

ΑΝΤΩΝΙΟΥ Α. ΣΤΡΕΚΛΑ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ

Η ΔΙΑΤΑΞΙΣ ΤΩΝ ΤΕΛΕΣΤΩΝ
ΕΙΣ ΤΗΝ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

ΔΙΑΤΡΙΒΗ ΕΠΙ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΑ

Εγκριθείσα υπό της Φυσικομαθηματικής Σχολής του Πανεπιστημίου Πατρών

ΠΑΤΡΑΙ 1980

Η έγκριση της Διδακτορικής Διατριβής υπό της Φυσικομαθηματικής Σχολής του Πανεπιστημίου Πατρών δεν υποδηλοί αποδοχήν των γνώμων του συγγραφέως.

(Ν. 5343/1932, άρθρο. 202)

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διατριβή εξεπονήθη εις την Έδραν Θεωρητικής Φυσικής του Πανεπιστημίου Πατρών τη υποδείξει του Καθηγητού κ. Αστερίου Γιαννούση, προς τον οποίον εκφράζω την ευγνωμοσύνην μου δια την καθοδήγησιν και την αμέριστον συμπαράστασιν του καθ' όλην την διάρκειαν της εκπονήσεως της.

Ευχαριστώ επίσης τους βοηθούς της Έδρας Θεωρητικής Φυσικής κ. Κ. Βλάχον και κ. Β. Παπαθέου δια την εν γένει συνεργασίαν των.

Τέλος ευχαριστώ όλους όσους καθ' οιονδήποτε τρόπον με εβοήθησαν.

ΠΙΝΑΞ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

	Σελίς
ΕΙΣΑΓΩΓΗ	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟΝ Ι. Κβαντομηχανικαί παραστάσεις.	
1. Shrödinger παράστασις.	6
2. Wigner παράστασις.	8
3. Feynman παράστασις.	12
ΚΕΦΑΛΑΙΟΝ ΙΙ. Μέθοδοι υπολογισμού των propagator.	
4. Στάσιμα καταστάσεις.	17
5. Μη στάσιμα καταστάσεις.	18
6. Μία άμεσος λύσις.	22
ΚΑΦΑΛΑΙΟΝ ΙΙΙ. Η Διάταξις των τελεστών και εφαρμογαί της θεωρίας διατάξεως εις την μη σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν.	
7. Διάταξις των Boson τελεστών.	28
8. Κανονική διάταξις του τελεστού $\exp \{ k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (aa^+ + a^+a) \}.$	31
9. Μη στάσιμα συστήματα τετραγωνικής μορφής.	35
10. Μη στάσιμα συστήματα τετραγωνικής μορφής. με γραμμικούς όρους	41

ΚΑΦΑΛΑΙΟΝ Γ'. Εφαρμογὰί τῆς θεωρίας διατάξεως εἰς τὴν σχετικιστικὴν κβαντομηχανικὴν.	
11. Wigner παράστασις.	44
12. Σχετικιστικὸς propagator.	48
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	54
SUMMARY	56
BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	58

1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Εις την κβαντομηχανική λαμβάνεται ως αρχική έννοια η κατάσταση ενός συστήματος, η οποία περιγράφεται εις μίαν δεδομένην στιγμή από μία κυματοσυνάρτηση $\Psi(q)$. Η κυματοσυνάρτησις $\Psi(q)$ είναι στοιχείον του χώρου Hilbert ήτοι είναι τετραγωνικώς ολοκληρώσιμος, και τούτο διότι το μέγεθος $|\Psi(q)|^2$ λαμβάνεται ως η αντίστοιχος πυκνότης πιθανότητος. Επί πλέον αυτή είναι συνεχής και έχει παράγωγον συνεχή κατά τμήματα ως προς q . Η δυναμική του συστήματος περιγράφεται τη βοήθεια μιας χρονικώς εξαρτωμένης κυματοσυναρτήσεως $\Psi(q, t)$, η οποία επί πλέον είναι συνεχής ως προς t και ικανοποιεί την εξίσωσιν κινήσεως του Schrödinger. Τα παρατηρήσιμα μεγέθη παρίστανται αμφιμονοσημάντως από ερμητιανούς τελεστές και η μέση τιμή των δίδεται εκ της σχέσεως.

