Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1

ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

1.1 Λαγκρανζιανή διατύπωση

Επαναλαμβάνουμε κάποια στοιχεία αναλυτικής δυναμικής που είναι χρήσιμα στην ανάπτυξη θεμάτων που θα μας απασχολήσουν αργότερα. Στη διατύπωση του Lagrange γίνεται αποκλειστική χρήση των γενικευμένων συντεταγμένων $q_1, q_2, \ldots, q_n$, που είναι ισάριθμες με τους βαθμούς ελευθερίας και συνδέονται με τις ορθογώνιες καρτεσιανές συντεταγμένες με τις σχέσεις:

$$x_\nu = x_\nu(q_1, q_2, \ldots, q_n, t)$$

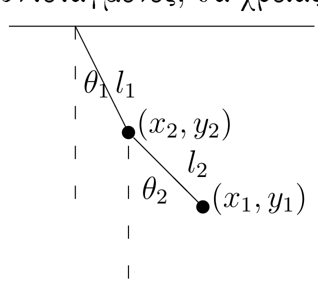
$$y_\nu = y_\nu(q_1, q_2, \ldots, q_n, t)$$

$$z_\nu = z_\nu(q_1, q_2, \ldots, q_n, t)$$

ή, πιό συνοπτικά:

$$\vec{r}_\nu = \vec{r}_\nu(q_1, q_2, \ldots, q_n).$$

Ο δείκτης ν υποδηλώνει τα διάφορα σωματίδια που συναποτελούν το σύστημα, που έχει n βαθμούς ελευθερίας. Για παράδειγμα, θεωρούμε το διπλό εκκρεμές που είναι περιορισμένο να κινείται στο επίπεδο xy. Αν θέλαμε να το περιγράψουμε με ορθογώνιες συντεταγμένες, θα χρειαζόμαστε τα x_1, y_1, x_2 και y_2.



Μπορούμε όμως να χρησιμοποιήσουμε ως γενικευμένες συντεταγμένες τις γωνίες θ_1 και θ_2 των δύο νημάτων με την κατακόρυφο και να εκφράσουμε τις ορθογώνιες συντεταγμένες με τις σχέσεις:

$$x_1 = l_1 \cos\theta_1$$

$$y_1 = l_1 \sin\theta_1$$

$$x_2 = l_1 \cos\theta_1 + l_2 \cos\theta_2$$

$$y_2 = l_1 \sin\theta_1 + l_2 \sin\theta_2$$

Ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα για το σωματίδιο ν γράφεται:

$$m_\nu \frac{\partial^2 \vec{r}_\nu}{\partial t^2} = \vec{F}_\nu.$$

Είναι εύκολο ν′ αποδειχτεί ότι για την κινητική ενέργεια

$$T = \sum_\nu \frac{1}{2} m_\nu \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t}\right)^2$$

ισχύουν οι ιδιότητες:

$$\frac{\partial T}{\partial q_a} = \sum_\nu m_\nu \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t}\right)\left(\frac{\partial^2 \vec{r}_\nu}{\partial q_a \partial t}\right), \; \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a} = \sum_\nu m_\nu \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t}\right)\left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right). \tag{1.1}$$

Ο νόμος του Νεύτωνα συνεπάγεται ότι:

$$m_\nu \left(\frac{\partial^2 \vec{r}_\nu}{\partial t^2}\right) \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) = \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) \rightarrow$$

$$\rightarrow m_\nu \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t} \cdot \frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) - m_\nu \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t}\right) \cdot \left(\frac{\partial^2 \vec{r}_\nu}{\partial q_a \partial t}\right) = \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) \rightarrow$$

$$\rightarrow \sum_\nu \frac{d}{dt}\left(m_\nu \frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t} \cdot \frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) - \sum_\nu m_\nu \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial t}\right) \cdot \left(\frac{\partial^2 \vec{r}_\nu}{\partial q_a \partial t}\right) = \sum_\nu \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right).$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.1) η τελευταία σχέση γίνεται:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_a} = \sum_\nu \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right). \tag{1.2}$$

Αυτές οι σχέσεις είναι μια πρώτη μορφή των εξισώσεων Lagrange. Η έκφραση $p_a \equiv \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a}$ λέγεται *γενικευμένη ορμή*, ενώ το δεύτερο μέλος $f_a \equiv \sum_\nu \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right)$ λέγεται *γενικευμένη δύναμη*.

Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε τη σπουδαία ειδική περίπτωση που η δύναμη παράγεται από δυναμικό: $\vec{F}_\nu = -\vec{\nabla}_\nu V$. Η γενικευμένη δύναμη γίνεται:

$$\sum_\nu \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) = -\sum_\nu \vec{\nabla}_\nu V \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) =$$

$$= -\sum_\nu \left[\frac{\partial V}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial q_a} + \frac{\partial V}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial q_a} + \frac{\partial V}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial q_a}\right] = -\frac{\partial V}{\partial q_a}.$$

Μ΄ αυτό το δεδομένο, η σχέση (1.2) γράφεται:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_a} = -\frac{\partial V}{\partial q_a} \rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial (T-V)}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial (T-V)}{\partial q_a} = 0,$$

όπου έχουμε υποθέσει ότι το δυναμικό εξαρτάται μόνο από τις συντεταγμένες q_a και όχι από τις γενικευμένες ταχύτητες $\dot{q}_a$. Ορίζουμε τη συνάρτηση

$$L \equiv T - V$$

που ονομάζεται *Λαγκρανζιανή συνάρτηση* και οι εξισώσεις του Lagrange παίρνουν την πιο συνηθισμένη τους μορφή:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_a} = 0. \tag{1.3}$$

Παράδειγμα: Για το απλό εκκρεμές η κινητική ενέργεια είναι: $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2$ και η δυναμική ενέργεια: $V = mg(l - l\cos\theta)$, όπου θ είναι η γωνία που σχηματίζει το νήμα με την κατακόρυφο. Η Λαγκρανζιανή είναι, λοιπόν: $L = T - V = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2 - mg(l - l\cos\theta)$. Ξεκινώντας από τις παρατηρήσεις ότι $\frac{\partial L}{\partial \theta} = -mgl\sin\theta$, $\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2\dot{\theta}$ εφαρμόζουμε την εξίσωση (1.3) και βρίσκουμε:

$$ml^2\ddot{\theta} + mgl\sin\theta = 0 \rightarrow \ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0,$$

που για μικρές γωνίες απομάκρυνσης μεταπίπτει στη γνωστή: $\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\theta = 0$. Από πλευράς ορολογίας το θ είναι η γενικευμένη συντεταγμένη, το $\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2\dot{\theta} = ml(l\dot{\theta}) = mlv$, δηλαδή η γενικευμένη ορμή δεν είναι άλλη από τη στροφορμή. Η γενικευμένη δύναμη ισούται με $-\frac{\partial V}{\partial \theta} = mgl\sin\theta$, που είναι η προβολή της δύναμης κατά μήκος της τροχιάς.

1.1.1 Συνθήκες πάνω στις γενικευμένες συντεταγμένες

Αν υπάρχουν (δύο, έστω) σχέσεις που συνδέουν τις γενικευμένες συντεταγμένες μεταξύ τους, και που μπορούν να γραφτούν με τη μορφή:

$$[\sum_{a=1}^{n} A_a dq_a + Adt = 0,\ \sum_{a=1}^{n} B_a dq_a + Bdt = 0] \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow [\sum_{a=1}^{n} A_a \dot{q}_a + A = 0,\ \sum_{a=1}^{n} B_a \dot{q}_a + B = 0],$$

οι γενικευμένες συντεταγμένες δεν είναι πια ανεξάρτητες και οι εξισώσεις (1.2) πρέπει να τροποποιηθούν στις:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_a} = \sum_{\nu} \vec{F}_\nu \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}_\nu}{\partial q_a}\right) + \lambda_1 A_a + \lambda_2 B_a,\ a = 1, \ldots, n.$$

Επίσης, οι εξισώσεις (1.3) που αναφέρονται σε διατηρητικά συστήματα, τροποποιούνται στις:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_a} = \lambda_1 A_a + \lambda_2 B_a,\ a = 1, \ldots, n.$$

Οι σταθερές λ_1 και λ_2 είναι πολλαπλασιαστές Lagrange και οι παραστάσεις $\lambda_1 A_a$ και $\lambda_2 B_a$ είναι οι γενικευμένες δυνάμεις που απαιτούνται για να επιβληθούν οι περιορισμοί. Ας επικεντρώσουμε στην τελευταία μορφή των εξισώσεων και ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο σε βαρυτικό πεδίο που κινείται υποχρεωτικά σ′ ένα παραβολοϊδές εκ περιστροφής με εξίσωση

$$x^2 + y^2 \equiv \rho^2 = az \rightarrow 2\rho d\rho - adz = 0.$$

Η Λαγκρανζιανή θα γραφτεί σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$L = \frac{1}{2} m \left(\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2 + \dot{z}^2\right) - mgz.$$

Είναι προφανές ότι

$$q_1 = \rho, q_2 = \phi, q_3 = z,\ A_1 = 2\rho, A_2 = 0, A_3 = -a$$

και ότι έχουμε μόνο έναν περιορισμό, άρα μας χρειάζεται μόνο το λ_1. Οι εξισώσεις κίνησης

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_a} = \lambda_1 A_a,\ a = 1, 2, 3$$

είναι:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \rho} = \lambda_1 2\rho, \; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0, \; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\right) - \frac{\partial L}{\partial z} = -a\lambda_1,$$

που μετά τις πράξεις γίνονται:

$$m\left(\ddot{\rho} - \rho\dot{\phi}^2\right) = 2\lambda_1\rho, \; m\frac{d}{dt}(\rho^2\dot{\theta}) = 0, \; m\ddot{z} = -mg - \lambda_1 a.$$

Ο περιορισμός $\rho^2 = az$ συνεπάγεται την

$$2\rho\dot{\rho} - a\dot{z} = 0,$$

που, μαζί με τις εξισώσεις κίνησης, συναποτελεί τις τέσσερεις εξισώσεις που είναι απαραίτητες για τον προσδιορισμό των τεσσάρων αγνώστων ρ, ϕ, z και λ_1.

1.2 Χαμιλτονιανή διατύπωση

Ξεκινώντας από τον ορισμό των γενικευμένων ορμών $p_a \equiv \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_a}$ μπορεί κανείς (τουλάχιστον κατ΄ αρχήν) να εκφράσει τις γενικευμένες ταχύτητες $\dot{q}_a$ συναρτήσει των απομακρύνσεων q_a και των γενικευμένων ορμών p_a. Ορίζουμε τον μετασχηματισμό Legendre της Λαγκρανζιανής, που θα τον λέμε Χαμιλτονιανή συνάρτηση, με τη σχέση:

$$H(p_a, q_a, t) \equiv \sum_{a=1}^{n} p_a\dot{q}_a - L(q_a, \dot{q}_a, t).$$

Επισημαίνουμε ότι οι γενικευμένες ταχύτητες του δεξιού μέλους πρέπει να αντικατασταθούν όπως εξηγήσαμε λίγο πριν, οπότε, αν και στο δεξιό μέλος εμφανίζονται οι γενικευμένες ταχύτητες, η Χαμιλτονιανή τελικά είναι συνάρτηση των γενικευμένων ορμών, των απομακρύνσεων και ενδεχομένως του χρόνου.

Η Χαμιλτονιανή προσφέρει μια εναλλακτική διατύπωση της κλασικής μηχανικής. Για να το δούμε, θεωρούμε το διαφορικό της H :

$$dH = \sum_a dp_a\dot{q}_a + \sum_a p_a d\dot{q}_a - \sum_a \frac{\partial L}{\partial q_a}dq_a - \sum_a \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}d\dot{q}_a - \frac{\partial L}{\partial t}dt.$$

Ο ορισμός της γενικευμένης ορμής δείχνει ότι ο δεύτερος και ο τέταρτος όρος του δεξιού μέλους αλληλοαναιρούνται. Επί πλέον, οι εξισώσεις του Lagrange γράφονται: $\frac{\partial L}{\partial q_a} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}\right) = \frac{dp_a}{dt} \equiv \dot{p}_a$. Η έκφραση για το διαφορικό γράφεται, λοιπόν:

$$dH = \sum_a \dot{q}_a dp_a - \sum_a \dot{p}_a dq_a - \frac{\partial L}{\partial t}dt.$$

Εξ άλλου, αν λάβουμε υπ΄ όψη ότι οι ανεξάρτητες μεταβλητές της Χαμιλτονιανής είναι οι p_a, q_a και t, το διαφορικό γράφεται εναλλακτικά με τη μορφή:

$$dH = \sum_a \frac{\partial H}{\partial p_a}dp_a + \sum_a \frac{\partial H}{\partial q_a}dq_a + \frac{\partial H}{\partial t}dt,$$

οπότε, συγκρίνοντας τις δύο εκφράσεις για το διαφορικό συνάγουμε τις σχέσεις:

$$\dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a},\ \dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a} \tag{1.4}$$

και $\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$. Οι εξισώσεις (1.4) λέγονται εξισώσεις του Hamilton και είναι μια ισοδύναμη διατύπωση με τη Λαγκρανζιανή. Αποδεικνύεται ότι, για διατηρητικά συστήματα, ισχύει:

$$H = T + V.$$

Για το παράδειγμα του απλού εκκρεμούς η λαγκρανζιανή, όπως έχουμε ήδη πει είναι: $L = T - V = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2 - mg(l - l\cos\theta)$ και η συζυγής ορμή $p_\theta \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2\dot{\theta} \to \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{ml^2}$. Άρα: $H \equiv p_\theta\dot{\theta} - L = (ml^2\dot{\theta})\dot{\theta} - \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2 + mg(l - l\cos\theta) = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 + mg(l - l\cos\theta)$. Βέβαια, όπως είπαμε, η Χαμιλτονιανή πρέπει να εκφράζεται ως συνάρτηση της απομάκρυνσης θ και της συζυγούς ορμής p_θ, οπότε αντικαθιστούμε το $\dot{\theta}$ με το ίσο του $\frac{p_\theta}{ml^2}$ και καταλήγουμε στην τελική έκφραση:

$$H = \frac{p_\theta^2}{2ml^2} + mg(l - l\cos\theta).$$

Ο κινητικός όρος είναι της μορφής $\frac{L^2}{2I}$, αφού $p_\theta = L$, δηλαδή η στροφορμή, και $ml^2 = I$, δηλαδή η ροπή αδράνειας περί το σημείο εξάρτησης. Οι εξισώσεις του Χάμιλτον δίνουν:

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{ml^2},\ \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -mgl\sin\theta.$$

Πρόκειται για δύο εξισώσεις πρώτης τάξης ως προς το χρόνο, από τις οποίες είναι εύκολο να καταλήξουμε στην ισοδύναμη εξίσωση Lagrange: αρκεί να αντικαταστήσουμε στη δεύτερη εξίσωση του Χάμιλτον το p_θ όπως δίνεται από την πρώτη: $\frac{d}{dt}(ml^2\dot{\theta}) = -mgl\sin\theta \to \ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0$.

1.3 Αγκύλες Poisson

Αν έχουμε δύο ποσότητες F και G που εξαρτώνται από τις απομακρύνσεις q_a, τις συζυγείς ορμές p_a και το χρόνο t, η αγκύλη Poisson ορίζεται ως εξής:

$$[F,G] = \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial p_a}\frac{\partial G}{\partial q_a} - \frac{\partial F}{\partial q_a}\frac{\partial G}{\partial p_a} \right).$$

Αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι ιδιότητες:

$$[F,G] = -[G,F],\ [F_1+F_2,G] = [F_1,G]+[F_2,G],$$

$$[F,[G,H]]+[G,[H,F]]+[H,[F,G]] = 0,\ [A,BC] = [A,B]C+B[A,C],$$

$$[F,q_r] = \frac{\partial F}{\partial p_r},\ [F,p_r] = -\frac{\partial F}{\partial q_r}.$$

Ίσως η πιο σπουδαία ιδιότητά τους είναι ότι, για οποιαδήποτε συνάρτηση $f(q_a,p_a,t)$ ισχύει:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [H,f]. \tag{1.5}$$

Πράγματι:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_a \left(\frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial q_a}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial p_a}{\partial t} \right) =$$

$$= \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_a \left(\frac{\partial f}{\partial q_a}\frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial f}{\partial p_a}\frac{\partial H}{\partial q_a} \right) \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + [H,f],$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις εξισώσεις του Χάμιλτον:

$$\frac{\partial q_a}{\partial t} \equiv \dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a},\ \frac{\partial p_a}{\partial t} \equiv \dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a}.$$

Το 1925 ο Dirac παρατήρησε ότι οι διάφορες σχέσεις της κβαντικής μηχανικής είναι δυνατόν να προκύψουν αν κανείς αντικαταστήσει τις αγκύλες Poisson με τους αντίστοιχους μεταθέτες διά $i\hbar$:

$$[A,B]_{Poisson} \Rightarrow \frac{[A,B]}{i\hbar}.$$

Ένα πρώτο παράδειγμα είναι η κλασική σχέση $[x_i,p_j] = \delta_{ij}$ που με την αντικατάσταση που περιγράψαμε δίνει την $\frac{[x_i,p_j]}{i\hbar} = \delta_{ij} \rightarrow [x_i,p_j] = i\hbar\delta_{ij}$, που είναι η βασική σχέση στην οποία βασίζεται η κβαντική μηχανική. Άλλο σημαντικό παράδειγμα είναι η σχέση (1.5), όπως διαμορφώνεται για μια ποσότητα $F(q_a,p_a)$

που δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο. Η κλασική εξίσωση κίνησης (1.5) γράφεται: $\frac{dF}{dt} = [H, F]$, και με την αντικατάσταση $[H, F] \rightarrow \frac{[\hat{H},\hat{F}]}{i\hbar}$ παίρνουμε την αντίστοιχη κβαντική εξίσωση κίνησης για τον τελεστή $\hat{F}$:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = i\hbar[\hat{H}, \hat{F}],$$

που δεν είναι τίποτ΄ άλλο από την εξίσωση για την κίνηση του κβαντικού τελεστή $\hat{F}$ στην εικόνα του Heisenberg. Η κβαντική εξίσωση είναι γενικότερη από την κλασική, με την έννοια ότι ισχύει και για τελεστές όπως το σπιν, που δεν έχουν κλασικό ανάλογο.

