Τι ειναι η Αρχη της Υπερθεσης;

Υπερθέσεις και Μίγματα

Χρυσοβαλάντης Στεργίου

0.1. **Εισαγωγή.** Η Αρχή της Υπέρθεσης είναι μια θεμελιώδης αρχή της κβαντικής μηχανικής η οποία αντιστοιχεί στην γραμμικότητα του φορμαλισμού (γραμμικοί διανυσματικοί χώροι και γραμμικοί τελεστές) και την υιοθέτηση ενός γραμμικού δυναμικού νόμου εξέλιξης (εξίσωση Schrödinger).

Ο Dirac προτείνει την αρχή της υπέρθεσης ως την κύρια διαφορά ανάμεσα στην κλασική και στην κβαντική φυσική.

0.2. **Η αρχή της υπέρθεσης (P.A.M. Dirac 1930).** Η γενική αρχή της υπέρθεσης στην κβαντική μηχανική εφαρμόζεται στις καταστάσεις [...] κάθε δυναμικού συστήματος. Απαιτεί από εμάς να κάνουμε την υπόθεση ότι ανάμεσα σε αυτές τις καταστάσεις υφίστανται ιδιαίτερες σχέσεις που είναι τέτοιες ώστε κάθε φορά που το σύστημα βρίσκεται σε μια καθορισμένη κατάσταση να μπορούμε να θεωρήσουμε ότι βρίσκεται εν μέρει σε μία από δύο ή περισσότερες άλλες καταστάσεις. Η αρχική κατάσταση θα πρέπει να θεωρηθεί ως *υπέρθεση* των δύο ή περισσότερων νέων καταστάσεων, κατά τρόπον που δεν μπορεί να κατανοηθεί με βάση κλασικές ιδέες. Κάθε κατάσταση μπορεί να θεωρηθεί ως το αποτέλεσμα υπέρθεσης δύο ή περισσότερων άλλων κατάστάσεων και, μάλιστα, αυτό μπορεί να γίνει με άπειρους τρόπους.[1] Αντίστροφα, οποιεσδήποτε δύο ή περισσότερες καταστάσεις μπορούν να υπερτεθούν ώστε να δώσουν μια νέα κατάσταση.[2] Η διαδικασία έκφρασης μιας κατάστασης ως το αποτέλεσμα υπέρθεσης ενός αριθμού διαφορετικών καταστάσεων είναι μια μαθηματική διαδικασία που είναι πάντοτε επιτρεπτή, ανεξάρτητα από την αναφορά σε άλλες φυσικές συνθήκες, όπως η διαδικασία της ανάλυσης ενός κύματος στις συνιστώσες της μέσω της ανάλυσης Fourier. Το αν είναι χρήσιμη αυτή η ανάλυση, πράγματι, εξαρτάται από τις ιδιαίτερες συνθήκες του προβλήματος που εξετάζεται. (σ. 12)

Όταν μια κατάσταση σχηματίζεται ως υπέρθεση δύο άλλων καταστάσεων, αυτή θα έχει ιδιότητες που είναι με κάποιο ασαφή τρόπο ενδιάμεσες μεταξύ των ιδιοτήτων των δύο αρχικών καταστάσεων και προσεγγίζουν λιγότερο ή περισσότερο σε κάποιες από αυτές ανάλογα με το μεγαλύτερο ή μικρότερο 'βάρος' που αποδίδεται σε αυτή την κατάσταση στη διαδικασία υπέρθεσης. Η νέα κατάσταση ορίζεται πλήρως από τις αρχικές καταστάσεις όταν τα σχετικά βάρη στη διαδικασία υπέρθεσης είναι γνωστά, μαζί με μια διαφορά φάσης. Η ακριβής σημασία των βαρών και των φάσεων περιγράφεται από τη μαθηματική θεωρία (σ.13)

0.2.1. *Σχόλιο.* [1] Έστω ένα παρατηρήσιμο A το οποίο αναπαρίσταται από έναν αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A}$ σε ένα N-διάστατο ($N < \infty$) μιγαδικό χώρο Hilbert, $\mathcal{H}$. Σύμφωνα με τα μαθηματικά της κβαντικής μηχανικής, μπορούμε να επιλέξουμε μια ορθοκανονική βάση του $\mathcal{H}$ η οποία συγκροτείται από ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$, u_{n_j} με $n = 1, 2, .., M$

και $j = 1, 2, ..., d(n)$. Τότε κάθε διάνυσμα ψ του χώρου Hilbert, $\mathcal{H}$ γράφεται ως υπέρθεση των καταστάσεων που αντιστοιχούν στα διανύσμα τα της βάσης ως εξής:

$$\psi = \sum_{n=1}^{M} \sum_{j=1}^{d(n)} \left(u_{n_j}, \psi\right) u_{n_j}.$$

Το ίδιο μπορούμε να κάνουμε για οποιοδήποτε άλλο αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{B}$, μετατιθέμενο ή μη με τον $\hat{A}$, που αντιστοιχεί σε κάποιο παρατηρήσιμο B. Άρα, υπάρχουν πάρα πολλοί τρόποι να εκφρασθεί η τυχούσα κατάσταση ως υπέρθεση άλλων καταστάσεων.

