ορίζουσα αυτή βρίσκουμε την διόρθωση $E_n^{(1)}$, όπου οι ιδιοτιμές της \hat{H} θα είναι $E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$.

Θ.3 Θεωρία Μεταβολών (ή Παραλλαγών)

Η μέθοδος αυτή είναι η γνωστότερη μη διαταρακτική προσεγγιστική τεχνική.

Το πρόβλημα είναι και πάλι η επίλυση της εξίσωσης ιδιοτιμών $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$, για κάποια Hamiltonian \hat{H} , αν και πρέπει να διευκρινίσουμε ότι η μέθοδος αυτή σπάνια δίνει καλά αποτελέσματα για καταστάσεις πλην της θεμελιώδους. Σύμφωνα με την μέθοδο αυτή εκλέγουμε μια δοκιμαστική συνάρτηση Ψ_λ η οποία εξαρτάται από μία τουλάχιστον παράμετρο λ .

Χρήσιμα κριτήρια για την επιλογή της Ψ_λ αποτελούν οι οριακές συνθήκες, η συμμετρία του προβλήματος κ.λ.π.

Αν κανονικοποιηθεί η δοκιμαστική συνάρτηση Ψ_λ η μέση ενέργεια θα είναι :

$$\langle E \rangle_\lambda = \langle \Psi_\lambda | \hat{H} | \Psi_\lambda \rangle$$

Η μέση αυτή ενέργεια θα ικανοποιεί την σχέση $\langle E \rangle_\lambda \geq E_0$, όπου E_0 είναι η θεμελιώδης ενέργεια του συστήματος.

Η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου λ βρίσκεται από την απαίτηση η $\langle E \rangle_\lambda$ να καταστεί ελάχιστη, ώστε να προσεγγίζει την E_0 .

Η τιμή αυτή λ_0 βρίσκεται μέσω της σχέσης $\frac{d\langle E \rangle_\lambda}{d\lambda} = 0$.

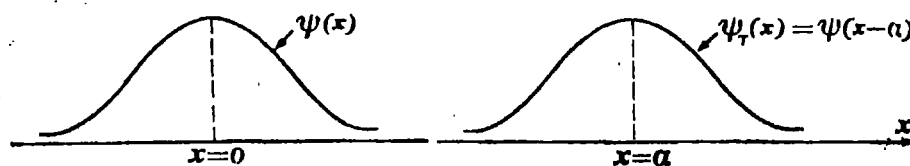
Αντικαθιστώντας στη συνέχεια την τιμή $\lambda = \lambda_0$ βρίσκουμε τη βέλτιστη κυματοσυνάρτηση Ψ_{λ_0} και τη βέλτιστη ενέργεια $E = \langle E \rangle_{\lambda_0}$.

I. ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΙ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ ΣΤΗΝ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

I.1 Μετασχηματισμοί μετατόπισης

Σε αυτό το πρώτο θεωρητικό συμπλήρωμα θα μιλήσαμε για ορισμένες έννοιες και τεχνικές που είναι πολύ χρήσιμες για τη μελέτη της συμμετρίας στα κβαντικά συστήματα.

Σαν ένα πρώτο βήμα ας δούμε πώς «πραγματώνεται» στην Κβαντομηχανική η απλούστερη γεωμετρική πράξη που μπορεί να κάνει κανείς σ' ένα φυσικό σύστημα ή μεταφορά του από μια θέση του χώρου σε μια άλλη. Αν περιοριστούμε για απλότητα σ' ένα μονοδιάστατο πρόβλημα τότε το αναμενόμενο αποτέλεσμα της μεταφοράς θα είναι όπως στο σχήμα 1.



Σχήμα 1

Λόγω της ισοδυναμίας όλων των σημείων του χώρου (ομογένεια τον χώρου) ή κυματοσυνάρτηση $\Psi_T(x)$ ($T \equiv Translated$) που περιγράφει το μετατοπισμένο φυσικό σύστημα θα' ναι η ίδια με την αρχική μόνο που το «κέντρο» της θα' χει μετατοπιστεί κατά α . Θα' ναι δηλαδή

$$\Psi_T(x) = \psi(x - \alpha) \quad (1.1)$$

όπου στο δεύτερο μέλος χρειάζεται προφανώς η μεταβλητή $x - \alpha$, και όχι η $x + \alpha$, διότι αν η αρχική κυματοσυνάρτηση είχε την «κορυφή» της στο $x = 0$, η $\Psi_T(x)$ πρέπει να την έχει στο $x = \alpha$. Θα δείξουμε τώρα ότι η μετατοπισμένη κυματοσυνάρτηση (1) συνδέεται με την αρχική $\Psi(x)$ μέσω της σχέσης

$$\Psi_T(x) = \psi(x - \alpha) = e^{-\alpha D} \psi(x) \quad (1.2)$$

όπου $D = \frac{d}{dx}$ ο τελεστής της παραγώγισης. Πράγματι αν θεωρήσουμε την $\psi(x - \alpha)$ σαν συνάρτηση του α και την αναπτύξουμε σε σειρά Taylor γύρω από το $\alpha = 0$, θα έχουμε

$$\psi(x - \alpha) = \psi(x) - \frac{\alpha}{1!} \psi'(x) + \frac{\alpha^2}{2!} \psi''(x) - \frac{\alpha^3}{3!} \psi'''(x) + \dots$$

οπότε το αρνητικό πρόσημο προέρχεται από την μετατροπή των παραγώγων ως προς α σε παραγώγους ως προς x . Θα είναι λοιπόν,

$$\psi(x - \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)^n}{n!} \psi^{(n)}(x) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n}{n!} D^n \right) \psi \quad (1.3)$$

και η (1.2) είναι πια προφανής αφού η εντός παρενθέσεως σειρά στην (1.3) δεν είναι παρά το ανάπτυγμα του εκθετικού $\exp(-\alpha D)$. Η (1.2) μας λέει ότι η

μετατοπισμένη κυματοσυνάρτηση $\Psi_T(x) = \psi(x - a)$ προκύπτει από την αρχική με δράση του τελεστή μετατόπισης

$$U_T(\alpha) = e^{-i\alpha p}$$

ο οποίος γράφεται συνήθως στην ισοδύναμη μορφή

$$U_T(\alpha) = e^{-i\alpha p} \quad (1.4)$$

οπότε $p = -i\frac{d}{dx}$ ($\hbar = 1$) ο τελεστής της ορμής. Φτάσαμε λοιπόν στο πολύ

σημαντικό συμπέρασμα ότι ο τελεστής της ορμής συνδέεται με τη γεωμετρική πράξη της μεταφοράς ενός φυσικού συστήματος από μια θέση σε μια άλλη. Αυτή η σύνδεση θα γίνει πιο διάφανη αν πραγματοποιήσουμε μια απειροστή μετατόπιση κατά $\delta\alpha$ οπότε θα έχουμε

$$U_T(\delta\alpha) = e^{-i\delta\alpha p} \approx 1 - i\delta\alpha p$$

$$\Rightarrow \Psi_T - U_T(\delta\alpha)\psi \approx (1 - i\delta\alpha p)\psi$$

και έτσι η απειροστή αλλαγή στην κυματοσυνάρτηση λόγω της μετατόπισης κατά $\delta\alpha$ θα ισούται με

$$\delta\psi = \psi_T - \psi = -i\delta\alpha p\psi \quad (1.5)$$

θα προκύπτει δηλαδή με δράση του τελεστή της ορμής πάνω στην αρχική κυματοσυνάρτηση. Εξ αίτιας αυτού ακριβώς του ρόλου του ο τελεστής της ορμής δικαίως αποκαλείται γεννήτορας των μετατοπίσεων στο χώρο. Πρόκειται για μια ιδιότητα που, εκ των ύστερων, φαίνεται αρκετά προφανής. Ο τελεστής της ορμής δεν είναι παρά η πράξη της παραγώγισης, της οποίας η δράση πάνω σε μια συνάρτηση ξέρουμε ότι δίνει την απειροστή της αλλαγή σε μια στοιχειώδη μετατόπιση της μεταβλητής. Όσο για την εκθετική μορφή (1.4) αυτή δεν είναι παρά το συνολικό αποτέλεσμα της άθροισης (= ολοκλήρωσης) πολλών απειροστών μετατοπίσεων που συνθέτουν μια πεπερασμένη μετατόπιση κατά α .

Δεδομένου ότι η ταυτόχρονη μετατόπιση δύο κυματοσυναρτήσεων $\psi(x)$ και $\phi(x)$ τις αφήνει στην ίδια σχετική θέση, το εσωτερικό τους γινόμενο θα παραμείνει το ίδιο, και επομένως περιμένουμε ότι ο τελεστής μετατόπισης (1.4) θα είναι μοναδιαίος όπως και συμβαίνει. (Θυμηθείτε ότι κάθε εκθετικό της μορφής e^{iA} , όπου A Ερμιτιανός τελεστής, δίνει ένα μοναδιαίο τελεστή).

