# ΤΕΛΕΣΤΕΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΚΑΤΑΣΤΡΟΦΗΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ – ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
Στα πλαίσια του Μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών.

ΙΩΑΝΝΗΣ Ε. ΣΦΑΕΛΟΣ
2004

# Π Ε Ρ Ι Ε Χ Ο Μ Ε Ν Α

# 1. Ορισμός των τελεστών δημιουργίας καταστροφής

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα ερμητιανό τελεστή Α, με διάκριτο φάσμα και ιδιοτιμές ισαπέχουσες (Σχ. 1).


Σχ. 1

Σ'αυτή την περίπτωση, μπορούμε να βρούμε όλες τις ιδιοτιμές ξεκινώντας από μία οποιαδήποτε και προχωρώντας προς την μία ή την άλλη κατεύθυνση, με ένα σταθερό βήμα. Παρατηρούμε, ότι υπάρχει μία απλή επαναληπτική διαδικασία για την κατασκευή όλων των ιδιοτιμών με αφετηρία μία απ'αυτές. Αφού οι ιδιοτιμές συνδέονται μεταξύ τους μ'έναν τόσο απλό επαναληπτικό μηχανισμό, υποθέτουμε ότι συμβαίνει το ίδιο και με τις ιδιοσυναρτήσεις, δηλαδή ότι υπάρχει ένας επαναληπτικός μηχανισμός με μια συγκεκριμένη μαθηματική μορφή, που συνδέει την μία ιδιοσυνάρτηση με την άλλη. Δεδομένου, ότι οι κυματοσυναρτήσεις είναι διανύσματα ενός διανυσματικού χώρου, ο μηχανισμός που ζητάμε θα έχει την μορφή δύο τελεστών.

Ο πρώτος τελεστής, ονομάζεται τελεστής δημιουργίας και τον συμβολίζουμε με $a^+$ και όταν δρα σε μία ιδιοσυνάρτηση, μας δίνει την ιδιοσυνάρτηση με την αμέσως μεγαλύτερη ιδιοτιμή. Ο δεύτερος τελεστής, ονομάζεται τελεστής καταστροφής και τον συμβολίζουμε με a και όταν δρα σε μία ιδιοσυνάρτηση, μας δίνει την ιδιοσυνάρτηση με την αμέσως μικρότερη ιδιοτιμή.

Έστω $\{ \varphi_0=|0>, \varphi_1=|1>,\ldots, \varphi_n=|n> \}$ οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή Α, που αποτελούν βέβαια ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν βάση στον αντίστοιχο χώρο Hilbert.

Σύμφωνα με τις προδιαγραφές τους οι τελεστές $a^+$ και a, θα δρουν πάνω στις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Α κατά τον εξής τρόπο :

$$a^+|n> = C_{n+1}|n + 1> \qquad (1.1) \qquad , \qquad a|n> = C_{n-1}|n - 1> \qquad (1.2)$$

όπου $C_{n+1}$, $C_{n-1}$ είναι συντελεστές κανονικοποίησης. Για να βρούμε αυτούς τους συντελεστές, ας λύσουμε το ακόλουθο απλό πρόβλημα.

Έστω ένας τελεστής a, που ικανοποιεί την σχέση μετάθεσης:

$$[a, a^+] = 1 \qquad (1.3)$$

όπου $a^+$ ο ερμητιανός συζυγής του a. Το πρόβλημα είναι να βρούμε τις ιδιοτιμές του ερμητιανού τελεστή $a^+ a$ και να τις συσχετίσουμε με τα ιδιοδιανύσματα. Αν $|n>$ είναι ένα νορμαλισμένο ιδιοδιάνυσμα με

$$a^+ a|n> = n|n> \qquad (1.4)$$

τότε : $n = <n| a^+ a |n> = ||a|n>||^2 \geq 0 \qquad (1.5)$

Η τελευταία σχέση μας λέει ότι οι ιδιοτιμές είναι όλες πραγματικές και μη αρνητικές. Εφαρμόζοντας την ταυτότητα : $[AB,\Gamma] = A[B,\Gamma] + [A,\Gamma]B$

έχουμε : $[a^+a, a] = a^+[a,a] + [a^+,a]a = -a \qquad (1.6)$

$[a^+a, a^+] = a^+[a,a^+] + [a^+,a^+]a = a^+ \qquad (1.7)$

(εφόσον $[a,a] =[a^+,a^+]= 0$ και $[a^+ ,a] = -1$).

Οι σχέσεις (1.6),(1.7) γράφονται ισοδυνάμως :

$$(a^+a)a = a(a^+a - 1) \quad (1.8) \quad , \quad (a^+a)\, a^+ = a^+( a^+a + 1) \quad (1.9)$$

Για ένα ιδιοδιάνυσμα $|n>$, η εξ. (1.8) με την βοήθεια της (1.4) δίνει :

$$(a^+a)a|n> = a(a^+a - 1)|n> = a(n - 1)|n> = (n - 1)a|n> \qquad (1.10)$$

Επομένως $a|n>$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του $a^+a$ με ιδιοτιμή $n - 1$, εκτός αν $a|n> = 0$. Ομοίως από την εξ. (1.9) έχουμε :

$$(a^+a)\, a^+|n> = a^+( a^+a + 1)|n> = a^+(n + 1)|n> = (n + 1)\, a^+|n> \qquad (1.11)$$

δηλαδή το $a^+|n>$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του $a^+a$ με ιδιοτιμή $n +1$, εκτός αν $a^+|n> = 0$.