[2] Αυτό είναι προφανές σε μαθηματικό επίπεδο, αφού οι καταστάσεις αναπαρίστανται ως διανύσματα ενός χώρου Hilbert. Προσοχή όμως! Δεν αντιστοιχούν όλα τα διανύσματα που γράφονται ως γραμμικός συνδυασμός δύο διανυσμάτων σε ένα χώρο Hilbert φυσικώς πραγματοποιήσιμες καταστάσεις. Αν δύο διανύσματα $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ αποτελούν διαφορετικές ιδιοκαταστάσεις του τελεστή που αναπαριστά τη μάζα ή το ηλεκτρικό φορτίο, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός του δεν αποτελεί φυσικώς πραγματοποιήσιμη κατάσταση. Το γεγονός αυτός φανερώνει την ισχύ *κανόνων υπερεπιλογής*. Με άλλα λόγια, η αρχή της υπέρθεσης εκφράζεται μαθηματικά με τη γραμμικότητα του διανυσματικού χώρου χωρίς να ταυτίζεται με αυτήν.

0.3. **Η αρχή της υπέρθεσης και η απροσδιοριστία των αποτελεσμάτων (P.A.M. Dirac 1930).** Η υπόθεση σχέσεων υπέρθεσης ανάμεσα σε καταστάσεις είναι δυνατή μόνο αν αναγνωρίσουμε τη σημασία της διαταραχής που συνοδεύει μια παρατήρηση και τη συνακόλουθη απροσδιοριστία ως προς το αποτέλεσμα της παρατήρησης. Όταν παρατηρούμε ένα ατομικό σύστημα που βρίσκεται σε ορισμένη κατάσταση, γενικά το αποτέλεσμα δεν είναι καθορισμένο, δηλαδή αν το πείραμα εκτελεσθεί πολλές φορές υπό ταυτόσημες συνθήκες, τα αποτελέσματα που λαμβάνουμε είναι διαφορετικά. Αποτελεί νόμο της φύσης, όμως, ότι αν το πείραμα επαναληφθεί πάρα πολλές φορές, οι φορές που θα λάβουμε το κάθε συγκεκριμένο αποτέλεσμα είναι ένα ορισμένο κλάσμα του αριθμού των επαναλήψεων του πειράματος, οπότε υπάρχει μια καθορισμένη *πιθανότητα* αυτό να λάβει χώρα. (σ.14)

0.3.1. *Σχόλιο.* Θεωρείστε μια κατάσταση του κβαντικού συστήματος που έχει τη μορφή,

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2,$$

με $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ και $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, όπου $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$. Η κατάσταση αυτή είναι υπέρθεση δύο ιδιοκαταστάσεων του παρατηρήσιμου του A και ισχύει ότι

$$\Delta_\psi A = \langle\psi|\, \hat{A}^2 \,|\psi\rangle - \Big(\langle\psi|\, \hat{A} \,|\psi\rangle\Big)^2 \neq 0$$

0.4. **Η μη κλασική φύση της υπέρθεσης (P.A.M. Dirac 1930).** Η μη κλασική φύση της υπέρθεσης αναδεικνύεται αν θεωρήσουμε την υπέρθεση δύο καταστάσεων A και B οι οποίες είναι τέτοιες ώστε να υπάρχει μια παρατήρηση η οποία αν γίνει όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση A είναι βέβαιο ότι θα λάβουμε ένα συγκεκριμένο αποτέλεσμα, ας πούμε a, ενώ αν αυτή γίνει όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση B είναι βέβαιο ότι θα προκύψει ένα διαφορετικό αποτέλεσμα, έστω το b. Ποιο θα είναι το αποτέλεσμα της μέτρησης όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση υπέρθεσης; Η απάντηση είναι ότι το αποτέλεσμα θα είναι κάποιες φορές a και κάποιες φορές b σύμφωνα με έναν πιθανοκρατικό νόμο που εξαρτάται από τα σχετικά βάρη των A και B στη διαδικασία της υπέρθεσης. Δεν θα είναι ποτέ διαφορετικό από τα a και b. *Ο ενδιάμεσος χαρακτήρας της κατάστασης που διαμορφώνεται με υπέρθεση εκφράζεται, άρα μέσω του γεγονότος ότι η πιθανότητα ενός συγκεκριμένου αποτελέσματος μέτρησης είναι ενδιάμεση των πιθανοτήτων που προκύπτουν για τις αρχικές καταστάσεις* [Σημ. δική μου: αυτό, παρατηρεί ο Dirac δεν ισχύει γενικά. Ισχύει όμως όταν οι αρχικές πιθανότητες είναι μηδέν ή μονάδα] *και όχι μέσω του γεγονότος ότι το ίδιο το αποτέλεσμα είναι ενδιάμεσο των αντιστοίχων αποτελεσμάτων στις αρχικές καταστάσεις.* (σ.13)