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(q, t) F \left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, t \right) \Psi(q, t) dq \quad (1)$$

Το 1943 μια άλλη παράστασις ανεπτύχθη υπό του Feynman. Εις την παράστασιν αυτήν η εξίσωσις κινήσεως του Schrödinger αντικαθίσταται από μίαν ολοκληρωτικήν εξίσωσιν, ο πυρήν της οποίας είναι η Green συνάρτησις της εξισώσεως του Schrödinger, και ονομάζεται propagator του συστήματος. Ο Feynman έδειξε επίσης ότι ο εν λόγω πυρήν δίνεται εξ ενός path integral. Η μέθοδος αυτή εν τούτοις, δεν δύναται να μελετήσῃ συστήματα τα οποία περιέχουν spin ή άλλους παρόμοιους τελεστές με απλόν τρόπον. Ευρίσκει περισσότερον εφαρμογήν εις συστήματα δια τα οποία αι συντεταγμένα και αι συζυγείς ορμαί των είναι επαρκείς δια να τα περιγράψουν. Πολλά από τα συμπεράσματα των path integrals δύναται να επανεκφρασθούν και αρκετά νέα να προκύψουν, από μίαν άλλην μαθηματικήν μέθοδον, ένα είδος λογισμού διατάξεως των τελεστών. Η διάταξις του τελεστού χρονικής εξελίξεως εις κάποιαν μορφήν είναι ιδιαιτέρως χρήσιμος, διότι ο τελεστής αυτός δίδει την χρονικήν εξέλιξιν του συστήματος. Ειδικώτερον η επίδρασις του εν λόγω τελεστού επί της $\delta(q_2 - q_1)$ συναρτήσεως δίδει τον propagator του συστήματος.

Προσφάτως γίνεται προσπάθεια δια την περιγραφήν των κβαντομηχανικών συστημάτων κατ' ευθείαν εις τον χώρο των φάσεων. Η αρχή εγένετο υπό του Wigner το 1932 ο οποίος συσχέτισε την κατάσταση ενός συστήματος με μίαν συνήθη μιγαδικήν συνάρτησιν γνωστή ως Wigner συνάρτησις κατανομής. Έδειξε επίσης ότι με την βοήθειαν της κατανομής αυτής, αι κβαντομηχανικά μέσα τιμαί δύναται να παρασταθούν με την ίδιαν μαθηματικήν μορφήν ως οι αναμενόμεναι τιμαί της κλασικής στατιστικής

μηχανικής. Αργότερον έγινε σαφές ότι η συσχέτισις αυτή, συνδέεται με μίαν αντιστοιχίαν μεταξύ συναρτήσεων τελεστών και των συνήθων μιγαδικών συναρτήσεων, η οποία εισήχθη υπό του Weyl. Η κατανομή του Wigner αντιστοιχεί προς τον τελεστήν της μήτρας πυκνότητος και η εξίσωσις κινήσεως του Heisenberg αυτού αντιστοιχεί προς την εξίσωσιν κινήσεως του Wigner. Άλλοι κανόνες συσχετισμού έχουν επίσης μελετηθή και ορισμένοι εξ αυτών έδωσαν την βάση δια την εισαγωγήν διαφόρων άλλων συναρτήσεων κατανομής. Οι εν λόγω κανόνες συσχετισμού βασίζονται επίσης εις την θεωρίαν διατάξεως των τελεστών.

Η διάταξις ενός τελεστού προσφέρει δύο ωφέλειαι εις την κβαντομηχανικήν. Διά των αντιστοιχιών των διατεταγμένων τελεστών προς τους μιγαδικούς αριθμούς, δυνάμεθα να αντικαταστήσωμεν τους αντιμεταθέτας και τας τροχιάς της κβαντομηχανικής, με συνήθεις διαφορικές εξισώσεις και συνήθη ολοκληρώματα εις τον χώρο των φάσεων. Η δυνατότης αυτή προσφέρει περισσότερον εις την κατανόησιν των κβαντομηχανικών εκφράσεων παρά εις την απλοποίησιν των υπολογισμών.