Λόγω της προηγούμενης σχέσης (1.10) : $(a^+a)a|n> = (n - 1)a|n>$ βγάζουμε το συμπέρασμα, ότι εφόσον η κατάσταση $a|n>$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή $(a^+a)$ με ιδιοτιμή $(n - 1)$, θα είναι επομένως ανάλογη της $|n - 1>$ ή ισοδύναμα : $a|n> = C_{n-1}|n - 1> \qquad (1.12)$

Η σταθερά $C_{n-1}$ προσδιορίζεται αμέσως ως εξής :

$$n = < n | a^+a | n > = a < n | a | n > = | C_{n-1} |^2 \Rightarrow$$

$$\boxed{C_{n-1} = \sqrt{n}} \qquad (1.13)$$

Άρα ισχύει : $\boxed{a | n >= \sqrt{n}\, | n - 1 >} \qquad (1.14)$

Όπως φαίνεται από αυτή την σχέση, η δράση του τελεστή a συνεπάγεται την ελάττωση των αντίστοιχων ιδιοτιμών κατά μία μονάδα. Επανειλημμένη δράση του τελεστή καταστροφής, συνεπάγεται την ελάττωση των ιδιοτιμών κατά περισσότερες της μιας μονάδες. Επί παραδείγματι : $a^2 | n > = a(\sqrt{n}\, | n - 1 >) = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\, | n - 2 > \qquad (1.15)$

Αν n είναι μία ιδιοτιμή, είναι φανερό ότι και οι αριθμοί n-1, n-2,… θα είναι επίσης ιδιοτιμές. Η ακολουθία αυτή όμως θα πρέπει να τερματίζεται σε κάποια μη αρνητική ελάχιστη ιδιοτιμή. Αυτή δεν μπορεί να είναι ένας αριθμός μεγαλύτερος της μονάδας, γιατί αν ήταν θα μπορούσε να ελαττωθεί περαιτέρω με μία επιπλέον δράση του a.

Έστω λοιπόν ότι είναι ένας αριθμός $n_o$, με $0<n_o<1$. Αλλά σ’αυτή την περίπτωση, μία επιπλέον δράση του τελεστή καταστροφής θα μας οδηγούσε σε αρνητικές ιδιοτιμές. Αυτό μπορεί να φανεί αν εφαρμόσουμε την εξ. (1.10) για το $a^2|n>$, οπότε έχουμε :

$$(a^+a)a^2|n> = (a^+a)aa|n> = a(a^+a-1)a|n> = a[(a^+a)a-a]|n> =$$
$$= a[a(a^+a-1)|n> - a|n>] = a[(n-1)a|n> - a|n>] = a(n-2)a|n> \Rightarrow$$

$$\boxed{(a^+a)a^2|n> = (n-2)a^2|n>} \qquad (1.16)$$

Παρατηρούμε ότι $a^2|n>$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του $a^+a$ με ιδιοτιμή $n-2$, εκτός αν $a^2|n> = 0$.

Γενικεύοντας, αν υποθέσουμε ότι $a^m|n> \neq 0$ για όλα τα m, επαναλαμβάνοντας την ίδια διαδικασία καταλήγουμε ότι :

$$\boxed{(a^+a)a^m|n> = (n-m)a^m|n>} \qquad (1.17)$$

δηλαδή το $a^m|n>$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του $a^+a$ με ιδιοτιμή $n-m$.

Από την τελευταία σχέση βλέπουμε, ότι η μόνη συνεπής ελάχιστη ιδιοτιμή είναι η $n-m = 0$. Τότε αναγκαστικά, εφόσον φτάνουμε στο 0 με ακέραια βήματα, οι ιδιοτιμές θα είναι οι ακέραιοι αριθμοί 0,1,2,…

Όταν ο τελεστής καταστροφής δράσει στην κατάσταση ελάχιστης ιδιοτιμής δίνει αποτέλεσμα μηδέν, δηλαδή : $a|0> = 0$ (1.18)

Αντίστοιχα, από την σχέση (1.11) : $(a^+a)\ a^+|n> = (n+1)\ a^+|n>$ συμπεραίνουμε ότι : $a^+|n> = C_{n+1}|n+1>$ , οπότε παίρνοντας το μέτρο αυτής της εξίσωσης βρίσκουμε :

$$n+1 = <n|aa^+ + 1|n> = <n|aa^+|n> = a^+ <n|a^+|n> = |C_{n+1}|^2$$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{C_{n+1} = \sqrt{n+1}} \qquad (1.19)$$

Συνεπώς, η δράση του τελεστή δημιουργίας εκφράζεται από τον τύπο :

$$\boxed{a^+|n> = \sqrt{n+1}|n+1>} \qquad (1.20)$$

Δρώντας επανειλημμένα με τον τελεστή αυτόν, μπορούμε να πάρουμε ιδιοκατάσταση με όσο μεγάλη ιδιοτιμή θέλουμε. Για παράδειγμα, ξεκινώντας από την «θεμελιώδη κατάσταση» $|0>$ έχουμε :

$$a^+|0> = |1>,\ a^+|1> = (a^+)^2|0> = \sqrt{2}|2>,\ a^+|2> = (a^+)^3|0> =$$

$$= \sqrt{3}|3>, \ldots, \quad \boxed{(a^+)^n|0> = \sqrt{n!}|n>} \qquad (1.21)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις (1.14), (1.20) έχουμε :

$$\boxed{a^+a|n> = n|n>} \qquad (1.22)$$

Οι εξισώσεις (1.14), (1.20) και (1.22) μπορούν να εκφραστούν εναλλακτικά με την βοήθεια πινάκων. Οι πίνακες, που αναπαριστούν τους τελεστές a, $a^+$ και $(a^+a)$ καθορίζονται από τις σχέσεις :

$$< m | a^+ | n > = \sqrt{n+1} < m | n+1 > = \sqrt{n+1}\, \delta_{m,n+1} \qquad (1.23)$$