... οι άνθρωποι προσπάθησαν να διαπιστώσουν αναλογίες με συστήματα στην κλασική μηχανική, όπως οι ταλαντούμενες χορδές ή μεμβράνες, οι οποίες διέπονται απο γραμμικές εξισώσεις και, άρα, γι αυτές ισχύει η αρχή της υπέρθεσης. Τέτοιες αναλογίες αναλογίες οδήγησαν στην απόδοση στην κβαντική μηχανική του ονόματος «Κυματομηχανική». Ωστόσο, είναι σημαντικό να θυμόμαστε ότι η υπέρθεση που συμβαίνει στην κβαντική μηχανική είναι ουσιωδώς διαφορετικής φύσης από οποιαδήποτε συμβαίνει στην κλασική θεωρία, όπως υποδεικνύει το γεγονός ότι η κβαντική αρχή της υπέρθεσης απαιτεί απροσδιοριστία των αποτελεσμάτων της παρατήρησης για να μπορεί να επιδεχθεί μια νοηματικά αποδεκτή φυσική ερμηνεία. Δηλαδή, οι αναλογίες μπορεί να είναι παραπλανητικές. (σ.14)

0.5. **Η εξίσωση Schrödinger και η αρχή της υπέρθεσης (P.A.M. Dirac 1930).** Η υπόθεση σχέσεων υπέρθεσης ανάμεσα σε καταστάσεις, οδηγεί σε μια μαθηματική θεωρία στην οποία οι εξισώσεις που ορίζουν την κατάσταση είναι γραμμικές ως προς τους αγνώστους. (σ. 14)

Η αρχή της υπέρθεσης εφαρμόζεται σε αυτές τις καταστάσεις κίνησης καθ′ όλη τη διάρκεια του χρόνου που παραμένει το σύστημα αδιατάρακτο, πράγμα που σημαίνει ότι αν μια σχέση υπέρθεσης ισχύει για συγκεκριμένες καταστάσεις τη χρονική στιγμή t_0 και δίνει λαβή για μια γραμμική εξίσωση ανάμεσα στα αντίστοιχα kets, την εξίσωση,

$$|R_{t_0}\rangle = c_1\,|A_{t_0}\rangle + c_2\,|B_{t_0}\rangle\,,$$

η ίδια υπέρθεση θα πρέπει να ισχύει ανάμεσα στις κατατάσεις κίνησης καθ′ όλη τη διάρκεια στην οποία το σύστημα είναι αδιατάρακτο και πρέπει να οδηγεί στην ίδια εξίσωση ανάμεσα στα kets που αντιστοιχούν σε αυτές τις καταστάσεις σε κάθε χρονική στιγμή t (εντός του χρονικού διαστήματος που το σύστημα είναι αδιατάρακτο), δηλαδή, την εξίσωση

$$|R_t\rangle = c_1\,|A_t\rangle + c_2\,|B_t\rangle\,,$$

δεδομένου ότι οι αυθαίρετοι αριθμητικοί παράγοντες με τους οποίους πολλαπλασιάζονται τα είναι κατάλληλα επιλεγμένοι. Από τα παραπάνω συνεπάγεται ότι τα διανύσματα $|P_t\rangle$ είναι γραμμικές συναρτήσεις των $|P_{t_0}\rangle$ και κάθε $|P_t\rangle$ είναι το αποτέλεσμα της εφαρμογής ενός γραμμικού τελεστή στο $|P_{t_0}\rangle$. Σε συμμβολική μορφή,

$$|P_t\rangle = T\,|P_{t_0}\rangle\,,$$

όπου T είναι ένας γραμμικός τελεστής ανεξάρτητος από το P και εξαρτώμενος μόνο απο το t (και το t_0). (σ.108-9)