Κατά δεύτερον λόγον η ανάπτυξις των τελεστών εις κάποιαν κατάλληλον μορφήν διευκολύνει και απλοποιεί την επίδρασιν των τελεστών επί των διαφόρων συναρτήσεων. Ατυχώς η διάταξις των τελεστών αν και είναι ένα από τα πρώτα προβλήματα της κβαντομηχανικής, δεν είναι μια απλή διαδικασία. Εν τούτοις δια εκθετικούς τελεστάς τετραγωνικής μορφής ως προς τας κανονικάς συζυγείς μεταβλητάς η διάταξις επιτυγχάνεται δια της μεθόδου της παραμετρικής παραγωγίσεως.

Ημείς εδώ θα ασχοληθώμεν με τας δύο αυτάς εφαρμογάς της θεωρίας διατάξεως των τελεστών. Ιδιαιτέρως θα εύρωμεν τους ακριβείς propagators μη σχετικιστικών συστημάτων, στασίμων ή μη, τετραγωνικής μορφής, ανάγοντες το πρόβλημα εις την λύσιν κλασικών εξισώσεων της κινήσεως. Επίσης θα επεκτείνωμεν την μέθοδον και εις την σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν, ένθα θα εύρωμεν τον advance propagator του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Θα επεκτείνωμεν τέλος την Wigner παράστασιν εις την σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν, ένθα θα ορίσωμεν και θα λύσωμεν την σχετικιστικήν εξίσωσιν του Wigner.

Η παρούσα διατριβή περιλαμβάνει τέσσαρα κεφάλαια. Εις το πρώτο κεφάλαιον περιγράφονται αι τρεις παραστάσεις της κβαντομηχανικής. Ειδικότερον αναφέρεται η κλασική και η κβαντομηχανική έννοια της καταστάσεως ενός συστήματος καθώς και αι αντίστοιχαι εξισώσεις της κινήσεως. Περιγράφεται η παράστασις του Wigner και αποδεικνύεται η μετατροπή της εξισώσεως κινήσεως του Heisenberg εις την εξίσωσιν του Wigner, τη βοήθειά των τελεστών του Bopp. Ακολούθως αναπτύσσεται η παράστασις του Feynman, δίδωμεν την εξίσωσιν την οποίαν ικανοποιεί ο propagator, καθώς και ωρισμένας ιδιότητας αυτού. Αναφέρομεν επίσης την χρησιμότητα της παραστάσεως αυτής και δίδωμεν τέλος την έννοιαν του path integral. Εις το δεύτερο κεφάλαιον περιγράφωμεν ωρισμένας μεθόδους υπολογισμού των propagators δια στάσιμα και μη στάσιμα συστήματα. Μελετάται η προσεγγιστική μέθοδος, καθώς και η μέθοδος υπολογισμού δια των ολοκληρωμάτων της κινήσεως.

Διεξοδικώτερον μελετάται μια άμεσος λύσις δια τον propagator, την οποίαν και χρησιμοποιούμεν δια τους υπολογισμούς μας. Εις το τρίτον κεφάλαιον αναπτύσσονται ορισμένα θεωρήματα διατάξεως των τελεστών. Αναπτύσσεται ο τελεστής $\exp \{ k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (aa^+ + a^+a) \}$ εις κανονικήν μορφήν και δίδομεν μια άμεσον εφαρμογήν εις την στατιστικήν. Ακολούθως ευρίσκομεν τους propagators ωρισμένων μη στάσιμων συστημάτων. Μέρος του κεφαλαίου αυτού απετέλεσε την δημοσίευση εις το περιοδικόν Physica Scripta vol. 18 13 – 17 ενώ το υπόλοιπον είναι μια επέκτασις της εν λόγω δημοσιεύσεως δια την περίπτωσιν χρονικώς εξαρτωμένων τελεστών του Hamilton. Εις το τέταρτον κεφάλαιον ορίζεται ο σχετικιστικός Wigner τελεστής του οποίου ευρίσκομεν τόσον τας ιδιοσυναρτήσεις όσον και τας ιδιοτιμάς, αι οποίαι είναι η διαφορά των ιδιοτιμών δύο εξισώσεων του Dirac. Η παράγραφος αυτή απετέλεσεν την δημοσίευση εις το περιοδικόν Lettere al Nuovo Cimento vol. 18, No 11, 1997. Τέλος δια της αναπτυχθείσης μεθόδου, υπολογίζομεν τον σχετικιστικόν propagator του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