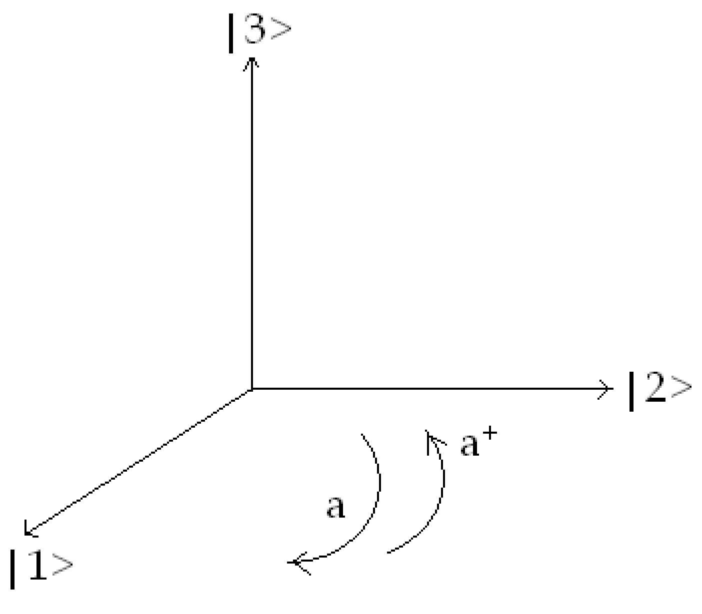
$$< m | a | n > = \sqrt{n} < m | n-1 > = \sqrt{n}\, \delta_{m,n-1} \qquad (1.24)$$

$$< m | (a^+ a) | n > = n < m | n > = n\, \delta_{m,n} \qquad (1.25)$$

οι οποίες αντιστοιχούν στους πίνακες :

$$(a^+) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \\ . & . & . & . & \ldots \end{pmatrix} \quad , \qquad (a) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ . & . & . & . & \ldots \end{pmatrix}$$

$$(a^+ a) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \ldots \\ . & . & . & . & \ldots \end{pmatrix}$$




Σχ. 2

## 2. Ο γραμμικός αρμονικός ταλαντωτής

Σ' αυτή την ενότητα θα κάνουμε μια εφαρμογή των αποτελεσμάτων, που βρέθηκαν προηγουμένως για τον μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή, ο οποίος έχει Hamiltonian της μορφής :

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad (2.1)$$

όπου x και p είναι οι τελεστές θέσης και ορμής αντίστοιχα του σωματιδίου, για τους οποίους ως γνωστόν ισχύει :

$$[x,p] = i\hbar \qquad (2.2)$$

Ο σκοπός μας είναι να βρούμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις του H. Αντί να διαλέξουμε κάποια αναπαράσταση, π.χ. την αναπαράσταση {x} και να επιλύσουμε την διαφορική εξίσωση, που θα προκύψει, θα χρησιμοποιήσουμε μια κομψότερη μέθοδο, που οφείλεται στον Dirac, με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής.

Θεωρούμε τον τελεστή καταστροφής :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \qquad (2.3)$$

και τον ερμητιανό συζυγή του, τον τελεστή δημιουργίας :

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \qquad (2.4)$$

Σημειώνουμε ότι οι παραστάσεις $\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x$ και $\frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ είναι αδιάστατες. Από την εξ. (2.2) βρίσκουμε : $[a,a^+] = 1$ (2.5)

Εκφράζοντας τώρα την θέση x και την ορμή p συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής, έχουμε :

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{a + a^+}{\sqrt{2}} \qquad (2.6)$$

$$p = \sqrt{m\omega\hbar}\frac{a - a^+}{i\sqrt{2}} \qquad (2.7)$$

Οι αντίστοιχοι πίνακες είναι :

$$(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ . & . & . & \dots \end{pmatrix} \qquad (2.8)$$

$$(p) = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & ... \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & ... \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & ... \\ . & . & . & ... \end{pmatrix} \qquad (2.9)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (2.6), (2.7) στην εξ. (2.1) βρίσκουμε :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(a^+a + aa^+) = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}) \qquad (2.10)$$

Το πρόβλημα των ιδιοτιμών της ενέργειας ανάγεται στην εύρεση των ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων του τελεστή $a^+a$ . Συμβολίζοντας ως n τις ιδιοτιμές και ως |n> τις ιδιοκαταστάσεις του τελεστή $a^+a$, χρησιμοποιώντας τις εξ. (1.14), (1.20) έχουμε :

$$H|n> = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)|n> = \hbar\omega\left(a^+\sqrt{n}\,|n-1> + \frac{1}{2}|n>\right) =$$

$$= \hbar\omega\left(\sqrt{n}\sqrt{n}\,|n> + \frac{1}{2}|n>\right) \Rightarrow \boxed{H|n> = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n>} \quad (2.11)$$

Από την εξ. (2.11) συμπεραίνουμε ότι οι καταστάσεις |n> είναι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας και οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι :

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (2.12)$$

Μπορούμε να βρούμε τώρα τις κυματοσυναρτήσεις $\varphi_n(x)$ = <x|n>, με την βοήθεια των εξ. (1.18) και (2.3) ως εξής :

$$0 = a|0> = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right)|0> \qquad (2.13)$$

Λόγω της γνωστής σχέσης από την κβαντομηχανική :

$$<x|p|j> = -i\hbar\frac{d}{dx}<x|j> \qquad (2.14)$$

πολλαπλασιάζοντας με <x| και τα δύο μέλη της (2.13) παίρνουμε :

$$0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)<x|0> \qquad (2.15)$$

(όπου το x είναι τώρα αριθμός και όχι τελεστής). Η εξ. (2.15) είναι ουσιαστικά η εξ. (1.18) σε αναπαράσταση συντεταγμένων, η οποία παίρνει την μορφή μιας διαφορικής εξίσωσης, που η λύση της είναι :

$$<x|0> = A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \qquad (2.16)$$

όπου Α είναι μία σταθερά. Εφαρμόζοντας την συνθήκη κανονικοποίησης έχουμε :

$$1 = <0|0> \int_{-\infty}^{+\infty} <0|x><x|0> dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(m\omega/\hbar)x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

οπότε λύνοντας ως προς Α παίρνουμε : $A = e^{i\theta}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

Επειδή η φάση θ είναι αυθαίρετη, μπορούμε να την θεωρήσουμε ίση με το μηδέν, οπότε : $A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

Έτσι η εξ. (2.16) γίνεται :

$$<x|0> = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (2.17)$$

Κατ΄αυτόν τον τρόπο βρήκαμε την κυματοσυνάρτηση για την θεμελιώδη κατάσταση. Για τις άλλες καταστάσεις εφαρμόζουμε τον τελεστή δημιουργίας $a^+$, σύμφωνα με την εξ. (1.21), οπότε :

$$<x|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}} <x|(a^+)^n|0> \quad (2.18)$$

Αφού $<x|a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} <x|\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)<x|$,

τότε χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.17) και (2.18) , έχουμε :

$$<x|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n <x|0> \Rightarrow$$

$$\boxed{<x|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} \quad (2.19)$$

## 3. Αναρμονικός ταλαντωτής

Υποθέτουμε ένα σύστημα, που έχει την Hamiltonian :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \lambda x^4 \qquad (3.1)$$

Θεωρούμε ότι το λ είναι πολύ μικρό ( $<<\hbar\omega$ ), ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης. Σ' αυτή την περίπτωση, μπορούμε να θεωρήσουμε το $\lambda x^4$ σαν μια διαταραχή της Hamiltonian του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή εξ.(2.1), οπότε τα διαταραγμένα ενεργειακά επίπεδα είναι :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega + \Delta_n \qquad (3.2)$$

όπου : $\Delta_n = \langle n | \lambda x^4 | n \rangle$ (3.3)

Λόγω της εξ. (2.6) έχουμε :

$$\Delta_n = \lambda \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | (a + a^+)^4 | n \rangle \qquad (3.4)$$

Αναπτύσσοντας την έκφραση $(a + a^+)^4$ παίρνουμε 16 όρους. Αλλά σύμφωνα με τις ιδιότητες των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής και λόγω του γεγονότος ότι οι ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ είναι κανονικοποιημένες ($\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ ), οι μόνοι όροι που δίνουν μη μηδενικές αναμενόμενες τιμές, είναι εκείνοι που περιέχουν δύο a και δύο $a^+$, οπότε χρησιμοποιώντας και τις σχέσεις (1.14), (1.20) :

$$\langle n | (a + a^+)^4 | n \rangle = \langle n | (a^+a^+aa + a^+aa^+a + a^+aaa^+ + aa^+a^+a + aa^+aa^+ +$$

$$+ aaa^+a^+) | n \rangle = n(n-1) + n^2 + n(n+1) + n(n+1) + (n+1)^2 + (n+1)(n+2) \Rightarrow$$

$$\langle n | (a + a^+)^4 | n \rangle = 6n^2 + 6n + 3 \qquad (3.5)$$

Αντικαθιστώντας τώρα την εξ. (3.5) στην (3.4) καταλήγουμε :

$$\Delta_n = 3\lambda \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1) \qquad (3.6)$$

## 4. Συστήματα αρμονικών ταλαντωτών

Υποθέτουμε ένα σύστημα, που έχει Hamiltonian :

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} P_i^2 + \sum_{i,j} V_{ij} Q_i Q_j \qquad (4.1)$$

όπου $Q_i, P_i$ είναι οι κανονικές συντεταγμένες και ορμές, για τις οποίες ισχύει :

$$[Q_i, Q_j] = [P_i, P_j] = 0 \ , \ [Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (4.2)$$

και $V_{ij} = V_{ji}$.