Κεφάλαιο 2

ΤΑΥΤΟΤΙΚΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

Για λόγους πληρότητας δίνουμε σ' αυτό το κεφάλαιο μια στοιχειώδη περιγραφή των ταυτοτικών σωματιδίων στην κβαντική μηχανική. Στην κλασική μηχανική μπορεί κανείς να διακρίνει δύο πανομοιότυπα σωματίδια, λόγου χάριν παρακολουθώντας τις διακριτές τροχιές τους. Στην Κβαντική Μηχανική αυτό δεν είναι πια δυνατό, λόγω της επικάλυψης των δύο κυματοσυναρτήσεων. Άρα, το μόνο που μπορεί να ειπωθεί με αξιοπιστία είναι ότι ένα σωματίδιο βρίσκεται στην κατάσταση 1 και ένα στην κατάσταση 2, χωρίς να προσδιορίζεται ποιο από τα δύο βρίσκεται στην κάθε μια. Αυτό καταλήγει στην αρχή ότι δυό κβαντικές καταστάσεις δύο σωματιδίων που διαφέρουν μόνο ως προς την εναλλαγή δύο ταυτοτικών σωματιδίων πρέπει να είναι φυσικά ισοδύναμες. Αυτό συνεπάγεται ότι οι δύο αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις πρέπει να διαφέρουν μόνο κατά έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα λ. Αν ξ_1 και ξ_2 συμβολίζουν το σύνολο των συντεταγμένων που χαρακτηρίζουν τα δύο σωματίδια, τότε για την κυματοσυνάρτησή τους θα ισχύει: $\Psi(\xi_2, \xi_1) = \lambda\Psi(\xi_1, \xi_2)$. Αν τώρα εναλλάξουμε για μια επί πλέον φορά τα δύο σωματίδια θα ισχύει η επιπρόσθετη σχέση: $\Psi(\xi_1, \xi_2) = \lambda\Psi(\xi_2, \xi_1)$, οπότε $\Psi(\xi_2, \xi_1) = \lambda^2\Psi(\xi_2, \xi_1)$, δηλαδή $\lambda = \pm 1$. Αυτό σημαίνει ότι είτε η κυματοσυνάρτηση θα είναι συμμετρική:

$$\Psi(\xi_2, \xi_1) = +\Psi(\xi_1, \xi_2), \tag{2.1}$$

που συμβαίνει για σωματίδια με ακέραιο σπιν που λέγονται μποζόνια, είτε αντισυμμετρική:

$$\Psi(\xi_2, \xi_1) = -\Psi(\xi_1, \xi_2), \tag{2.2}$$

που συμβαίνει για σωματίδια με ημιπεριττό σπιν που λέγονται φερμιόνια. Ας θεωρήσουμε τώρα ένα σύστημα N ταυτοτικών σωματιδίων, των οποίων η αμοιβαία αλληλεπίδραση μπορεί να αμεληθεί. Οι κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε καταστάσεις ενός σωματιδίου είναι οι $\psi_k, k = 1, 2, 3, \ldots$, που επιλέγονται να συναποτελούν ένα ορθοκανονικό σύνολο. Το θέμα που τίθεται είναι πώς να εκφραστεί η κυματοσυνάρτηση του συστήματος συναρτήσει των ψ_k. Ας περιοριστούμε κατ΄ αρχήν σε ένα σύστημα δύο μποζονίων που το ένα βρίσκεται στην κατάσταση ψ_{k_1} και το άλλο στην ψ_{k_2}, που υποθέτουμε ότι είναι διαφορετικές μεταξύ τους. Η κυματοσυνάρτηση του συστήματος θα δίνεται από ένα άθροισμα γινομένων, στη συγκεκριμένη περίπτωση:

$$\Psi_S(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)+\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)].$$

Ο παράγοντας $\frac{1}{\sqrt{2}}$ έχει τεθεί για λόγους κανονικοποίησης. Είναι προφανές ότι η συνάρτηση είναι συμμετρική (2.1) κατά την εναλλαγή των σωματιδίων. [1]

Η $\Psi_S(\xi_1,\xi_2)$ προφανώς ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger, αφού η αλληλεπίδραση των σωματιδίων μεταξύ τους είναι αμελητέα και επομένως η Χαμιλτονιανή είναι απλά το άθροισμα των δύο επί μέρους Χαμιλτονιανών. Πιο συγκεκριμένα

$$\hat{H}(\xi_1,\xi_2)=\hat{H}_{\xi_1}+\hat{H}_{\xi_2},$$

όπου μια πιθανή μορφή θα μπορούσε να είναι:

$$\hat{H}_{\xi_1}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\xi_1^2}+V(\xi_1),\ \hat{H}_{\xi_2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\xi_2^2}+V(\xi_2).$$

Ισχύει ότι

$$\hat{H}(\xi_1,\xi_2)[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)]=[\hat{H}_{\xi_1}+\hat{H}_{\xi_2}][\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)]=$$

$$=[\hat{H}_{\xi_1}\psi_{k_1}(\xi_1)]\psi_{k_2}(\xi_2)+\psi_{k_1}(\xi_1)[\hat{H}_{\xi_2}\psi_{k_2}(\xi_2)]=$$

$$=[E_{k_1}\psi_{k_1}(\xi_1)]\psi_{k_2}(\xi_2)+\psi_{k_1}(\xi_1)[E_{k_2}\psi_{k_2}(\xi_2)]=(E_{k_1}+E_{k_2})[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)],$$

δηλαδή η συνάρτηση $\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της ολικής Χαμιλτονιανής $\hat{H}(\xi_1,\xi_2)$ με ιδιοτιμή $E_{k_1}+E_{k_2}$. Το ίδιο ακριβώς ισχύει, προφανώς και για την $\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)$, άρα και για τον γραμμικό συνδυασμό τους $\Psi_S(\xi_1,\xi_2)$.

Αν περιγράφουμε φερμιόνια, πρέπει να σχηματίσουμε τον αντισυμμετρικό συνδυασμό, δηλαδή την κυματοσυνάρτηση

$$\Psi_A(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)-\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)]. \tag{2.3}$$

[1] Πρέπει να τονίσουμε ότι στα παραπάνω έχουμε κάνει τη σιωπηλή υπόθεση ότι $k_1\neq k_2$. Στην αντίθετη περίπτωση ($k_2=k_1$) η κυματοσυνάρτηση είναι απλά $\Psi_S(\xi_1,\xi_2)=\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)$ (χωρίς συντελεστή κανονικοποίησης).

Παρατηρούμε ότι σ΄ αυτήν την κυματοσυνάρτηση ενσωματώνεται η απαγορευτική αρχή του Pauli: αν θεωρήσουμε ότι τα δύο φερμιόνια βρίσκονται στην ίδια κβαντική κατάσταση ($k_2 = k_1$) είναι φανερό ότι $\Psi(\xi_1, \xi_2) = 0$, δηλαδή αυτό το ενδεχόμενο έχει μηδενική πιθανότητα.

Ένα ενδιαφέρον ερώτημα είναι το ακόλουθο: αν δύο φερμιόνια (π.χ. ηλεκτρόνια) είναι πολύ απομακρυσμένα μεταξύ τους, θα περίμενε κανείς ότι η κυματοσυνάρτηση του ενός θα έπρεπε να περιγράφει επαρκώς την κβαντική κατάσταση του σωματιδίου. Πώς συμβιβάζεται αυτό με την απαίτηση η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει τα δύο σωματίδια να είναι αντισυμμετρική; Η απάντηση είναι ότι κατ΄ αρχήν πρέπει να χρησιμοποιείται η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση (2.3). Επί πλέον, υπάρχουν τα δεδομένα ότι

$$\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi) = \psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi) = \psi_{k_1}(\xi)\psi^*_{k_2}(\xi) = \psi^*_{k_1}(\xi)\psi^*_{k_2}(\xi) = 0.$$

Αυτό γίνεται κατανοητό αν σκεφτεί κανείς ότι, αν το ξ βρίσκεται στην περιοχή όπου η κυματοσυνάρτηση $\psi_{k_1}(\xi)$ έχει σημαντικά μεγάλη τιμή, η $\psi_{k_2}(\xi)$ θα είναι κοντά στο μηδέν, οπότε το αντίστοιχο γινόμενο είναι κοντά στο μηδέν (αντίστοιχα πράγματα θα ισχύουν αν εναλλάξουμε τα k_1 και k_2). Αυτή είναι η έκφραση του γεγονότος ότι τα δύο ηλεκτρόνια είναι απομακρυσμένα και καλά διαχωρισμένα μεταξύ τους. Η πιθανότητα $P(x)$ το σωματίδιο να βρεθεί στη θέση ξ ισούται με το άθροισμα δύο πιθανοτήτων: της πιθανότητας $\int d\xi_2 \Psi^*_A(\xi, \xi_2)\Psi_A(\xi, \xi_2)$ το σωματίδιο 1 να βρεθεί στο ξ, ανεξάρτητα του πού βρίσκεται το σωματίδιο 2 και της πιθανότητας $\int d\xi_1 \Psi^*_A(\xi_1, \xi)\Psi_A(\xi_1, \xi)$ το σωματίδιο 2 να βρεθεί στο ξ, ανεξάρτητα του πού βρίσκεται το σωματίδιο 1. Δηλαδή:

$$P(\xi) = \int d\xi_2 \Psi^*_A(\xi, \xi_2)\Psi_A(\xi, \xi_2) + \int d\xi_1 \Psi^*_A(\xi_1, \xi)\Psi_A(\xi_1, \xi) =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\xi_2 [\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_2) - \psi_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_2)]^*[\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_2) - \psi_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_2)]+$$

$$+\frac{1}{2}\int d\xi_1 [\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi) - \psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi)]^*[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi) - \psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi)] =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\xi_2 [\psi^*_{k_1}(\xi)\psi^*_{k_2}(\xi_2)\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_2) - \psi^*_{k_1}(\xi)\psi^*_{k_2}(\xi_2)\psi_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_2) -$$

$$-\psi^*_{k_2}(\xi)\psi^*_{k_1}(\xi_2)\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_2) + \psi^*_{k_2}(\xi)\psi^*_{k_1}(\xi_2)\psi_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_2)]$$

$$+\frac{1}{2}\int d\xi_1 [\psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi) - \psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi) -$$

$$-\psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi) + \psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi)].$$

Λόγω του ότι οι κυματοσυναρτήσεις δεν έχουν επικάλυψη το αποτέλεσμα απλοποιείται στο:

$$P(\xi) = \frac{1}{2}\int d\xi_2[\psi^*_{k_1}(\xi)\psi^*_{k_2}(\xi_2)\psi_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_2) + \psi^*_{k_2}(\xi)\psi^*_{k_1}(\xi_2)\psi_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_2)]$$

$$+\frac{1}{2}\int d\xi_1[\psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi) + \psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi)] =$$

$$= \frac{1}{2}[\psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_1}(\xi) + \psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_2}(\xi)] + \frac{1}{2}[\psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_2}(\xi) + \psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_1}(\xi)] =$$

$$= \psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_1}(\xi) + \psi^*_{k_2}(\xi)\psi_{k_2}(\xi).$$

Αυτό το αποτέλεσμα έχει το εξής νόημα: αν το σημείο ξ είναι στην περιοχή όπου μόνο η $\psi_{k_1}(\xi)$ είναι σημαντική, τότε αυτομάτως $\psi_{k_2}(\xi) = 0$ και $P(\xi) = \psi^*_{k_1}(\xi)\psi_{k_1}(\xi)$. Αντίστοιχα πράγματα ισχύουν αν είμαστε στην περιοχή όπου $\psi_{k_1}(\xi) = 0$. Άρα, αν δεν υπάρχει επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων, τότε πράγματι οι κυματοσυναρτήσεις του καθενός σωματιδίου ξεχωριστά δίνουν επαρκή περιγραφή του σωματιδίου στην αντίστοιχη περιοχή.

Μία ακόμη σημαντική παρατήρηση είναι ότι η χρήση της αντισυμμετρικής συνάρτησης έχει μετρήσιμα αποτελέσματα στα παρατηρήσιμα μεγέθη. Ας θεωρήσουμε ότι η Χαμιλτονιανή, εκτός από τα μέρη $\hat{H}_{\xi_1}$ και $\hat{H}_{\xi_2}$, έχει και μια ασθενή αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων 1 και 2 (έστω την ηλεκτροστατική άπωση Coulomb $V(\xi_1, \xi_2)$ μεταξύ τους), την οποία μπορούμε να χειριστούμε ως διαταραχή, οπότε θα χρειαστεί να υπολογίσουμε την αναμενόμενη τιμή της:

$$< V >\equiv \int d\xi_1 d\xi_2 \Psi^*_A(\xi_1, \xi_2)V(\xi_1, \xi_2)\Psi_A(\xi_1, \xi_2) =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2[\psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi_2) - \psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi_2)]V(\xi_1, \xi_2)[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2) - \psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)] =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi_2)V(\xi_1, \xi_2)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)$$

$$-\frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi_2)V(\xi_1, \xi_2)\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)$$

$$-\frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi_2)V(\xi_1, \xi_2)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)$$

$$+\frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_2}(\xi_1)\psi^*_{k_1}(\xi_2)V(\xi_1, \xi_2)\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2).$$

Αν υποθέσουμε ότι $V(\xi_2,\xi_1)=V(\xi_1,\xi_2)$, τότε ο πρώτος όρος ισούται με τον τέταρτο και ο δεύτερος με τον τρίτο, όπως μπορούμε να δούμε. Για παράδειγμα, μετονομάζοντας τις (βουβές) μεταβλητές ολοκλήρωσης:

$$\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi^*_{k_2}(\xi_2)V(\xi_1,\xi_2)\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)=$$

$$=\int d\xi_2 d\xi_1 \psi^*_{k_1}(\xi_2)\psi^*_{k_2}(\xi_1)V(\xi_2,\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)\psi_{k_2}(\xi_1),$$

που ισούται με τον τέταρτο όρο, λόγω της συμμετρίας του δυναμικού. Τελικά:

$$<V>=I_D-I_E,$$

$$I_D\equiv\int d\xi_1 d\xi_2 |\psi_{k_1}(\xi_1)|^2|\psi_{k_2}(\xi_2)|^2 V(\xi_1,\xi_2),$$

$$I_E\equiv\int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)\psi^*_{k_2}(\xi_2)\psi_{k_2}(\xi_1)V(\xi_1,\xi_2).$$

Η δεύτερη συνεισφορά I_E λέγεται ολοκλήρωμα ανταλλαγής και οφείλεται στην αναγκαιότητα χρήσης της κυματοσυνάρτησης με καθορισμένη συμμετρία.

Η γενίκευση σε περισσότερα των δύο σωματίδια είναι απλή. Στην περίπτωση των μποζονίων η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει N μποζόνια με την πρόσθετη πληροφορία ότι από τους δείκτες $\{k_1,k_2,\ldots\}$ οι N_1 βρίσκονται στην κατάσταση 1, οι N_2 την κατάσταση 2 και ούτω καθεξής, δίνεται από την έκφραση:

$$\Psi_{N_1N_2\ldots}(\xi_1,\xi_2,\ldots)=\sqrt{\frac{N_1!N_2!\ldots}{N!}}\sum\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N).$$

Το άθροισμα είναι πάνω στις μεταθέσεις των δεικτών $k_1,k_2,\ldots,$ που είναι $\frac{N!}{N_1!N_2!\ldots}$ τον αριθμό.

Μπορεί κανείς εύκολα να επαληθεύσει ότι για $N=2$ η παραπάνω σχέση δίνει

$$\Psi_{1,1,\ldots}(\xi_1,\xi_2)=\sqrt{\frac{1!1!}{2!}}[\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)+\psi_{k_2}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2)],$$

για την περίπτωση που οι k_1 και k_2 είναι διαφορετικές, και

$$\Psi_{2,0,\ldots}(\xi_1,\xi_2,\ldots)=\sqrt{\frac{2!0!}{2!}}\psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_1}(\xi_2),$$

στην περίπτωση $k_2=k_1$, δηλαδή συμφωνεί πλήρως με ό,τι εξηγήσαμε προηγουμένως.

Για την περίπτωση των N φερμιονίων η κυματοσυνάρτηση δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \ldots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \psi_{k_1}(\xi_2) & \ldots & \psi_{k_1}(\xi_N) \\ \psi_{k_2}(\xi_1) & \psi_{k_2}(\xi_2) & \ldots & \psi_{k_2}(\xi_N) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \psi_{k_N}(\xi_1) & \psi_{k_N}(\xi_2) & \ldots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix} .$$

Και πάλι, εύκολα μπορεί κανείς να ελέγξει ότι, για $N = 2$ η ορίζουσα μεταπίπτει στην (2.3). Φυσικά, αναφορικά με φερμιόνια, τα N_k παίρνουν μόνο τις τιμές 0 και 1, οπότε ο παράγοντας κανονικοποίησης είναι απλούστερος.

Κεφάλαιο 3

ΔΕΥΤΕΡΗ ΚΒΑΝΤΩΣΗ

3.1 Μετατοπισμένος κβαντικός ταλαντωτής

Θα παραθέσουμε ορισμένες παρατηρήσεις σχετικές μ' έναν κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή που υφίσταται, εκτός από τη δύναμη επαναφοράς και μια σταθερή δύναμη, που απλά μεταθέτει το σημείο ισορροπίας. Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-\sqrt{2}\gamma\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\psi=E\psi. \tag{3.1}$$

Όταν $\gamma=0$ η εξίσωση μεταπίπτει στην εξίσωση του συνηθισμένου κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή. Ο γραμμικός όρος έχει γραφτεί με σχετικά περίπλοκη επιλογή σταθερών, ώστε να απλοποιηθεί μετά, όπως θα δούμε αμέσως. Κάνουμε την αλλαγή μεταβλητών $x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi, E=\hbar\omega\epsilon$, οπότε η εξίσωση (3.1) γράφεται:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\xi^2-\sqrt{2}\gamma\hbar\omega\xi\right)\psi=\hbar\omega\epsilon\psi\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2-\sqrt{2}\gamma\xi\right)\psi=\epsilon\psi. \tag{3.2}$$

Οι ποσότητες ξ,ϵ και γ είναι αδιάστατες. Η τελευταία εξίσωση μπορεί να γραφτεί και με τη μορφή:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}(\xi-\sqrt{2}\gamma)^2-\gamma^2\right)\psi=\epsilon\psi.$$

Είναι σαφές από αυτήν την έκφραση ότι το σημείο ισορροπίας, που είναι το ελάχιστο του δυναμικού $\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\gamma)^2 - \gamma^2$, έχει μετατοπιστεί από το μηδέν στο σημείο $\sqrt{2}\gamma$. Επίσης η τιμή του δυναμικού στο ελάχιστο δεν ειναι μηδέν, αλλά $-\gamma^2$, οπότε και η ενέργεια (π.χ. της θεμελιώδους κατάστασης) είναι μικρότερη από του αρχικού αρμονικού ταλαντωτή κατά γ^2. Αυτό έχει σοβαρές συνέπειες ως προς τον ορισμό του "κενού" της θεωρίας. Το "κενό" αλλάζει καθώς μεταβάλλεται το γ, γιατί το "κενό" είναι εξ ορισμού η κατάσταση με την χαμηλότερη ενέργεια.

Θα λύσουμε το πρόβλημα με τη μέθοδο των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής. Εμπνεόμενοι από τον μη μετατοπισμένο αρμονικό ταλαντωτή ορίζουμε τους τελεστές

$$b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + ip_\xi\right), b_0^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - ip_\xi\right),$$

και αντικαθιστώντας $p_\xi = -i\frac{d}{d\xi}$ βρίσκουμε τελικά:

$$b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right), b_0^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right). \tag{3.3}$$

Αυτές οι σχέσεις μπορούν να αντιστραφούν με το αποτέλεσμα:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(b_0 + b_0^\dagger\right), \frac{d}{d\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(b_0 - b_0^\dagger\right). \tag{3.4}$$

Αντικαθιστώντας τις (3.4) στην (3.2) βρίσκουμε:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(b_0 - b_0^\dagger\right)\right]^2 + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(b_0 + b_0^\dagger\right)\right]^2 - \sqrt{2}\gamma\frac{1}{\sqrt{2}}\left(b_0 + b_0^\dagger\right)\right\}\psi = \epsilon\psi.$$

Στη συνέχεια πρέπει να γίνουν οι αλγεβρικές πράξεις (λαμβάνοντας υπόψη ότι τα $b_0^\dagger b_0$ και $b_0 b_0^\dagger$ δεν είναι ίδια, οπότε πρέπει να διατηρούμε τη σειρά όπως ακριβώς προκύπτει) και το αποτέλεσμα είναι:

$$\left[b_0^\dagger b_0 + \frac{1}{2} - \gamma(b_0 + b_0^\dagger)\right]\psi = \epsilon\psi \Rightarrow$$

$$[b_0^\dagger b_0 - \gamma(b_0 + b_0^\dagger)]\psi = \left(\epsilon - \frac{1}{2}\right)\psi \equiv \epsilon'\psi \tag{3.5}$$

Για $\gamma = 0$ η λύση της εξίσωσης του Schrödingerείναι η

$$\psi_{0n} = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b_0^\dagger)^n|0>, \ b_0|0>= 0,$$

όπου $|0>$ είναι το κενό σ' αυτήν την περίπτωση και η αντίστοιχη ενέργεια είναι

$$\epsilon'_{0n} = n \Rightarrow \epsilon_{0n} = n + \frac{1}{2}.$$

Η εξίσωση (3.5) μπορεί να απλοποιηθεί με το μετασχηματισμό

$$b_0 = b + \gamma, \ b_0^\dagger = b^\dagger + \gamma.$$

Το αποτέλεσμα της αντικατάστασης είναι:

$$[b^\dagger b - \gamma^2]\psi = \epsilon'\psi \equiv (\tilde{\epsilon} - \gamma^2)\psi$$

Δηλαδή το πρόβλημα ανάγεται στη λύση της εξίσωσης

$$b^\dagger b|\psi >= \tilde{\epsilon}|\psi > . \tag{3.6}$$

Η λύση της εξίσωσης (3.6) ακολουθεί το σχήμα της περίπτωσης $\gamma = 0$: αν ορίσουμε το κενό $|G>$ της θεωρίας με τη σχέση

$$b|G >= 0, \tag{3.7}$$

οι συναρτήσεις

$$|\psi_n >= \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|G>$$

αντιστοιχούν σε ενέργειες $\tilde{\epsilon}_n = n, n = 0, 1, 2, \ldots$, οπότε

$$\epsilon_n = \epsilon'_n + \frac{1}{2} = \tilde{\epsilon}_n - \gamma^2 + \frac{1}{2} = n - \gamma^2 + \frac{1}{2}.$$

Η σχέση (3.7) συνεπάγεται τη σχέση

$$(b_0 - \gamma)|G >= 0 \Rightarrow b_0|G >= \gamma|G > . \tag{3.8}$$

Υπενθυμίζουμε ότι το αρχικό κενό $|0>$ οριζόταν με τη σχέση $b_0|0>=0$. Το καινούριο κενό $|G>$ πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση (3.8), δηλαδή πρέπει να είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή καταστροφής! Άρα δεν είναι δυνατόν να είναι κατάσταση με καθορισμένο αριθμό κβάντων, όπως, για παράδειγμα, η $\psi_n >$. Αν δοκιμάσουμε τη μορφή $|G >= f(b_0^\dagger)|0>$, όπου η $f(b_0^\dagger)$ πρέπει να προσδιορισθεί, η εξίσωση (3.8) για το $|G>$ γράφεται

$$b_0 f(b_0^\dagger)|0 >= \gamma f(b_0^\dagger)|0 >\Rightarrow b_0 f(b_0^\dagger)|0 > - f(b_0^\dagger)b_0|0 >= \gamma f(b_0^\dagger)|0 >\Rightarrow$$

$$\Rightarrow [b_0, f(b_0^\dagger)]|0> = \gamma f(b_0^\dagger)|0>, \tag{3.9}$$

όπου εμφανίσαμε τον όρο $f(b_0^\dagger)b_0|0>$, που είναι προφανώς μηδέν και δεν αλλάζει το αποτέλεσμα. Για τον υπολογισμό του μεταθέτη αποδεικνύεται ότι $[b_0, (b_0^\dagger)^n] = n(b_0^\dagger)^{n-1}$, δηλαδή ο μεταθέτης λειτουργεί φορμαλιστικά ως παράγωγος ($[x^n]' = nx^{n-1}$), όταν δρα σε δυνάμεις του $b_0^\dagger$. Αναπτύσσοντας την τυχαία συνάρτηση $f(b_0^\dagger)$ σε σειρά Maclaurin μπορεί εύκολα να αποδειχθεί ότι

$$[b_0, f(b_0^\dagger)] = \frac{\partial f(b_0^\dagger)}{\partial b_0^\dagger}.$$

Η εξίσωση (3.9) μπορεί να ικανοποιηθεί, αν βρεθεί συνάρτηση $f(b_0^\dagger)$ που να ικανοποιεί τη σχέση

$$[b_0, f(b_0^\dagger)] = \gamma f(b_0^\dagger) \Rightarrow \frac{\partial f(b_0^\dagger)}{\partial b_0^\dagger} = \gamma f(b_0^\dagger),$$

οπότε $f(b_0^\dagger) = ce^{\gamma b_0^\dagger}$ και $|G> = ce^{\gamma b_0^\dagger}|0>$. Ο παράγοντας c έχει να κάνει με την κανονικοποίηση. Αποδεικνύεται ότι $c = \exp\left[-\frac{\gamma^2}{2}\right]$, οπότε τελικά:

$$|G> = \exp\left[-\frac{\gamma^2}{2}\right] e^{\gamma b_0^\dagger}|0> .$$

Οι διεγερμένες καταστάσεις είναι πλέον εύκολο να προσδιορισθούν:

$$|\psi_n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|G> = \frac{1}{\sqrt{n!}}\exp\left[-\frac{\gamma^2}{2}\right](b_0^\dagger - \gamma)^n e^{\gamma b_0^\dagger}|0> .$$

Είναι φανερό ότι αυτό που αποκαλούμε κενό δεν είναι η απουσία κβάντων: αντίθετα, το $|G>$ είναι γεμάτο από κβάντα. Το σημαντικό στον ορισμό του κενού είναι ότι είναι η κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας. Οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή καταστροφής λέγονται <u>σύμφωνες καταστάσεις</u> και είναι πρωταρχικής σημασίας κυρίως στην κβαντική οπτική.