2 Κβαντομηχανικά Παραστάσεις

2.1 Shrödinger παράστασις

Ας θεωρήσωμεν ένα σύστημα το οποίον περιγράφεται από την κλασσική συνάρτηση $H(q, p, t)$ του Hamilton. Τα p και q είναι το σύνολον των κανονικών συντεταγμένων και ορμών και $H(q, p, t)$ είναι η ενέργεια του συστήματος η οποία δίδεται ως συνάρτησις αυτών και πιθανώς και του χρόνου. Η συνάρτησις αυτή ως γνωστόν λαμβάνεται μέσω της συναρτήσεως $L(q, \dot{q}, t)$ του Lagrange. Εις την κλασσικήν μηχανικήν του Hamilton το πρόβλημα το οποίον μελετάται έχει ως εξής:

Δεδομένης της θέσεως q_0 και της ορμής p_0 του συστήματος δια κάποιαν αρχικήν χρονικήν στιγμήν t_0 να ευρεθεί η κατάστασις αυτού δι όλους του μετέπειτα χρόνους. Τούτο σημαίνει, να ευρεθί η τροχιά $q(t)$ του συστήματος η οποία ικανοποιεί τας αρχικάς συνθήκας $q(t_0) = q_0, p(t_0) = p_0$.

Το πρόβλημα συνίσταται κατ' ουσίαν εις την λύσιν των κανονικών διαφορικών εξισώσεων του Hamilton [1].

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (2)$$

Απεικονίζουμε τέλος τας συναρτήσεις $q(t)$ και $p(t)$ εις τον χώρο των p και q , ο οποίος ονομάζεται χώρος των φάσεων και ούτω είμεθα εις θέσιν να γνωρίζομεν ανά πάσαν στιγμήν την θέσιν και την ορμήν του συστήματος.

Εις την κβαντομηχανικήν το ανάλογον πρόβλημα τίθεται ως ακολούθως.

Δεδομένης της αρχικής καταστάσεως $\psi(q)$ δια κάποιαν χρονικήν στιγμήν t_0 ζητείται η κατάστασις $\psi(q, t)$ δι' όλους τους μετέπειτα χρόνους, η οποία να ικανοποιή την αρχικήν συνθήκην $\psi(q, t_0) = \psi_0(q)$. Εις την περίπτωσιν αυτήν η δυναμική του προβλήματος περιγράφεται με την βοήθειαν της εξισώσεως του Shrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \hat{H} \psi(q, t) \quad (3)$$

Ο τελεστής \hat{H} σχετίζεται με την κλασσικήν συνάρτησιν του Hamilton μέσω της σχέσεως

$$\hat{H} = \hat{H} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, q, t \right) \quad (4)$$

Εάν ο τελεστής του Hamilton δεν εξαρτάται αναλυτικώς εκ του χρόνου, η λύσις της εξισώσεως του Shrödinger η οποία ικανοποιεί και την αρχικήν συνθήκην είναι της μορφής:

$$\psi(q, t) = \exp \left\{ -(i/\hbar) \hat{H} t \right\} \psi_0(q) \quad (5)$$

Ο εκθετικός τελεστής της σχέσεως αυτής ονομάζεται τελεστής εξελίξεως και δίδει την χρονική εξέλιξιν της κυματοσυναρτήσεως. Δύναται ευκόλως να δειχθή ότι η σχέσις αυτή γράφεται και υπό την ακόλουθον ολοκληρωτικήν μορφήν

$$\psi(q, t) = \int K(q, t; q', 0) \psi_0(q') dq' \quad (6)$$

Ενθα

$$k(q, t; q', 0) = \exp \left\{ -(i/\hbar) \hat{H} t \right\} \delta(q - q') \quad (7)$$

Ο πυρήν K ονομάζεται propagator του συστήματος και θα εξετασθή λεπτομερέστερον εις άλλην παράγραφον.