Για να απλοποιήσουμε λίγο την κατάσταση κάνουμε μια αλλαγή κλίμακας, ορίζοντας :

$$q_i = \sqrt{m_i} Q_i \ , \quad p_i = \frac{P_i}{\sqrt{m_i}} \qquad (4.3)$$

και $U_{ij} = \dfrac{2}{\sqrt{m_i m_j}} V_{ij}$ (4.4)

Επειδή οι $q_i$ , $p_i$ είναι επίσης κανονικές, ισχύει :

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (4.5)$$

οπότε η Hamiltonian γράφεται συναρτήσει αυτών :

$$H = \frac{1}{2}\sum_i p_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j} U_{ij} q_i q_j \qquad (4.6)$$

Τώρα μπορούμε να εκφράσουμε την Hamiltonian, με όρους τους τελεστές ανύψωσης και υποβιβασμού, όπως κάναμε και στον μονοδιάστατο ταλαντωτή. Η διαδικασία αυτή περιλαμβάνει δύο βήματα : στο πρώτο βρίσκουμε ένα σύνολο κανονικών συντεταγμένων $\tilde{q}_\alpha$ ως προς το οποίο το δυναμικό είναι σε διαγώνια μορφή, ενώ στο δεύτερο βήμα εκφράζουμε τις συντεταγμένες και τις ορμές με όρους τους τελεστές ανύψωσης και υποβιβασμού.

Έστω οι συντεταγμένες $q_i, \tilde{q}_\alpha$ σχετίζονται ως εξής :

$$\tilde{q}_\alpha = \sum_i C_{\alpha i} q_i \qquad (4.7)$$

Επειδή ο $(U_{ij})$ έχουμε θεωρήσει ότι είναι πραγματικός και συμμετρικός, ο πίνακας μετασχηματισμού $C_{\alpha i}$ που διαγωνοποιεί είναι ορθογώνιος :

$$\sum_i C_{\alpha i} C_{\beta i} = \delta_{\alpha\beta} \ , \ \sum_\alpha C_{\alpha i} C_{\alpha j} = \delta_{ij} \qquad (4.8)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός της εξίσωσης (4.7) θα είναι :

$$q_i = \sum_{\alpha} C_{i\alpha} \tilde{q}_{\alpha} \qquad (4.9)$$

Επιπρόσθετα υποθέτουμε ότι οι ιδιοτιμές του $(U_{ij})$ είναι όλες θετικές, ώστε ο πίνακας να είναι θετικά ορισμένος (αυτό εξασφαλίζει ότι $q_i = 0$ είναι ένα σημείο ευσταθούς ισορροπίας). Ορίζοντας αυτές τις ιδιοτιμές με $\omega_{\alpha}^2 (\omega_{\alpha} > 0)$, έχουμε :

$$\sum_{i,j} C_{\alpha i} C_{\beta j} U_{ij} = \omega_a^2 \delta_{\alpha\beta} \qquad (4.10)$$

και έτσι :

$$\sum_{i,j} U_{ij} q_i q_j = \sum_{\alpha} \omega_a^2 \tilde{q}_a^2 \qquad (4.11)$$

Τελικά, ορίζουμε τα $\tilde{p}_a$ κατά τέτοιον τρόπο ώστε να διατηρεί τις κανονικές σχέσεις μετάθεσης :

$$\tilde{p}_a = \sum_{i} C_{ai} p_i \qquad (4.12) \qquad\qquad [\tilde{q}_a, \tilde{p}_{\beta}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \qquad (4.13)$$

Το αποτέλεσμα αυτών των προσπαθειών οδηγεί στην Hamiltonian :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{a} (\tilde{p}_a^2 + \omega_a^2 \tilde{q}_a^2) \qquad (4.14)$$

που σημαίνει ότι έχουμε ένα σύστημα αποσυνεζευγμένων αρμονικών ταλαντωτών (ένας για κάθε τιμή του α).

Χρησιμοποιώντας την διαδικασία, που αναφέραμε στον γραμμικό ταλαντωτή, οι τελεστές υποβιβασμού και ανύψωσης στην περίπτωσή μας θα είναι :

$$a_a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{\omega_{\alpha}} \tilde{q}_{\alpha} + \frac{i}{\sqrt{\omega_{\alpha}}} \tilde{p}_{\alpha} \right) \qquad (4.15)$$

$$a_{\alpha}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{\omega_{\alpha}} \tilde{q}_{\alpha} - \frac{i}{\sqrt{\omega_{\alpha}}} \tilde{p}_{\alpha} \right) \qquad (4.16)$$

οπότε λύνοντας ως προς $\tilde{q}_a, \tilde{p}_a$ παίρνουμε :

$$\tilde{q}_a = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_a}} (a_a + a_a^{+}) \qquad (4.17)$$

$$\tilde{p}_a = -i \sqrt{\frac{\hbar \omega_a}{2}} (a_a - a_a^{+}) \qquad (4.18)$$

Επίσης έχουμε :

$$[a_a, a_\beta] = [a_a^+, a_\beta^+] = 0 \qquad (4.19)$$

$$[a_a, a_\beta^+] = \delta_{a\beta} \qquad (4.20)$$

$$\mathrm{H} = \sum_a \hbar\omega_a (a_a^+ a_a + \frac{1}{2}) \qquad (4.21)$$

Οι ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian περιγράφονται αν είναι γνωστές για κάθε τιμή του α, η ιδιοτιμή $n_\alpha$ του $a_a^+ a_a$. Έτσι έχουμε :

$$H \mid n_1 n_2 n_3 ... > = \sum_a (n_a + \frac{1}{2}) \hbar\omega_a \mid n_1 n_2 n_3 ... > \qquad (4.22)$$

$$\mid n_1 n_2 n_3 ... > = \left[ \prod_a \frac{(\alpha_a^+)^{n_a}}{\sqrt{n_a !}} \right] \mid 000... > \qquad (4.23)$$

όπου η θεμελιώδης κατάσταση $\mid 000... >$ ορίζεται από την σχέση :

$a_a \mid 000... > = 0$ (4.24) για όλα τα α.

