$$\langle x''|\hat{x}|x'\rangle = x'\langle x''|x'\rangle = x'\delta(x''-x') = x''\delta(x''-x')$$

$$\boxed{\langle x''|\hat{x}|x'\rangle = x''\delta(x''-x')} \quad (1)$$

▼ $\boxed{x\delta'(x) = -\delta(x)}$ (2) διότι:

$$A' = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\delta'(x)f(x) = \cancel{\left[xf(x)\delta(x)\right]_{-\infty}^{+\infty}} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\delta(x)\left[xf(x)\right]'$$

$\emptyset$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\delta(x)\left\{f(x)+xf'(x)\right\} = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\delta(x)\,f(x) - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\delta(x)\,xf'(x)$$

$$= -f(\emptyset) - \emptyset\cdot f'(\emptyset) = -f(\emptyset)$$

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

$$x\delta'(x) = -\delta(x)$$

$$x\frac{\partial}{\partial x}\delta(x) = -\delta(x)$$

$$x''\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'') = -\delta(x'')$$

$$(x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x) = -\delta(x''-x')$$

$$\boxed{\delta(x''-x') = -(x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')} \quad (2'')$$

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \Leftrightarrow \hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x} = i\hbar \Rightarrow$$

$$\langle x''|\hat{x}\hat{p}|x'\rangle - \langle x''|\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\hbar\langle x''|x'\rangle \Rightarrow$$

$$x''\langle x''|\hat{p}|x'\rangle - x'\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar\langle x''|x'\rangle \Rightarrow$$

$$\boxed{(x''-x')\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar\,\delta(x''-x')} \quad (3)$$

$$(2''),(3) \Rightarrow (x''-x')\langle x''|\hat p|x'\rangle = -i\hbar (x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')$$ 2

$$\Rightarrow \boxed{\langle x''|\hat p|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')} \quad (4)$$

(1)(4) κι αναπτύσσοντας σε δυνάμεις του $\hat x$ και $\hat p$

$$\boxed{\langle x''|\hat M(\hat x,\hat p)|x'\rangle = M\left(x'',-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)\delta(x''-x')} \quad \boxed{\begin{matrix}5\\1\Delta\end{matrix}}$$

$$\boxed{\langle \vec r\,''|\hat M(\hat{\vec r},\hat{\vec p})|\vec r\,'\rangle = M(\vec r\,'',-i\hbar\vec\nabla'')\,\delta(\vec r\,''-\vec r\,')} \quad \boxed{\begin{matrix}6\\3\Delta\end{matrix}}$$

$\langle\psi|\vec r\rangle = \psi(\vec r)^*$ $\quad$ $\langle\vec r|\psi\rangle = \psi(\vec r)$

$$\langle\psi|\hat M|\phi\rangle = \int d^3r\int d^3r'\,\langle\psi|\vec r\rangle\langle\vec r|\hat M|\vec r\,'\rangle\langle\vec r\,'|\phi\rangle =$$

$$= \int d^3r\int d^3r'\,\psi(\vec r)^*\,\langle\vec r|\hat M|\vec r\,'\rangle\,\phi(\vec r\,') =$$

$$= \int d^3r\int d^3r'\,\psi(\vec r)^*\,M(\vec r,-i\hbar\vec\nabla)\,\delta(\vec r-\vec r\,')\,\phi(\vec r\,')$$

$$= \int d^3r\,\psi(\vec r)^*\,M(\vec r,-i\hbar\vec\nabla)\,\phi(\vec r)$$

$$\langle\Phi_\ell|\hat M|\Phi_k\rangle = \int d^3r\int d^3r'\,\langle\Phi_\ell|\vec r\rangle\langle\vec r|\hat M|\vec r\,'\rangle\langle\vec r\,'|\Phi_k\rangle =$$

έστω $\{|\Phi_k\rangle\}$ βάση

$$= \int d^3r\int d^3r'\,\Phi_\ell(\vec r)^*\,M(\vec r,-i\hbar\vec\nabla)\,\delta(\vec r-\vec r\,')\,\Phi_k(\vec r\,')$$

$$= \int d^3r\,\Phi_\ell(\vec r)^*\,M(\vec r,-i\hbar\vec\nabla)\,\Phi_k(\vec r)$$

$$M_{\ell k} := \langle\Phi_\ell|\hat M|\Phi_k\rangle = \int d^3r\,\Phi_\ell(\vec r)^*\,M(\vec r,-i\hbar\vec\nabla)\,\Phi_k(\vec r)$$