Ως γνωστόν η κβαντομηχανική χρειάζεται το ήμισυ του αριθμού των ανεξαρτήτων μεταβλητών έναντι της κλασσικής μηχανικής. Τούτο έχει ως συνέπειαν η κυματοσυναρτήσις να είναι συναρτήσις μόνον των συντεταγμένων.

Εις μιαν άλλην παράστασιν το φυσικό σύστημα περιγράφεται από μιαν κυματοσυνάρτησιν $\Phi(p, t)$ των ορμών. Αι δύο κυματοσυναρτήσις συνδέονται μεταξύ των μέσω μετασχηματισμού Fourier. Εις την παράστασιν αυτήν ο τελεστής του Hamilton της εξισώσεως του Shrödinger συνδέεται με την κλασσικήν συνάρτησιν του Hamilton μέσω της ακολούθου σχέσεως:

$$\hat{H} = \hat{H} \left(p, i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, t \right) \quad (8)$$

2.2 Wigner παράστασις

Η έννοια της παραγωγίσεως ενός φυσικού μεγέθους ως προς τον χρόνο, δεν δύναται να ορισθεί κατά τον συνηθή τρόπον της κλασσικής δυναμικής. Εις την κβαντομηχανικήν ορίζομεν ως παράγωγον \hat{F} του μεγέθους F το μέγεθος του οποίου η μέση τιμή ισούται προς την παράγωγον της μέσης τιμής $\langle F \rangle$ ήτοι εξ ορισμού έχουμε

$$\langle \hat{F} \rangle = \left(\langle F \rangle \right)'. \quad (9)$$

Λαμβάνοντες υπ' όφιν την εξίσωσιν Shrödinger η ανωτέρω ταυτότης τη βοήθεια της σχέσεως (8), δίδει την ακόλουθον εξίσωσιν της κινήσεως

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] \quad (10)$$

Ο αντιμεταθέτης δύο τελεστών ορίζεται ως εξής:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (11)$$

Ως κλασσικό παράδειγμα αναρέομεν τον αντιμεταθέτην των τελεστών \hat{p} και \hat{q} της ορμής και της θέσεως

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (12)$$

Δεξιά της τελευταίας σχέσεως υπονοείται ο μοναδιαίος τελεστής. Επί πλέον η σχέση αυτή συνδέεται αμέσως με την αρχή αβεβαιότητος του Heisenberg.

Εις την περίπτωσιν κατά την οποίαν ο τελεστής του Hamilton δεν εξαρτάται αναλυτικώς εκ του χρόνου, η λύσις της εξισώσεως κινήσεως έχει ως εξής:

$$\hat{F}(t) = \exp \left\{ (i/\hbar)\hat{H}t \right\} \hat{F} \left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) \exp \left\{ -(i/\hbar)\hat{H}t \right\} \quad (13)$$

Η εξίσωσις κινήσεως του τελεστού \hat{F} δύναται να ευρεθή εκόλως παραγωγίζοντες την σχέσιν (13)

$$i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = [\hat{F}, \hat{H}] \quad (14)$$

Κατά συνέπειαν η μέση τιμή του μεγέθους F δίδεται εκ της σχέσεως

$$\langle \hat{F} \rangle = \int \psi_0^*(q) \hat{F}(t) \psi_0(q) dq \quad (15)$$

Εις την κβαντομηχανικήν διακρίνομεν δύο είδη συστημάτων. Τα καθαρά συστήματα οποία δύναται να παρασταθούν από κυματοσυναρτήσεις και τα μεικτά συστήματα τα οποία περιγράφονται από τον τελεστήν της μήτρας πυκνότητος. Η παράστασις

αυτή της κβαντομηχανική, μέσω του τελεστού της μήτρας πυκνότητας είναι ιδιαίτερα χρήσιμος δια συστήματα πολλών σωματιδίων ή δια συστήματα δια τα οποία έχουμε ολίγας πληροφορίες. Η χρονική εξέλιξη του εν λόγω τελεστού, εις την περίπτωση των στασιμων καταστάσεων, δίδεται εκ της σχέσεως (14) και η στατιστική μέση τιμή ενός παρατηρήσιμου είναι το ίχνος

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr(\rho \hat{A}) \quad (16)$$