Σημειώνουμε ότι η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης είναι $\sum_a \frac{1}{2} \hbar\omega_a$. Για ένα σύστημα με απείρως περισσότερους βαθμούς ελευθερίας, αυτή η ποσότητα γενικά τείνει στο άπειρο. Επειδή το μηδενικό σημείο της ενέργειας είναι ζήτημα ορισμού (μόνο η διαφορά μεταξύ δύο ενεργειακών επιπέδων έχει φυσική σημασία), είναι βολικό να επαναπροσδιορίσουμε την Hamiltonian ενός τέτοιου συστήματος, έτσι ώστε η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης να είναι μηδέν. Έστω λοιπόν ότι :

$$H = \frac{1}{2} \sum_a (p_a^2 + \omega_a^2 q_a^2 - \frac{1}{2} \hbar\omega_a) \qquad (4.25)$$

που είναι μια έκφραση σύμφωνα με τις αρχικές συντεταγμένες $q_i$, οπότε:

$$H = \sum_a \hbar\omega_a a_a^+ a_a \qquad (4.26)$$

και

$$H \mid n_1 n_2 n_3 ... > = \sum_a n_a \hbar\omega_a \mid n_1 n_2 n_3 ... > \qquad (4.27)$$

## 5. Κβαντισμός πεδίου

Ένα σημαντικό παράδειγμα συστήματος, με απείρως πολλούς βαθμούς ελευθερίας είναι το πεδίο. Παραδείγματα έχουμε για το πλάτος των ηχητικών κυμάτων, του φωτός κ.ά.

Ας θεωρήσουμε ένα πραγματικό βαθμωτό πεδίο $\varphi(x)$, του οποίου η κίνηση περιγράφεται από την Lagrangian :

$$L(\varphi,\dot{\varphi}) = \frac{1}{2}\int d^3x\,\dot{\varphi}(x)\dot{\varphi}(x) - \frac{1}{2}\int d^3x \int d^3x' K(x - x')\varphi(x)\varphi(x') \quad (5.1)$$

όπου $K(x - x') = K(x' - x)$. Οι κλασσικές εξισώσεις της κίνησης, βρίσκονται με μεταβλητή το $\varphi(x)$:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta L}{\delta\dot{\varphi}(x)} - \frac{\delta L}{\delta\varphi(x)} = \ddot{\varphi}(x) + \int d^3x' K(x - x')\varphi(x') \quad (5.2)$$

Σημειώνουμε πως οι εξισώσεις (5.1) και (5.2) μοιάζουν με τις αντίστοιχες εξισώσεις για το σύστημα αρμονικών ταλαντωτών, που αναφέρθησαν στην προηγούμενη παράγραφο :

$$L = \frac{1}{2}\sum_i \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2}\sum_{i,j} U_{ij}q_i q_j$$

$$0 = \ddot{q}_i + \sum_j U_{ij}q_j$$

Κατ' αυτό τον τρόπο είναι δικαιολογημένη η θεώρηση του πεδίου, σαν ένα σύστημα αρμονικών ταλαντωτών (τυπικά τουλάχιστον), όπου το $\varphi(x)$ αντιστοιχεί στο σύμβολο q και το x αντιστοιχεί στο i. Το $\varphi(x)$ μπορεί να λογιστεί σαν μια ξεχωριστή συντεταγμένη του συστήματος για κάθε τιμή του x.

Για παράδειγμα, υποθέτουμε ότι :

$$K(x - x') = -c^2\nabla^2\delta^3(x - x') \quad (5.3)$$

οπότε η εξίσωση (5.1) γίνεται, μετά από μερικές ολοκληρώσεις κατά μέρη :

$$L = \frac{1}{2}\int d^3x[\dot{\varphi}(x)\dot{\varphi}(x) - c^2\nabla\varphi(x).\nabla\varphi(x)] \quad (5.4)$$

και η εξίσωση (5.2) γίνεται :

$$\nabla^2\varphi(x) - \frac{1}{c^2}\ddot{\varphi}(x) = 0 \quad (5.5)$$

που είναι η συνήθης εξίσωση κύματος.

Αν υποθέσουμε ότι $\varphi(x)$ είναι μια συντεταγμένη του συστήματος για κάθε x, η συσζυγής ορμή στην $\varphi(x)$ είναι :

$$\Pi(x)=\frac{\delta L}{\delta\dot{\varphi}(x)}=\dot{\varphi}(x) \qquad (5.6)$$

Η Hamiltonian είναι τότε :

$$H=\int d^3x\Pi(x)\dot{\varphi}(x)-L=\frac{1}{2}\int d^3x\Pi(x)\Pi(x)+\frac{1}{2}\int d^3x\int d^3x'K(x-x')\varphi(x)\varphi(x') \qquad (5.7)$$

Για την διαδικασία κβάντωσης του συστήματος, έστω ότι $\varphi(x)$ και Π(x) είναι ερμιτιανοί τελεστές που ικανοποιούν τις θεμελιώδεις μεταθετικές σχέσεις :

$$[\varphi(x),\varphi(x')]=[\Pi(x),\Pi(x')]=0 \qquad (5.8)$$

$$[\varphi(x),\Pi(x')]=i\hbar\delta^3(x-x') \qquad (5.9)$$

και υποθέτουμε ότι η Hamiltonian δίνεται από την σχέση (5.7) εκτός του βαθμωτού όρου, που δίνει την θεμελιώδη κατάσταση μηδενικής ενέργειας.