3.2 Γραμμική αλυσίδα

Θεωρούμε N σωματίδια με μάζα m που το καθένα συνδέεται με το προηγούμενο και το επόμενό του με ελατήρια σταθεράς K. Στην κατάσταση ισορροπίας το μήκος των ελατηρίων είναι a και οι απομακρύνσεις από τη θέση ισορροπίας είναι φυσικά $q_l = 0, l = 1, 2, 3, \ldots, N$. Για μια τυχαία διάταξη οι απομακρύνσεις τριών διαδοχικών σωματιδίων χαρακτηρίζονται από τις μετατοπίσεις q_{l-1}, q_l, q_{l+1}, και η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο l είναι $K(q_{l+1} - q_l) - K(q_l - q_{l-1})$, οπότε η εξίσωση κίνησης γράφεται:

$$m\ddot{q}_l = K(q_{l+1} - 2q_l + q_{l-1}) \Rightarrow \frac{\partial^2 q_l}{\partial t^2} = \frac{K}{m}(q_{l+1} - 2q_l + q_{l-1}). \tag{3.10}$$

3.2.1 Κανονικοί τρόποι ταλάντωσης

Μπορεί κανείς να μαντέψει αρκετά εύκολα τη λύση της εξίσωσης (3.10) αν θυμηθεί ότι η λύση της κυματικής εξίσωσης $\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}$ επιτυγχάνεται δοκιμάζοντας τη μορφή $q = Pe^{\pm ikx}e^{\pm i\omega t}$. Αν αυτή η δοκιμαστική λύση αντικατασταθεί στην κυματική εξίσωση θα προκύψει η σχέση $\omega = \pm ck$, δηλαδή η σχέση διασποράς. Με την παρατήρηση ότι το la θα πάρει τη θέση του x για τη γραμμική αλυσίδα μπορούμε να αναζητήσουμε λύση για την (3.10) που να έχει τη μορφή $q_l = Pe^{\pm ikla}e^{\pm i\omega t}$. Αντικατάσταση στην εξίσωση (3.10) θα δώσει τη σχέση διασποράς

$$\omega^2 = \frac{2K}{m}(1 - \cos ka) \Rightarrow \omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|. \tag{3.11}$$

Έχουμε επιλέξει να κρατήσουμε μόνο το θετικό πρόσημο για το ω και οι τυχόν αρνητικές τιμές να συμπεριληφθούν ρητά (π.χ. με τη μορφή $e^{\pm i\omega t}$, που εμφανίσαμε προηγουμένως). Μια ιδιότητα που απορρέει από την (3.11) και που θα χρησιμοποιηθεί πολύ στη συνέχεια είναι η

$$\omega_{-k} = \omega_k. \tag{3.12}$$

Παρατηρούμε ότι στο όριο $ka \to 0$ η σχέση διασποράς μεταπίπτει στην $\omega = \sqrt{\frac{Ka^2}{m}}k$, δηλαδή μια γραμμική σχέση, όπως στην περίπτωση της χορδής. Το φυσικό νόημα είναι ότι η χορδή είναι μια καλή προσέγγιση της γραμμικής αλυσίδας στο όριο που το μήκος ηρεμίας των ελατηρίων είναι πολύ μικρότερο από το μήκος κύματος.

Η γενική λύση για την απομάκρυνση q_l θα είναι η υπέρθεση:

$$q_l = \sum_k \left[A_k e^{ikla}e^{-i\omega_k t} + A_k^* e^{-ikla}e^{i\omega_k t} + C_k e^{ikla}e^{i\omega_k t} + C_k^* e^{-ikla}e^{-i\omega_k t}\right] \tag{3.13}$$

Οι συντελεστές έχουν επιλεγεί με τέτοιον τρόπο ώστε η απομάκρυνση q_l να είναι πραγματικός αριθμός. Οι όροι με συντελεστές A_k, A_k^* αντιπροσωπεύουν κύματα που οδεύουν προς τα δεξιά, ενώ οι όροι με συντελεστές C_k, C_k^* αντιπροσωπεύουν κύματα που οδεύουν προς τα αριστερά. Στη συνέχεια θα μελετήσουμε μόνο κύματα που οδεύουν προς τα δεξιά, δηλαδή θα θεωρήσουμε ότι

$C_k = C_k^* = 0$. Η γενίκευση δεν παρουσιάζει καμμιά δυσκολία. Κάτι που πρέπει να διευκρινιστεί είναι το άθροισμα πάνω στα $k(\sum_k)$. Υποθέτουμε ότι ισχύουν περιοδικές οριακές συνθήκες: $q_{l+N} = q_l$ για όλα τα l. Αυτό συνεπάγεται τις σχέσεις

$$e^{\pm ik(l+N)} = e^{\pm ikl} \Rightarrow e^{\pm ikN} = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k = n\frac{2\pi}{Na}, n = \begin{cases} -p+1, \ldots, p-1, p, & N = 2p, \\ -p, -p+1, \ldots, p-1, p, & N = 2p+1, \end{cases} \tag{3.14}$$

όπου ο n είναι ακέραιος και το πεδίο τιμών του διαφοροποιείται ελαφρά, ανάλογα με το αν ο N είναι άρτιος ή περιττός αριθμός. Αυτές οι διαφορές δεν παίζουν κανένα ρόλο αν το N είναι μεγάλο, όπως συνήθως. Άρα το $\sum_k$ παίρνει ένα συγκεκριμένο νόημα: είναι το άθροισμα πάνω στα αντίστοιχα n.

Θεωρούμε, λοιπόν την έκφραση

$$q_l = \sum_k \left[A_k e^{ikla} e^{-i\omega_k t} + A_k^* e^{-ikla} e^{i\omega_k t}\right] \tag{3.15}$$

και την αντίστοιχη έκφραση για την ορμή $p_l = m\dot{q}_l$:

$$p_l = im \sum_k \left[-\omega_k A_k e^{ikla} e^{-i\omega_k t} + \omega_k A_k^* e^{-ikla} e^{i\omega_k t}\right] \tag{3.16}$$

Ορίζουμε $B_k \equiv A_k e^{-i\omega_k t} \Rightarrow B_k^* \equiv A_k^* e^{+i\omega_k t}$, εν όψει της χρήσης της εικόνας του Schrödinger, όπου οι τελεστές είναι χρονικά ανεξάρτητοι και η χρονική εξάρτηση μεταφέρεται στις κυματοσυναρτήσεις. Οι εξισώσεις (3.15, 3.16) παίρνουν τη μορφή

$$q_l = \sum_k \left[B_k e^{ikla} + B_k^* e^{-ikla}\right], \tag{3.17}$$

$$p_l = im \sum_k \left[-\omega_k B_k e^{ikla} + \omega_k B_k^* e^{-ikla}\right]. \tag{3.18}$$

Είναι εύκολο να δει κανείς ότι

$$q_l = \sum_k B_k e^{ikla} + \sum_k B_k^* e^{-ikla} = \sum_k B_k e^{ikla} + \sum_{k'} B_{-k'}^* e^{ik'la},$$

με την αλλαγή μεταβλητής $k' = -k$. Μπορούμε τέλος να απαλείψουμε τον τόνο από τη βουβή μεταβλητή και να βρούμε μια χρήσιμη παραλλαγή της (3.15):

$$q_l = \sum_k [B_k + B_{-k}^*] e^{ikla}. \tag{3.19}$$

Παρόμοια βήματα μπορούμε να κάνουμε ξεκινώντας από την (3.18), αλλά θα χρειαστεί να επικαλεστούμε την ιδιότητα (3.12): $\omega_{-k} = \omega_k$. Το αποτέλεσμα θα είναι:

$$p_l = \sum_k [-im\omega_k B_k + im\omega_k B^*_{-k}] e^{ikla}. \tag{3.20}$$

Παρατηρούμε ότι οι (3.19, 3.20) είναι αναπτύγματα Fourier, οπότε μπορούν να αντιστραφούν και να υπολογίσουμε τις ποσότητες μέσα στις τετράγωνες αγκύλες. Θα χρειαστεί η σχέση ορθογωνιότητας

$$\sum_{l=1}^{N} e^{ikla} e^{-ik'la} = N\delta_{kk'}. \tag{3.21}$$

Αν, για παράδειγμα, πολλαπλασιάσουμε την (3.19) δεξιά και αριστερά με την παράσταση $e^{-ik'la}$ και αθροίσουμε σ' όλα τα l, θα βρούμε:

$$\sum_{l=1}^{N} q_l e^{-ik'la} = \sum_k [B_k + B^*_{-k}] \sum_{l=1}^{N} e^{ikla} e^{-ik'la} = \sum_k [B_k + B^*_{-k}] N\delta_{kk'} = N[B_{k'} + B^*_{-k'}],$$

οπότε, αναδιατάσσοντας ελαφρά και απαλείφοντας τον τόνο βρίσκουμε τη σχέση:

$$B_k + B^*_{-k} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} q_l e^{-ikla}. \tag{3.22}$$

Παρόμοια, αλλά ξεκινώντας από την (3.20) βρίσκουμε:

$$B_k - B^*_{-k} = \frac{i}{Nm\omega_k} \sum_{l=1}^{N} p_l e^{-ikla}. \tag{3.23}$$

Μπορούμε, λοιπόν, να επιλύσουμε:

$$B_k = \frac{1}{2N} \sum_{l=1}^{N} \left(q_l + \frac{i}{m\omega_k} p_l \right) e^{-ikla}, \tag{3.24}$$

$$B^*_k = \frac{1}{2N} \sum_{l=1}^{N} \left(q_l - \frac{i}{m\omega_k} p_l \right) e^{+ikla}. \tag{3.25}$$

(Στην τελευταία σχέση κάναμε απ' ευθείας το βήμα να θέσουμε όπου $-k$ το k, ώστε να βρούμε το B^*_k από το B^*_{-k}). Οι πιο έμπειροι αναγνώστες θα έχουν προσέξει ότι οι εκφράσεις αυτές μοιάζουν αρκετά με τις εκφράσεις ορισμού των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή.

Βέβαια, εδώ περιοριζόμαστε ακόμα στην κλασική θεωρία, αλλά όταν προχωρήσουμε στην κβάντωση οι συντελεστές B_k και B_k^* θα σχετισθούν πράγματι με τελεστές δημιουργίας και καταστροφής.

Θα εξετάσουμε τώρα το ίδιο πρόβλημα στις διατυπώσεις του Lagrange και του Hamilton, ώστε να είμαστε έτοιμοι για την κβάντωση της θεωρίας. Η κινητική ενέργεια της γραμμικής αλυσίδας είναι: $T = \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} m\dot{q_l}^2$, ενώ η δυναμική της ενέργεια είναι $V = \sum_l \frac{1}{2} K(q_l - q_{l+1})^2$. Δηλαδή η λαγκρανζιανή είναι:

$$L = T - V = \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} m\dot{q_l}^2 - \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} K(q_l - q_{l+1})^2. \tag{3.26}$$

Η συζυγής ορμή βρίσκεται εύκολα από τον ορισμό: $p_l \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = m\dot{q}_l$. Η χαμιλτονιανή είναι $H = \sum_{l=1}^{N} p_l \dot{q}_l - L$. Μετά τις πράξεις και την αντικατάσταση $\dot{q}_l = \frac{p_l}{m}$ η τελική έκφραση είναι:

$$H = \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2m} p_l^2 + \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} K(q_l - q_{l+1})^2, \tag{3.27}$$

δηλαδή το άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας.

Η χαμιλτονιανή H μπορεί να εκφραστεί και συναρτήσει των ποσοτήτων $B_{\pm k}, B_{\pm k}^*$, αν τα p_l και q_l αντικατασταθούν στην (3.27) με τη βοήθεια των (3.19, 3.20). Αποδεικνύεται ότι οι επί μέρους όροι είναι ίσοι με:

$$\sum_{l=1}^{N} p_l^2 = N m^2 \sum_k \omega_k^2 (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k} - B_k^* B_{-k}^* - B_k B_{-k}) \tag{3.28}$$

$$\sum_{l=1}^{N} (q_l - q_{l+1})^2 = 2N \sum_k (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k} + B_k^* B_{-k}^* + B_k B_{-k})(1 - \cos ka), \tag{3.29}$$

οπότε η χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\begin{aligned} H = {} & \frac{Nm^2}{2m} \sum_k \omega_k^2 (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k} - B_k^* B_{-k}^* - B_k B_{-k}) + \\ & + \frac{1}{2} K 2N \sum_k (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k} + B_k^* B_{-k}^* + B_k B_{-k})(1 - \cos ka) = \\ = {} & \frac{N}{2} \sum_k m\omega_k^2 (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k}) + N \sum_k (B_k B_k^* + B_{-k}^* B_{-k}) K (1 - \cos ka) - \\ & - \frac{N}{2} \sum_k m\omega_k^2 (B_k^* B_{-k}^* + B_k B_{-k}) + N \sum_k (B_k^* B_{-k}^* + B_k B_{-k})(1 - \cos ka) \end{aligned} \tag{3.30}$$

Τέλος, η σχέση διασποράς (3.11) με την πρώτη της μορφή: $\omega_k^2 = \frac{2K}{m}(1 - \cos ka)$ δείχνει ότι οι δύο πρώτοι όροι είναι ίσοι, άρα απλά η συνεισφορά τους διπλασιάζεται, ενώ οι δύο τελευταίοι αλληλοεξουδετερώνονται. Τελικά:

$$H = \frac{N}{2}[\sum_k 2m\omega_k^2 B_k^* B_k + \sum_k 2m\omega_k^2 B_{-k}^* B_{-k}] =$$

$$= N[\sum_k m\omega_k^2 B_k^* B_k + \sum_{k'} m\omega_k^2 B_{k'}^* B_{k'}],$$

όπου χρησιμοποιήσαμε πάλι την αλλαγή μεταβλητής $k' = -k$. Στη δεύτερη άθροιση μπορούμε να απαλείψουμε τον τόνο στη βουβή μεταβλητή, οπότε

$$H = \sum_k (Nm\omega_k^2)(B_k^* B_k + B_k B_k^*) = \sum_k (Nm\omega_k^2)(2B_k^* B_k). \qquad (3.31)$$

Θα επισημάνουμε τις ομοιότητες (αλλά και τις διαφορές!) αυτής της κλασικής έκφρασης με την έκφραση

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}(b_k^\dagger b_k + b_k b_k^\dagger)$$

της κβαντικής μηχανικής για τη χαμιλτονιανή N ασύζευκτων μεταξύ τους κβαντικών αρμονικών ταλαντωτών. Υπάρχει προφανώς μια διαφορά στην κανονικοποίηση (την οποία θα ρυθμίσουμε στην επόμενη παράγραφο) αλλά η ουσιαστική διαφορά έγκειται προφανώς στο γεγονός ότι το άθροισμα $B_k^* B_k + B_k B_k^*$ δίνει απλά το $2B_k^* B_k$ που εμφανίζεται τελικά στην εξίσωση, ενώ δεν συμβαίνει το ίδιο με το άθροισμα $b_k^\dagger b_k + b_k b_k^\dagger$, το οποίο, αν το επεξεργαστεί κανείς με τη βοήθεια των σχέσεων μετάθεσης, θα δώσει $2b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}$, όπου το $\frac{1}{2}$ θα συνεισφέρει στην περίφημη ενέργεια μηδενικού σημείου του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή.

3.2.2 Κβάντωση της γραμμικής αλυσίδας

Η κβάντωση γίνεται με την καθιερωμένη μέθοδο της επιβολής σχέσεων μετάθεσης στις απομακρύνσεις q_l και τις συζυγείς ορμές τους p_l :

$$[q_m, q_n] = 0, \; [p_m, p_n] = 0, \; [q_m, p_n] = i\hbar\delta_{mn}. \qquad (3.32)$$

Αυτές οι σχέσεις συνεπάγονται αντίστοιχες σχέσεις μετάθεσης μεταξύ των b_k και $b_k^\dagger$, στα οποία θα μεταλλαχθούν τα B_k και B_k^*. Οι σχέσεις (3.24) και (3.25) γράφονται:

$$B_k = \frac{1}{2N}\sum_{l=1}^{N}\left(q_l + \frac{i}{m\omega_k}p_l\right)e^{-ikla}, \qquad (3.33)$$

$$B_k^\dagger = \frac{1}{2N}\sum_{l=1}^{N}\left(q_l - \frac{i}{m\omega_k}p_l\right)e^{ikla}. \tag{3.34}$$

Θα υπολογίσουμε τον μεταθέτη $[B_{k_1}, B_{k_2}^\dagger]$:

$$[B_{k_1}, B_{k_2}^\dagger] = \frac{1}{4N^2}\sum_{l_1,l_2}\left[q_{l_1} + \frac{i}{m\omega_{k_1}}p_{l_1}, q_{l_2} - \frac{i}{m\omega_{k_2}}p_{l_2}\right]e^{-ik_1l_1a}e^{ik_2l_2a} =$$

$$= \frac{1}{4N^2}\sum_{l_1,l_2}\left\{\left[q_{l_1}, -\frac{i}{m\omega_{k_2}}p_{l_2}\right] + \left[\frac{i}{m\omega_{k_1}}p_{l_1}, q_{l_2}\right]\right\}e^{-ik_1l_1a}e^{ik_2l_2a} =$$

$$= \frac{1}{4N^2}\sum_{l_1,l_2}\left\{\left(-\frac{i}{m\omega_{k_2}}\right)(i\hbar\delta_{l_1l_2}) + \left(\frac{i}{m\omega_{k_1}}\right)(-i\hbar\delta_{l_1l_2})\right\}e^{-ik_1l_1a}e^{ik_2l_2a} =$$

$$= \frac{1}{4N^2}\sum_{l}\left\{\left(\frac{\hbar}{m\omega_{k_1}} + \frac{\hbar}{m\omega_{k_2}}\right)\right\}e^{-i(k_1-k_2)la} =$$

$$= \frac{1}{4N^2}\left(\sum_{l}e^{-i(k_1-k_2)la}\right)\left(\frac{\hbar}{m\omega_{k_1}} + \frac{\hbar}{m\omega_{k_2}}\right) =$$

$$= \frac{1}{4N^2}N\delta_{k_1k_2}\left(\frac{\hbar}{m\omega_{k_1}} + \frac{\hbar}{m\omega_{k_2}}\right) = \frac{\hbar}{2Nm\omega_{k_1}}\delta_{k_1k_2}.$$

Οι υπόλοιποι μεταθέτες ($[B_{k_1}, B_{k_2}]$, $[B_{k_1}^\dagger, B_{k_2}^\dagger]$) είναι τετριμένοι, δηλαδή μηδενικοί. Άρα το αποτέλεσμα είναι, συγκεντρωτικά:

$$[B_{k_1}, B_{k_2}] = 0,\ [B_{k_1}^\dagger, B_{k_2}^\dagger] = 0,\ [B_{k_1}, B_{k_2}^\dagger] = \frac{\hbar}{2Nm\omega_{k_1}}\delta_{k_1k_2}. \tag{3.35}$$

Ορίζουμε τώρα νέους τελεστές ως εξής:

$$b_k \equiv \sqrt{\frac{2Nm\omega_k}{\hbar}}B_k,\ b_k^\dagger \equiv \sqrt{\frac{2Nm\omega_k}{\hbar}}B_k^\dagger. \tag{3.36}$$

Αυτός ο ορισμός απλοποιεί τις σχέσεις μετάθεσης:

$$[b_{k_1}, b_{k_2}] = 0,\ [b_{k_1}^\dagger, b_{k_2}^\dagger] = 0,\ [b_{k_1}, b_{k_2}^\dagger] = \delta_{k_1k_2}. \tag{3.37}$$

Οι εξισώσεις (3.19) και (3.20) μπορούν να γραφτούν και συναρτήσει των νέων τελεστών:

$$q_l = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_k}}[b_k + b_{-k}^\dagger]e^{ikla}, \tag{3.38}$$

$$p_l = -i \sum_k \sqrt{\frac{\hbar m \omega_k}{2N}} [b_k - b^\dagger_{-k}] e^{ikla}. \tag{3.39}$$

Γράφουμε, τέλος, και τις αντίστροφες σχέσεις:

$$b_k = \sum_{l=1}^{N} \left(\sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar N}} q_l + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m N \omega_k}} p_l \right) e^{-ikla}, \tag{3.40}$$

$$b_k^\dagger = \sum_{l=1}^{N} \left(\sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar N}} q_l - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m N \omega_k}} p_l \right) e^{ikla}. \tag{3.41}$$

Με τη βοήθεια των σχέσεων (3.27), (3.40) και (3.41) μπορούμε να βρούμε την κβαντική χαμιλτονιανή. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει πριν, εκείνο που διαφοροποιεί αυτόν τον υπολογισμό από τον αντίστοιχο της προηγούμενης παραγράφου είναι η ανάγκη να κρατήσει κανείς τη σειρά των τελεστών. Το αποτέλεσμα είναι:

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} (b_k^\dagger b_k + b_k b_k^\dagger) = \sum_k \hbar\omega_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right). \tag{3.42}$$

Παρατηρούμε την εμφάνιση της ενέργειας μηδενικού σημείου και του τελεστή αρίθμησης $b_k^\dagger b_k$, οπότε η αναμενόμενη τιμή της χαμιλτονιανής $\hat{H}$ θα έχει ακριβώς τη μορφή της ενέργειας που θα περίμενε κανείς για ένα σύστημα ασύζευκτων ταλαντωτών.