Η βασική εξίσωση κινήσεως (14) της εν λόγω παραστάσεως, δυνάμει βασικών σχέσεων της θεωρίας των τελεστών [2] δύναται να γραφή

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(\hat{p}, \hat{q}, t) = \left\{ \hat{H} \left(\hat{p} + i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{q}}, \hat{q} - i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}}, t \right) - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t) \right\} \hat{\rho}(\hat{p}, \hat{q}, t) \quad (17)$$

Η εξίσωση αυτή είναι δύσκολον να λυθή γενικώς, δεδομένου ότι αι συναρτήσεις $\rho(\hat{p}, \hat{q}, t)$ είναι συναρτήσεις τελεστών. Σημειώνομεν ότι η παράγωγος συναρτήσεως τελεστών [3] ως προς κάποιον τελεστήν ή κάποιαν παράμετρον δίδεται εκ της σχέσεως:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}(\hat{A}(t)) = \int_0^1 d\lambda D\hat{F}(\hat{A}_\lambda) \frac{d\hat{A}}{dt} \quad (18)$$

Ένθα το D δηλώνει παραγωγήσιν ως προς το όρισμα και ο τελεστής \hat{A}_λ επιδρά ως ακολούθως

$$\hat{A}_\lambda \hat{B} = \hat{A} - \lambda [\hat{A}, \hat{B}] \quad (19)$$

Συμφώνως προς του Borp και Kubo[[4], [5]], η τελεστική διαφορική εξίσωση (17) δύναται να μετατραπή εις μίαν συνήθη διαφορικήν εξίσωσιν με την αντικατάστασιν των τελεστών \hat{p} και \hat{q} με τους κάτωθι τελεστάς:

$$\hat{P} = p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \hat{Q} = q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \quad (20)$$

Επιδρώντες τελικώς εκ δεξιών με τον μοναδιαίον τελεστήν, λαμβάνομεν την εξίσωσιν

$$i\hbar \frac{d}{dt} f(p, q, t) = \left\{ H(\hat{P}, \hat{Q}, t) - H(\hat{P}^*, \hat{Q}^*, t) \right\} f(p, q, t) \quad (21)$$

Η ανωτέρω εξίσωση αποτελεί την εξίσωσιν Wigner. Η λύσις της εξισώσεως είναι η κατανομή Wigner [6] η οποία συνδέεται με τας λύσεις της εξισώσεως του Shrödinger μέσω της σχέσεως:

$$f(p, q, t) = h^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip\tau}{\hbar}} \psi^* \left(q + \frac{\tau}{2} \right) \psi \left(q - \frac{\tau}{2} \right) d\tau \quad (22)$$

Η στατιστική μέση τιμή ενός παρατηρησίμου μεγέθους εις την παράστασιν αυτήν δίδεται υπό μορφήν ολοκληρώματος παρομοίου με εκείνου της κλασσικής πιθανοθεωρίας εις τον χώρο των φάσεων

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr \hat{\rho} \hat{A} = \int dpdq A(p, q, t) f(p, q, t) \quad (23)$$

Ενθα $A(p, q, t)$ είναι ο Weyl [7] μετασχηματισμός του τελεστού $\hat{A}(\hat{p}, \hat{q}, t)$ ήτοι:

$$A(p, q, t) = (2\pi)^{-2} \int d\tau d\theta e^{-i(\theta q + \tau p)} Tr \left[\hat{A}(\hat{p}, \hat{q}, t) \exp \{i(\theta \hat{q} + \tau \hat{p})\} \right] \quad (24)$$

και $f(p, q, t)$ η κατανομή Wigner.

Δύναται να αποδειχθή ότι η κατανομή Wigner είναι ο Weyl μετασχηματισμός του τελεστού της μήτρας πυκνότητας.