Πέρα από το νόμο μετασχηματισμού των κυματοσυναρτήσεων ο οποίος εκφράζεται με τη σχέση $\Psi_T = U_T\psi = e^{-i\alpha p}\psi$ θα θέλαμε να δούμε τώρα πώς μετασχηματίζονται και τα φυσικά μεγέθη του συστήματος μας παίρνοντας σαν συγκεκριμένο παράδειγμα τη θέση του σωματιδίου για την οποία είναι προφανές ότι θα πρέπει να ισχύει η

$$\langle x \rangle_T = \langle x \rangle + \alpha \quad (1.7)$$

οπού $\langle x \rangle_T$ και $\langle x \rangle$ οι μέσες τιμές της θέσης στο μετατοπισμένο και στο αρχικό σύστημα αντίστοιχα. Θα είναι λοιπόν

$$\langle x \rangle_T = (\psi_T, x\psi_T) = (U_T\psi, xU_T\psi) = (\psi, U_T^+ x U_T \psi)$$

και

$$\langle x \rangle = (\psi, x\psi)$$

οπότε η (1.7) θα γράφεται σαν

$$\begin{aligned} (\psi, U_T^+ x U_T \psi) &= (\psi, x\psi) + \alpha = (\psi, x\psi) + \alpha(\psi, \psi) \\ &= (\psi, x\psi) + (\psi, \alpha\psi) = (\psi, (x + \alpha)\psi) \end{aligned}$$

απ' οπού έπεται αναγκαστικά η

$$U_T^+ x U_T = x + \alpha \quad (1.8)$$

Εντελώς ανάλογα από την φυσικά προφανή σχέση

$$\langle p \rangle_T = \langle p \rangle$$

η οποία μας λέει ότι η μετατόπιση ενός φυσικού συστήματος δεν επηρεάζει καθόλου την ορμή του, θα καταλήξουμε στην

$$U_T^+ A(x, p) U_T = A(x + \alpha, p) \quad (1.9)$$

που η ισχύς της είναι βεβαίως προφανής αφού ο τελεστής μετατόπισης είναι συνάρτηση μόνο της ορμής και άρα θα μετατίθεται μ' αυτήν. Από τις (1.8) κι (1.9) έπεται αμέσως (ας σκεφτεί μόνος του ο αναγνώστης γιατί) η γενικότερη σχέση

$$U_T^+ A(x, p) U_T = A(x\alpha, p) \quad (1.10)$$

οπού $A = A(x, p)$ ένα τυχόν φυσικό μέγεθος. Εκ των υστέρων όλα φαίνονται βεβαίως πολύ ευλόγα. Το πρώτο μέλος της (1.10) δεν είναι παρά ο γνωστός νόμος μετασχηματισμού των κβαντικών τελεστών λόγω της εκτέλεσης ενός μοναδιαίου μετασχηματισμού επί των κυματοσυναρτήσεων, ενώ στο δεύτερο μέλος είναι το αναμενόμενο αποτέλεσμα αυτού του μετασχηματισμού λόγω της γεωμετρικής του σημασίας ως μετασχηματισμού μετατόπισης. Εκ των ύστερων είναι λοιπόν πολύ προφανές (!) ότι ο νόμος μετασχηματισμού των φυσικών μεγεθών κάτω από μετατοπίσεις θα' χει τη μορφή,

$$e^{i\alpha p} A(x, p) e^{i\alpha p} = A_T \equiv A(x + \alpha, p) \quad (1.11)$$

οπού το σύμβολο A_T δηλώνει τη μετατοπισμένη μορφή του φυσικού μεγέθους A .

Η (1.11) οδηγεί σ' ένα πολύ ενδιαφέρον γενικό συμπέρασμα αν εξεταστεί στην περιοχή των απειροστών μετατοπίσεων για τις όποιες ο τελεστής μετατόπισης γράφεται, όπως είπαμε πριν, στη μορφή

$$U_T(\delta\alpha) \approx 1 - i\delta\alpha p$$

Έτσι θα έχουμε

$$U_T^+(\delta\alpha) A U_T(\delta\alpha) \approx (1 + i\delta\alpha p) A (1 - i\delta\alpha p) \quad (I.12)$$

Κάνοντας τις πράξεις στην (I.12) και κρατώντας ορούς μόνο μέχρι την πρώτη τάξη ως προς $\delta\alpha$, παίρνουμε

$$U_T^+(\delta\alpha) A U_T(\delta\alpha) \approx A + i\delta\alpha [p, A]$$

και εξισώνοντας αυτό το αποτέλεσμα με $A_T = A(x + \delta\alpha, p)$ βρίσκουμε

$$i\delta\alpha [p, A] = \delta A \quad (I.13)$$

οπού $\delta A = A_T - A$ η απειροστή μεταβολή του μεγέθους A λόγω της μετατόπισης του συστήματος κατά $\delta\alpha$. Πιο συγκεκριμένα θα είναι

$$\begin{aligned} \delta A &= A(x + \delta\alpha, p) - A(x, p) \\ &= A(x, p) + \delta\alpha \frac{\partial A}{\partial x} - A(x, p) = \delta\alpha \frac{\partial A}{\partial x} \end{aligned}$$

οπότε η (I.13) θα καταλήγει στην

$$i\delta\alpha [p, A] = \delta\alpha \frac{\partial A}{\partial x} \Rightarrow [p, A] = -i \frac{\partial A}{\partial x}$$

που είναι η γνωστή μας μεταθετική σχέση της ορμής με ένα τυχόν φυσικό μέγεθος.

Το γενικό συμπέρασμα που απορρέει από την (I.13) είναι ότι : ο μεταθετής της ορμής με ένα φυσικό μέγεθος δίνει την απειροστή μεταβολή αυτού του μεγέθους σε μια απειροστή μετατόπιση του φυσικού συστήματος.

Η πιο απλή σχετική περίπτωση είναι βεβαίως ο θεμελιώδης μεταθετής

$$[p, x] = -i$$

ο οποίος, ύστερα από τα παραπάνω, αποκτά πια ένα καθαρά γεωμετρικό περιεχόμενο.

Η επέκταση στην τριδιάστατη περίπτωση είναι μάλλον προφανής. Ο τελεστής μετατόπισης (η μεταφοράς) ενός φυσικού συστήματος κατά α θα δίνεται (σε μονάδες $\hbar = 1$ πάντα) από τον τύπο,

$$U_T(\alpha) = e^{-i\alpha \cdot p} \quad (I.14)$$

όπου p ο διανυσματικός τελεστής της ορμής που κάθε του συνιστώσα θα είναι τώρα ο γεννήτορας των μετατοπίσεων κατά την αντίστοιχη κατεύθυνση. Όσο για το νόμο μετασχηματισμού (I.11) αυτός θα γράφεται τώρα σαν,

$$e^{i\alpha \cdot p} A(r, p) e^{-i\alpha \cdot p} = A(r = \alpha, p)$$

και η απειροστή μορφή του θα είναι η

$$i[\delta\alpha \cdot p, A] \delta A \quad (I.15)$$

όπου δA η απειροστή μεταβολή του μεγέθους A λόγω της μετατόπισης του συστήματος κατά $\delta \alpha$. Διαλέγοντας το $\delta \alpha$ να έχει μια οποιαδήποτε από τις κατευθύνσεις x, y, z παίρνουμε,

$$i\delta\alpha[p_i, A] = \delta_i A \quad (1.16)$$

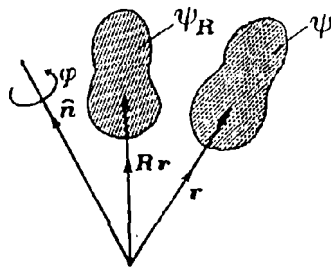
οπού $\delta_i A$ η απειροστή μεταβολή του μεγέθους A λόγω μετατόπισης κατά την κατεύθυνση i ($i = 1, 2, 3, \equiv x, y, z$). Η (1.16) είναι βεβαίως ισοδύναμη με τη γνωστή μας μεταθετική σχέση $[p_i, A] = -i\partial A / \partial x_i$, αν λάβουμε υπ' όψη ότι είναι $\delta_i A = \delta \alpha \partial A / \partial x_i$. Στο φως της (1.16) οι θεμελιώδεις μεταθετικές σχέσεις $[p_i, x_j] = -i\delta_{ij}$ αποκτούν πια ένα σαφέστατο μαθηματικό νόημα. Παραδείγματος χάρη ο μηδενισμός των μεταθετών $[p_i, x_j]$ για $i \neq j$ εκφράζει το απλό γεγονός ότι η συνιστώσα της θέσης σε μια ορισμένη κατεύθυνση παραμένει αμετάβλητη σε μετατοπίσεις κάθετες προς αυτήν. Γενικότερα, η (1.16) μας λέει ότι αν ένα φυσικό μέγεθος παραμένει αναλλοίωτο σε μετατοπίσεις κατά μία ορισμένη διεύθυνση τότε θα μετατίθεται με την αντίστοιχη συνιστώσα της ορμής. Αν δε το μέγεθος αυτό συμβαίνει να είναι η Χαμιλτονιανή τότε από την ύπαρξη μιας συμμετρίας μετατόπισης οδηγούμαστε στη διατήρηση μιας συνιστώσας της ορμής. Ας προσθέσαμε τέλος ότι από τη γνωστή σχέση

$$\psi(t) = e^{-iHt} \psi(0)$$

είναι φανερό ότι και η Χαμιλτονιανή είναι γεννήτορας κάποιων μετατοπίσεων μόνο που πρόκειται για τις μετατοπίσεις στο χρόνο. Έτσι η διατήρηση της ενέργειας συνδέεται με τη συμμετρία της χρονικής μετατόπισης με τον ίδιο τρόπο που η διατήρηση της ορμής απορρέει από τη συμμετρία της χωρικής μετατόπισης του συστήματος.