0.6. **Καταστάσεις μίγματος.** Οι καθαρές καταστάσεις ενός κβαντικού συστήματος συμπυκνώνουν τη μέγιστη δυνατή πληροφορία που διαθέτουμε για το σύστημα και αναπαρίστανται, μαθηματικά, από διανύσματα σε κάποιο χώρο Hilbert $\mathcal{H}$. Τι γίνεται, όμως, αν αγνοούμε την **καθαρή κατάσταση** του συστήματος; Τι γίνεται αν με βάση τα δεδομένα που διαθέτουμε για το κβαντικό σύστημα, το καλύτερο που μπορούμε να συναγάγουμε γι αυτό είναι ότι το σύστημα είναι δυνατόν να βρίσκεται σε ένα σύνολο καθαρών καταστάσεων, η οποία αναπαρίσταται από μια οικογένεια διανυσμάτων $\{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_d\}$,με πιθανότητες $\{w_1, w_2, ..., w_d\}$, αντίστοιχα; Σε αυτή την περίπτωση θα λέμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε **κατάσταση μίγματος,**

$$\rho := \{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_d; w_1, w_2, ..., w_d\}\,,$$

όπου $\psi_i \in \mathcal{H},\ 0 < w_i \leq 1$ **και** $\sum\limits_{i=1}^{d} w_i = 1,\ i = 1, ...d$. Οι πιθανότητες w_i είναι κλασικές πιθανότητες, υπό την έννοια ότι δεν προκύπτουν από τον κανόνα του Born, και εκφράζουν την άγνοιά μας για το ποια είναι η καθαρή κατάσταση του συστήματος.

Επίσης, οι καταστάσεις μίγματος μπορούν να κατανοηθούν ως καταστάσεις που περιγράφουν μια στατιστική συλλογή πανομοιότυπων κβαντικών συστημάτων, καθένα εκ των οποίων βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση ψ_i. Οι τιμές πιθανοτήτων w_i να εκφράζουν την κλασική πιθανότητα ένα σύστημα της στατιστικής συλλογής να βρίσκεται στην συγκεκριμένη κατάσταση ψ_i.

Σημειώστε ότι οι καταστάσεις μίγματος δεν έχουν να κάνουν αποκλειστικά με την κβαντική μηχανική. Συναντώνται, επίσης, και στην κλασική στατιστική μηχανική όταν μελετάμε σύνθετα συστήματα αποτελούμενα από πολλά όμοια κλασικά συστήματα και αγνοούμε, ή δεν ενδιαφερόμαστε να γνωρίζουμε για τη μελέτη τους, την ακριβή κατάσταση του κλασικού συστήματος.

0.7. **Πιθανότητα μέτρησης αποτελέσματος παρατηρήσιμου σε κατάσταση μίγματος.** Αν θεωρήσουμε ένα παρατηρήσιμο A που αναπαρίσταται από έναν αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A}$ σε ένα χώρο Hilbert $\mathcal{H}$. Ας θεωρήσουμε ότι το κβαντικό μας σύστημα είναι δυνατόν να βρίσκεται σε μία από τις καταστάσεις $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_d \in \mathcal{H}$. Σύμφωνα με τον κανόνα του Born,

$$Prob(A = a_n; |\psi_i\rangle) = \langle\psi_i|\,\hat{P}_n\,|\psi_i\rangle\,, i = 1, ...d,$$

όπου $\hat{P}_n$ ο προβολικός τελεστής που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή a_n, σύμφωνα με τη φασματική ανάλυση του $\hat{A}$.

Επειδή δεν γνωρίζουμε σε ποια κατάσταση βρίσκεται το κβαντικό σύστημα, περιγράφουμε την κατάσταση αυτού ως κατάσταση μίγματος $\rho = \{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_d; w_1, w_2, ..., w_d\}$ με w_i την πιθανότητα να βρίσκεται το σύστημα στην κατάσταση ψ_i. Τα ενδεχόμενα να βρίσκεται το σύστημα σε οποιαδήποτε από τις παραπάνω καθαρές καταστάσεις είναι ανεξάρτητες, επομένως από το νόμο για την ολική πιθανότητα έχουμε ότι

$$Prob(A = a_n; \rho) = \sum_{i=1}^{d} w_i \langle\psi_i| \hat{P}_n |\psi_i\rangle ,$$

υποθέτοντας ότι οι κβαντικές και οι κλασικές πιθανότητες είναι μεταξύ τους ανεξάρτητες.