Η συνάρτησις Wigner είναι πραγματική και κανονικοποιημένη εις την μονάδα, αλλά δεν είναι θετικώς ορισμένη δια ορισμένα κβαντομηχανικά συστήματα. Τα ολοκληρώματα της συναρτήσεως αυτής ως προς τας συντεταγμένας ή τας ορμάς είναι θετικώς ορισμένα και ως εκ τούτου δύναται να θεωρηθούν ως πυκνότητες πιθανότητος. Δύναται να δειχθή ευκόλως, εφαρμόζοντες την ανισότητα του Shwarts εις την έκφρασιν (22) ότι η συνάρτησις του Wigner είναι απολύτως φραγμένη εκ των άνω

$$|f(p, q, t)| \leq (2/h)^3 \quad (25)$$

Επειδή η συνάρτησις $f(p, q, t)$ είναι κανονικοποιημένη έπεται από την ανισότητα αυτή ότι η $f(p, q, t)$ είναι διάφορος του μηδενός εις έναν όγκον του χώρου των φάσεων μεγαλύτερον του $(h/2)^3$. Το γεγονός αυτό σημαίνει ότι η συνάρτησις του Wigner δεν δύναται να εντοπισθή ως προς p και q και τούτο είναι μια άμεσος συνέπεια της αρχής της αβεβαιότητος. Αν και η συνάρτησις κατανομής του Wigner δεν είναι θετικώς ορισμένη, εν τούτοις η παράστασις αυτή είναι ιδιαιτέρως χρήσιμος διότι δίδει μιαν συστηματικήν μέθοδον αναλύσεως των φυσικών μεγεθών εις δυνάμεις του \hbar . Κατ' αυτόν τον τρόπον δυνάμεθα να λάβωμεν τας κβαντικές διορθώσεις των κλασσικών σχέσεων. Εάν λάβωμεν το όριον της εξισώσεως (21) του \hbar τείνοντος προς το μηδέν καλήγομεν εις την γνωστήν εξίσωσιν της κλασσικής δυναμικής του Liouville, οπότε ο αντιμεταθέτης μεταπίπτει εις την αγκύλην του Poison. Μια συστηματική μελέτη της κατανομής αυτής έχει δοθεί εις την βιβλιογραφίαν [8] όπου απεδείχθη ότι αι ιδιοτιμαί της εξισώσεως του Wigner, δια την περίπτωσιν των στασίμων καταστάσεων είναι η διαφορά των ιδιοτιμών της αντιστοίχου εξισώσεως του Shrödinger.

2.3 Feynman παράστασις

Το 1932 ο Dirac με την εργασία του επί του ρόλου της μηχανικής του Lagrange εις την κβαντικήν θεωρίαν, έθεσε τας βάσεις δια μιαν νέαν παράστασιν της κβαντομηχανικής η οποία ανεπτύχθη αργότερον το 1943 υπό του Feynman [10]. Η κυρία ιδέα της θεωρίας αυτής συνίσταται εις την μελέτην των λύσεων των εξισώσεων της κβαντομηχανικής αντί των ιδίων των εξισώσεων. Εάν η κυματοσυνάρτησις $\psi(q_1, t_1)$ είναι γνωστή δια μιαν δεδομένην χρονική στιγμή t_1 αύτη δύναται να ευρεθή δι' όλους τους μετέπειτα χρόνους. Θεωρούμεν ότι κατά την χρονικήν στιγμήν t_1 κάθε σημείον του χώρου είναι μια πηγή σφαιρικών κυμάτων τα οποία διαδίδονται εκ του σημείου q_1 . Το κύμα το οποίον φθάνει εις το σημείον q_2 κατά την χρονικήν στιγμήν t_2 πρέπει να είναι ανάλογον προς το αρχικόν πλάτος $\psi(q_1, t_1)$, η δέ σταθερά αναλογίας είναι η $K(q_1, t_1; q_2, t_2)$. Συμφώνως προς την αρχήν της επιπροσθέσεως το συνολικόν κύμα δίδεται εκ της σχέσεως

$$\psi(2) = \int K(2, 1)\psi(1)dq_1 \quad (26)$$

Ένθα δια συντομίαν χρησιμοποιούμεν τον συμβολισμόν $j = 1, 2$ δια το σημείον (q_j, t_j) .