1.2. Μετασχηματισμοί στροφής

Όπως υποψιάζεται ίσως ο αναγνώστης, το ρόλο που παίζει η ορμή για τις μετατοπίσεις τον αναλαμβάνει η στροφορμή προκειμένου για τις στρωτού φυσικού συστήματος στο χώρο. Μια τέτοια στροφή κατά γωνία ϕ γύρω από τον άξονα n δείχνεται στο σχήμα 2, οπού οι διαγραμμισμένες περιοχές δηλώνουν ενδεικτικά τις θέσεις πού «καταλαμβάνουν» οι κυματοσυναρτήσεις του αρχικού και του στραμμένου φυσικού συστήματος αντίστοιχα. Η στραμμένη θέση ενός αρχικού διανύσματος θέσης r δηλώνεται



Σχήμα 2

με $Rt(*)$ ($R=Rotatio$) ενώ το $R^{-1}r$ παριστάνει προφανώς το σημείο που καταλήγει στο r υστέρα από τη στροφή. Η στραμμένη (ψ_R) και η αρχική (ψ) κυματοσυνάρτηση θα έχουν τις ίδιες τιμές στα σημεία που προέρχονται το ένα από το άλλο με στροφή, θα ισχύει η

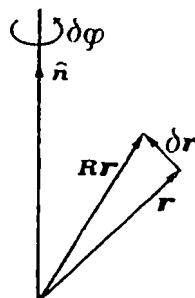
$$\psi_R(Rr) = \psi(r) \tag{1.17}$$

που είναι βεβαίως ισοδύναμη με την

$$\psi_R(r) = \psi(R^{-1}r) \tag{1.18}$$

όπου η παρουσία της αντίθεσης στροφής στο δεύτερο μέλος της (1.18) μας λέει ακριβώς ότι η τιμή της στραμμένης κυματοσυνάρτησης σ' ένα σημείο r ισούται με την τιμή της αρχικής στο σημείο από το οποίο προείλθε το r με στροφή. Για να διερευνήσουμε τώρα την σχέση της στροφορμής με τις στροφορμές ας δούμε ποιο είναι το αποτέλεσμα μιας απειροστής στροφής επι των κυματοσυναρτήσεων. Με την βοήθεια του σχήματος 3 είναι εύκολο να δούμε ότι η απειροστή μεταβολή δr του διανύσματος θέσης r λόγω της στροφής κατά $\delta\phi$ γύρω από τον άξονα n , δίνεται από το εξωτερικό γινόμενο

$$\delta r = \delta\phi n \times r = \delta\phi \times r \tag{1.19}$$



Σχήμα 3

όπου $\delta\phi = n\delta\phi$ είναι το διάνυσμα που καθορίζει τη στροφή κατά μέγεθος και διεύθυνση. Η στραμμένη θέση του διανύσματος r , λόγω της απειροστής στροφής, θα είναι $r + \delta r$ ενώ το διάνυσμα από το οποίο προήλθε το r είναι $r - \delta r$. Βάσει της (1.18) θα είναι λοιπόν

$$\psi_R(r) = \psi(r - \delta r)$$

κι επομένως για την απειροστή μεταβολή $\delta\psi = \psi_R - \psi$ θα έχουμε

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \psi_R(r) - \psi(r) = \psi(r - \delta r) - \psi(r) \\ &= -\delta r \cdot \nabla \psi = -(\delta\phi \times r) \cdot \nabla \psi \\ &= -\delta\phi \cdot (r \times \nabla)\psi = -i\delta\phi \cdot (r \times p)\psi \quad (p) = -i\nabla \\ &= -i\delta\phi \cdot l\psi \end{aligned} \quad (1.19)$$

Η μορφή της απειροστής μεταβολής (1.4) είναι ταυτόσημη μ' εκείνη που είχαμε στην περίπτωση της μετατόπισης ($\delta\psi = -i\delta\alpha \cdot p\psi$) μόνο πού η στροφορμή έχει πάρει τη θέση της ορμής και το διάνυσμα της στοιχειώδους μετατόπισης $\delta\alpha$ έχει αντικατασταθεί από το διάνυσμα της στοιχειώδους στροφής $\delta\phi$. Για πεπερασμένες στροφές η (1.19) θα πάρει βεβαίως την εκθετική μορφή

$$\psi_R(r) = U_R \psi(r) = e^{-i\phi \cdot l} \psi(r) \quad (1.20)$$

ενώ ο νόμος μετασχηματισμού των φυσικών μεγεθών θα γράφεται σαν

$$U_R^\dagger A U_R = e^{i\phi \cdot l} A e^{-i\phi \cdot l} = A_R \quad (1.21)$$

οπού A_R η στραμμένη μορφή του φυσικού μεγέθους. Για απειροστές στροφές ειδικότερα η (1.21) καταλήγει στην

$$i[\delta\phi \cdot l, A] = \delta A \quad (1.22)$$

οπού δA η απειροστή μεταβολή του μεγέθους A λόγω της στροφής κατά $\delta\phi$ γύρω από τον άξονα n . Δεδομένου ότι $\delta\phi \cdot l = \delta\phi n \cdot l = \delta\phi l_n$, οπού l_n η συνιστώσα της στροφορμής κατά τη διεύθυνση του άξονα στροφής, η (1.22) θα γράφεται επίσης σαν

$$i\delta\phi[l_n, A]\delta A \quad (1.23)$$

Μια άμεση συνέπεια της (1.23) είναι ότι μια συνιστώσα της στροφορμής θα μετατίθεται με κάθε φυσικό μέγεθος που έχει συμμετρία στροφής γύρω από τον αντίστοιχο άξονα. Αν το φυσικό μέγεθος έχει πλήρη περιστροφική συμμετρία τότε θα μετατίθεται με όλες τις συνιστώσες της στροφορμής. Στο φως αυτής της διαπίστωσης ο μηδενισμός των μεταθετών

$$[l_i, l^2] = [l_i, p^2] = [l_i, r \cdot p] = 0$$

είναι πια γεωμετρικά προφανής αφού το εσωτερικό γινόμενο δύο τυχόντων διανυσμάτων είναι αναλλοίωτο σε στροφές. Πλήρη συμμετρία στροφής έχει και η Χαμιλτονιανή ενός κεντρικού πεδίου

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

οπότε θα μετατίθεται μ' όλες τις συνιστώσες της στροφορμής οι όποιες θα είναι έτσι διατηρήσιμες ποσότητες του προβλήματος. Η διατήρηση της στρο-

φορμής είναι λοιπόν αποτέλεσμα της περιστροφικής συμμετρίας ενός προβλήματος ακριβώς όπως η διατήρηση της ορμής είναι απόρροια της συμμετρίας μετατόπισης. Η γενική μεταθετική σχέση (1.23) είναι όμως χρήσιμη και στις περιπτώσεις φυσικών μεγεθών που δεν παραμένουν αμετάβλητα σε στροφές μετασχηματίζονται όμως μ' ένα καθορισμένο τρόπο όπως συμβαίνει, παραδείγματος χάρη, με τα διανύσματα. Αν A είναι ένα τέτοιο διανυσματικό μέγεθος τότε η απειροστή μεταβολή του σε μια στοιχειώδη στροφή θα δίδεται από τον ίδιο τύπο που βρήκαμε νωρίτερα για το r (τύπος (1.19)) αφού όλα τα διανύσματα μετασχηματίζονται με τον ίδιο τρόπο κάτω από στροφές. Θα είναι λοιπόν

$$\delta A = \delta \phi \times A = \delta \phi n \times A$$

οπότε η (1.23) θα γράφεται σαν

$$[1_n, A] = -in \times A$$

απ' όπου είναι εύκολο να καταλήξετε μόνοι σας στην μεταθετική σχέση

$$[1_i, A_j] = ie_{ijk} A_k \quad (1.24)$$

στην οποία εννοείται βεβαίως ότι ο επαναλαμβανόμενος δείκτης στο δεύτερο μέλος αθροίζεται. (Σύμβαση άθροισης του Einstein).

$$[1_i, x_j] = ie_{ijk} x_k, \quad [1_i, p_j] = ie_{ijk} p_k, \quad [1_i, 1_j] = ie_{ijk} 1_k$$

Εκφράζουν τον κοινό νόμο μετασχηματισμού των διανυσμάτων σε στροφές.

Θα τελειώσουμε με μια εφαρμογή των παραπάνω ιδεών στην απλούστερη δυνατή περίπτωση στροφορμής που είναι, εκείνη του spin και ειδικότερα του spin 1/2. Ο τελεστής στροφής γύρω από ένα τυχόντα άξονα n θα γράφεται τώρα σαν

$$U_R = e^{-i\phi s_n} = e^{-\frac{1}{2}i\phi \sigma_n}$$

και θα είναι βέβαια μια 2×2 μοναδιαία μήτρα που μπορεί να υπολογιστεί. Το αποτέλεσμα είναι

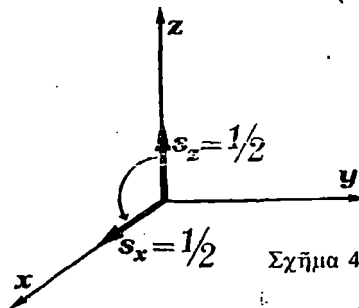
$$U_R = \cos \frac{\phi}{2} - i \sin \frac{\phi}{2} \sigma_n$$

$$U_{Ry}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -\sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

Δεδομένου τώρα ότι μια στροφή γύρω από τον άξονα y κατά $\frac{\pi}{2}$ φέρνει τον άξονα z πάνω στον άξονα x (Σχήμα 4) η δράση της μήτρας (10), με $\phi = \frac{\pi}{2}$,

πάνω στην κατάσταση με $s_z = 1/2$ θα τη μετατρέψει στην κατάσταση με $s_x = 1/2$.

Πράγματι



(Σχήμα 4)

$$U_{Ry}(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, X(s_z = 1/2) = X_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = X(s_x = 1/2)$$

Με ανάλογη χρήση κατάλληλων μητρών στροφής μπορούν επίσης να κατασκευαστούν και οι ιδιοκαταστάσεις του spin για τυχούσα κατεύθυνση. Σημειώστε ακόμα ότι η εφαρμογή του νόμου μετασχηματισμού τελεστών $U_R^+ A U_R = A_R$ θα πρέπει να δώσει στην περίπτωση μας το αποτέλεσμα

$$U_{Ry}^+(\pi/2) s_z U_{Ry}(\pi/2) = s_x.$$

Κ. ΕΙΚΟΝΕΣ ΚΑΙ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΕΙΣ ΤΟΥ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΟΥ ΦΟΡΜΑΛΙΣΜΟΥ

Κ.1. Εικόνα του Schrödinger και εικόνα του

Ο κβαντομηχανικός φορμαλισμός επιδέχεται μια ποικιλία αναπαραστάσεων διότι ούτε οι τελεστές ούτε τα καταστατικά διανύσματα έχουν άμεσο φυσικό νόημα, παρά μόνο οι μέσες τιμές. Μπορούμε λοιπόν ν' αλλάξουμε τον τρόπο περιγραφής και στη θέση των καταστάσεων ψ να χρησιμοποιήσουμε τις

$$\psi' = U\psi' \quad (\text{K.1})$$

και στη θέση των τελεστών A τους

$$A' = UAU^+ \quad (K.2)$$

οπού U ένας τυχών μοναδιαίος τελεστής ώστε να είναι εξασφαλισμένη η διατήρηση της κανονικοποίησης των καταστάσεων. Οι (K.1) και (K.2) εγγυώνται βεβαίως αυτό που επιζητούσαμε. Ότι δηλαδή οι μέσες τιμές στην παλιά και τη νέα περιγραφή Θ είναι οι ίδιες. Πράγματι

$$\begin{aligned} \langle A' \rangle &= (\psi', A' \psi') = (U\psi, UAU^+U\psi) = (\psi, U^+UAU^+U\psi) \\ &= (\psi, A\psi) = \langle A \rangle \end{aligned}$$