0.8. **Ίχνος τελεστή.** Έστω $\hat{B}$ ένας τελεστής και $\{e_1, e_2, ..., e_N\}$ μια ορθοκανονική βάση σε ένα N- διάστατο χώρο Hilbert $\mathcal{H}$. Ορίζουμε το **ίχνος** του $\hat{B}$ με τη σχέση,

$$tr\hat{B} := \sum_{i=1}^{N} \langle e_i| \hat{B} |e_i\rangle .$$

Το ίχνος του τελεστή είναι ανεξάρτητο από την ορθοκανονική βάση που επιλέγουμε και είναι γραμμική συνάρτηση του $\hat{B}$.

Με τη βοήθεια του ίχνους μπορούμε να εκφράσουμε τον κανόνα του Born για ένα παρατηρήσιμο A που αναπαρίσταται από τον αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A}$ ως εξής:

$$Prob(A = a_n; |\psi\rangle) = tr(\hat{P}_\psi \hat{P}_n),$$

$$\langle A\rangle_\psi = tr(\hat{P}_\psi \hat{A}),$$

όπου $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, ο προβολικός τελεστής στην κατάσταση ψ και $\hat{P}_n$ ο προβολικός τελεστής που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή a_n, σύμφωνα με τη φασματική ανάλυση του $\hat{A}$.

0.9. **Καταστάσεις μίγματος και τελεστές (πίνακες) πυκνότητας.** Για την κατάσταση μίγματος κατάσταση μίγματος $\rho = \{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_d; w_1, w_2, ..., w_d\}$ ορίζουμε τον **τελεστή μίγματος**

$$\hat{\rho} := \sum_{i=1}^{d} w_i \hat{P}_{|\psi_i\rangle},$$

όπου w_i η κλασική πιθανότητα το διάνυσμα κατάστασης να είναι το $|\psi_i\rangle$. Τότε

$$Prob(A = a_n; \rho) = \sum_{i=1}^{d} w_i \langle\psi_i| \hat{P}_n |\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^{d} w_i tr(\hat{P}_{|\psi_i\rangle} \hat{P}_n) = tr\left(\sum_{i=1}^{d} w_i \hat{P}_{|\psi_i\rangle} \hat{P}_n\right),$$

άρα,

$$Prob(A = a_n; \rho) = tr\left(\hat{\rho}\hat{P}_n\right).$$

Η αντίστοιχη έκφραση για τις **αναμενόμενες τιμές** των παρατηρήσιμων,

$$\langle A \rangle_\rho = tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right).$$

0.9.1. *Μαθηματική σημείωση.* Ο τελεστής μίγματος $\hat{\rho}$ έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

(1) Ο $\hat{\rho}$ είναι αυτοσυζυγής, δηλαδή, $\hat{\rho} = \hat{\rho}^*$
(2) Ο $\hat{\rho}$ είναι θετικά ημιορισμένος, για κάθε διάνυσμα $|\psi\rangle$, $\langle\psi|\,\hat{\rho}\,|\psi\rangle \geq 0$.
(3) $tr\hat{\rho} = 1$

Οι τελεστές που ικανοποιούν τις τρεις παραπάνω συνθήκες καλείται **τελεστής πυκνότητας.**

0.10. **Η διάκριση υπερθέσεων και μιγμάτων είναι ένα κβαντικό γεγονός.** Έστω ένα παρατηρήσιμο A που αναπαρίσταται από έναν αυτοσυζυγή τελεστή $\hat{A}$ σε ένα N-διάστατο ($N < \infty$) μιγαδικό χώρο Hilbert, $\mathcal{H}$ και $\left\{|a_i\rangle_{i=1}^N\right\}$ μια ορθοκανονική βάση που ορίζεται από τα ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$.

Θεωρούμε το ανάπτυγμα τυχόντος διανύσματος ως προς τη βάση αυτή,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i\,|a_i\rangle\,, \qquad c_i \in \mathbb{C}$$

και τον τελεστή πυκνότητας

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{N} |c_i|^2\,\hat{P}_{|a_i\rangle}$$

όπου $\hat{P}_{|a_i\rangle} = |a_i\rangle\langle a_i|$. Τότε για κάθε $\hat{B}$ τέτοιο ώστε $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$,

$$\langle B \rangle_\psi = \langle B \rangle_\rho$$

Η παραπάνω πρόταση μας λέει ότι ***αναγκαία συνθήκη*** **για να διακρίνουμε υπερθέσεις από μίγματα είναι η μη μεταθετότητα των τελεστών που αναπαριστούν τα παρατηρήσιμα.**