Τώρα μπορούμε να τα εκφράσουμε όλα σε όρους «normal modes». Βέβαια, καταλήγουμε σε μικρές διαφορές σε σχέση με τα αποτελέσματα, που καταλήξαμε στην προηγούμενη παράγραφο, αφού είναι κατάλληλα εδώ να χρησιμοποιήσουμε «μιγαδικές» κανονικές συντεταγμένες (αυτό σημαίνει, ότι οι τελεστές είναι μη ερμιτιανοί).

Επειδή το σύστημά μας είναι σταθερό, είναι καταλληλότερο να εκφράσουμε τα πεδία σε αναπαράσταση ορμών. Έτσι ορίζουμε :

$$\tilde{\varphi}(k)=\int d^3x\varphi(x)e^{-ik.x} \qquad (5.10)$$

$$\tilde{\Pi}(k)=\int d^3x\Pi(x)e^{-ik.x} \qquad (5.11)$$

Με βάση τα γνωστά ολοκληρώματα :

$$\int d^3x e^{-ik.x}=(2\pi)^3\delta^3(k)\,,\quad \int d^3k e^{ik.x}=(2\pi)^3\delta^3(x)$$

βρίσκουμε τους αντίστροφους μετασχηματισμούς, π.χ.

$$\varphi(x)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\tilde{\varphi}(k)e^{ik.x} \qquad (5.12)$$

Αφού $\varphi(x)$, $\Pi(x)$ είναι ερμιτιανοί, θα ισχύει :

$$\tilde{\varphi}^+(k)=\tilde{\varphi}(-k),\quad \tilde{\Pi}^+(k)=\tilde{\Pi}(-k) \qquad (5.13)$$

Από τις σχέσεις (5.8), (5.9) βρίσκουμε :

$$[\tilde{\varphi}(k),\tilde{\varphi}(k')]=[\tilde{\Pi}(k),\tilde{\Pi}(k')]=0 \qquad (5.14)$$

$$[\tilde{\varphi}(k),\tilde{\Pi}(k')]=i\hbar(2\pi)^3\delta^3(k+k') \qquad (5.15)$$

Τώρα έστω :

$$\omega^2(\mathrm{k}) = \int \mathrm{d}^3\mathrm{x}\mathrm{K}(\mathrm{x})\mathrm{e}^{-i\mathrm{k}.\mathrm{x}} \qquad (5.16)$$

Αφού ισχύει : $\mathrm{K}(\mathrm{x}) = \mathrm{K}(-\mathrm{x}) = \mathrm{K}^*(\mathrm{x})$, θα έχουμε ότι :

$$\omega^2(\mathrm{k}) = \omega^2(\mathrm{k})^* = \omega^2(-\mathrm{k}) \qquad (5.17)$$

Συνεπώς η Hamiltonian (5.7) ξαναγράφεται ως εξής :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3}[\tilde{\Pi}(-\mathrm{k})\tilde{\Pi}(\mathrm{k}) + \omega^2(\mathrm{k})\tilde{\varphi}(\text{-k})\tilde{\varphi}(\mathrm{k})] =$$

$$\frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3}[\tilde{\Pi}^+(\mathrm{k})\tilde{\Pi}(\mathrm{k}) + \omega^2(\mathrm{k})\tilde{\varphi}^+(\mathrm{k})\tilde{\varphi}(\mathrm{k})] \qquad (5.18)$$

Θεωρούμε ότι $\omega^2(\mathrm{k}) > 0$, ώστε η Hamiltonian να είναι θετικά ορισμένη. Κατά συνέπεια $\omega(\mathrm{k})$ είναι πραγματικό, οπότε $\omega(\mathrm{k}) > 0$.

Στο παράδειγμα που περιγράψαμε με τις εξισώσεις (5.3), (5.4), (5.5) έχουμε $\omega(\mathrm{k}) = \mathrm{c}\,|\,\mathrm{k}\,|$.

Παρακάτω θα ορίσουμε τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής.

Συγκρίνοντας με τις εξισώσεις (4.15), (4.16), (4.17) και (4.18) έχουμε :

$$a(\mathrm{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{\omega(\mathrm{k})}\tilde{\varphi}(\mathrm{k}) + \frac{i}{\sqrt{\omega(\mathrm{k})}}\tilde{\Pi}(\mathrm{k})\right] \qquad (5.19)$$

$$a^+(\mathrm{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{\omega(\mathrm{k})}\tilde{\varphi}(-\mathrm{k}) - \frac{i}{\sqrt{\omega(\mathrm{k})}}\tilde{\Pi}(-\mathrm{k})\right] \qquad (5.20)$$

οπότε :

$$\tilde{\varphi}(\mathrm{k}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mathrm{k})}}[a(\mathrm{k}) + a^+(-\mathrm{k})] \qquad (5.21)$$

$$\tilde{\Pi}(\mathrm{k}) = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mathrm{k})}{2}}[a(\mathrm{k}) - a^+(-\mathrm{k})] \qquad (5.22)$$

Οι σχέσεις μετάθεσης σύμφωνα με τις εξισώσεις (5.14), (5.15) είναι :

$$[a(\mathrm{k}), a(\mathrm{k}')] = [a^+(\mathrm{k}), a^+(\mathrm{k}')] = 0 \quad (5.23)$$

$$[a(\mathrm{k}), a^+(\mathrm{k}')] = (2\pi)^3\delta^3(\mathrm{k} - \mathrm{k}') \qquad (5.24)$$