Οι ιδιοκαταστάσεις $|\Phi>$ της χαμιλτονιανής ($\hat{H}|\Phi>= E|\Phi>$) δίνονται από τη σχέση

$$|\Phi>= \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (b_k^\dagger)^{n_k} |0>, \tag{3.43}$$

όπου η κατάσταση του κενού ορίζεται ως συνήθως:

$$b_k|0>= 0.$$

Αν, π.χ., $|\Phi>= b_K^\dagger|0>$, η αντίστοιχη ενέργεια θα είναι

$$E =< \Phi|\hat{H}|\Phi>=< 0|b_K \sum_k \hbar\omega_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right) b_K^\dagger |0>=$$

$$= \sum_k \hbar\omega_k < 0|b_K \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right) b_K^\dagger |0> .$$

Όμως

$$< 0|b_K b_K^\dagger|0>=< 0|[b_K, b_K^\dagger]|0>= 1$$

και

$$\begin{aligned} &< 0|b_K b_k^\dagger b_k b_K^\dagger|0 >=< 0|(\delta_{kK} + b_k^\dagger b_K)(\delta_{kK} + b_K^\dagger b_k)|0 >= \\ &= \delta_{kK}\delta_{kK} + \delta_{kK} < 0|b_k^\dagger b_K|0 > +\delta_{kK} < 0|b_K^\dagger b_k|0 > + \\ &+ < 0|b_k^\dagger b_K b_K^\dagger b_k|0 >= \delta_{kK}, \end{aligned}$$

αφού οι τρεις τελευταίοι όροι έχουν τον τελεστή καταστροφής να ενεργεί στο κενό. Άρα

$$E = \sum_k \hbar\omega_k \left(\delta_{kK} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega_K + \sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k.$$

Δηλαδή η ενέργεια είναι το άθροισμα της ενέργειας του κβάντου που έχει διεγερθεί και των ενεργειών μηδενικού σημείου όλων των πιθανών κυματαριθμών. Αν το N γίνει άπειρο, θα είναι αντίστοιχα άπειρη και η ενέργεια μηδενικού σημείου. Σημασία έχουν βέβαια μόνο διαφορές ενεργειών.

Ένας χρήσιμος τελεστής είναι ο

$$\hat{N} \equiv \sum_k b_k^\dagger b_k, \tag{3.44}$$

που λέγεται τελεστής αρίθμησης. Μπορεί να αποδειχθεί ότι οι ιδιοκαταστάσεις $|\Phi >$ της ενέργειας είναι και ιδιοκαταστάσεις του $\hat{N}$ και

$$n =< \Phi|\hat{N}|\Phi >= \sum_k n_k.$$

Είναι δυνατόν να αποδείξει κανείς ότι καταστάσεις με διαφορετικό αριθμό κβάντων είναι ορθογώνιες μεταξύ τους. Κατ΄ ακολουθίαν οι αναμενόμενες τιμές των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής είναι μηδέν: η κατάσταση $b_K|\Phi >$ έχει ένα κβάντο λιγότερο από την κατάσταση $|\Phi >$, οπότε $< \Phi|b_K|\Phi >= 0$, και με την ίδια λογική $< \Phi|b_K^\dagger|\Phi >= 0$. Εγείρεται, λοιπόν, η απορία, πώς φτάνει κανείς στο κλασικό όριο, αφού αυτές οι αναμενόμενες τιμές μηδενίζονται. Η απάντηση είναι ότι οι φυσικές καταστάσεις δεν είναι της μορφής των $|\Phi >$ τις οποίες αναφέραμε προηγουμένως, αλλά είναι οι λεγόμενες σύμφωνες καταστάσεις, που αναφέραμε στην παράγραφο για τον μετατοπισμένο αρμονικό ταλαντωτή. Ένα παράδειγμα σύμφωνης κατάστασης είναι η

$$|\Phi_{k_0} >= \exp\left[-\frac{|\beta|^2}{2}\right] e^{\beta b_{k_0}^\dagger}|0 >, \beta = \gamma e^{-i\omega_{k_0} t}.$$

Είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι

$$b_k|\Phi_{k_0} >= \delta_{kk_0}\beta|\Phi_{k_0} >,$$

δηλαδή ότι η κατάσταση $|\Phi_{k_0}>$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή καταστροφής: αυτός είναι ακριβώς ο ορισμός της σύμφωνης κατάστασης. Αποδεικνύονται οι χρήσιμες ιδιότητες:

$$< \Phi_{k_0}|b_k|\Phi_{k_0} >= \beta\delta_{kk_0},\ < \Phi_{k_0}|b_k^\dagger|\Phi_{k_0} >= \beta^*\delta_{kk_0}.$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε την αναμενόμενη τιμή της απομάκρυνσης χρησιμοποιώντας και τη σχέση (3.38), δηλαδή την $q_l = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_k}}[b_k + b_{-k}^\dagger]e^{ikla}$:

$$< \Phi_{k_0}|q_l|\Phi_{k_0} >= \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_k}}[< \Phi_{k_0}|b_k|\Phi_{k_0} > + < \Phi_{k_0}|b_{-k}^\dagger|\Phi_{k_0} >]e^{ikla} =$$

$$= \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_k}}[\beta\delta_{kk_0} + \beta^*\delta_{-kk_0}]e^{ikla} = \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_{k_0}}}[\beta e^{ik_0la} + \beta^* e^{-ik_0la}].$$

Η αντικατάσταση $\beta = \gamma e^{-i\omega_{k_0}t}$ (υποθέτοντας για απλότητα ότι το γ είναι πραγματικό· αν δεν είναι, απλά θα συνεισφέρει μια διαφορά φάσης) θα μας δώσει το αποτέλεσμα:

$$< \Phi_{k_0}|q_l|\Phi_{k_0} >= 2\gamma\sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_{k_0}}}\cos(k_0la - \omega_{k_0}t),$$

που έχει τη μορφή κύματος με κυματικό αριθμό k_0 που οδεύει προς τα δεξιά, ενώ η αναμενόμενη τιμή της ίδιας ποσότητας σε καταστάσεις με καθορισμένο αριθμό κβάντων είναι μηδέν, όπως βρήκαμε λίγο πριν. Βλέπουμε ότι οι σύμφωνες καταστάσεις έχουν κλασικό όριο, σε αντίθεση με τις καταστάσεις με καθορισμένο αριθμό κβάντων, που δεν έχουν.

3.3 Συνεχές όριο

3.3.1 Κλασική αλυσίδα

Θα εξετάσουμε τώρα το όριο της γραμμικής αλυσίδας κατά το οποίο θεωρούμε ότι τα σωματίδια γίνονται όλο και πιο πολλά ($N \to \infty$), ενώ η απόστασή τους a μικραίνει, έτσι ώστε το φυσικό μήκος $L = Na$ να διατηρείται σταθερό. Η διακριτή αλυσίδα μ' αυτή τη διαδικασία θα μεταπέσει σε συνεχή χορδή. Η μάζα m των σφαιριδίων πρέπει να τείνει στο μηδέν. Ο λόγος είναι ότι το πηλίκο $\mu = \frac{m}{a}$ θα μεταπέσει στη γραμμική πυκνότητα της χορδής, οπότε, για να είναι πεπερασμένο το πηλίκο στο όριο $a \to 0$, πρέπει και ο αριθμητής m να τείνει επίσης στο μηδέν. Σχετικά με τη σταθερά ελατηρίου υπενθυμίζουμε ότι, αν συνδέσουμε σε σειρά δύο ελατήρια μήκους a και σταθεράς K, προκύπτει ελατήριο μήκους $2a$ και σταθεράς $\frac{K}{2}$. Δηλαδή το γινόμενο Ka παραμένει αναλλοίωτο κατά τη διαδικασία της μετάβασης σε μηδενική απόσταση. Απαιτούμε, λοιπόν, αυτήν την ιδιότητα, δηλαδή το $s = Ka$ να είναι σταθερό, καθώς $a \to 0$, δηλαδή το K πρέπει να τείνει αντίστοιχα στο άπειρο. Συνοπτικά, το συνεχές όριο εκφράζεται με τις σχέσεις:

$$N \to \infty,\ a \to 0,\ K \to \infty,\ m \to 0, \tag{3.45}$$

ενώ οι ποσότητες που διατηρούνται σταθερές κατά τη διαδικασία του ορίου είναι οι εξής:

$$Na = L, Ka = s,\ \frac{m}{a} = \mu. \tag{3.46}$$

Στη συνέχεια πρέπει να διευκρινίσουμε ότι ο συνδυασμός la θα αντικατασταθεί με τη συνεχή μεταβλητή x και οι βαθμοί ελευθερίας $q_l(t)$ θα αντικατασταθούν με τις συναρτήσεις $q_l(t) \equiv q(la, t) = q(x, t)$. Η κλασική εξίσωση κίνησης (3.10),δηλαδή η

$$\frac{\partial^2 q_l}{\partial t^2} = \frac{K}{m}(q_{l+1} - 2q_l + q_{l-1}),$$

μπορεί να προσεγγιστεί σ' αυτό το όριο ως εξής:

$$q_{l+1} = q((l+1)a, t) = q(x+a, t) \simeq q(x,t) + a\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2},$$

$$q_{l+1} = q((l-1)a, t) = q(x-a, t) \simeq q(x,t) - a\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2},$$

$$2q_l = q(la, t) = 2q(x,t).$$

Από τις τελευταίες εξισώσεις προκύπτει ότι

$$q_{l+1} - 2q_l + q_{l-1} \simeq a^2\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2},$$

οπότε η κλασική εξίσωση κίνησης προσεγγίζεται από την

$$\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial t^2} = \frac{Ka^2}{m}\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2}.$$

Στη συνέχεια, προκειμένου να πάρουμε το όριο, κάνουμε τις αντικαταστάσεις $K = \frac{s}{a},\ m = \mu a$:

$$\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\frac{s}{a}a^2}{\mu a}\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial t^2} = \frac{s}{\mu}\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2}. \tag{3.47}$$

Δηλαδή καταλήξαμε στην κλασική κυματική εξίσωση. Εξ άλλου η λαγκρανζιανή (3.26), δηλαδή η

$$L = \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{q_l}^2 - \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{2} K (q_l - q_{l+1})^2,$$

θα προσεγγιστεί διαδοχικά από τις εκφράσεις:

$$L = \sum_x \frac{1}{2}(\mu a) \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} \right)^2 - \sum_x \frac{1}{2} \frac{s}{a} (q(x,t) - q(x+a,t))^2 \simeq$$

$$\simeq a \left[\sum_x \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} \right)^2 - \sum_x \frac{1}{2} \frac{s}{a^2} \left(-a \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \right)^2 \right] =$$

$$= a \left[\sum_x \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} \right)^2 - \sum_x \frac{1}{2} s \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \right)^2 \right].$$

(Έχουμε χρησιμοποιήσει την προσέγγιση $q(x,t) - q(x+a,t) \simeq -a\frac{\partial q}{\partial x}$). Το άθροισμα στα x που εμφανίζεται στα αθροίσματα υπονοεί άθροιση στα διακριτά σημεία $x = la$. Όταν πάρουμε το όριο, το a που πολλαπλασιάζει την αγκύλη θα παίξει το ρόλο του διαφορικού dx και η όλη παράσταση θα μετατραπεί σε ολοκλήρωμα:

$$L = \int_0^L dx \left[\frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} s \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \right)^2 \right].$$

Όπως συνηθίζεται για συνεχή συστήματα, συμβολίζουμε την παράσταση μέσα στην αγκύλη με $\mathcal{L}$ και να την ονομάζουμε λαγκρανζιανή πυκνότητα:

$$\mathcal{L} = \left[\frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} s \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \right)^2 \right], \; L = \int_0^L dx \mathcal{L}. \tag{3.48}$$

Αν τροποποιήσουμε την τροχιά κατά δq, η δράση θα αλλάξει κατά:

$$\delta S = \int dt \int_0^L dx \delta \mathcal{L}(q, q_x, q_t) = \int dt \int_0^L dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_x} \delta q_x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} \delta q_t \right] =$$

$$= \int dt \int_0^L dx \delta \mathcal{L} = \int dt \int_0^L dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_x} \partial_x(\delta q) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} \partial_t(\delta q) \right].$$

Με παραγοντικές ολοκληρώσεις, αφού οι επιφανειακοί όροι δεν θα συνεισφέρουν, θα καταλήξουμε στη σχέση:

$$\delta S = \int dt \int_0^L dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \partial_x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_x} \partial_x \right) - \partial_t \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} \partial_t \right) \right] \delta q$$

και η συνθήκη $\delta S = 0$ συνεπάγεται τις εξισώσεις Euler-Lagrange για συνεχή συστήματα:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_x} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}. \tag{3.49}$$

Η λαγκρανζιανή πυκνότητα πρέπει να δίνει την εξίσωση κίνησης, που είδαμε ότι πρέπει να είναι η κυματική εξίσωση (3.47). Ας το επαληθεύσουμε:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_x} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} (-s q_x) + \frac{\partial}{\partial t} (\mu q_t) = 0 \Rightarrow s q_{xx} = \mu q_{tt},$$

όπως θα έπρεπε.

Η συζυγής ορμή είναι

$$\pi \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_t} = \mu q_t = \frac{m q_t}{a} = \frac{p}{a}.$$

και ορίζεται μια χαμιλτονιανή πυκνότητα

$$\mathcal{H} \equiv \pi q_t - \mathcal{L} = \frac{1}{2\mu} \pi^2 + \frac{s}{2} q_x^2. \tag{3.50}$$

Παρατηρούμε ότι το π είναι το όριο, όχι ακριβώς της ορμής p_l, αλλά της παράστασης $\frac{p_l}{a}$ (βλέπε και την επόμενη παράγραφο).

3.3.2 Κβαντική αλυσίδα

Η κβάντωση του συστήματος που μόλις περιγράψαμε μπορεί να γίνει επιβάλλοντας τις κατάλληλες σχέσεις μετάθεσης στις μεταβλητές θέσης και ορμής. Κατ΄ αρχήν παρατηρούμε ότι η σχέση (3.38):

$$q_l = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2 N m \omega_k}} [b_k + b_{-k}^\dagger] e^{ikla},$$

που περιγράφει τη θέση της (κβαντισμένης) διακριτής αλυσίδας συναρτήσει των b_k και $b^\dagger_{-k}$, μπορεί να μεταγραφεί χωρίς προβλήματα στο όριο $a \to 0$, δηλαδή έχει πεπερασμένο συνεχές όριο. Αρκεί να γίνουν οι συνηθισμένες αντικαταστάσεις: $la = x, N = \frac{L}{a}, m = \mu a$. Το αποτέλεσμα, μετά την άλγεβρα, θα είναι:

$$q(x) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2L\mu\omega_k}}[b_k + b^\dagger_{-k}]e^{ikx},\ k = n\frac{2\pi}{L}. \tag{3.51}$$

Οι τιμές που παίρνει ο ακέραιος n εξακολουθούν να δίνονται από τις σχέσεις (3.14). Αφού η q_l έχει πεπερασμένο συνεχές όριο, το ίδιο θα συμβαίνει και με τη χρονική του παράγωγο $\dot{q}_l$. Η συζυγής ορμή για τη διακριτή αλυσίδα δίδεται από τη σχέση $p_l = m\dot{q}_l$, η οποία, όμως, έχει τετριμένο συνεχές όριο: συγκεκριμένα, το όριο είναι μηδέν, λόγω του μηδενισμού της μάζας m καθώς $a \to 0$. Για να πάρουμε κάποια ποσότητα που να σχετίζεται με την ορμή και να έχει μη τετριμένο όριο στο συνεχές, θεωρούμε την ποσότητα

$$\frac{p_l}{a} = \frac{m}{a}\dot{q}_l = \mu\dot{q}_l = -i\frac{1}{a}\sum_k \sqrt{\frac{\hbar m\omega_k}{2N}}[b_k - b^\dagger_{-k}]e^{ikla}.$$

Το όριο είναι η ποσότητα:

$$\pi(x) = -i\sum_k \sqrt{\frac{\hbar\mu\omega_k}{2L}}[b_k - b^\dagger_{-k}]e^{ikx},\ k = n\frac{2\pi}{L}. \tag{3.52}$$

Η αντιστροφή των σχέσεων αυτών είναι απλή. Η μόνη διαφορά από τη διακριτή περίπτωση είναι ότι η σχέση ορθογωνιότητας τροποποιείται ελαφρά και αντί της (3.21):

$$\sum_{l=1}^{N} e^{i(k-k')la} = N\delta_{kk'}$$

πρέπει να χρησιμοποιηθεί η

$$\int_0^L dx e^{i(k-k')x} = L\delta_{kk'}.$$

Οι πράξεις θα δώσουν:

$$b_k = \int_0^L dx \left(\sqrt{\frac{\mu\omega_k}{2\hbar L}}q(x) + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\mu L\omega_k}}\pi(x)\right)e^{-ikx}, \tag{3.53}$$

$$b^\dagger_k = \int_0^L dx \left(\sqrt{\frac{\mu\omega_k}{2\hbar L}}q(x) - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\mu L\omega_k}}\pi(x)\right)e^{ikx}. \tag{3.54}$$

Οι σχέσεις μετάθεσης (3.37):

$$[b_{k_1}, b^{\dagger}_{k_2}] = 0,\ [b^{\dagger}_{k_1}, b^{\dagger}_{k_2}] = 0,\ [b_{k_1}, b^{\dagger}_{k_2}] = \delta_{k_1 k_2}$$

συνεπάγονται τις σχέσεις

$$[q(x), q(x')] = 0,\ [p(x), p(x')] = 0,\ [q(x), p(x')] = i\hbar\delta(x - x'). \tag{3.55}$$

Θα μπορούσε κανείς να ξεκινήσει επιβάλλοντας τις σχέσεις (3.55), οπότε με την αντίστροφη πορεία θα προέκυπταν οι σχέσεις μετάθεσης για τα b_k και τα $b^{\dagger}_k$. Οι πράξεις που κάναμε στη διακριτή κβαντική αλυσίδα μεταγράφονται χωρίς σοβαρές μετατροπές στην συνεχή κβαντική αλυσίδα. Καταγράφουμε κάποια ενδιαφέροντα αποτελέσματα: Η χαμιλτονιανή εκφράζεται και στην προκειμένη περίπτωση ως:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left(b^{\dagger}_k b_k + \frac{1}{2}. \right).$$

Οι ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής θα είναι και εδώ οι

$$|\Phi_n >= \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (b^{\dagger}_k)^{n_k} |0 >, b_k|0 >= 0,$$

ενώ παρόμοια μεταγράφονται και οι σύμφωνες καταστάσεις. Για παράδειγμα μπορεί κανείς να αποδείξει τη σχέση

$$< \Phi_{k_0}|q(x)|\Phi_{k_0} >= 2\gamma\sqrt{\frac{\hbar}{2L\mu\omega_{k_0}}} \cos(k_0 x - \omega_{k_0} t),$$

όπου είναι εμφανές ότι προκύπτει κύμα που οδεύει προς τα δεξιά.