το στοιχείο πίνακα ℓk του τελεστή $\hat M$ στην αναπαράσταση $\{|\Phi_k\rangle\}$

καταστατικό άνυσμα

Καθαρή κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ pure state

Το σύστημα περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση / καταστατικό άνυσμα

$$\Psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle \qquad \Psi(\vec{r},t)^{*} = \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle$$

Έστω $\{ |\Phi_k\rangle \}$ πλήρης βάση

k συλλογικός κβαντικός αριθμός

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\Phi_k\rangle$$

Τότε η αναμενόμενη τιμή του τελεστή $\hat{A}$ στην $|\Psi(t)\rangle$ είναι

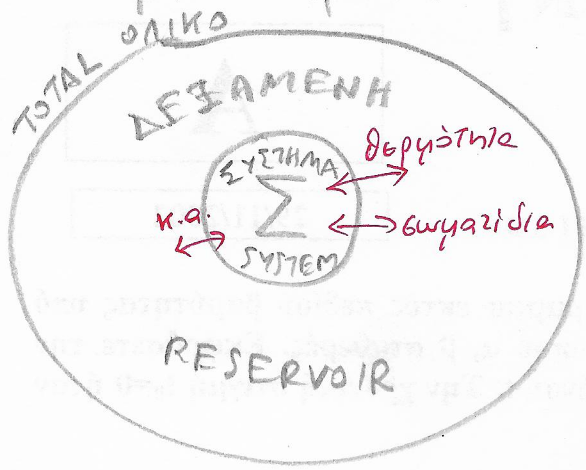
$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \sum_k \sum_{k'} c_{k'}^{*}(t)\, c_k(t) \langle \Phi_{k'} | \hat{A} | \Phi_k \rangle$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k \sum_{k'} c_{k'}^{*}(t)\, c_k(t)\, A_{k'k}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k \sum_{k'} \underbrace{c_k(t)\, c_{k'}^{*}(t)}_{:=\, \rho_{kk'}(t)} A_{k'k}$$

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \sum_k \sum_{k'} \rho_{kk'}(t)\, A_{k'k}} \qquad \boxed{\rho_{kk'}(t) := c_k(t)\, c_{k'}^{*}(t)}$$

Όμως, δεν είναι πάντοτε εφικτό ένα σύστημα Σ να περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση.



TOTAL = SYSTEM $\oplus$ RESERVOIR

Αν ΟΛΙΚΟ (TOTAL) απομονωμένο $\Longrightarrow$ μπορούμε να ορίσουμε

$$\Psi_T(\vec{r}, \vec{r}_R, t)$$

Αν Σ <u>ΔΕΝ</u> αλληλεπιδρά με $R \Longrightarrow$ μπορούμε να γράψουμε

$$\Psi_T(\vec{r}, \vec{r}_R, t) = \underbrace{\Psi(\vec{r}, t)}_{\Sigma}\, \underbrace{\Psi_R(\vec{r}_R, t)}_{R}$$

(Το τι κάνει το σύστημα είναι ανεξάρτητο από το τι κάνει η δεξαμενή)

Αν Σ αλληλεπιδρά με $R \Longrightarrow$ δεν μπορούμε να τα διαχωρίσουμε κ να γράψουμε $\Psi(\vec{r}, t)$ και $\Psi_R(\vec{r}_R, t)$

Επίσης, μπορεί να μη θέλουμε να εργαστούμε με την $\Psi_T(\vec{r}, \vec{r}_R, t)$

μπορεί να μην ενδιαφερόμαστε τι κάνει η δεξαμενή

μπορεί να είναι εξαιρετικά πολύπλοκο...

ΕΡΩΤΗΜΑ: Πώς αντιμετωπίζουμε περιπτώσεις όπου δεν υπάρχει κατά ορισμένη κυματοσυνάρτηση για το σύστημα;

Μικτή κατάσταση mixed state : Δεν υπάρχει κατά ορισμένη κυματοσυνάρτηση για το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε.