Μια πολύ χρήσιμη ιδιότητα του νόμου μετασχηματισμού (K.2) είναι ότι διατηρεί όλες τις αλγεβρικές σχέσεις μεταξύ των τελεστών του συστήματος. Έτσι παραδείγματος χάρη αν οι τελεστές A, B, C συνδέονται με τη σχέση

$$C = AB \quad (K.3)$$

το ίδιο θα ισχύει και για τις «εικόνες» τους A', B', C' . Θα είναι δηλαδή

$$C' = A'B' \quad (K.4)$$

Αυτό φαίνεται αμέσως αν πολλαπλασιάσουμε τα δύο μέλη της (K.3) από αριστερά με U και από δεξιά με U^+ ώστε το στο πρώτο μέλος να εμφανιστεί ο τελεστής C' οπότε θα έχουμε

$$UCU^+ = C' = UABU^+ = UAU^+UBU^+ = A'B'$$

οπού από τη δεύτερη ισότητα στην τρίτη πήγαμε παρεμβάλλοντας μεταξύ των τελεστών A και B το γινόμενο U^+U που ξέρουμε ότι κάνει μονάδα.

Μια άμεση συνέπεια των παραπάνω είναι και η διατήρηση των μεταθετικών σχέσεων μεταξύ των τελεστών του προβλήματος. Θα ισχύει δηλαδή

$$[A, B] = iC \quad \Rightarrow \quad [A', B'] = iC \quad (K.5)$$

που είναι τελείως εύλογη από φυσική άποψη αν θυμηθούμε ότι η τιμή του μεταθετή καθορίζει, μεταξύ άλλων, και τη σχέση αβεβαιότητας των αντίστοιχων μεγεθών.

Μ' αυτές τις εισαγωγικές παρατηρήσεις κατά νου, ας προχωρήσουμε τώρα σε μια ειδική επιλογή για τον τελεστή μετασχηματισμού U ώστε να πετύχουμε ένα συγκεκριμένο αποτέλεσμα, να μεταφέρουμε τη χρονική εξέλιξη από τις φυσικές καταστάσεις στους τελεστές.

Το ότι στην περιγραφή που χρησιμοποιήσαμε μέχρι τώρα η χρονική εξέλιξη φέρονταν από τις κυματοσυναρτήσεις ενώ οι τελεστές παρέμεναν «παγωμένοι» σε μια ορισμένη μορφή είναι κάτι που θεωρήθηκε αυτονόητο

ενώ απλώς πρόκειται για μία μεταξύ πολλών εναλλακτικών επιλογών. Η απλούστερη απ' αυτές τις εναλλακτικές επιλογές οφείλεται στον Heisenberg και έχει σαν αφετηρία της τον νόμο της χρονικής εξέλιξης των καταστάσεων

$$\psi(t) = e^{-iHt} \psi(0) \quad (\hbar = 1) \quad (\text{K.6})$$

απ' όπου φαίνεται αμέσως ότι αν ως τελεστής μετασχηματισμού στις (!) και (K.2) επιλεγεί ο e^{-iHt} τότε οι νέες καταστάσεις

$$\psi_H = e^{-iHt} \psi(t) \quad (\text{K.7})$$

θα είναι ανεξάρτητες του χρόνου ενώ οι νέοι τελεστές θα δίνονται από τον τύπο

$$A_H(t) = e^{-iHt} A e^{-iHt} \quad (\text{K.8})$$

και θα εξαρτώνται, προφανώς, από το χρόνο. Οι (K.7) και (K.8) ορίζουν την λεγόμενη εικόνα του Heisenberg ενώ η παλιά περιγραφή αποκαλείται εικόνα του Heisenberg και δηλώνεται προς διάκριση με τον δείκτη S . Είναι δηλαδή

$$\psi_S = \psi(t) \quad , \quad A_S = A \quad (\text{K.9})$$

Στην εικόνα του Schrodinger λοιπόν, η χρονική εξέλιξη φέρεται από το καταστατικό διάνυσμα ενώ στην εικόνα του Heisenberg από τους τελεστές. Το φυσικό περιεχόμενο και των δύο εικόνων είναι βεβαίως το ίδιο αφού οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών παραμένουν αμετάβλητες.

Δεδομένου τώρα ότι στην εικόνα του Heisenberg η δυναμική είναι αποτυπωμένη στους τελεστές ας δούμε ποιος είναι ο νόμος της χρονικής τους εξέλιξης. Γι' αυτό το σκοπό παραγωγίζουμε την (K.8) ως προς t και παίρνουμε

$$\begin{aligned} \frac{dA_H}{dt} &= \left(e^{iHt} \right) A e^{-iHt} + e^{iHt} A \left(-e^{-iHt} \right) \\ &= iH e^{iHt} A e^{-iHt} + e^{iHt} A \left(-iH e^{-iHt} \right) \\ &= iH A_H - iA_H H = -i(A_H, H) \end{aligned} \quad (\text{K.10})$$

$$\Rightarrow i \frac{dA_H}{dt} = [A_H, H]$$

Η εξίσωση (K.10) είναι γνωστή ως εξίσωση κίνησης του Heisenberg και παίζει στην αντίστοιχη εικόνα τον ίδιο ρόλο που παίζει η εξίσωση του Schrödinger στην ομώνυμη εικόνα. Σημειώστε ότι η (K.10) καταλήγει αμέσως στη γνωστή μας

εξίσωση της χρονικής μεταβολής των μέσων τιμών αν πάρουμε τη μέση τιμή των δύο μελών της ως προς τα ακίνητα καταστατικά διανύσματα $\psi_H = \psi(0)$.

Απομένει να δούμε αν η εξίσωση του Heisenberg μπορεί να χρησιμεύσει ως εναλλακτικό εργαλείο για τον υπολογισμό της χρονικής εξέλιξης αντί της εξισώσεως Schrödinger. Γι' αυτό το σκοπό αρκεί να μελετήσουμε τη χρονική μεταβολή των τελεστών θέσης και ορμής αφού όλοι οι άλλοι δεν είναι παρά συναρτήσεις αυτών των δύο. Οι σχετικές εξισώσεις του Heisenberg είναι

$$i\dot{x} = [x, H] \quad , \quad i\dot{p} = [p, H] \quad (\text{K.11})$$

όπου περιοριστήκαμε για απλότητα σ' ένα μονοδιάστατο σύστημα και επίσης αφαιρέσαμε (όπως συνηθίζεται) το δείκτη H από τους τελεστές, θεωρώντας αυτονόητο (αφού εμφανίζονται οι χρονικές τους παράγωγοι) ότι πρόκειται για τους χρονεξαρτημένους τελεστές

$$x(t) = x_H(t) \quad , \quad p(t) = p_H(t)$$

της εικόνα του Heisenberg. Για τον υπολογισμό των μεταθετών στην (K.11) είναι αναγκαίο να σημειώσαμε ότι μπορούν να εφαρμοστούν οι γνωστές σχέσεις

$$[x, H] = i \frac{\partial H}{\partial p} \quad , \quad [p, H] = -i \frac{\partial H}{\partial x} \quad (\text{K.12})$$

διότι η απόδειξη τους βασίζεται μόνο στη θεμελιώδη μεταθετική $[x, p] = i$ η οποία εξακολουθεί να ισχύει και για τους τελεστές Heisenberg $x(t)$ και $p(t)$ αφού συνδέονται με τους παλιούς μ' ένα μοναδιαίο μετασχηματισμό. Θα είναι δηλαδή

$$[x, p] = [x(t), p(t)] = i \quad (\text{K.13})$$

Εφαρμόζοντας τις (K.12) για μια Χαμιλτονιανή της μορφής $H = p^2/2m + V(x)$ οι εξισώσεις (K.11) δίνουν

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \quad \text{και} \quad \dot{p} = -\frac{dV}{dx} = F(x) \quad (\text{K.14})$$

εδώ παραγωγίζουμε την πρώτη και κάνουμε αντικατάσταση στην δεύτερη. Έχουμε την εξίσωση

$$m\ddot{x} = \frac{dV}{dx} = F(x) \quad (\text{K.15})$$

πού είναι μορφολογικά ταυτόσημη με την εξίσωση Νεύτωνα του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος. Όμως οι ομοιότητες είναι απατηλές. Στην κβαντική

εξίσωση (Κ.15) η άγνωστη συνάρτηση $x(t)$ είναι ένα τελεστικό πεδίο πάνω στον άξονα t και μάλιστα μη μεταθετικό αφού, λόγω των (Κ.13) και (Κ.14), ισχύει η

$$[x(t), \dot{x}(t)] = \frac{i}{m} \quad (\text{Κ.16})$$

οπότε θα είναι $[x(t), x(t')] \neq 0$. Το ότι αυτή ακριβώς η μη μεταθετικότητα είναι αυτή που κάνει πρακτικά αδύνατη την επίλυση της τελεστικής εξίσωσης (Κ.15) είναι κάτι που μπορούμε να το αντιληφθούμε πολύ εύκολα αν επιχειρήσουμε να ακολουθήσαμε τη διαδικασία επίλυσης του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος. Όπως γνωρίζουμε το καίριο βήμα στην κλασική μέθοδο λύσης είναι η διαπίστωση ότι η (Κ.15) διαθέτει ένα «πρώτο ολοκλήρωμα» που δεν είναι παρά η έκφραση της ολικής ενέργειας

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \quad (\text{Κ.17})$$

από την οποία η λύση προκύπτει με μια απλή ολοκλήρωση. Στο κβαντικό πρόβλημα η μη μεταθετικότητα μας εμποδίζει ακόμα και να ελέγξουμε αν η (Κ.17) είναι πράγματι μια σταθερά της κίνησης ή όχι. Και η δυσκολία έγκειται στο γεγονός ότι δεν ξέρουμε καν πως να παραγωγίζουμε εκφράσεις όπου η εμφανιζόμενη «συνάρτηση» δεν μετατίθεται με την παραγωγό της. Παραδείγματος χάρη η χρονική παράγωγος του $V(x)$ μπορεί να ισούται με οποιαδήποτε, ή και με καμία, από τις εκφράσεις

$$\frac{dV}{dt} = \dot{x} \frac{dV}{dx} \quad , \quad \frac{dV}{dx} \dot{x} \quad , \quad \frac{1}{2} \left(\dot{x} \frac{dV}{dx} + \frac{dV}{dx} \dot{x} \right) \text{ κ.λ.π.}$$

που είναι κλασικά ισοδύναμες αλλά διαφορετικές μεταξύ τους όταν οι τελεστές x και \dot{x} δεν μετατίθενται.