Παρατηρούμε ότι, αν και πήγαμε στο συνεχές όριο, η μεταβλητή k εξακολουθεί να παίρνει διακριτές τιμές. Αυτό οφείλεται στο ότι έχουμε περιοριστεί σε χορδή πεπερασμένου μήκους L. Αν θεωρήσουμε το όριο $L \to \infty$, η μεταβλητή k θα πάρει συνεχείς τιμές.

3.4 Κβάντωση της εξίσωσης Schrödinger

Θεωρούμε την εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V, \tag{3.56}$$

η οποία έχει τις ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_\mu(x,t) = \phi_\mu(x)\exp\left[-\frac{iE_\mu t}{\hbar}\right], \hat{H}\phi_\mu(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_\mu(x) + V\phi_\mu(x) = E_\mu\phi_\mu(x),$$

και η γενική λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης θα δίνεται από τις σχέσεις:

$$\psi(x) = \sum_\mu b_\mu\phi_\mu(x),\ \psi^*(x) = \sum_\mu b_\mu^*\phi_\mu^*(x),$$

όπου η χρονική εξάρτηση έχει ενσωματωθεί στα b_μ και b_μ^*. Φυσικά η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ περιγράφει την κβαντική κατάσταση του συστήματος στο οποίο αναφερόμαστε, αλλά στην προκειμένη περίπτωση θα το θεωρήσουμε κατ΄ αρχήν ως ένα κλασικό πεδίο, θα το κβαντώσουμε στη συνέχεια και θα διερευνήσουμε τις συνέπειες αυτής της λεγόμενης **δεύτερης κβάντωσης**. Θα δούμε ότι ο νέος φορμαλισμός θα αναδείξει πιο ανάγλυφα τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά και ότι προσφέρεται για την περιγραφή καταστάσεων με πολλά σωματίδια. Οδηγός μας στη διαδικασία κβάντωσης θα είναι η κβάντωση της συνεχούς χορδής που έγινε στις προηγούμενες παραγράφους.

Κατ΄ αρχήν είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η λαγκρανζιανή πυκνότητα

$$\mathcal{L} = \psi^*\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - V\psi\right) \tag{3.57}$$

αναπαράγει την εξίσωση (3.56). Πράγματι:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_t^*}\right) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^*} \Rightarrow 0 = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - V\psi.$$

Η συζυγής ορμή είναι

$$\pi \equiv \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_t} = i\hbar\psi^* \tag{3.58}$$

και η χαμιλτονιανή πυκνότητα:

$$\mathcal{H} = \pi\psi_t - \mathcal{L} = \psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi = \psi^*\hat{H}\psi. \tag{3.59}$$

Η χαμιλτονιανή είναι:

$$H \equiv \int d^3x\mathcal{H} = \int d^3x\psi^*\hat{H}\psi = \int d^3x\sum_\mu b_\mu^*\phi_\mu^*(x)\hat{H}\sum_\nu b_\nu\phi_\nu(x) =$$

$$= \sum_{\mu,\nu} b_\mu^* b_\nu \int d^3x \phi_\mu^* \phi_\nu = \sum_{\mu,\nu} E_\nu b_\mu^* b_\nu \delta_{\mu\nu} = \sum_\mu E_\mu b_\mu^* b_\mu. \tag{3.60}$$

Η κβάντωση συνίσταται, όπως και στη συνεχή χορδή, στην επιβολή των κανόνων μετάθεσης:

$$[\Psi(x), \Psi(x')] = 0,\ [\Pi(x), \Pi(x')] = 0,\ [\Psi(x), \Pi(x')] = i\hbar\delta(x - x'). \tag{3.61}$$

Η εξίσωση

$$\Pi(x) = i\hbar\Psi^\dagger(x)$$

επιτρέπει την επαναδιατύπωση των σχέσεων μετάθεσης με τη μορφή:

$$[\Psi(x), \Psi(x')] = 0,\ [\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(x')] = 0,\ [\Psi(x), \Psi^\dagger(x')] = \delta(x - x'). \tag{3.62}$$

Χρησιμοποιώντας τα αναπτύγματα

$$\Psi(x) = \sum_\mu b_\mu \phi_\mu(x),\ \Psi^\dagger(x) = \sum_\mu b_\mu^\dagger \phi_\mu^*(x) \tag{3.63}$$

καταλήγουμε στις σχέσεις μετάθεσης των b_μ και $b_\mu^\dagger$:

$$[b_\mu, b_\nu] = 0, [b_\mu^\dagger, b_\nu^\dagger] = 0,\ [b_\mu, b_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}. \tag{3.64}$$

Η χαμιλτονιανή είναι ο τελεστής

$$H = \int d^3x \Psi^\dagger \hat{H} \Psi$$

και αναπτύσσοντας τα Ψ και $\Psi^\dagger$ καταλήγουμε να την εκφράσουμε ως:

$$H = \sum_\mu E_\mu b_\mu^\dagger b_\mu. \tag{3.65}$$

Παρατηρούμε τη ρητή εμφάνιση της σωματιδιακής εικόνας: οι ενεργειακές στάθμες E_μ είναι δυνατόν να καταλαμβάνονται από έναν αριθμό κβάντων ή σωματιδίων, που καταμετρούνται από τον τελεστή αρίθμησης $b_\mu^\dagger b_\mu$. Οι ιδιοσυναρτήσεις της χαμιλτονιανής ($H|\Phi >= E|\Phi >$) μπορούν να γραφτούν με τη συνηθισμένη μορφή:

$$|\Phi >= \prod_\mu \frac{1}{\sqrt{n_\mu!}} (b_\mu^\dagger)^{n_\mu} |0 >,\ b_\mu|0 >= 0. \tag{3.66}$$

Ένα ενδιαφέρον ερώτημα είναι ποιό είναι το φυσικό νόημα των τελεστών $\Psi^\dagger(x_0) = \sum_\mu b_\mu^\dagger \phi_\mu^*(x_0)$. Η απάντηση είναι ότι δημιουργούν ένα σωματίδιο στη θέση x_0. Η απόδειξη είναι απλή:

$$< x|\Psi^\dagger(x_0)|0 >= \sum_\mu < x|b_\mu^\dagger|0 > \phi_\mu^*(x_0) = \sum_\mu \phi_\mu(x)\phi_\mu^*(x_0) = \delta(x - x_0),$$

δηλαδή η κυματοσυνάρτηση της κατάστασης $\Psi^\dagger(x_0)|0>$ είναι εντελώς εντοπισμένη στη θέση x_0. Η τελευταία ισότητα $\sum_\mu \phi_\mu(x)\phi^*_\mu(x_0) = \delta(x-x_0)$ δεν είναι παρά η σχέση πληρότητας του συνόλου ιδιοσυναρτήσεων $\phi_\mu(x)$.

3.4.1 Εφαρμογές

1: Τελεστής πυκνότητας Αναφερόμενοι στη γνωστή έκφραση $\rho = \psi^*\psi$ της συνηθισμένης Κβαντικής Μηχανικής για την πυκνότητα πιθανότητας ορίζουμε τον τελεστή πυκνότητας $\hat{\rho} \equiv \Psi^\dagger\Psi$ και εξετάζουμε την αναμενόμενη τιμή του σε μια κατάσταση $|\Phi>$: $\bar{\rho} \equiv <\Phi|\Psi^\dagger\Psi|\Phi>$. Θεωρούμε ότι το $|\Phi>$ είναι η κατάσταση ενός σωματιδίου $|\Phi>= b^\dagger_\lambda|0> \Longleftrightarrow <\Phi| = <0|b_\lambda$, όπου το λ αντιστοιχεί στην ενεργειακή στάθμη E_λ. Θα επικαλεστούμε τα αναπτύγματα (3.63) και θα καταλήξουμε στην ισότητα:

$$\bar{\rho} \equiv <0|b_\lambda\Psi^\dagger\Psi b^\dagger_\lambda|0>= \sum_{\mu,\nu} <0|b_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b^\dagger_\lambda|0> \phi^*_\mu(x)\phi_\nu(x).$$

Μένει να υπολογιστεί η αναμενόμενη τιμή $<0|b_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b^\dagger_\lambda|0>$.

Ένα πολύ σημαντικό σχόλιο έχει να κάνει με τους υπολογισμούς αναμενομένων τιμών. Έστω ότι έχει κανείς ένα γινόμενο τελεστών δημιουργίας και καταστροφής, το $b_{m_1}b^\dagger_{n_1}b^\dagger_{n_2}b_{m_2}b^\dagger_{n_3}$. Όταν χρειαστεί να υπολογιστούν αναμενόμενες τιμές στο κενό, είναι πολύ χρήσιμο να προσπαθήσει κανείς, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις μετάθεσης, να μεταφέρει όλους τους τελεστές δημιουργίας στα αριστερά οποιουδήποτε τελεστή καταστροφής. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, μια παραδεκτή διάταξη θα ήταν η $b^\dagger_{n_1}b^\dagger_{n_2}b^\dagger_{n_3}b_{m_1}b_{m_2}$. Μια τέτοιου είδους διάταξη των των τελεστών λέγεται **φυσική διάταξη** (normal ordering).

Επί του προκειμένου θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις $b_\rho b^\dagger_\sigma = \delta_{\rho\sigma} + b^\dagger_\sigma b_\rho$, ώστε να πετύχουμε τη φυσική διάταξη της παράστασης $b_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b^\dagger_\lambda$:

$$(b_\lambda b^\dagger_\mu)(b_\nu b^\dagger_\lambda) = (\delta_{\lambda\mu} + b^\dagger_\mu b_\lambda)(\delta_{\lambda\nu} + b^\dagger_\lambda b_\nu) =$$

$$= \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu} + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\lambda b_\nu + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\mu b_\lambda + b^\dagger_\mu b_\lambda b^\dagger_\lambda b_\nu =$$

$$= \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu} + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\lambda b_\nu + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\mu b_\lambda + b^\dagger_\mu(1 + b^\dagger_\lambda b_\lambda)b_\nu =$$

$$= \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu} + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\lambda b_\nu + \delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\mu b_\lambda + b^\dagger_\mu b_\nu + b^\dagger_\mu b^\dagger_\lambda b_\lambda b_\nu.$$

Η χρησιμότητα της φυσικής διάταξης θα γίνει προφανής τώρα αμέσως. Έχει να κάνει με τις ιδιότητες $b_\rho|0>= 0, <0|b^\dagger_\rho = 0$. Βάσει των ιδιοτήτων αυτών, το αποτέλεσμα για την αναμενόμενη τιμή είναι:

$$<0|b_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b^\dagger_\lambda|0>=<0|\delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu}+\delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\lambda b_\nu+\delta_{\lambda\mu}b^\dagger_\mu b_\lambda+b^\dagger_\mu b_\nu+b^\dagger_\mu b^\dagger_\lambda b_\lambda b_\nu|0>= \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu}, \quad (3.67)$$

όπου, όπως φαίνεται εύκολα, οι αναμενόμενες τιμές γινομένων σε φυσική διάταξη μηδενίζονται. Αντικαθιστώντας βλέπουμε ότι η αναμενόμενη τιμή του τελεστή πυκνότητας ισούται με:

$$\bar{\rho} = \phi^*_\lambda(x)\phi_\lambda(x),$$

το οποίο είναι το αποτέλεσμα που θα βρίσκαμε στην στοιχειώδη κβαντική μηχανική. Παρ΄ όλ΄ αυτά στη νέα γλώσσα με έναν τελεστή πυκνότητας μπορούμε να περιγράψουμε διάφορες φυσικές καταστάσεις. Για παράδειγμα, αν έχουμε σύστημα δύο σωματιδίων με καθορισμένες ενέργειες

$$|\Phi >= b^\dagger_{\lambda_1} b^\dagger_{\lambda_2}|0>, \ \lambda_1 \neq \lambda_2,$$

ανάλογα βήματα θα μας φέρουν στην έκφραση

$$\phi^*_{\lambda_1}\phi_{\lambda_1} + \phi^*_{\lambda_2}\phi_{\lambda_2}.$$

2: Τελεστής θέσης Και πάλιν εμπνεόμενοι από την στοιχειώδη κβαντική μηχανική ορίζουμε τον τελεστή θέσης

$$\hat{x} \equiv \int dx \Psi^\dagger x \Psi,$$

όπου τα $\Psi^\dagger$ καιΨ είναι τελεστές. Το ενδιαφέρον φυσικό μέγεθος είναι η αναμενόμενη τιμή αυτού του τελεστή σε μιά κατάσταση $|\Phi>$, όπως και πριν:

$$\bar{x} \equiv \int dx < \Phi|\Psi^\dagger x \Psi|\Phi > .$$

Επιλέγουμε την ίδια κατάσταση όπως στο προηγούμενο παράδειγμα, ώστε να εκμεταλλευτούμε τα έτοιμα αποτελέσματα: $|\Phi >= b^\dagger_\lambda|0> \Longleftrightarrow < \Phi| =< 0|b_\lambda$. Η αναμενόμενη τιμή είναι, λοιπόν:

$$\bar{x} = \sum_{\mu,\nu} < 0|b_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b^\dagger_\lambda|0> \int dx \phi^*_\mu(x) x \phi_\nu(x) =$$

$$= \sum_{\mu,\nu} \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu} \int dx \phi^*_\mu(x) x \phi_\nu(x) = \int dx \phi^*_\lambda(x) x \phi_\lambda(x),$$

δηλαδή αυτό που είναι γνωστό από τη στοιχειώδη κβαντική μηχανική του ενός σωματιδίου.

3: Εξωτερικό πεδίο Η δυναμική ενέργεια λόγω αλληλεπίδρασης των σωματιδίων με εξωτερικό πεδίο θα γραφόταν στην κβαντική μηχανική ως:

$$\int dx \psi^* V \psi.$$

Θεωρούμε τον αντίστοιχο τελεστή:

$$\hat{V} = \int dx \Psi^* V \Psi$$

και αναζητούμε την αναμενόμενη τιμή του στην ίδια κατάσταση $|\Phi >= b_\lambda^\dagger |0>$:

$$\bar{V} = \int dx < \Phi|\Psi^\dagger V(x)\Psi|\Phi >= \sum_{\mu,\nu} < 0|b_\lambda b_\mu^\dagger b_\nu b_\lambda^\dagger|0> \int dx \phi_\mu^*(x)V(x)\phi_\nu(x) =$$

$$= \sum_{\mu,\nu} \delta_{\lambda\mu}\delta_{\lambda\nu} \int dx \phi_\mu^*(x)V(x)\phi_\nu(x) = \int dx \phi_\lambda^*(x)V(x)\phi_\lambda(x),$$

σύμφωνα με τα αναμενόμενα.

4: Δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης Η δυναμική ενέργεια που δεν οφείλεται στην επενέργεια κάποιου εξωτερικού πεδίου, αλλά στην αλληλεπίδραση των σωματιδίων μεταξύ τους είναι σχετικά περίπλοκη. Στην κβαντική μηχανική θα θεωρούσαμε δύο στοιχειώδεις όγκους d^3r και d^3r' με αντίστοιχες πυκνότητες φορτίου $q\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3r$ και $q\psi^*(\vec{r'})\psi(\vec{r'})d^3r'$, οπότε η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης θα είναι:

$$\bar{V} = \frac{1}{2}\int d^3r d^3r' q\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\frac{k}{|\vec{r}-\vec{r'}|} q\psi^*(\vec{r'})\psi(\vec{r'}),$$

όπου το k εξαρτάται από τις μονάδες (π.χ. $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ στο σύστημα SI). Θα έλεγε κανείς ότι αρκεί να αντικατασταθούν οι κυματοσυναρτήσεις ψ^* και ψ με τους αντίστοιχους τελεστές $\Psi^\dagger$ και Ψ. Κατ΄ αρχήν είναι σωστή ιδέα, αλλά τίθεται αμέσως το πρόβλημα της ακριβούς διάταξης μέσα στο γινόμενο, αφού οι τελεστές δεν μετατίθενται πάντα μεταξύ τους. Επί του προκειμένου μας καθοδηγεί η απλή παρατήρηση ότι η αλληλεπίδραση Coulomb πρέπει να μηδενίζεται όταν θεωρήσουμε την αναμενόμενη τιμή σε καταστάσεις του ενός μόνο σωματιδίου. Επιλέγουμε τον τελεστή:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^3r d^3r' \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi^\dagger(\vec{r'})\frac{kq^2}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\Psi(\vec{r'})\Psi(\vec{r}).$$

Αν υπολογίσουμε την αναμενόμενη τιμή του στην κατάσταση

$$|\Phi_1 >= b_\lambda^\dagger|0> \Longleftrightarrow < \Phi_1| =< 0|b_\lambda$$

θα διαπιστώσουμε ότι πράγματι μηδενίζεται. Αν προχωρήσουμε στην κατάσταση

$$|\Phi_2 >= b_{\lambda_1}^\dagger b_{\lambda_2}^\dagger|0> \Longleftrightarrow < \Phi_2| =< 0|b_{\lambda_2}b_{\lambda_1},\ \lambda_1 \neq \lambda_2,$$

θα καταλήξουμε στην έκφραση:

$$\hat{V} = \int d^3r d^3r' \frac{kq^2}{|\vec{r} - \vec{r'}|}[\phi^*_{\lambda_1}(\vec{r})\phi_{\lambda_1}(\vec{r})\phi^*_{\lambda_2}(\vec{r'})\phi_{\lambda_2}(\vec{r'}) + \phi^*_{\lambda_1}(\vec{r})\phi_{\lambda_2}(\vec{r})\phi^*_{\lambda_2}(\vec{r'})\phi_{\lambda_1}(\vec{r'})].$$

Παρατηρούμε ότι, εκτός από το ευθύ ολοκλήρωμα, εμφανίζεται και το λεγόμενο ολοκλήρωμα ανταλλαγής, που οφείλεται στο γεγονός ότι έχουμε ταυτοτικά σωματίδια.

3.5 Δυναμικές μεταβλητές

Θεωρούμε κατ΄ αρχήν μια προσθετική ποσότητα που αναφέρεται σ΄ ένα και μόνο σωματίδιο, όπως η κινητική ενέργεια. Η κινητική ενέργεια, λοιπόν, ενός συνόλου σωματιδίων από τα οποία N_k βρίσκονται στην κβαντική κατάσταση k που έχει ενέργεια T'_k είναι, προφανώς, $\sum_k N_k T'_k$. Η μεταγραφή του τελεστή της κινητικής ενέργειας στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης είναι απλή: αρκεί να αντικαταστήσει κανείς τον αριθμό N_k με τον τελεστή $a^\dagger_k a_k$ για να καταλήξει σε μια πρώτη έκφραση για την κινητική ενέργεια:

$$\hat{T} = \sum T'_k a^\dagger_k a_k.$$

Τα T'_k είναι απλά αριθμοί. Όμως δεν έχουμε βρει ακόμη την πιο γενική έκφραση για την κινητική ενέργεια. Ο λόγος είναι ότι υποθέσαμε ότι οι καταστάσεις k έχουν συγκεκριμένη κινητική ενέργεια, πράγμα που δεν είναι απαραίτητο. Αν αλλάξουμε τις καταστάσεις από τις k που περιγράφονται από τις $\phi_k(\mathbf{r})$ σε κάποιες άλλες, οι τελεστές δημιουργίας $a^\dagger_k$ και καταστροφής a_k θα αλλάξουν σε $b^\dagger_l$ και b_l, που θα συνδέονται με τους παλιούς με μετασχηματισμό ομοιότητας:

$$a^\dagger_k = \sum_m c^*_{km} b^\dagger_m, \;\; a_k = \sum_n c_{kn} b_n. \tag{3.68}$$

Συναρτήσει των νέων τελεστών δημιουργίας και καταστροφής η κινητική ενέργεια θα γράφεται:

$$\hat{T} = \sum_k T'_k \sum_{m,n} c_{kn} c^*_{km} b^\dagger_m b_n = \sum_{m,n} \sum_k T'_k c_{kn} c^*_{km} b^\dagger_m b_n,$$

δηλαδή

$$\hat{T} = \sum_{m,n} T^m_n b^\dagger_m b_n, \;\; T^m_n \equiv \sum_k T'_k c_{kn} c^*_{km}. \tag{3.69}$$

Τα T^m_n έχουν γενικά μη μηδενικά στοιχεία για οποιεσδήποτε τιμές των m και n.