Οδός:

Θα υποθέσουμε ότι υπάρχει πιθανότητα W_i το σύστημα να βρίσκεται στην κατάσταση που περιγράφεται από την $\Psi_i(\vec{r},t)$

Δηλαδή, αντί να λέμε πώς το σύστημα βρίσκεται με βεβαιότητα σε μια κατάσταση, ή οποία περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση, του επιτρέπουμε να βρίσκεται
με διαφορετικές πιθανότητες W_i
σε διαφορετικές καταστάσεις $|\Psi_i(t)\rangle$
οι οποίες περιγράφονται από διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις $\langle \vec{r}, \Psi_i(t)\rangle = \Psi_i(\vec{r},t)$

Φυσικά θα πρέπει:

$$\sum_i W_i = 1$$

Σε αυτή τη μικτή κατάσταση, η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ θα είναι:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i W_i \langle \hat{A} \rangle_i$$

$$\langle \hat{A} \rangle_i = \langle \Psi_i(t) | \hat{A} | \Psi_i(t) \rangle = \sum_{k'} C_{k'}^{i*}(t) \langle \Phi_{k'} | \hat{A} \sum_k C_k(t) | \Phi_k \rangle$$

$$= \sum_{k'} \sum_k C_{k'}^{i*}(t) C_k(t) \langle \Phi_{k'} | \hat{A} | \Phi_k \rangle = \sum_{k'} \sum_k C_{k'}^{i*}(t) C_k(t) A_{k'k}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i w_i \sum_{k'} \sum_k c_{k'}^{i*}(t)\, c_k^i(t)\, A_{k'k} \Rightarrow$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k'} \sum_k \underbrace{\sum_i w_i\, c_k^i(t)\, c_{k'}^{i*}(t)}_{:= \rho_{kk'}(t)} A_{k'k}$$

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \sum_k \sum_{k'} \rho_{kk'} A_{k'k}} \qquad \boxed{\rho_{kk'}(t) := \sum_i w_i\, c_k^i(t)\, c_{k'}^{*}(t)} \quad (\omega)_M$$

M

Ο πίνακας, του οποίου τα στοιχεία δίνονται από τις (ω) λέγεται πίνακας πυκνότητας (density matrix) και ο αντίστοιχος τελεστής τελεστής πυκνότητας (density operator) $\hat{\rho}$

Παρατήρηση: Αν βρισκόμαστε σε καθαρή κατάσταση $\Rightarrow$

$\exists$ μία μόνο i με $W_i = 1$

οπότε σχέση $(\omega)_M \equiv (\omega)_K$

πίνακας κ τελεστής πυκνότητας εισήχθησαν ανεξάρτητα

από τους $\left\{ \begin{array}{l} \text{John von Neumann} \\ \text{Lev Landau} \end{array} \right\}$ 1927

Πιο γενική περιγραφή

Ενώ μια καθαρή κατάσταση μπορεί να περιγραφεί με καταστατικό άνυσμα $|\psi(t)\rangle$ – κυματοσυνάρτηση $\Psi(\vec{r}, t)$

ο πίνακας πυκνότητας μπορεί να περιγράφει και μικτές καταστάσεις

π.χ. σε περίπτωση απώλειας συνοχής (decoherence) του συστήματος λόγω αλληλεπίδρασης με δεξαμενή με την οποία ανταλλάσσει θερμότητα – σωματίδια

Εφ' όσον αυτό που εν τέλει προσδοκούμε είναι οι αναμενόμενες τιμές
των φυσικών μεγεθών $\langle \hat{A} \rangle$
όλη η χρήσιμη πληροφορία για το σύστημα που μας ενδιαφέρει
κωδικοποιείται
στα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας $\rho_{kk'}(t)$.

ΑΡΑ

Ο τελεστής πυκνότητας $\hat{\rho}$ μπορεί να ορισθεί:

$$\langle \Phi_k | \hat{\rho}(t) | \Phi_{k'} \rangle := \rho_{kk'}(t)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k \underbrace{\sum_{k'} \rho_{kk'} A_{k'k}}_{\text{Το } kk \text{ στοιχείο του } \rho(t)\cdot A} = \mathrm{tr}\left(\rho(t) \cdot A\right)$$

trace (ίχνος) = άθροισμα διαγωνίων στοιχείων τετραγωνικού πίνακα