Η κβαντική εξίσωση του Νεύτωνα (Κ.15) μπορεί να επιλυθεί μόνο στην περίπτωση που είναι γραμμική οπότε η λύση της είναι τυπικά ταυτόσημη με την αντίστοιχη κλασική και μπορεί να ελεγχθεί με τον ίδιο τρόπο μια και τώρα δεν εμφανίζονται πουθενά «επικίνδυνα» γινόμενα με μη μετατιθέμενους παράγοντες.

Παραδείγματος χάρη για τον αρμονικό ταλαντωτή η (Κ.15) παίρνει τη μορφή

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0$$

και η λύση της, με δεδομένες αρχικές συνθήκες $x(0), \dot{x}(0) = p(0)/m$, θα είναι

$$x(t) = x(0)\cos \omega t + \frac{p(0)}{m} \sin \omega t \quad (\text{K.18})$$

$$= \cos \omega t x - \frac{i}{m} \sin \omega t \frac{d}{dx} \quad (\text{K.19})$$

οπού από την (K.18) στην (K.19) χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι οι τελεστές $x(0)$ και $p(0)$ έχουν τη γνωστή μορφή της εικόνας του Schrodinger. Ισούνται δηλαδή με x και $-id/dx$ αντίστοιχα.

Κ.2. Αναπαράσταση θέσης και αναπαράσταση ορμής

Θα προχωρήσουμε τώρα σε μια διαφορετική εκλογή εναλλακτικής περιγραφής του Κβαντομηχανικού φορμαλισμού η οποία έχει σαν αφετηρία της τη γενική διαπίστωση ότι μια κβαντική κατάσταση ορίζεται πλήρως αν ξέρουμε τα πλάτη πιθανότητας όλων των δυνατών τιμών ενός οποιουδήποτε Κβαντομηχανικού μεγέθους. Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ έχει αυτό ακριβώς το περιεχόμενο για το φυσικό μέγεθος «θέση» το οποίο έχει συνεχές φάσμα εκτεινόμενο από $-\infty$ έως $+\infty$. Έκτος όμως από τη θέση υπάρχουν και άλλα φυσικά μεγέθη που θα μπορούσαν να παίξουν τον ίδιο ρόλο. Το πρώτο παράδειγμα που έρχεται στο νου είναι βεβαίως, η ορμή που έχει κι αυτή συνεχές φάσμα από $-\infty$ έως $+\infty$ και ιδιοσυναρτήσεις που δεν είναι παρά τα γνωστά μας επίπεδα κύματα

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \quad (\hbar=1) \quad (\text{K.20})$$

οπού ο συντελεστής $\sqrt{2\pi}$ έχει προκύψει από τη συνθήκη «κανονικοποίησης» του συνεχούς

$$(\psi_p, \psi_{p'}) = \delta(p - p') \quad (\text{K.21})$$

Από τις (K.20), (K.21) και τις γενικές αρχές της Κβαντικής θεωρίας έπεται πλάτη πιθανότητας για τις διάφορες δυνατές τιμές της ορμής θα δίνονται από τον τύπο

$$c(p) = (\psi_p, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx} \psi(x) dx \quad (\text{K.22})$$

ενώ βέβαια η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ θα προκύπτει από τα $c(p)$ μέσω του αναπύγματος

$$\psi(x) = \int c(p) \psi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ipx} c(p) dp \quad (\text{K.23})$$

Η συνάρτηση $c(p)$ μας παρέχει λοιπόν μια πλήρη γνώση της κατάστασης του συστήματος και άρα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως κυματοσυνάρτηση μιας άλλης «αναπαράστασης» όπου τον ρόλο της θέσης θα τον παίζει η ορμή.

Για να συνεχίσουμε είναι σκόπιμο να εισαγάγουμε για την $c(p)$ το σύμβολο $\tilde{\psi}(p)$ το οποίο μας θυμίζει ότι πρόκειται για τη μετασχηματισμένη Fourier της $\tilde{\psi}(x)$. Η $\tilde{\psi}(p)$ θα ονομάζεται στο έξης κυματοσυνάρτηση του χώρου των ορμών ή απλώς κυματοσυνάρτηση ορμής σε αντιδιαστολή με την $\psi(x)$ που θα ονομάζεται κυματοσυνάρτηση του χώρου των θέσεων, ή απλώς κυματοσυνάρτηση θέσης.

Το πρόβλημα τώρα είναι να δούμε τι μορφή θα πρέπει να πάρουν οι φυσικοί τελεστές σ' αυτή την νέα αναπαράσταση— την αναπαράσταση ορμής όπως θα την αποκαλούμε— ώστε το φυσικό περιεχόμενο της θεωρίας—δηλ. οι μέσες τιμές— να παραμείνει αμετάβλητο. Όπως πάντα θέλουμε λοιπόν να είναι

$$\left(\tilde{\psi}, \tilde{A} \tilde{\psi} \right) = (\psi, A \psi) \quad (\text{K.24})$$

όπου \tilde{A} η ζητούμενη νέα μορφή του τελεστή A . Η βασική παρατήρηση είναι ότι αφού η $\tilde{\psi}(p)$ παριστάνει το πλάτος πιθανότητας ορμής η μέση τιμή $\langle p \rangle$ θα δίνεται από το ολοκλήρωμα

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p \left| \tilde{\psi}(p) \right|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} p \tilde{\psi}^* \tilde{\psi} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^* p \tilde{\psi} dp$$

απ' όπου είναι φανερό ότι ο τελεστής της ορμής θα έχει σ' αυτή την αναπαράσταση τη μορφή

$$\tilde{p} = p \quad (\text{K.25})$$

θα είναι δηλαδή ένας απλός πολλαπλασιασμός των κυματοσυναρτήσεων με τη μεταβλητή τους p . Η ορμή έχει δηλαδή εδώ την ίδια μορφή που έχει η θέση στην «δική της» αναπαράσταση. Για να βρούμε τώρα και την έκφραση του τελεστή \tilde{x} της θέσης δεν έχουμε παρά να παρατηρήσαμε ότι η αλλαγή αναπαράστασης, όντως το αποτέλεσμα ενός μοναδιαίου μετασχηματισμού, δεν μεταβάλλει τις μεταθετικές σχέσεις κι επομένως θα είναι

$$\left[\begin{matrix} \tilde{\tilde{x}} \\ \tilde{\tilde{p}} \end{matrix} \right] = [x, p] = i$$

απ' όπου σε συνδυασμό με την (Κ.6) και τα γνωστά από την αναπαράσταση θέσης προκύπτει αμέσως η

$$\tilde{\tilde{x}} = i \frac{d}{dp} \quad (\text{Κ.26})$$

με την αναμενόμενη βέβαια αλλαγή πρόσημου αφού πρόκειται για γνώριμους μας τελεστές μόνο που έχει αλλάξει η σειρά τους στο μεταθέτη. Φυσικά μπορούμε να επαληθεύσουμε, ότι η μέση θέση υπολογίζεται με βάση τον τελεστή (Κ.26)

$$\langle x \rangle = \left(\tilde{\tilde{\psi}}, \tilde{\tilde{x}} \tilde{\tilde{\psi}} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\tilde{\psi}}(p) \left(i \frac{d}{dp} \tilde{\tilde{\psi}}(p) \right) dp$$

και είναι η ίδια μ' αυτήν που προκύπτει στην αναπαράσταση θέσης.

Όσο για τη μορφή που παίρνει ένας τυχών τελεστής $A = A(x, p)$ στην αναπαράσταση ορμής, θα ισχύει προφανώς η

$$\tilde{\tilde{A}} = A \left(\begin{matrix} \tilde{\tilde{x}} \\ \tilde{\tilde{p}} \end{matrix} \right)$$

Έτσι, παραδείγματος χάρη, για τη Χαμιλτονιανή θα έχουμε

$$\tilde{\tilde{H}} = \frac{\tilde{\tilde{p}}^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V \left(i \frac{d}{dp} \right) \quad (\text{Κ.27})$$

απ' όπου αντιλαμβάνεται κανείς αμέσως γιατί η αναπαράσταση της ορμής δεν προσφέρεται και πολύ για πρακτική αξιοποίηση. Αν το δυναμικό $V(x)$ είναι ένα ακέραιο πολυώνυμο βαθμού n τότε η Χαμιλτονιανή (Κ.8) θα είναι ένας διαφορικός τελεστής τάξεως n που προφανώς δεν κάνει την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger ευκολότερη. Τα πράγματα απλώς δεν χειροτερεύουν στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή και απλουστεύονται μόνο για το γραμμικό δυναμικό $V = gx$. Για όλες τις άλλες συναρτήσεις δυναμικού ή αναπαράσταση ορμής όχι μόνο δεν προσφέρει κανένα πρακτικό πλεονέκτημα αλλά πάσχει κι από ένα σωρό προβλήματα ερμηνείας του τελεστή $V(i d / dp)$.