Ας προχωρήσουμε τώρα στην περίπτωση της δυναμικής ενέργειας, που μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα σε ζευγάρια σωματιδίων. Ας θεωρήσουμε ότι N_k σωματίδια βρίσκονται στην κατάσταση k και αλληλεπιδρούν με N_l σωματίδια που βρίσκονται στην κατάσταση l. Υποθέτουμε προς το παρόν ότι οι καταστάσεις k και l είναι διαφορετικές. Η δυναμική ενέργεια κάθε ζευγαριού είναι (έστω) V'_{kl} και υπάρχουν $\frac{N_k N_l}{2}$ ζευγάρια. Συνεπώς αυτό το κομμάτι της δυναμικής ενέργειας ισούται με $\frac{1}{2}\sum_{k\neq l} N_k N_l V'_{kl} = \frac{1}{2}\sum_{k,l}(1-\delta_{kl})N_k N_l V'_{kl}$. (Διαιρούμε με το 2 γιατί κάθε ζευγάρι σωματιδίων μετριέται δύο φορές). Για την περίπτωση $k=l$ η δυναμική ενέργεια κάθε ζευγαριού είναι V'_{kk} και υπάρχουν $\frac{N_k(N_k-1)}{2}$ ζευγάρια, με αντίστοιχη συνεισφορά $\sum_k \frac{N_k(N_k-1)}{2}V'_{kk} = \sum_{k,l}\delta_{kl}\frac{N_k(N_l-1)}{2}V'_{kl}$. Συμπερασματικά η δυναμική ενέργεια γράφεται:

$$\frac{1}{2}\sum_{k,l}(1-\delta_{kl})N_k N_l V'_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{k}\delta_{kl}N_k(N_l-1)V'_{kl} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{k,l}[N_k N_l - \delta_{kl}N_k]V'_{kl} = \frac{1}{2}\sum_{k,l}P_{kl}V'_{kl},\ \ P_{kl}\equiv N_k N_l - \delta_{kl}N_k.$$

Από αυτή την έκφραση η μεταγραφή του τελεστή της δυναμικής ενέργειας στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης είναι σχετικά απλή: αρκεί να αντικαταστήσουμε τους αριθμούς N_k και N_l με τους αντίστοιχους τελεστές αρίθμησης $a_k^\dagger a_k$ και $a_l^\dagger a_l$. Ο αριθμός P_{kl} θα μετατραπεί στον τελεστή κατανομής ζευγαριών $\hat{P}_{kl}$, ο οποίος, μάλιστα παίρνει μια πολύ απλή μορφή:

$$\hat{P}_{kl} \equiv a_k^\dagger(a_k a_l^\dagger)a_l - \delta_{kl}a_k^\dagger a_k = a_k^\dagger(\delta_{kl}+a_l^\dagger a_k)a_l - \delta_{kl}a_k^\dagger a_k = a_k^\dagger a_l^\dagger a_k a_l = a_k^\dagger a_l^\dagger a_l a_k.$$

(Το τελευταίο βήμα δεν ήταν απαραίτητο για την μποζονική περίπτωση, αλλά προτιμήσαμε να γράψουμε το αποτέλεσμα έτσι μόνο και μόνο για να πάρουμε την ίδια έκφραση με αυτήν που προκύπτει στην φερμιονική περίπτωση). Δηλαδή η δυναμική ενέργεια γράφεται με τη μορφή

$$\frac{1}{2}\sum_{k,l}V'_{kl}a_k^\dagger a_l^\dagger a_l a_k.$$

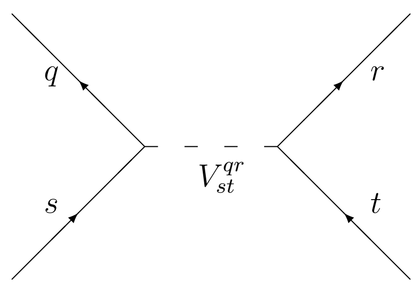
Θα προτιμήσουμε πάλι να δώσουμε τη γενικότερη έκφραση που θα προκύψει αν αντικαταστήσουμε τους τελεστές $a_k^\dagger, a_l^\dagger, a_l, a_k$ συναρτήσει των $b_q^\dagger, b_r^\dagger, b_s, b_t$ με βάση τις εξισώσεις (3.68). Το αποτέλεσμα είναι:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{q,r,s,t}V_{st}^{qr}b_q^\dagger b_r^\dagger b_s b_t, \tag{3.70}$$

όπου

$$V_{st}^{qr} = \sum_{k,l} c_{qk}^{*} c_{rl}^{*} c_{sl} c_{tk} V_{kl}^{\prime}.$$

Υπάρχει ένας πολύ παραστατικός τρόπος να παρουσιάσει κανείς γραφικά την έκφραση (3.70). Εκείνο που φαίνεται να κάνει ο τελεστής της δυναμικής ενέργειας είναι να παίρνει τα δύο σωματίδια που βρίσκονται στις καταστάσεις s και t, να τα εξαφανίζει μέσα από την αλληλεπίδραση V_{st}^{qr} και να γεννά στη θέση τους δύο "νέα" σωματίδια στις καταστάσεις q και r. Μπορούμε, λοιπόν, να παραστήσουμε τα δύο σωματίδια s και t ως "εισερχόμενα" στη διαδικασία, όπως φαίνεται στο σχήμα, και τα δύο άλλα σωματίδια q και r ως "εξερχόμενα". Το διάγραμμα που δείχνουμε εδώ είναι το πρώτο δείγμα των περίφημων διαγραμμάτων του Feynman. Ασφαλώς είναι πάρα πολύ απλοποιημένο, δείχνει όμως κάποιες πλευρές της αναπαράστασης περίπλοκων παραστάσεων με σχετικά εύληπτα διαγράμματα.



3.6 Κβάντωση της εξίσωσης Schrödinger με στατιστική Fermi

Θεωρούμε και πάλι την εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}\psi_s = i\hbar \frac{\partial \psi_s}{\partial t}, \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V, \tag{3.71}$$

η οποία έχει τις ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_{\mu s}(x,t) = \phi_{\mu s}(x) \exp\left[-\frac{iE_\mu t}{\hbar}\right], \hat{H}\phi_{\mu s}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \phi_{\mu s}(x) + V\phi_{\mu s}(x) = E_\mu \phi_{\mu s}(x),$$

και η γενική λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης θα δίνεται από τις σχέσεις:

$$\psi_{\mu s}(x) = \sum_{\mu,s} a_{\mu s}\phi_{\mu}(x), \;\; \psi_{\mu s}^{*}(x) = \sum_{\mu,s} a_{\mu s}^{*}\phi_{\mu s}^{*}(x),$$

όπου η χρονική εξάρτηση έχει ενσωματωθεί στα $a_{\mu s}$ και $a^*_{\mu s}$. Θεωρούμε το $\Psi_s(x,t)$ ως ένα πεδίο προς κβάντωση. Η διαφορά από τη διαδικασία που περιγράφεται στην παράγραφο 3.4 είναι ότι θέλουμε οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής να περιγράφουν σωματίδια που υπακούουν τη στατιστική Fermi-Dirac. Ειδικότερα αυτό σημαίνει ότι δεν είναι δυνατόν δύο τέτοια σωματίδια να έχουν τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς (αρχή του Pauli), οπότε αν εφαρμόσουμε στο κενό $|0>$ δύο φορές τον τελεστή δημιουργίας $\Psi_s^\dagger(x)$ ενός σωματιδίου στο σημείο x με σπιν s πρέπει να πάρουμε μηδέν: $(\Psi_s^\dagger(x))^2|0>=0$. Αυτή η σχέση μπορεί να επιβληθεί, αν απαιτήσουμε, αντί για τη σχέση $[\Psi_s^\dagger(x),\Psi_{s'}^\dagger(x')]=0$, τη σχέση $\{\Psi_s^\dagger(x),\Psi_{s'}^\dagger(x')\}\equiv\Psi_s^\dagger(x)\Psi_{s'}^\dagger(x')+\Psi_{s'}^\dagger(x')\Psi_s^\dagger(x)=0$. Εδώ εμφανίζεται το αντικείμενο $\{A,B\}\equiv AB+BA$, που ονομάζουμε αντι-μεταθέτη (με την παύλα ενδιάμεσα, για να το ξεχωρίζουμε από τον μεταθέτη $[A,B]\equiv AB-BA$). Η κβάντωση με αντι-μεταθέτες είναι χαρακτηριστική της στατιστικής Fermi-Dirac. Αυτή θα είναι η μόνη διαφορά από την κβάντωση της παραγράφου 3.4.

Κατ΄ αρχήν είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η λαγκρανζιανή πυκνότητα

$$\mathcal{L}=\sum_s\left[\psi_s^*\left(i\hbar\frac{\partial\psi_s}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_s-V\psi_s\right)\right] \tag{3.72}$$

αναπαράγει την εξίσωση (3.71). Πράγματι:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\psi_s^*)}\right)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_s^*}\Rightarrow 0=i\hbar\frac{\partial\psi_s}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_s-V\psi_s.$$

Η συζυγής ορμή είναι

$$\pi_s\equiv\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\psi_s)}=i\hbar\psi_s^* \tag{3.73}$$

και η χαμιλτονιανή πυκνότητα:

$$\mathcal{H}=\sum_s[\pi_s\partial_t\psi_s]-\mathcal{L}=\sum_s\psi_s^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right]\psi_s=\sum_s\psi_s^*\hat{H}\psi_s. \tag{3.74}$$

Η χαμιλτονιανή είναι:

$$H\equiv\int d^3x\mathcal{H}=\int d^3x\sum_s\psi_s^*\hat{H}\psi_s=\int d^3x\sum_s\left[\sum_\mu a^*_{\mu s}\phi^*_\mu(x)\hat{H}\sum_{\mu'}a_{\mu' s}\phi_{\mu'}(x)\right]=$$

$$=\sum_s\sum_{\mu,\mu'}a^*_{\mu s}a_{\mu' s}\int d^3x\phi^*_\mu\hat{H}\phi_{\mu'}=\sum_s\sum_{\mu,\mu'}E_{\mu'}a^*_{\mu s}a_{\mu' s}\delta_{\mu\mu'}=\sum_s\sum_\mu E_\mu a^*_{\mu s}a_{\mu s}. \tag{3.75}$$

Η κβάντωση συνίσταται, όπως είπαμε, στην επιβολή των κανόνων αντι-μετάθεσης:

$$\{\Psi_s(x),\Psi_{s'}(x')\}=0,\ \{\Pi_s(x),\Pi_{s'}(x')\}=0,\ \{\Psi_s(x),\Pi_{s'}(x')\}=i\hbar\delta_{ss'}\delta(x-x'). \tag{3.76}$$

Η εξίσωση

$$\Pi_s(x)=i\hbar\Psi_s^\dagger(x)$$

επιτρέπει την επαναδιατύπωση των σχέσεων αντι-μετάθεσης με τη μορφή:

$$\{\Psi_s(x),\Psi_{s'}(x')\}=0,\ \{\Psi_s^\dagger(x),\Psi_{s'}^\dagger(x')\}=0,\ \{\Psi_s(x),\Psi_{s'}^\dagger(x')\}=\delta_{ss'}\delta(x-x'). \tag{3.77}$$

Χρησιμοποιώντας τα αναπτύγματα

$$\Psi_s(x)=\sum_{\mu,s}a_{\mu s}\phi_\mu(x),\ \Psi_s^\dagger(x)=\sum_{\mu,s}a_{\mu s}^\dagger\phi_\mu^*(x)$$

καταλήγουμε στις σχέσεις αντι-μετάθεσης των $a_{\mu s}$ και $a_{\mu s}^\dagger$:

$$\{a_{\mu s},a_{\mu' s'}\}=0,\{a_{\mu s}^\dagger,a_{\mu' s'}^\dagger\}=0,\ \{a_{\mu s},a_{\mu' s'}^\dagger\}=\delta_{\mu\mu'}\delta_{ss'}. \tag{3.78}$$

Η χαμιλτονιανή $H=\int d^3x\sum_s\Psi_s^\dagger\hat{H}\Psi_s$ γράφεται:

$$H=\sum_{\mu,s}E_\mu a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}. \tag{3.79}$$

Παρατηρούμε τη ρητή εμφάνιση της σωματιδιακής εικόνας: οι ενεργειακές στάθμες E_μ είναι δυνατόν να καταλαμβάνονται από έναν αριθμό κβάντων ή σωματιδίων με σπιν s, που καταμετρούνται από τον τελεστή αρίθμησης $N_{\mu s}\equiv a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}$. Παρατηρούμε ότι οι σχέσεις αντι-μετάθεσης συνεπάγονται:

$$(N_{\mu s})^2=a_{\mu s}^\dagger(a_{\mu s}a_{\mu s}^\dagger)a_{\mu s}=a_{\mu s}^\dagger(1-a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s})a_{\mu s}=$$

$$=a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}-a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}a_{\mu s}=a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}-0=N_{\mu s},$$

όπου λάβαμε υπόψη ότι $a_{\mu s}^\dagger a_{\mu s}^\dagger=a_{\mu s}a_{\mu s}=0$. Το αποτέλεσμα $(N_{\mu s})^2=N_{\mu s}$ συνεπάγεται ότι ο τελεστής $N_{\mu s}$ έχει ιδιοτιμές μηδέν και ένα, δηλαδή το πολύ ένα σωματίδιο μπορεί να βρίσκεται σε κάθε κβαντική κατάσταση, όπως ακριβώς θα περίμενε κανείς για φερμιόνια. Αυτό συνεπάγεται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις της χαμιλτονιανής ($H|\Phi>=E|\Phi>$) μπορούν να γραφτούν με τη συνηθισμένη μορφή:

$$|\Phi>=\prod_{\mu,s}(a_{\mu,s}^\dagger)^{n_{\mu s}}|0>,\ a_{\mu s}|0>=0,$$

όπου το $n_{\mu s}$ μπορεί να είναι μηδέν ή ένα. Η σχέση αυτή είναι απλούστερη από την αντίστοιχη μποζονική (3.66) κατά το ότι δεν περιλαμβάνει τον παράγοντα κανονικοποίησης με τα παραγοντικά.

Το φυσικό νόημα των τελεστών $\Psi_s^\dagger(x_0)$ είναι ότι δημιουργούν ένα σωματίδιο με σπιν s στη θέση x_0.

3.7 Συσχετισμοί σε αέρια Bose και Fermi

3.7.1 Φερμιόνια

Ας θεωρήσουμε κατ' αρχήν το τελείως εκφυλισμένο αέριο Fermi, δηλαδή ένα σύνολο φερμιονίων μέσα σ' έναν όγκο V, που το μέτρο της ορμής τους κυμαίνεται μεταξύ του μηδέν και της ανώτατης τιμής p_F, που λέγεται ορμή Fermi. Αυτή η κβαντική κατάσταση $|\Phi_0>$ ονομάζεται και κενό Fermi. Θεωρούμε τους φερμιονικούς τελεστές δημιουργίας και καταστροφής:

$$\Psi_s^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{p}s}^\dagger, \;\; \Psi_s(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{p}s}, \tag{3.80}$$

$$a_{\vec{p}s}^\dagger = \int d^3r \frac{e^{i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} \Psi_s^\dagger(\vec{r}), \;\; a_{\vec{p}s} = \int d^3r \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} \Psi_s(\vec{r}).$$

Η μεταβλητή s περιγράφει το σπιν του σωματιδίου. Θα επιχειρήσουμε να υπολογίσουμε το πλάτος διάδοσης $G_s(\vec{r},\vec{r}')$ ενός σωματιδίου με σπιν s από τη θέση $\vec{r}'$ στη θέση $\vec{r}$, όταν το σύστημα βρίσκεται στο κενό Fermi $|\Phi_0>$. (Δεν υπάρχει περίπτωση να συμβεί αλλαγή του σπιν, όπως είναι εύκολο να αποδειχτεί). Η ποσότητα $G_s(\vec{r},\vec{r}')$ λέγεται *πίνακας πυκνότητας ενός σωματιδίου.*

$$G_s(\vec{r},\vec{r}') \equiv <\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\vec{r})\Psi_s(\vec{r}')|\Phi_0> = <\Phi_0|\frac{1}{V}\sum_{\vec{p},\vec{p}'} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}} a_{\vec{p}s}^\dagger e^{i\vec{r}'\cdot\vec{p}'} a_{\vec{p}'s}|\Phi_0> =$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{p},\vec{p}'} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}} e^{i\vec{r}'\cdot\vec{p}'} <\Phi_0|a_{\vec{p}s}^\dagger a_{\vec{p}'s}|\Phi_0> = \frac{1}{V}\sum_{\vec{p},\vec{p}'} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}} e^{i\vec{r}'\cdot\vec{p}'} \delta_{\vec{p},\vec{p}'}\Theta(p_F - p) =$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\Theta(p_F - p) = \int^{p_F} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}. \tag{3.81}$$

Η βηματική συνάρτηση $\Theta(p_F - p)$ εκφράζει το γεγονός ότι το μέτρο της ορμής δεν πρέπει να υπερβαίνει το p_F. Το ίδιο εκφράζει ο συμβολισμός $\int^{p_F} \frac{d^3p}{(2\pi)^3}$. [1]

[1] Μπορούμε να εκφράσουμε τον συνολικό αριθμό σωματιδίων N στον όγκο V ως εξής: $N = \sum_{\vec{p},s} n_{\vec{p},s} = 2\sum_{p\leq p_F} 1$. Μετατρέποντας το άθροισμα σε ολοκλήρωμα βρίσκουμε: $N =$

Θεωρούμε ότι υιοθετούμε ως άξονα των z το $\vec{r}-\vec{r}'$: $d^3p = 2\pi d(\cos\theta)dpp^2$, $\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') = p|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta$, οπότε:

$$G_s(\vec{r},\vec{r}') = 2\pi\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{p_F} dpp^2\int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)e^{-ip|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta} =$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int_0^{p_F} dpp^2\frac{1}{-ip|\vec{r}-\vec{r}'|}\left[e^{-ip|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'|}\right] =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_0^{p_F} dpp\sin(p|\vec{r}-\vec{r}'|) =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2|\vec{r}-\vec{r}'|}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2}\left[\sin(p_F|\vec{r}-\vec{r}'|) - p_F|\vec{r}-\vec{r}'|\cos(p_F|\vec{r}-\vec{r}'|)\right]$$

$$= \frac{p_F^3}{2\pi^2x^3}[\sin(x) - x\cos(x)],\ x \equiv p_F|\vec{r}-\vec{r}'|. \tag{3.82}$$

Η συνάρτηση $j_1(x) \equiv \frac{1}{x^2}[\sin(x) - x\cos(x)]$ αναγνωρίζεται εύκολα ως η σφαιρική συνάρτηση Bessel πρώτης τάξης. Εξ άλλου, όταν το x είναι μικρό, μπορούμε να αναπτύξουμε κατά Taylor και να βρούμε την προσεγγιστική μορφή: $\lim_{x\to 0} G_s(\vec{r},\vec{r}') \approx \frac{n}{2}\left(1 - \frac{x^2}{10}\right)$. Η γραφική παράσταση του $G_s(\vec{r},\vec{r}')$ συναρτήσει του $p_F|\vec{r}-\vec{r}'|$ φαίνεται στο σχήμα.

Συναρτήσεις συσχετισμού ζευγών

Είναι γνωστό ότι τα σωματίδια με τον ίδιο προσανατολισμό του σπιν τείνουν να απομακρύνονται μεταξύ τους. Αυτό δεν είναι τίποτ' άλλο από την απαγορευτική αρχή του Pauli. Αυτό πρέπει στο φορμαλισμό που περιγράφουμε εδώ να εκφράζεται από το γεγονός ότι το πλάτος του να είναι κοντά πρέπει να τείνει στο μηδέν. Ένας τρόπος να υπολογίσουμε την πιθανότητα να βρίσκεται ένα σωματίδιο στη θέση $\vec{r}'$ δεδομένου ότι κάποιο άλλο βρίσκεται στη θέση $\vec{r}$ είναι να θεωρήσουμε ότι απομακρύνουμε νοητά ένα από τα N σωματίδια με σπιν s από τη θέση $\vec{r}$ και να βρούμε την πυκνότητα των υπόλοιπων $N-1$ σωματιδίων (με σπιν s') στη νέα κβαντική κατάσταση $|\Phi'(\vec{r},s) >\equiv \Psi_s(\vec{r})|\Phi_0 >$. Η πυκνότητα αυτή γράφεται:

$$< \Phi'(\vec{r},s)|\Psi^\dagger_{s'}(\vec{r}')\Psi_{s'}(\vec{r}')|\Phi'(\vec{r},s) >=< \Phi_0|\Psi^\dagger_s(\vec{r})\Psi^\dagger_{s'}(\vec{r}')\Psi_{s'}(\vec{r}')\Psi_s(\vec{r})|\Phi_0 >$$

$$\equiv \left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\vec{r}-\vec{r}').$$

$2V\int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = 2\pi\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{p_F} dpp^2\int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) = \frac{p_F^3}{3\pi^2}$, οπότε $p_F^3 = \frac{3\pi^2N}{V} = 3\pi^2n$, όπου n είναι η μέση πυκνότητα σωματιδίων.