Αν γράψουμε την Hamiltonian με όρους α(k) και $\alpha^+$(k) , κάνοντας την αλλαγή της μεταβλητής $\mathrm{k} \to -\mathrm{k}$ όταν χρειάζεται, βρίσκουμε :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3}\hbar\omega(\mathrm{k})[a^+(\mathrm{k})a(\mathrm{k}) + a(\mathrm{k})a^+(\mathrm{k})] \qquad (5.25)$$

συν έναν διορθωτικό όρο για να κάνει το κενό με ενέργεια μηδέν. Η διορθωμένη Hamiltonian είναι προφανώς :

$$\mathrm{H} = \int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3} \hbar\omega(\mathrm{k}) a^+(\mathrm{k}) a(\mathrm{k}) \qquad (5.26)$$

Σημειώνουμε ότι ο διορθωτικός όρος είναι η άπειρη ποσότητα $-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3\mathrm{k}\hbar\omega(\mathrm{k})\delta^3(0)$. Τελικά, εκφράζουμε τις αρχικές μεταβλητές των πεδίων με όρους τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (5.12), (5.21) και (5.22), οπότε :

$$\varphi(\mathrm{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mathrm{k})}} [a(\mathrm{k})e^{\mathrm{ik.x}} + a^+(\mathrm{k})e^{\text{-ik.x}}] \qquad (5.27)$$

$$\Pi(\mathrm{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mathrm{k})}{2}} [-\mathrm{i}a(\mathrm{k})e^{\mathrm{ik.x}} + \mathrm{i}a^+(\mathrm{k})e^{\text{-ik.x}}] \qquad (5.28)$$

Οι εξισώσεις (5.23) μέχρι (5.28) είναι τα σημαντικά αποτελέσματα της διαδικασίας κβάντωσης.

Η σχέση μετάθεσης (5.24) μπορεί να φαίνεται παράξενη, στην περίπτωση που $[a(\mathrm{k}), a^+(\mathrm{k}')]$ είναι άπειρη (αντί της μονάδας).

Επιλέγουμε ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων $\psi_a(\mathrm{k})$, όπου α είναι ένας διακριτός δείκτης :

$$\int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3} \psi_a^*(\mathrm{k})\psi_\beta(\mathrm{k}) = \delta_{\alpha\beta} \qquad (5.29)$$

$$\sum_a \psi_a(\mathrm{k})\psi_a^*(\mathrm{k}') = (2\pi)^3\delta^3(\mathrm{k} - \mathrm{k}') \qquad (5.30)$$

και ορίζουμε :

$$a_a = \int \frac{\mathrm{d}^3\mathrm{k}}{(2\pi)^3} \psi_a^*(\mathrm{k}) a(\mathrm{k}) \qquad (5.31)$$

Τότε : $[a_a, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta}$ (5.32)

Τώρα μπορούμε να εφαρμόσουμε τα προηγούμενα αποτελέσματα και να κατασκευάσουμε τις καταστάσεις $|\mathrm{n}_1 \ldots\ \mathrm{n}_\alpha \ldots\rangle$. Βέβαια, αυτές οι καταστάσεις δεν μπορεί να είναι ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian. Οι καταστάσεις :

$$|\,\mathrm{k}> = a^+(\mathrm{k})\,|\,0>, \qquad |\,\mathrm{k},\mathrm{k}'> = a^+(\mathrm{k})a^+(\mathrm{k}')\,|\,0>$$

και ούτω καθ'εξής, αν και μη κανονικοποιημένες, είναι ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian.

# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Στην αλγεβρική θεωρία του αρμονικού ταλαντωτή, έχουμε την δυνατότητα αντί της Hamiltonian : $\mathrm{H} = a^{+}a + \frac{1}{2}$ (στο σύστημα μονάδων όπου $\hbar = m = \omega = 1$), να χρησιμοποιήσουμε τον τελεστή αρίθμησης $\mathrm{N} = a^{+}a$, μέσω του οποίου η εξίσωση ιδιοτιμών :

$$\mathrm{H}\,|\,\mathrm{n} >= (\mathrm{n} + \frac{1}{2})\,|\,\mathrm{n} >$$

γράφεται σε πιο κομψή μορφή : $\mathrm{N}\,|\,\mathrm{n} >= \mathrm{n}\,|\,\mathrm{n} >$

Οι ιδιοτιμές του n καταμετρούν τον αριθμό των ενεργειακών κβάντων $\hbar\omega$, που περιέχονται στην εξεταζόμενη ιδιοκατάσταση.

Πολύ εύκολα αποδεικνύεται η γενική μεταθετική σχέση :

$$[N, A] = (k - m)A$$

όπου A είναι ένα τυχόν τελεστικό γινόμενο από k τελεστές δημιουργίας και m τελεστές καταστροφής. Το αποτέλεσμα της δράσης ενός τέτοιου γινομένου πάνω σε μια ιδιοκατάσταση |n> είναι να μετατοπίζει την ιδιοτιμή της κατά k – m.

## <u>ΑΝΑΦΟΡΕΣ</u>


1. Statistical Mechanics (A set of Lectures)
   R. P. Feynman
2. Κβαντομηχανική
   Στ. Τραχανάς
3. Εισαγωγή στην Κβαντική Μηχανική
   Κ. Ε. Βαγιονάκης
4. Roots of the phase operators
   G. Jorjadze and I. Sarishvili
5. Notes on Creation and Annihilation Operators
   http://www.chm.uri.edu/