Κ.3. Γενική θεωρία των αναπαραστάσεων

Όπως είπαμε νωρίτερα μια κβαντική κατάσταση ενός μονοδιάστατου συστήματος καθορίζεται πλήρως από τα πλάτη πιθανότητας όλων των δυνατών τιμών ενός φυσικού μεγέθους τα οποία μπορούν επομένως να χρησιμοποιηθούν ως

κυματοσυνάρτηση μιας νέας αναπαράστασης βασισμένης σ' αυτό το φυσικό μέγεθος. Όμως στη γεωμετρική γλώσσα που είναι σύμφυτη με τον κβαντικό φορμαλισμό, αυτά τα πλάτη πιθανότητας δεν είναι παρά οι συντεταγμένες του καταστατικού διανύσματος στη βάση που σχηματίζουν τα ίδια διανύσματα του θεωρούμενου φυσικού μεγέθους. Έτσι η αλλαγή αναπαράστασης δεν είναι τελικά τίποτα άλλο παρά μια αλλαγή βάσης στο διανυσματικό χώρο των φυσικών καταστάσεων.

Για να μιλήσουμε πιο συγκεκριμένα ας υποθέσουμε ότι βασιζόμαστε στην περιγραφή μας στο φυσικό μέγεθος A και ας δεχτούμε σε μια πρώτη φάση ότι το φάσμα του είναι διακριτό με ιδιοτιμές α_n και ιδιοσυναρτήσεις. Μία τυχούσα κυματοσυνάρτηση ψ θα γράφεται τότε, κατά τα γνωστά, στη μορφή

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \quad (\text{K.28})$$

όπου οι συντελεστές c_n δεν είναι παρά οι συντεταγμένες του διανύσματος ψ στη βάση των ιδιοδιανυσμάτων ψ_n . Αν λοιπόν ως βάση στο χώρο μας διαλέξουμε τις ιδιοκαταστάσεις του μεγέθους A κάθε κβαντική κατάσταση ψ , δηλαδή κάθε διάνυσμα του χώρου μας, θα μπορεί να παρασταθεί σαν ένα (άπειρο) διάνυσμα στήλης

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{K.29})$$

με συνιστώσες τις συντεταγμένες c_n που είναι ταυτόχρονα και τα πλάτη πιθανότητας για όλες τις δυνατές τιμές του μεγέθους A . Όσο για τη δράση των φυσικών τελεστών πάνω στα διανύσματα στήλης (K.29) αυτή θα περιγράφεται από κατάλληλες μήτρες με στοιχεία

$$Q_{nm} = (\psi_n, Q\psi_m) \quad (\text{K.30})$$

οπού Q το υπ' όψιν φυσικό μέγεθος. Για $Q=A$ η (K.3) δίνει

$$A_{nm} = \alpha_n \delta_{nm} \quad (\text{K.31})$$

το οποίο σημαίνει ότι στην «δική του» αναπαράσταση το μέγεθος A παριστάνεται από μια διαγώνια μήτρα.

Τα παραπάνω επεκτείνονται χωρίς δυσκολία και στην περίπτωση των μεγεθών με συνεχές φάσμα η οποία μας ενδιαφέρει ιδιαίτερα μια και σ' αυτήν ανήκουν τα βασικά μεγέθη θέση και ορμή.

Αν A είναι πάλι το φυσικό μέγεθος πάνω στο οποίο θα βασιστεί η αναπαράσταση μας και ψ_α οι ιδιοσυναρτήσεις του, το ανάπτυγμα (Κ.28) θα γίνει τώρα ένα ανάπτυγμα σε μια συνεχή βάση της γνωστής μορφής

$$\psi = \int c(\alpha) \psi_\alpha da \quad (\text{Κ.32})$$

οπού οι συντελεστές $c_\alpha \equiv c(\alpha)$ είναι πια μια συνεχής ακολουθία συντεταγμένων που θα αντιπροσωπεύει το καταστατικό διάνυσμα ψ στη αναπαράσταση. Όσο για τους

φυσικούς τελεστές αυτοί θα παριστάνονται τώρα από **συνεχείς μήτρες** με στοιχεία

$$Q(\alpha, \alpha') = (\psi_\alpha, Q \psi_{\alpha'}) \quad (\text{Κ.33})$$

που η δράση τους πάνω στο συνεχές διάνυσμα στήλης $c(\alpha)$ θα έχει τη μορφή

$$\int Q(\alpha, \alpha') c(\alpha') d\alpha' \quad (\text{Κ.34})$$

η οποία είναι το ακριβές συνεχές ανάλογο της

$$\sum_m Q_{nm} c_m \quad (\text{Κ.35})$$

πού περιγράφει τη δράση της διακριτής μήτρας Q_{nm} πάνω στο διακριτό διάνυσμα στήλης c_n . Η αναλογία θα γίνει ακόμα διαφανέστερη αν θεωρήσετε την ακολουθία c_n ως συνάρτηση μιας ακέραιας μεταβλητής και τη μήτρα Q_{nm} ως συνάρτηση δύο ακέραιων μεταβλητών και τις γράψετε σαν c_n και $Q(n, m)$ αντίστοιχα. Η (Κ.35) θα παίρνει τότε τη μορφή

$$\sum_m Q(n, m) c(m) \quad (\text{Κ.36})$$

οπού το σύμβολο $\tilde{\psi}(\alpha)$ αντικατέστησε το $c(\alpha)$ διότι η χρήση του γράμματος ψ μας θυμίζει ότι πρόκειται για την ίδια κβαντική κατάσταση που περιγράφονταν πριν με την κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, ενώ παράλληλα η περισπωμένη σε συνδυασμό με τη μεταβλητή α δηλώνουν σαφώς ότι πρόκειται για τη μορφή αυτής της κυματοσυνάρτησης σε μια νέα αναπαράσταση. Στην πράξη όταν το σύμβολο α της μεταβλητής συνδέεται αναμφίβολα με ένα συγκεκριμένο φυσικό μέγεθος παραλείπεται συχνά και η περισπωμένη πάνω από το γράμμα ψ αφού το

σύμβολο της μεταβλητής δεν αφήνει περιθώρια αμφιβολίας για την «ταυτότητα» της αναπαράστασης. Έτσι, παραδείγματος χάρη, θα δείτε συχνά να χρησιμοποιείται το σύμβολο $\psi(p)$ για την κυματοσυνάρτηση ορμής χωρίς φόβο ότι θα παρερμηνευθεί ως $\psi(x)$ με $x=p$. Ας δούμε τώρα αν η εφαρμογή των παραπάνω ιδεών στην περίπτωση της ορμής οδηγεί στα γνωστά αποτελέσματα.

Αν με $\tilde{x}(p, p')$ και $\tilde{p}(p, p')$ συμβολίσουμε τις συνεχείς μήτρες των τελεστών θέσης και ορμής στην αναπαράσταση ορμής τότε θα είναι

$$\tilde{x}(p, p') = (\psi_p, x \psi_{p'}) \quad , \quad \tilde{p}(p, p') = (\psi_p, p \psi_p)$$

όπου οι τελεστές x και p μέσα στα εσωτερικά γινόμενα, όπως και οι σχετικές ιδιοσυναρτήσεις, θα έχουν τη μορφή που ξέρουμε στην αναπαράσταση θέσης.

Έτσι, παραδείγματος χάρη, για τη μήτρα ορμής $\tilde{p}(p, p')$ θα έχουμε

$$\begin{aligned} \tilde{p}(p, p') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx} \left(-i \frac{d}{dx} \right) e^{ip'x} dx \\ &= \frac{1}{2\pi} p' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'-p)x} dx = p' \delta(p' - p) \end{aligned} \quad (\text{K.37})$$

οπότε η δράση της ορμής πάνω στις κυματοσυναρτήσεις $\tilde{\psi}(p)$ θα γράφεται σαν

$$\tilde{p} \cdot \tilde{\psi} = \int \tilde{p}(p, p') \tilde{\psi}(p') dp' = \int p' \delta(p' - p) \tilde{\psi}(p') dp' = p \tilde{\psi}(p)$$

θα ισοδυναμεί δηλαδή με τον πολλαπλασιασμό τους επί την μεταβλητή p , - ακριβώς όπως είχαμε βρει νωρίτερα.

Παρόμοια για τη μήτρα θέσης $\tilde{x}(p, p')$ θα είναι

$$\tilde{x}(p, p') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{i(p'-p)x} dx = -i \delta(p' - p) \quad (\text{K.38})$$

οπού χρησιμοποιήσαμε τη σχέση

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{ikx} dx = -2\pi i \delta'(k) \quad (\text{K.39})$$

η οποία προκύπτει αμέσως από την

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = -2\pi \delta(k)$$

με παραγωγή των δύο μελών της ως προς k . Όσο για τον ορισμό της παραγώγου της δέλτα συνάρτησης, αυτός συνάγεται από το ολοκλήρωμα ορι-

σμού $\int \delta'(x) dx \varphi(x)$ με παραγοντική ολοκλήρωση και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι οι συνοριακοί οροί (τιμές στο $\pm\infty$) μηδενίζονται. Θα είναι έτσι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) \varphi(x) dx = -\varphi'(0) \quad (\text{K.40})$$

που παίρνεται συχνά και σαν αφετηριακός ορισμός της γενικευμένης συνάρτησης $\delta'(x)$. Σύμφωνα με την (K.38) και τον ορισμό (K.40) θα είναι λοιπόν

$$\tilde{x} \cdot \tilde{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} x(p, p') \tilde{\psi}(p') dp' = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(p' - p) \tilde{\psi}(p') dp' = i \tilde{\psi}(p)$$

ακριβώς όπως ξέρουμε. Είδαμε έτσι μ' αυτή την ευκαιρία πώς οι συνεχές μήτρες μπορούν να αναπαραστήσουν όλων των ειδών τους γραμμικούς τελεστές αρκεί να κάνουμε χρήση και κατάλληλων γενικευμένων συναρτήσεων.