Αντικαθιστώντας τους τελεστές πεδίου από τις σχέσεις (3.80) βρίσκουμε τη σχέση:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}'} < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{p}s'}a_{\vec{q}'s'}a_{\vec{p}'s}|\Phi_0 > \tag{3.83}$$

Ο υπολογισμός μπορεί να γίνει σε δύο στάδια:

(α) Περίπτωση $\mathrm{s} \neq \mathrm{s}'$

Η μόνη περίπτωση να έχουμε μη μηδενική συνεισφορά είναι να ικανοποιούνται οι σχέσεις $\vec{p}=\vec{p}'$ και $\vec{q}=\vec{q}'$. (Επισημαίνουμε ότι περιλαμβάνεται και η περίπτωση $\vec{p}=\vec{q}=\vec{p}'=\vec{q}'$.) Αφού ισχύουν οι σχέσεις $\{a_{\vec{p}s}, a^\dagger_{\vec{p}'s'}\} = \delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{s,s'}$ η υπόθεση για άνισα σπιν μας λέει ότι ο τελεστής $a_{\vec{p}'s}$ αντι-μετατίθεται με τους $a^\dagger_{\vec{p}s'}$ και $a_{\vec{q}'s'}$, οπότε ισχύουν οι ακόλουθες ισότητες:

$$a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}'s'}a_{\vec{p}'s} = (-1)a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{p}'s}a_{\vec{q}'s'} = (-1)^2 a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}'s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}'s'},$$

οπότε:

$$< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}'s'}a_{\vec{p}'s}|\Phi_0 >=< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}'s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}'s'}|\Phi_0 >=< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}s'}|\Phi_0 > .$$

Στο τελευταίο βήμα λάβαμε υπόψη τις σχέσεις $\vec{p}=\vec{p}'$ και $\vec{q}=\vec{q}'$. Στη συνέχεια θα εισαγάγουμε ένα πλήρες σύστημα ενδιάμεσων καταστάσεων $|\Phi>$ ως εξής:

$$< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}s'}|\Phi_0 >= \sum_{\Phi} < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}|\Phi >< \Phi|a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}s'}|\Phi_0 > .$$

Όμως η μοναδική μη μηδενική συνεισφορά προέρχεται από το $|\Phi >= |\Phi_0 >$, όπως είναι εύκολο να δει κανείς. Εξ άλλου, επειδή έχουμε στατιστική Fermi, δηλαδή κάθε κβαντική κατάσταση καταλαμβάνεται από ένα ακριβώς σωματίδιο, θα ισχύουν οι σχέσεις:

$$< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}|\Phi_0 >= 1, < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}s'}|\Phi_0 >= 1,$$

με την προϋπόθεση βέβαια ότι $q \leq p_F,\ p \leq p_F$. Μ′ αυτά τα δεδομένα καταλήγουμε στο αποτέλεσμα:

$$< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q}s'}|\Phi_0 >= 1,$$

οπότε

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}'}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'}\cdot 1 = \frac{1}{V^2}\sum_{p\leq p_F} 1 \sum_{q\leq p_F} 1.$$

Μετατρέποντας τα αθροίσματα σε ολοκληρώματα η τελευταία έκφραση γίνεται:

$$\frac{1}{V^2}\left(V\int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\right)^2=\frac{1}{(2\pi)^6}\left(4\pi\int_0^{p_F}dpp^2\right)^2=\frac{p_F^6}{36\pi^4}=\frac{1}{4}n^2,$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε τη γνωστή ισότητα $p_F^3=3\pi^2n\rightarrow p_F^6=9\pi^4n$. Τελικά, δηλαδή, καταλήγουμε στη σχέση:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\vec{r}-\vec{r'})=\frac{1}{4}n^2,$$

δηλαδή:

$$g_{ss'}(\vec{r}-\vec{r'})=1,\ \ s\neq s'.$$

(β) Περίπτωση $\mathbf{s=s'}$

Σ' αυτήν την περίπτωση έχουμε δύο δυνατότητες μη μηδενικής συνεισφοράς: την

$$\vec{p}=\vec{p'},\vec{q}=\vec{q'}$$

και την

$$\vec{p}=\vec{q'},\vec{q}=\vec{p'}.$$

Η περίπτωση $\vec{p}=\vec{q}$ αποκλείεται, γιατί μαζί με την υπόθεση $s=s'$ θα γεννούσε όρους του τύπου $(a_{\vec{p}s})^2=0$ ή $(a^\dagger_{\vec{p}s})^2=0$. Άρα:

$$\delta_{ss'}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q'}s'}a_{\vec{p'}s}|\Phi_0>=$$

$$=\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\delta_{\vec{q},\vec{q'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q'}s'}a_{\vec{p'}s}|\Phi_0>+\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{q'}}\delta_{\vec{q},\vec{p'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q'}s'}a_{\vec{p'}s}|\Phi_0>=$$

$$=\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\delta_{\vec{q},\vec{q'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}a_{\vec{p}s}|\Phi_0>+\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{q'}}\delta_{\vec{q},\vec{p'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{p}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0>.$$

Αφού $\vec{p}\neq\vec{q}$, όπως εξηγήσαμε, οι σχέσεις αντι-μετάθεσης $\{a_{\vec{p}s},a^\dagger_{\vec{q}s}\}=\delta_{\vec{p},\vec{q}}$ δείχνουν ότι ο $a_{\vec{p}s}$ αντι-μετατίθεται με τους $a_{\vec{q}s},a^\dagger_{\vec{q}s}$, οπότε ισχύουν οι ισότητες:

$$a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}a_{\vec{p}s}=(-1)a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{p}s}a_{\vec{q}s}=(-1)^2a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s},$$

$$a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{p}s}a_{\vec{q}s}=(-1)a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}$$

και η πιο πάνω σχέση γίνεται:

$$\delta_{ss'}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s'}a_{\vec{q'}s'}a_{\vec{p'}s}|\Phi_0>=$$

$$=\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\delta_{\vec{q},\vec{q'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0>-\delta_{ss'}\delta_{\vec{p},\vec{q'}}\delta_{\vec{q},\vec{p'}}<\Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0>=$$

$$= \delta_{ss'}[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0 >=$$
$$= \delta_{ss'}[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] \sum_{\Phi} < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}|\Phi >< \Phi|a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0 >=$$
$$= \delta_{ss'}[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] \sum_{\Phi} < \Phi_0|a^\dagger_{\vec{p}s}a_{\vec{p}s}|\Phi_0 >< \Phi_0|a^\dagger_{\vec{q}s}a_{\vec{q}s}|\Phi_0 >=$$
$$= \delta_{ss'}[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}].$$

Αυτό το αποτέλεσμα δίνει για το αρχικό πλάτος:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}}e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}'}[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] =$$
$$= \frac{1}{V^2}\sum_{p\le p_F}\sum_{q\le p_F}\left(1 - e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}}e^{-i(\vec{q}-\vec{p})\cdot\vec{r}'}\right) =$$
$$= \frac{1}{V^2}V\int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}V\int^{p_F}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left(1 - e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right) =$$
$$= \int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\int^{p_F}\frac{d^3q}{(2\pi)^3} - \int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\int^{p_F}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}. \quad (3.84)$$

Παρατηρούμε ότι επανεμφανίζεται το ολοκλήρωμα που εκφράζει τον πίνακα πυκνότητας ενός σωματιδίου (σχέσεις (3.81), (3.82)):

$$G_s(\vec{r}-\vec{r}') = \int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} =$$
$$= \frac{p_F^3}{2\pi^2x^3}[\sin(x) - x\cos(x)] = \frac{3n}{2}\frac{\sin(x) - x\cos(x)}{x^3},\ x \equiv p_F|\vec{r}-\vec{r}'|.$$

Επίσης εμφανίζονται τα ίδια ολοκληρώματα στη θέση $\vec{r}-\vec{r}' = \vec{0}$:

$$\int^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = G_s(\vec{0}) = \frac{n}{2}.$$

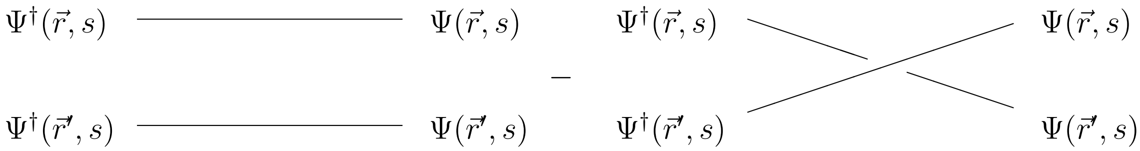
Αντικαθιστώντας στην (3.84) αυτά τα αποτελέσματα έχουμε:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss}(\vec{r}-\vec{r}') = G_s(\vec{0})G_s(\vec{0}) - G_s(\vec{r}-\vec{r}')G_s(\vec{r}-\vec{r}'),$$

δηλαδή:

$$g_{ss}(\vec{r}-\vec{r}') = 1 - \left(3\frac{\sin(x) - x\cos(x)}{x^3}\right)^2,\ x \equiv p_F|\vec{r}-\vec{r}'|.$$

Συνοψίζοντας, στην περίπτωση $s = s'$ το αποτέλεσμα μπορεί να παρασταθεί με τα διαγράμματα:



Για την περίπτωση $s \neq s'$, η ανισότητα των σπιν αποκλείει το "σταυρωτό" διάγραμμα, οπότε το αποτέλεσμα είναι : $g_{ss'} = 1$, όπως πράγματι βρήκαμε.

Εφαρμογή: η μέθοδος Hartree-Fock

Για τη μελέτη των ατόμων το πρώτο βήμα είναι να κατασκευαστεί μια δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση, η οποία να ενσωματώνει όσο το δυνατόν περισσότερα από τα χαρακτηριστικά που περιμένουμε. Πολύ συχνά επιλέγεται η λεγόμενη ορίζουσα του Slater των καταστάσεων ενός σωματιδίου:

$$\psi_N(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{x}_1) & \ldots & \phi_1(\vec{x}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N(\vec{x}_1) & \ldots & \phi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix} \tag{3.85}$$

Στην παραπάνω έκφραση $\phi_i(\vec{x}_j)$ είναι μια προσδιοριστέα κβαντική κατάσταση i με συντεταγμένες $\vec{x}_j$, που υποτίθεται κανονικοποιημένη: $< \phi_k | \phi_l >= \delta_{kl}$. Η παραπάνω δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση συνδέεται με την κατάσταση

$$|\psi_N, t >= \int d^3x_1 \ldots d^3x_N \psi_N(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N) \Psi^\dagger(\vec{x}_1, t) \ldots \Psi^\dagger(\vec{x}_N, t) |0> .$$

Η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H = H_0 + V,$$

$$H_0 \equiv \int d^3x \sum_s \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \right) \Psi_s(\vec{x}),$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}).$$

Αποδεικνύεται ότι

$$< \psi_N, t | H_0 | \psi_N, t >= \sum_{i=1}^N \int d^3x \phi_i^*(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \right) \phi_i(\vec{x}) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \int d^3x \frac{\hbar^2 |\nabla \phi_i(\vec{x})|^2}{2m} - \sum_{i=1}^{N} \int d^3x \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \phi_i^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}).$$

Εξ άλλου:

$$< \psi_N | V | \psi_N >= \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} < \psi_N | \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) | \psi_N > .$$

Αλλά

$$< \psi_N | \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) | \psi_N > \equiv < \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) >=$$

$$=< \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_s(\vec{x}) >< \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') > -$$

$$-\delta_{ss'} < \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_s(\vec{x}') >< \Psi_s^\dagger(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) >,$$

όπως έχουμε δει προηγουμένως (και ισχύει και σ' αυτήν την περίπτωση), οπότε:

$$< \psi_N | V | \psi_N >= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} |\phi_i(\vec{x})|^2 |\phi_j(\vec{x}')|^2 -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta_{s_i,s_j} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \phi_i^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}') \phi_j^*(\vec{x}') \phi_j(\vec{x})$$

και η αναμενόμενη τιμή της Χαμιλτονιανής είναι τελικά:

$$< H >= \sum_{i=1}^{N} \int d^3x \phi_i^*(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \right) \phi_i(\vec{x}) +$$

$$+\frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} |\phi_i(\vec{x})|^2 |\phi_j(\vec{x}')|^2 -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta_{s_i,s_j} \int d^3x d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \phi_i^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}') \phi_j^*(\vec{x}') \phi_j(\vec{x}).$$

Μεταβάλλοντας την παραπάνω έκφραση ως προς $\phi_i^*(\vec{x})$ βρίσκουμε το σύνολο μη γραμμικών εξισώσεων:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \right) \phi_i(\vec{x}) + \int d^3x' \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \sum_j \phi_j^*(\vec{x}') [\phi_j(\vec{x}') \phi_i(\vec{x}) - \delta_{s_i,s_j} \phi_j(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}')] =$$

$$= \epsilon_i \phi_i(\vec{x}), \ i = 1, \ldots, N,$$

που λέγονται **εξισώσεις Hartree-Fock**. Η σταθερά ϵ_i που εμφανίζεται στο δεξιό μέλος είναι προσεγγιστικά (μείον) η ενέργεια ιονισμού. Δεν είναι ακριβώς η ενέργεια ιονισμού, γιατί, αν απομακρυνθεί από το άτομο το ηλεκτρόνιο που περιγράφεται από την $\phi_i(\vec{x})$, οι υπόλοιπες $\phi_j(\vec{x})$ δεν θα μείνουν ανεπηρέαστες. Αυτές οι παρατηρήσεις συναποτελούν το θεώρημα του Koopmans.

3.7.2 Μποζόνια

Ας θεωρήσουμε τώρα μια κβαντική κατάσταση $|\Phi>$ ενός συστήματος μποζονίων που περιέχει $n_{\vec{p}_0}$ σωματίδια με ορμή $\vec{p}$, $n_{\vec{p}_0}$ σωματίδια με ορμή $\vec{p}$, κ.ο.κ. Θα υπολογίσουμε ποσότητες αντίστοιχες μ΄ εκείνες των φερμιονίων, εμπλέκοντας τους τελεστές

$$\Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} a^\dagger_{\vec{p}},\ \ \Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{p}},$$

$$a^\dagger_{\vec{p}} = \int d^3r \frac{e^{i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} \Psi^\dagger(\vec{r}),\ \ a_{\vec{p}} = \int d^3r \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} \Psi(\vec{r}).$$

Ξεκινάμε με την ποσότητα:

$$<\Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})|\Phi> = <\Phi|\sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}}{\sqrt{V}} a^\dagger_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} \frac{e^{i\vec{r}\cdot\vec{p}'}}{\sqrt{V}} a_{\vec{p}'}|\Phi> =$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{p},\vec{p}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}'}|\Phi> = \frac{1}{V}\sum_{\vec{p},\vec{p}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} n_{\vec{p}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}.$$

Εξ άλλου:

$$\begin{aligned} &<\Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi^\dagger(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')\Psi(\vec{r})|\Phi> = \\ &\frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi> . \end{aligned} \tag{3.86}$$

Για τον υπολογισμό της αναμενόμενης τιμής ξεχωρίζουμε την περίπτωση $\vec{p} \neq \vec{q}$, που υπολογίζεται αντίστοιχα με τη φερμιονική περίπτωση και την περίπτωση $\vec{p} = \vec{q}$, που δεν υπήρχε αντίστοιχο στα φερμιόνια. Για την περίπτωση $\vec{p} \neq \vec{q}$, εξετάζουμε τις δύο υποπεριπτώσεις $[\vec{p} = \vec{p}', \vec{q} = \vec{q}']$ και $[\vec{p} = \vec{q}', \vec{q} = \vec{p}']$.

$$\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi> = \delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}} a_{\vec{p}}|\Phi> .$$

Το $a_{\vec{p}}$ μετατίθεται με τα $a_{\vec{q}}$ και $a^\dagger_{\vec{q}}$, αφού έχουμε υποθέσει ότι $\vec{p} \neq \vec{q}$, οπότε

$$<\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}} a_{\vec{p}}|\Phi> = <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi> .$$

Όπως και στη φερμιονική περίπτωση εισάγουμε ένα πλήρες σύνολο ιδιοκαταστάσεων $|X>$ και συνάγουμε:

$$<\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi> = \sum_X <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|X><X|a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi> .$$

Η σχέση $a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi>= n_{\vec{q}}|\Phi>$ συνεπάγεται ότι $<X|a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi>= n_{\vec{q}}<X|\Phi>= n_{\vec{q}}\delta_{|X>,\Phi>}$. Αυτό σημαίνει ότι από το άθροισμα στα $|X>$ επιβιώνει μόνο ένας όρος:

$$\sum_X <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|X><X|a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi>= n_{\vec{p}} n_{\vec{q}},$$

οπότε:

$$(1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi>= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}}. \qquad (3.87)$$

Για την περίπτωση $[\vec{p}=\vec{q}', \vec{q}=\vec{p}']$ με παρόμοια βήματα προκύπτει:

$$(1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi>= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{p}} a_{\vec{q}}|\Phi>=$$

$$= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi>=$$

$$= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'} \sum_X <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|X><X|a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}}|\Phi>=$$

$$= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})\delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}}. \qquad (3.88)$$

Μένει η περίπτωση $\vec{p}=\vec{q}$, οπότε υποχρεωτικά και $\vec{p}'=\vec{q}'$. Χρησιμοποιώντας τη σχέση $a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{p}} - a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} = 1$ βρίσκουμε:

$$\delta_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi>= \delta_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|\Phi>=$$

$$= \delta_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}}(a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{p}} - 1) a_{\vec{p}}|\Phi> .$$

Η αναμενόμενη τιμή γίνεται, διαδοχικά:

$$<\Phi|a^\dagger_{\vec{p}}(a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{p}} - 1) a_{\vec{p}}|\Phi>=<\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|\Phi> - <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|\Phi>=$$

$$= \sum_X <\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|X><X|a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}|\Phi> - n_{\vec{p}} = (n_{\vec{p}})^2 - n_{\vec{p}}. \qquad (3.89)$$

Συνδυάζοντας τις (3.87, 3.88, 3.89) βρίσκουμε:

$$<\Phi|a^\dagger_{\vec{p}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'}|\Phi>= (1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} + \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] n_{\vec{p}} n_{\vec{q}} +$$

$$+\delta_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} n_{\vec{p}}(n_{\vec{p}} - 1).$$

Αντικαθιστούμε στην (3.86) καταλήγουμε στην:

$$<\Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi^\dagger(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')\Psi(\vec{r})|\Phi>=$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}'} \{(1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})[\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} + \delta_{\vec{p},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{p}'}] n_{\vec{p}} n_{\vec{q}} +$$

$$+\delta_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'}n_{\vec{p}}(n_{\vec{p}}-1)\}$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{q}}(1-\delta_{\vec{p},\vec{q}})(1+e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}}e^{-i(\vec{q}-\vec{p})\cdot\vec{r}'})n_{\vec{p}}n_{\vec{q}} + \sum_{\vec{p},\vec{q}}\delta_{\vec{p},\vec{q}}n_{\vec{p}}(n_{\vec{p}}-1) =$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p},\vec{q}}\Big[n_{\vec{p}}n_{\vec{q}} - \delta_{\vec{p},\vec{q}}(n_{\vec{p}})^2 + e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} - \delta_{\vec{p},\vec{q}}(n_{\vec{p}})^2 + \delta_{\vec{p},\vec{q}}(n_{\vec{p}})^2 - \delta_{\vec{p},\vec{q}}n_{\vec{p}}\Big] =$$

$$= \frac{1}{V^2}\left[\left(\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}\right)\left(\sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}}\right) - \sum_{\vec{p}}(n_{\vec{p}})^2 + \left(\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right)\left(\sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}}e^{+i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right) - \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}\right] =$$

$$= \left(\frac{\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}}{V}\right)^2 + \left|\frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right|^2 - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}(n_{\vec{p}}+1) \rightarrow$$

$$\rightarrow G_B \equiv < \Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi^\dagger(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')\Psi(\vec{r})|\Phi> =$$

$$= n^2 + \left|\frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right|^2 - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}(n_{\vec{p}}+1). \qquad (3.90)$$

Έχουμε συμβολίσει με n την πυκνότητα των μποζονίων.