Για να δώσουμε κι ένα άλλο παράδειγμα, βεβαιωθείτε μόνοι σας ότι στην αναπαράσταση θέσης οι συνεχείς μήτρες για τα μεγέθη θέση και ορμή είναι

$$\text{Θέση: } x\delta(x-x') \quad , \quad \text{Ορμή: } -i\delta(x'-x)$$

Ας δούμε τέλος αν όλα τα παραπάνω συμφωνούν με τους νόμους μετασχηματισμού

$$\tilde{\psi} = U\psi \quad , \quad \tilde{A} = UAU^+ \quad (\text{K.41})$$

πού συνδέουν τις διαφορετικές μορφές κυματοσυναρτήσεων και τελεστών στις δύο αναπαραστάσεις. Ας εξετάσουμε συγκεκριμένα το πέρασμα από την αναπαράσταση θέσης στην αναπαράσταση ορμής όπου έχουμε

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= (\psi, p, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx} \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} U(p, x) \psi(x) dx \equiv U \cdot \psi \end{aligned}$$

οπότε ο τελεστής μετασχηματισμού U θα έχει την ακόλουθη παράσταση υπό μορφή συνεχούς μήτρας

$$U(p, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} \quad (\text{I.42})$$

Είδαμε λοιπόν σαν σχέση μεταξύ μήτρων, η δεύτερη των (K.41) θα γράφεται σαν

$$\tilde{A}(p, p') = \int U(p, x) A(x, x') U^+(x', p) dx dx' \quad (\text{K.43})$$

οπού δεν κάναμε τίποτε άλλο παρά να εφαρμόσουμε και για συνεχείς μήτρες το γνωστό νόμο πολλαπλασιασμού μήτρων

$$(ABC)_{ij} = \sum_{k,l} A_{ik} B_{kl} C_{lj} \quad (\text{K.44})$$

στον όποιο όλοι οι ενδιάμεσοι δείκτες ταυτίζονται ανά δύο (ο καθένας με τον επόμενο του) και τελικά αθροίζονται για να επιζήσουν μόνο οι δύο ακραίοι που δηλώνουν τα στοιχεία μήτρας του γινομένου. Για τον υπολογισμό της (K.43) χρειαζόμαστε ακόμα τα στοιχεία μήτρας του συζυγή τελεστή U^+ τα όποια όμως προκύπτουν αμέσως με εφαρμογή του ίδιου κανόνα που ισχύει και για διακριτές μήτρες. (Εναλλαγή δεικτών γραμμής και στήλης συν μιγαδική συζυγία). Θα είναι λοιπόν

$$U^+(x', p') = U^*(p', x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ip'x'}$$

και έτσι η (K.43) θα γράφεται σαν

$$\tilde{A}(p, p') = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(p'x' - px)} A(x, x') dx dx' \quad (\text{K.45})$$

όπως μπορεί να δει μόνος του ο αναγνώστης ότι αν αντικαταστήσει στο δεύτερο μέλος της (K.45) τη μήτρα $A(x, x')$ ενός συγκεκριμένου φυσικού μεγέθους στην αναπαράσταση θέσης, θα πάρει τη μήτρα του ίδιου μεγέθους στην αναπαράσταση ορμής. Αυτός ο έλεγχος μπορεί όμως να γίνει και κατ' ευθείαν στη γενική περίπτωση (πέρασμα από την αναπαράσταση x στην τυχούσα αναπαράσταση α) με τον ακόλουθο τρόπο. Κατ' αρχάς για τη μήτρα μετασχηματισμού U θα έχουμε

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\alpha) &= (\psi_{\alpha, \psi}) = \int \psi_{\alpha}^*(x) \psi(x) dx = \int U(\alpha, x) \psi(x) dx \\ &\Rightarrow U(\alpha, x) = \psi_{\alpha}^* \end{aligned} \quad (\text{K.46})$$

οπού βέβαια υποθέσαμε ότι το φάσμα του μεγέθους A είναι συνεχές και δρα η ιδιοτιμή α θα είναι μια συνεχής παράμετρος. Θα δείξουμε τώρα ότι ο νόμος μετασχηματισμού

$$\tilde{Q} = UQU^+ \Rightarrow \tilde{Q}(\alpha, \alpha') = \int U(\alpha, x) Q(x, x') U^+(x', \alpha') dx dx' \quad (\text{K.47})$$

δίνει τα σωστά στοιχεία μήτρας $\tilde{Q}(\alpha, \alpha')$ του (τυχόντος) τελεστή Q στην αναπαράσταση α , τα όποια ορίζονται ανεξαρτήτως μέσω της σχέσης

$$\tilde{Q}(\alpha, \alpha') = (\psi_{\alpha}, Q \psi_{\alpha'}) \quad (\text{K.48})$$

Πράγματι βάσει και της (Κ. 46) ή (Κ. 47) γράφεται διαδοχικά σαν

$$\begin{aligned}\tilde{Q}(\alpha, \alpha') &= \int U(\alpha, x) Q(x, x') U^*(\alpha', x') dx dx' \\ &= \int \psi_\alpha^*(x) Q(x, x') \psi_{\alpha'}(x') dx dx' \\ &= \int \psi_\alpha^*(x) \left(\int Q(x, x') \psi_{\alpha'}(x') dx' \right) dx\end{aligned}\quad (\text{K.49})$$

οπότε αρκεί να παρατηρήσουμε ότι το εντός παρενθέσεως ολοκλήρωμα δεν είναι παρά η μητρική γραφή στην αναπαράσταση θέσης, της δράσης του τελεστή Q πάνω στην κυματοσυνάρτηση $\psi_{\alpha'}$, και να θέσουμε

$$\int Q(x, x') \psi_{\alpha'}(x') dx' \equiv Q \psi_{\alpha'}(x)$$

οπότε οι εκφράσεις (Κ.49) και (Κ.48) γίνονται προφανώς ταυτόσημες.

Για τον αναγνώστη που τυχόν διερωτάται αν η μήτρα μετασχηματισμού (Κ.46) είναι πράγματι μοναδιαία ως υπενθυμίσουμε μια παλιότερη παρατήρηση μας σύμφωνα με την οποία μια μήτρα είναι μοναδιαία αν οι γραμμές ή οι στήλες της αποτελούν ένα ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων. Δεδομένου ότι το α στην (Κ.46) είναι δείκτης γραμμής (συνεχής βέβαια) οι γραμμές (συνεχείς κι αυτές) της μήτρας (Κ.46) είναι πράγματι ορθοκανονικές με την έννοια, βεβαίως, πού έχει αυτό στο συνεχές φάσμα. $(\psi_\alpha, \psi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$.

Διδακτική είναι επίσης και η κατ' ευθείαν επαλήθευση της μοναδιαιότητας μέσω του ορισμού $UU^+ = 1$ ο οποίος πρέπει να ισχύει σε τυχούσα αναπαράσταση, άρα και σ' εκείνη πού ορίζει το μέγεθος A . Τα στοιχεία μήτρας $\alpha\alpha'$ των δύο μελών της $UU^+ = 1$ θα πρέπει να είναι λοιπόν ίσα και άρα θα πρέπει να ισχύει η

$$(UU^+)_{\alpha\alpha'} = 1_{\alpha\alpha'} \quad (\text{K.50})$$

όπου, παρά τον συνεχή χαρακτήρα των δεικτών, χρησιμοποιήσαμε τώρα τον συμβολισμό πού συνηθίζεται στις διακριτές μήτρες, διότι κι αυτή είναι μια κοινή πρακτική μεταξύ των φυσικών. Σημειώστε τώρα ότι τα στοιχεία μήτρας $1_{\alpha\alpha'}$ του ταυτοτικού τελεστή $1 \equiv I$, ισούνται με

$$1_{\alpha\alpha'} \equiv I(\alpha, \alpha') = (\psi_\alpha, I \psi_{\alpha'}) = (\psi_\alpha, \psi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$$

που ήταν και εξ αρχής προφανές από την σχέση

$$\int \delta(\alpha - \alpha') f(\alpha') d\alpha' = f(\alpha)$$

Εκτελώντας τώρα τον πολλαπλασιασμό στο πρώτο μέλος της (Κ.50) παίρνουμε

$$\begin{aligned}
(UU^+)_{\alpha\alpha'} &= \sum_x U_{\alpha x} U_{x\alpha'}^+ = \sum_x U_{\alpha x} U_{\alpha}^* \\
&= \int U(\alpha, x) U^*(\alpha', x) dx = \int \psi_{\alpha}^*(x) \psi_{\alpha'}(x) dx \\
&= (\psi_{\alpha}, \psi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha') = 1\alpha\alpha'
\end{aligned}$$

Κ.4. Η φασματική αναπαράσταση ενός τελεστή

Αν και συναφές με τα προηγούμενα, το θέμα τούτης της παραγράφου είναι κάπως διαφορετικής υφής. Αφετηρία του είναι το έξης ερώτημα: Μπορούμε να κατασκευάσουμε έναν τελεστή που να έχει προαποφασισμένες ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις; Πρόκειται προφανώς για ένα ερώτημα που αντιστρέφει τη συνήθη διαδικασία ενός προβλήματος ιδιοτιμών όπου το δεδομένο είναι ο τελεστής και το ζητούμενο οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του.

Θα δείξουμε ότι στην περίπτωση τελεστών (όπως εκείνοι της Κβαντομηχανικής) που διαθέτουν πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων η λύση του «αντίστροφου προβλήματος ιδιοτιμών» είναι απλούστατη και περιγράφεται από τον τύπο

$$A(x, x') = \sum_n \alpha_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \quad (\text{Κ.51})$$

όπου $A(x, x')$ τα στοιχεία μήτρας του τελεστή A στην αναπαράσταση θέσης και α_n, ψ_n οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του αντίστοιχα. Η (Κ.1) προκύπτει αμέσως από τη σχέση

$$A\psi = A \left(\sum_n c_n \psi_n(x) \right) = \sum_n c_n \alpha_n \psi(x) \quad (\text{Κ.52})$$

στην οποία η δράση του τελεστή A πάνω σε μια τυχούσα κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ υπολογίστηκε μέσω του αναπτύγματος της, σε ιδιοσυναρτήσεις του A πάνω στις όποιες η δράση του τελεστή είναι γνωστή. Αντικαθιστώντας τώρα στην (Κ.52) τις τιμές

$$c_n = (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x') \psi(x') dx'$$

και υποθέτοντας ότι η εναλλαγή ολοκλήρωσης και (άπειρης) άθροισης είναι επιτρεπτή, παίρνουμε

$$A\psi = A \left(\sum_n c_n \psi_n(x) \right) = \sum_n c_n \alpha_n \psi_n(x)$$

απ' όπου φαίνεται αμέσως ότι η εντός παρενθέσεως ποσότητα στο ολοκλήρωμα παριστάνει τα στοιχεία μήτρας του τελεστή A στην αναπαράσταση θέσης

Το ανάπτυγμα (Κ.51) —γνωστό ως φασματική αναπαράσταση του τελεστή A — λύνει το πρόβλημα που θέσαμε νωρίτερα αφού μας δίνει τα στοιχεία μήτρας του τελεστή σε μία συγκεκριμένη βάση, συναρτήσει των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του στην ίδια βάση.