Υπενθυμίζουμε το αποτέλεσμα για φερμιόνια που αντιστοιχεί στο (3.90):

$$G_F \equiv < \Phi_0|\Psi_s^\dagger(\vec{r})\Psi_{s'}^\dagger(\vec{r}')\Psi_{s'}(\vec{r}')\Psi_s(\vec{r})|\Phi_0> =$$

$$= \left(\frac{n}{2}\right)^2 - \left|\frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}s}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right|^2 \delta_{ss'}. \qquad (3.91)$$

Μια σύγκριση των δύο αποτελεσμάτων είναι πολύ χρήσιμη. Στην (3.90) υπάρχει ένας όρος (ο τελευταίος) ο οποίος δεν υπάρχει στην (3.91). Ο όρος αυτός είναι δευτερεύουσας σημασίας, γιατί είναι κατά έναν παράγοντα $\frac{1}{V}$ μικρότερος από τους άλλους δύο, οπότε, στο όριο όπου οι όγκοι είναι σχετικά μεγάλοι, μπορεί να παραλειφθεί. Η πιο σημαντική διαφορά μεταξύ των δύο εκφράσεων είναι το πρόσημο του δευτέρου όρου. Μια πολύ σημαντική ειδική περίπτωση έχουμε όταν $\vec{r} = \vec{r}'$. Σ' αυτήν την περίπτωση το αρνητικό πρόσημο στην (3.91) μειώνει το πλάτος, ενώ για τα μποζόνια το αντίστοιχο θετικό πρόσημο το αυξάνει. Το φυσικό αποτέλεσμα είναι ότι τα μποζόνια έχουν αυξημένη πιθανότητα να βρεθούν στο ίδιο σημείο, σε αντίθεση με τα φερμιόνια, για τα οποία το αντίστοιχο πλάτος είναι μηδέν. Η συμπεριφορά των φερμιονίων πρέπει να αποδοθεί στην αρχή του Pauli που απαγορεύει την συνύπαρξη ταυτοτικών φερμιονίων με το ίδιο σπιν στην ίδια ορμή. Για τα μποζόνια όχι μόνο δεν υπάρχει τέτοιος περιορισμός, αλλά αντίθετα η συνύπαρξη στην ίδια ορμή έχει ιδιαίτερα μεγάλη πιθανότητα. Η αρχή αυτή βρίσκεται στη βάση της συμπύκνωσης Bose-Einstein, που είναι η κατάσταση όπου όλα τα μποζόνια έχουν συσσωρευθεί στην πιο χαμηλή ορμή ($n_{\vec{p}_0} = N, n_{\vec{p}_{k\neq 0}} = 0$). Τότε:

$$G_B = \left(\frac{N}{V}\right)^2 + \left|\frac{1}{V}Ne^{-i\vec{p}_0\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right|^2 - \frac{1}{V^2}N(N+1) =$$
$$= \left(\frac{N}{V}\right)^2 + \left(\frac{N}{V}\right)^2 - \frac{N(N+1)}{V^2} = \frac{N(N-1)}{V^2}.$$

3.8 Σύνδεση της δεύτερης κβάντωσης με την Κβαντική Μηχανική ταυτοτικών σωματιδίων

Κλείνουμε αυτό το κεφάλαιο διατυπώνοντας, χωρίς απόδειξη, μια πολύ βασική πρόταση, που συνδέει το φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης με την κβαντική μηχανική πολλών σωματιδίων:

Πρόταση: Έστω η κατάσταση ενός σωματιδίου

$$|\chi_1, t> = \int d^3x \chi_1(\vec{x})\Psi^\dagger(\vec{x}, t)|0>,$$

η οποία υποθέτουμε ότι ικανοποιεί τη σχέση:

$$\hat{H}|\chi_1, t> = E|\chi_1, t>, \ \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})$$

Τότε αποδεικνύεται ότι η $\chi_1(x)$ θα ικανοποιεί τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger για την ίδια Χαμιλτονιανή και ιδιοτιμή ενέργειας:

$$\hat{H}\chi_1(\vec{x}) = E\chi_1(\vec{x}).$$

Έστω τώρα η κατάσταση n σωματιδίων

$$|\chi_n, t> = \int d^3x \chi_n(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n)\Psi^\dagger(\vec{x}_1, t)\ldots\Psi^\dagger(\vec{x}_n, t)|0>,$$

η οποία υποθέτουμε ότι ικανοποιεί τη σχέση:

$$\hat{H}|\chi_n, t> = E|\chi_n, t>, \ \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i^2 + V(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n).$$

Τότε η $\chi_n(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n)$ ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger πολλών σωματιδίων για την ίδια Χαμιλτονιανή και ιδιοτιμή ενέργειας:

$$\hat{H}\chi_n(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n) = E\chi_n(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n).$$

Το φυσικό νόημα είναι το εξής: η ποσότητα $|\chi_n(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_n)|^2 d^3x_1 \ldots d^3x_n$ είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο 1 στο στοιχειώδη όγκο d^3x_1, το σωματίδιο 2 στο στοιχειώδη όγκο $d^3x_2, \ldots,$ και τέλος το σωματίδιο n στο στοιχειώδη όγκο d^3x_n.

Κεφάλαιο 4

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

1. Να γραφτούν ρητά οι εξισώσεις Lagrange για το διπλό εκκρεμές που περιγράφεται στη θεωρία. Για απλότητα μπορείτε να θεωρήσετε ότι $l_1 = l_2 = l,\ m_1 = m_2 = m$.

2. Για μικρές απομακρύνσεις (θα παραλειφθούν όλοι οι όροι ανώτερης τάξης από τους γραμμικούς) γράψτε τις απλοποιημένες εξισώσεις για το διπλό εκκρεμές και προσδιορίστε τις ιδιοσυχνότητες και τη μορφή των απομακρύνσεων για τους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης.

3. Θεωρήστε υλικό σημείο που κινείται χωρίς τριβές κατά μήκος της κυκλοειδούς:
$$x = a(\theta - \sin\theta),\ y = a(1 + \cos\theta),\ 0 \leq \theta \leq 2\pi.$$
(1) Να γράψετε τη Λαγκρανζιανή και τις εξισώσεις κίνησης. (2) Να βρείτε την περίοδο ταλάντωσης του υλικού σημείου. Υπόδειξη: πιθανόν ν' αποδειχτεί χρήσιμη η αλλαγή μεταβλητής: $u \equiv \cos\frac{\theta}{2}$.

4. Έστω μια (άγνωστη) καμπύλη $y(x)$ στο επίπεδο xy, κατά μήκος της οποίας κινείται χωρίς τριβές ένα υλικό σημείο υπό την επίδραση του βάρους του. Να αποδειχτεί ότι ο χρόνος που θα χρειαστεί για την κίνηση που αρχίζει από την ηρεμία στο σημείο $(x_1, y_1 = y(x_1))$ και καταλήγει στο $(x_2, y_2 = y(x_2))$ δίνεται από τη σχέση:
$$T = \int_{x=x_1}^{x=x_2} \frac{dx}{\sqrt{2g}} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{y_1 - y}}.$$

5. Αποδείξτε ότι, αν τα ακραία σημεία είναι δεδομένα, η καμπύλη $y(x)$, για την οποία ο χρόνος T είναι ελάχιστος ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση:
$$1 + y'^2 + 2(y - y_1)y'' = 0.$$

Ο προσδιορισμός αυτής της καμπύλης υπήρξε στο παρελθόν το περιβόητο πρόβλημα του *βραχυστοχρόνου*. Επαληθεύστε ότι η κυκλοειδής:

$$x = a(\theta - \sin\theta),\ y = a(1 + \cos\theta),\ 0 \leq \theta \leq 2\pi$$

ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση, άρα λύνει το πρόβλημα. Υπόδειξη: διαιρώντας τα διαφορικά dy και dx μπορείτε να βρείτε την πρώτη παράγωγο $\frac{dy}{dx}$ συναρτήσει του θ.

6. Να προσδιορισθεί η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή με αφετηρία τη σχέση ορισμού $b|0>=0$ και την έκφραση του b συναρτήσει των $\xi, \frac{d}{d\xi}$.

7. Να βρεθούν οι κυματοσυναρτήσεις των τριών πρώτων διεγερμένων καταστάσεων του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή ξεκινώντας από τη σχέση ορισμού $|n>= \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|0>$.

8. Θεωρήστε έναν κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή που υφίσταται μια επί πλέον (χρονοεξαρτώμενη) εξωτερική δύναμη. Να γραφτεί η εξίσωση Schrödinger με τη βοήθεια των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής.

9. Να αποδειχθεί ότι η γενική λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger $\hbar\omega b^\dagger b|\Psi>= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi>$ δίνεται από την έκφραση:

$$|\Psi>= \sum_n c_n \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|0> e^{-in\omega t}.$$

10. Να αποδειχθεί επαγωγικά ότι ο παράγοντας κανονικοποίησης για τις ιδιοσυναρτήσεις του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή είναι $N_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$. Υπόδειξη: Θέστε $|n+1>= C_{n+1}b^\dagger|n>$ και προσδιορίστε το C_{n+1} από την απαίτηση $<n+1|n+1>=1$ και την υπόθεση $<n|n>=1$.

11. Υπολογίστε τις ποσότητες: (α) $<n|(b^\dagger)^2|n>$, (β) $<n|b^2|n>$, (γ) $<n|b^\dagger b|n>$, (δ) $<n|bb^\dagger|n>$.

12. Θεωρήστε δύο ασύζευκτους ταλαντωτές με ιδιοσυναρτήσεις

$$|n_1, n_2>= \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}}(b_1^\dagger)^{n_1}(b_2^\dagger)^{n_2}|0>.$$

Αποδείξτε ότι

$$<m_1m_2|n_1n_2>= \delta_{m_1n_1}\delta_{m_2n_2}$$

και υπολογίστε τις εκφράσεις

$(1) <m_1m_2|b_1|n_1n_2>, (2) <m_1m_2|b_2^\dagger|n_1n_2>, (3) <m_1m_2|b_1^\dagger b_2|n_1n_2>$.

13. Θεωρήστε αρμονικούς ταλαντωτές που περιγράφονται από τη χαμιλτονιανή
$$H = \sum_k \hbar\omega_k (b_k^\dagger b_k - \gamma_k b_k - \gamma_k^* b_k^\dagger).$$
Να αποδειχθεί ότι η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης είναι:
$$|G> = \prod_k \exp\left[-\frac{1}{2}|\gamma_k|^2\right] \exp[\gamma_k^* b_k^\dagger] \exp[-\gamma_k b_k]|0>, b_k|0>= 0.$$

14. Να υπολογιστεί ο αριθμός των φωνονίων στην κατάσταση $|G>$.

15. Έστω ότι οι συντελεστές $\gamma(t)$ και $\gamma^*(t)$ εξαρτώνται από το χρόνο. Δείξτε ότι η εξίσωση του Schrödinger
$$\hbar\omega(b^\dagger b - \gamma b - \gamma^* b^\dagger)|\Psi> = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi>$$
έχει λύση της μορφής
$$|\Psi> = e^{f(t)} e^{g(t)b^\dagger}|0>, \ b|0>= 0$$
και προσδιορίστε τα $f(t)$ και $g(t)$ συναρτήσει ολοκληρωμάτων των γ και γ^*. Στη συνέχεια υπολογίστε τα $\bar{b} \equiv <\Psi|b|\Psi>$ και $\overline{b^\dagger} \equiv <\Psi|b^\dagger|\Psi>$ και αποδείξτε ότι ικανοποιούν τις σχέσεις
$$\frac{d}{dt}\overline{b^\dagger} = i\omega\overline{b^\dagger} - i\omega\gamma(t), \ \frac{d}{dt}\bar{b} = -i\omega\bar{b} + i\omega\gamma^*(t).$$

16. (α) Βρείτε τη λαγκρανζιανή για μια γραμμική διακριτή αλυσίδα στα σωματίδια της οποίας (εκτός από τις δυνάμεις των ελατηρίων) ασκούνται εξωτερικές δυνάμεις $f_l(t)$. (β) Αν $f_l(t) = f_0\delta_{ll_0}\sin\omega_0 t$ και $q_l(0) = \dot{q}_l(0) = 0$, να προσδιορισθεί το $q_l(t)$.

17. Για την κβαντισμένη γραμμική αλυσίδα να υπολογιστούν οι ποσότητες $<\Phi|q_l|\Phi>$ και $<\Phi|p_l|\Phi>$:

(α) Για $|\Phi> = |0>$ και για
$$|\Phi> = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}}(b_k^\dagger)^{n_k}|0>$$
και

(β) Για τη σύμφωνη κατάσταση

$$|\Phi >= \exp\left[-\frac{1}{2}|\beta|^2\right] e^{\beta b^\dagger_{k_0}}|0>,\ \beta = \gamma e^{-i\omega_{k_0}t}.$$

Δείξτε επί πλέον ότι η σύμφωνη κατάσταση είναι λύση της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης του Schrödinger:

$$\left(\sum_k \hbar\omega_k b^\dagger_k b_k\right)|\Phi >= E|\Phi > .$$

18. Υπολογίστε την ποσότητα $<\Phi|q_l^2|\Phi>$ (α) Για $|\Phi >= |0>$, (β) Για $|\Phi >= b^\dagger_{k_0}|0>$.

19. Έστω ότι στο σημείο l_0 της κβαντικής γραμμικής αλυσίδας τοποθετείται ένα πρόσθετο φορτίο που εξασκεί δυνάμεις f_{l-l_0} στα υπόλοιπα σωματίδια. (α) Δείξτε ότι η αντίστοιχη εξίσωση του Schrödinger γράφεται:

$$\sum_k \left(\hbar\omega_k b^\dagger_k b_k - \gamma^*_k b_k + \gamma_k b^\dagger_k\right)|\Psi >= E|\Psi > .$$

Πώς συνδέονται τα γ_k και γ^*_k με τις δυνάμεις f_{l-l_0}; (β) Βρείτε την ενέργεια E_0 της θεμελιώδους κατάστασης και την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση $|\Phi_0>$. Η E_0 λέγεται αυτοενέργεια του πρόσθετου φορτίου. (γ) Να υπολογιστεί η ποσότητα $<\Phi_0|q_l|\Phi_0>$.

20. Να υπολογιστεί η ποσότητα $<\Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r}')|\Phi>$ όπου

$$|\Phi >= \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}}(b^\dagger_k)^{n_k}|0>,\ \Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} b_{\vec{p}},\ \Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} b^\dagger_{\vec{p}}.$$

Παρόμοια να υπολογιστεί η ποσότητα

$$<\Phi|\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi^\dagger(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')\Psi(\vec{r})|\Phi> .$$

Σ' αυτήν την περίπτωση διακρίνετε με προσοχή τις περιπτώσεις όπου διάφορες ορμές είναι ίσες ή όχι.

21. Θεωρήστε τη Χαμιλτονιανή

$$H = \epsilon a^\dagger a + \lambda\epsilon(a^\dagger + a).$$

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές της ενέργειας.

22. Θεωρήστε τη Χαμιλτονιανή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2 + 2\lambda x_1 x_2),$$

όπου $0 \leq \lambda < 1$. (1) Μπορεί κανείς να διαγωνοποιήσει αυτήν την έκφραση ορίζοντας τις νέες μεταβλητές $y_1 = ax_1 + bx_2,\ y_2 = cx_1 + dx_2$. Προσδιορίστε τις σταθερές a, b, c, d, ώστε η Χαμιλτονιανή να πάρει τη μορφή:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{1}{2}m\omega_1^2 y_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2 y_2^2.$$

Να προσδιορισθούν τα ω_1, ω_2. (2) Ορίστε κατάλληλους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ώστε να προσδιορίσετε τις ιδιοτιμές ενέργειας.

23. Θεωρήστε τους φερμιονικούς τελεστές $a_{\vec{k}}, a_{-\vec{k}}$, που σχετίζονται με τις καταστάσεις ενός σωματιδίου $|\vec{k}>$ και $|-\vec{k}>$. (1) Αν ορίσουμε νέους τελεστές

$$b_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a^\dagger_{-\vec{k}},\ b_{-\vec{k}} = u_{-\vec{k}} a_{-\vec{k}} + v_{-\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}},$$

να βρεθούν οι συνθήκες υπό τις οποίες τα $b_{\vec{k}}, b_{-\vec{k}}$ είναι επίσης φερμιονικοί τελεστές. (2) Αν το κενό οριστεί με τις σχέσεις $b_{\vec{k}}|0>= 0, b_{-\vec{k}}|0>= 0$, να υπολογιστεί η παράσταση $< 0|a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}}|0 >$. Ο μετασχηματισμός που εισήχθη παραπάνω λέγεται μετασχηματισμός του Bogoliubov και •παίζει μεγάλο ρόλο στη μελέτη της υπεραγωγιμότητας.

24. Να λυθεί το προηγούμενο πρόβλημα για μποζονικούς τελεστές.

25. Θεωρήστε τη Χαμιλτονιανή

$$H = \sum_{i,j=1}^{2} a_i^\dagger M_{ij} a_j,\ M = \begin{pmatrix} \epsilon & \delta \\ \delta & \epsilon \end{pmatrix},$$

όπου τα $a_i^\dagger, a_j$ είναι μποζονικοί τελεστές. Να διαγωνοποιηθεί η έκφραση και να βρεθούν οι ενέργειες των ψευδοσωματιδίων που θα γεννιούνται από τους νέους τελεστές δημιουργίας.

26. Να διαγωνοποιηθεί η Χαμιλτονιανή

$$H = 2xa^\dagger a + y^* a^\dagger a^\dagger + yaa,$$

όπου $x^* = x$.

27. Ορίζουμε τις ποσότητες

$$S_i \equiv \frac{\hbar}{2}(b_+^\dagger \; b_-^\dagger)\sigma_i \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix},$$

όπου οι τελεστές $b_+^\dagger(b_+)$ δημιουργούν (καταστρέφουν) μποζόνια με σπιν $+\frac{1}{2}$ και αντίστοιχα οι τελεστές $b_-^\dagger(b_-)$ δημιουργούν (καταστρέφουν) μποζόνια με σπιν $-\frac{1}{2}$. (α) Να αποδειχτεί ότι τα S_i ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης της στροφορμής. (β) Να αποδειχτεί ότι

$$S^2 = \hbar^2 \frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right), \; N = N_+ + N_-, \; N_+ \equiv b_+^\dagger b_+ \; N_- \equiv b_-^\dagger b_-.$$

και

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(N_+ - N_-).$$

Αυτές οι σχέσεις συνεπάγονται ότι τα $J = \frac{n_+ + n_-}{2}$ και $M = \frac{n_+ - n_-}{2}$ είναι ακέραιοι. (Τα n_+ και n_- ορίζονται μέσω των σχέσεων $N_+|n_+ >= n_+|n_+ >, \; N_-|n_- >= n_-|n_- >$).

28. Θεωρήστε ότι μια μονοδιάστατη γραμμική αλυσίδα περιγράφεται από τη χαμιλτονιανή

$$\widetilde{H} = -\sum_{k,l} J_{kl}\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l + Bg\beta_0 \sum_m (S_m)_z.$$

Τα S_m είναι τελεστές του σπιν, όπως ορίζονται στην προηγούμενη άσκηση. Αν υποθέσουμε ότι εξετάζουμε μόνο μικρές αποκλίσεις από τη θεμελιώδη κατάσταση (όλα τα σπιν κάτω), αποδεικνύεται ότι η χαμιλτονιανή μπορεί να προσεγγιστεί από την

$$H = E_0 + \hbar^2 \sum_{k,l} J_{kl} b_{k,+}^\dagger b_{k,+} - \hbar^2 \sum_{k,l} J_{kl} b_{k,+}^\dagger b_{l,+} + Bg\beta_0 \sum_m b_{m,+}^\dagger b_{m,+}.$$

Θεωρούμε ότι η γραμμική αλυσίδα είναι περιοδική και $J_{k+q,l+q} = J_{kl}$. Να αποδειχτεί ότι, αν ορίσουμε τους νέους τελεστές

$$\tilde{b}_p^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{-\infty}^{+\infty} b_{k,+}^\dagger e^{ipk}, \; b_{k,+}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} dp \tilde{b}_p^\dagger e^{-ipk},$$

η χαμιλτονιανή γράφεται και υπό τη μορφή

$$H = E_0 + \int_0^{2\pi} dp \tilde{b}_p^\dagger \tilde{b}_p [\hbar^2 \tilde{f}(0) - \hbar^2 \tilde{f}(p) + Bg\beta_0 \hbar],$$

όπου

$$\tilde{f}(p) \equiv \sum_k J_{kl} e^{-ip(l-k)}.$$

Οι τελεστές $\tilde{b}_p^\dagger$ δημιουργούν σωματίδια που λέγονται **μαγνόνια (magnons).** Η παράσταση $\epsilon_p \equiv \hbar^2 \tilde{f}(0) - \hbar^2 \tilde{f}(p) + Bg\beta_0\hbar$ είναι, συνεπώς, η ενέργεια ενός μαγνονίου με κυματαριθμό p. Θεωρήστε το όριο μικρού κυματικού αριθμού. Πώς γίνεται η σχέση διασποράς και ποιά είναι η μάζα ενός μαγνονίου;

29. Ν' αποδειχτεί ότι η κατάσταση

$$\chi \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j e^{ipj} b_{j,+}^\dagger b_{j,-} |0>, \; (b_{j,+}|0>= 0)$$

είναι ιδιοκατάσταση της αρχικής Χαμιλτονιανής:

$$\widetilde{H} = -\sum_{k,l} J_{kl} \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l + Bg\beta_0 \sum_m (S_m)_z.$$

Υπόδειξη: Να αποδειχτεί πρώτα ότι η Χαμιλτονιανή ισούται με:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{m,n} J_{mn} \Big[b_{m,+}^\dagger b_{m,-} b_{n,-}^\dagger b_{n,+} + b_{m,-}^\dagger b_{m,+} b_{n,+}^\dagger b_{n,-} +$$

$$+2(b_{m,+}^\dagger b_{m,+} - J)(b_{n,+}^\dagger b_{n,+} - J) \Big] + Bg\beta_0\hbar \sum_m b_{m,+}^\dagger b_{m,+}.$$