Στην ειδική περίπτωση που ο τελεστής A ταυτίζεται με τη μονάδα ($A=I=1$) θα έχουμε $\alpha_n=1$ ενώ οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_n μπορούν να ανήκουν σ' ένα τυχόν πλήρες σύστημα αφού η σχέση $I\psi_n=\psi_n$ ισχύει για κάθε ψ_n . Η (Κ.51) θα γράφεται λοιπόν τότε σαν

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = I(x,x') = \delta(x,x') \quad (\text{Κ.53})$$

και σ' αυτή τη μορφή είναι γνωστή σαν **σχέση πληρότητας** του συστήματος των ιδιοσυναρτήσεων ψ_n , διότι εκφράζει το γεγονός ότι κάθε κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ μπορεί να αναπτυχθεί στη βάση που σχηματίζουν οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_n . (Αν θέλετε να πειστείτε γι' αυτό πολλαπλασιάστε τα δύο μέλη της (Κ.53) με $\psi(x')$ και ολοκληρώστε ως προς x' . Το αποτέλεσμα θα είναι η σχέση $\psi(x) = \sum_n \alpha_n P_n$ με $c_n = (\psi_n, \psi)$). Τόσο η (Κ.51) όσο και η (Κ.53) γίνονται εμφανέστερες αν γράφουν στην πιο πυκνή μορφή

$$A = \sum_n \alpha_n P_n, \quad I = \sum_n P_n \beta \quad (\text{Κ.54})$$

και διαπιστωθεί ταυτόχρονα ότι οι τελεστές P_n με στοιχεία μήτρας

$$P_n(x,x') = \psi_n(x)\psi_n^*(x') \quad (\text{Κ.55})$$

όταν δρουν πάνω σε μια τυχούσα κατάσταση ψ έχουν την ιδιότητα να δίνουν την προβολή της κατά μήκος της ιδιοκατάστασης ψ_n . Πράγματι έχουμε:

$$\begin{aligned} P_n \cdot \psi &= \int P_n(x,x')\psi(x')dx' = \int \psi_n(x)\psi_n^*(x')\psi(x')dx' \\ &= \psi_n(x) \int \psi_n^*(x')\psi(x')dx' = c_n \psi_n \end{aligned}$$

και αφού το c_n δεν είναι παρά η αλγεβρική τιμή της προβολής του διανύσματος ψ πάνω στο ψ_n , το γινόμενο $c_n \psi_n$ θα παριστάνει, προφανώς, το διάνυσμα της προβολής του ψ πάνω στο ψ_n . Οι τελεστές (Κ.55) έχουν λοιπόν ένα απλούστατο γεωμετρικό νόημα είναι οι **προβολικοί τελεστές** πάνω στα ιδιοδιανύσματα του τελεστή A . Είδαμε μ' αυτό το πρίσμα ότι η σχέση πληρότητας (Κ.53) γραμμένη στην πιο πυκνή μορφή

$$\sum_n P_n = I \quad (\text{Κ.56})$$

έχει απλούστατο γεωμετρικό νόημα. Μας λέει ότι το άθροισμα των τελεστών που προβάλλουν πάνω στα ιδιοδιανύσματα ενός πλήρους συστήματος κάνει μονάδα, όπως θα έπρεπε να συμβαίνει ώστε το άθροισμα των προβολών ενός διανύσματος να ξαναδίνει το ίδιο το διάνυσμα.

Ας σημειώσουμε ακόμα ότι οι προβολικοί τελεστές P_n είναι Ερμιτιανοί και ικανοποιούν τις σχέσεις

$$P_n^2 = P_n, \quad P_n P_m = 0 \quad (\text{K.57})$$

πού είναι γεωμετρικά προφανείς όπως μπορεί να δει μόνος του ο αναγνώστης.

Η εφαρμογή του φασματικού αναπτύγματος στην περίπτωση των τελεστών που δρουν σε χώρους πεπερασμένης διάστασης —δηλαδή των μήτρων— είναι αρκετά ενδιαφέρουσα. Η βασική διαπίστωση εδώ είναι ότι οι προβολικοί τελεστές P_n γράφονται σε συμπαγή μητρική μορφή ως εξής

$$P_n = X_n X_n^\dagger \quad (\text{K.58})$$

οπού βέβαια το συζυγές του διανύσματος στήλης X_n είναι ένα διάνυσμα γραμμής οπότε το γινόμενο $X_n X_n^\dagger$ θα είναι μια $n \times n$ μήτρα, αντί ενός αριθμού όπως συμβαίνει με το ανεστραμμένο γινόμενο $X_n^\dagger X_n$. Το ότι η μήτρα (K.58) προβάλλει πάνω στην κατεύθυνση του ιδιοδιανύσματος X_n φαίνεται αμέσως αν την «αφήσουμε» να δράσει πάνω στο τυχόν διάνυσμα στήλης X οπότε παίρνουμε

$$P_n X = (X_n X_n^\dagger) X = X_n (X_n^\dagger X)$$

και αρκεί να παρατηρήσουμε ότι το γινόμενο μητρών $X_n^\dagger X$ δεν είναι παρά το εσωτερικό γινόμενο (X_n, X) το οποίο παριστάνει τις προβολές c_n του διανύσματος X πάνω στη βάση των ιδιοδιανυσμάτων X_n . Μια μήτρα A με πλήρες σύστημα ορθογώνιων ιδιοδιανυσμάτων θα έχει λοιπόν τη φασματική αναπαράσταση

$$A = \sum_n \alpha_n P_n = \sum_n \alpha_n X_n X_n^\dagger \quad (\text{K.59})$$

βάσει της οποίας μπορούμε να κατασκευάσουμε όσα παραδείγματα μητρών θέλουμε με προαποφασισμένες ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα.

Αν θυμηθούμε, τέλος, ότι η τυχούσα συνάρτηση $f(A)$ της μήτρας A έχει τα ίδια ιδιοδιανύσματα μ' αυτήν και ιδιοτιμές $f(\alpha_n)$, θα ισχύει και η

$$f(A) = \sum_n f(\alpha_n) P_n = \sum_n f(\alpha_n) X_n X_n^\dagger$$

η οποία μας προσφέρει μια μέθοδο υπολογισμού συναρτήσεων μήτρας.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ξένα βιβλιογραφία

1. D. Bouwmeester, A. Zeilinger - **Basic Concepts**
2. David Petrosyan, **ARTICLES Experimental and Teoretical Prospect for Quantum Computing**
3. Dirk Bouwmeester, Arthur Ekert, Anton Zeilinger (Eds.), **ARTICLES Experimental The Physics of Quantum Information** ,
4. G. Burkard and D. Loss, **Coupled Quantum Dots as Quantum Gate PRB**, V.59 N.3 p.2070
5. K. Fonseca Romero and M.C. Names, **Exact Description of Decoherence in Optical Cavities**, quntum-ph/0201107
6. Michael Aaron Nielsen, **Quantum Information theory**, quantum-ph/0011036
7. Marek Sasura and Vladimir Buzek, **Cold Trapped ions as Quantum Information Processors**, quantum – ph/0112041
8. P.Blanchard. D. Giulini, E.Joos, C. Kiefer, I.O. Stametescu, **Decoherence: Theoretical, Experimental and Conceptual Problems**, Springer
9. V. Giovanetti, D.Vitali, P. Tombesi and A. Ekert, **toward Scalable Quantum Computation with Cavity QED Systems**, quantum-ph/0004107
10. John Preskill, **Quantum Information and Computation.**
11. **ARTICLES Experimental quantum teleportation**
12. **ARTICLES Quantum Information and Computatation**

Ελληνική Βιβλιογραφία

13. Γ. Ι. Ανδρισόπουλος, **Εισαγωγή στην κβαντομηχανική**
14. Γεωργίου Πάστρα, Διπλωματική εργασία, **Στοιχεία Κβαντικής Θεωρίας Πληροφορίας Και Κβαντικοί Υπολογιστές**
15. ΕΔΟΥΑΡΔΟΥ ΣΠ. ΛΑΓΑΝΑ, **ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ Ι,ΙΙ**, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΑΡΝΟΣ,ΑΘΗΝΑ, 1995
16. Στέφανος Τραχανάς - **Κβαντομηχανική Ι**, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1991
17. Στέφανος Τραχανάς - **Κβαντομηχανική ΙΙΙ**, θεωρία διαταραχών-αλληλεπίδραση ύλης και ακτινοβολίας, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1991

Διευθύνσεις Internet

- [http://www.theory.caltech.edu/preskill/ph 229](http://www.theory.caltech.edu/preskill/ph229)
- [http://www.physis.Gr/ articles introqm.html](http://www.physis.Gr/articles/introqm.html)
- [http://www.physis.Gr/ articles introqm.html](http://www.physis.Gr/articles/introqm.html)
- http://www.nature.com/cgi-taf/DynaPage.taf.../398189a0_r.html&filetype=&dynoptions
- <http://www-theory.chem.washington.edu/~trstedl/quantum/quantum.html>
- [http://www.chembio.uoguelph.ca/edumat/chm386/rudiment/tourquan/ tourquan.htm](http://www.chembio.uoguelph.ca/edumat/chm386/rudiment/tourquan/tourquan.htm)