Ο πυρήν K παριστάνει μιαν διάδοσιν του συνόλου των συντεταγμένων εκ του σημείου (q_1, t_1) προς το σημείον (q_2, t_2) και ονομάζεται propagator του συστήματος. Εάν η συνάρτησις K είναι γνωστή δυνάμεθα να εύρωμεν την εξέλιξιν μιας οιασδήποτε αρχικής καταστάσεως ως προς τον χρόνον. Ως εκ τούτου είναι ισοδύναμος προς την πλήρη λύσιν της εξισώσεως του Schrödinger. Ένα κβαντομηχανικόν σύστημα περιγράφεται εξ ίσου καλώς είτε γνωρίζοντες την συνάρτησιν K είτε τον τελεστήν του Hamilton εκ του οποίου είναι δυνατόν να εξαχθή αυτή. Συνεπώς η K μας παρέχει όλαν τας πληροφορίας τας οποίας απαιτεί η κβαντική θεώρησις της φύσεως.

Η πιθανότης να ευρεθή το σύστημα εις την κατάστασιν $X(2)$ την χρονικήν στιγμήν t_2 όταν κατά την χρονικήν στιγμήν t_1 τούτο ευρίσκετο εις την κατάστασιν $\psi(1)$ δίδεται εξ του τετραγώνου του ολοκληρώματος

$$\int X^*(2)k(2, 1)\psi(1)dq_1 dq_2 \quad (27)$$

Τα προβλήματα τα οποία αντιμετωπιζομεν με την παράστασιν αυτήν του Feynman είναι συνήθως προβλήματα σχεδιάσεως. Το φυσικό πρόβλημα τίθεται ως εξής:

Ένα ελεύθερον σωματίον σχεδιάζεται εις κάποιον σημείον από ένα δυναμικόν. Ζητείται η κυματοσυνάρτησις του μετά την διαδικασίαν της σχεδιάσεως. Το εν λόγω σωματίον, εις το απώτερον παρελθόν του, περιγράφεται από μιαν κυματοσυνάρτησιν τύπου Gauss της μορφής:

$$\psi(q, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp \left\{ \frac{ipq}{\hbar} - \frac{q^2}{2\delta^2} \right\} \quad (28)$$

Η σχέση αυτή αποτελεί την $\psi(1)$ της (26) δια $t_1 = 0$. Εάν υποθέσωμεν ότι ο propagator του συστήματος έχει υπολογισθή τότε η κατάσταση $\psi(2)$ του σωματίου εις το απώτερον μέλλον του δίδεται εκ της σχέσεως (26).

Κυματοσυναρτήσεις την μορφής του κυματοδέματος παρουσιάζουν την ελάχιστην διασποράν ήτοι η σχέσις αβεβαιότητας του Heisenberg ισχύει με το ίσον. Κατά συνέπειαν αι καταστάσεις αυταί είναι πλησιέστερον προς τας κλασσικάς καταστάσεις. Αυτός είναι ο λόγος δια τον οποίον προτιμώνται ως αρχικαί κυματοσυναρτήσεις.

Εδώ το ενδιαφέρον μας εντοπίζεται εις κυματοσυναρτήσεις αι οποία εξελίσσονται ως προς τον χρόνον, και όχι δια στασίμους ενεργειακάς ιδιοσυναρτήσεις ήτοι στάσιμα κύματα (παράστασις του Shrödinger).

Δια να αντιληφθώμεν περισσότερον την φυσικήν σημασίαν της συναρτήσεως K , θα αναζητήσωμεν την εξίσωσιν την οποίαν ικανοποιεί. Παραγωγίζομεν την σχέσηιν (26) ως προς t_2 και τη βοήθειά της εξισώσεως του Shrödinger την οποίαν ικανοποιεί η κυματοσυνάρτησις λαμβάνομεν τελικώς την κάτωθι εξίσωσιν.

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(2) \right\} k(2, 1) = i\hbar \delta(2, 1) \quad (29)$$

Τούτο σημαίνει ότι ο propagator είναι η Green συνάρτησις της εξισώσεως του Shrödinger και ως εκ τούτου παριστάνει την ανταπόκρισιν του συστήματος εις μίαν εξωτερικής αλλαγής.

Εις την μη σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν ο propagator λαμβάνεται ίσος προς τό μηδέν δια χρόνους $t_2 < t_1$. Επί πλέον δια $t_2 \rightarrow t_1$ μεταπίπτει εις την δέλτα συνάρτησιν $\delta(q_2 - q_1)$.

Σημειώνομεν τέλος ότι ο εν λόγω πυρήν διαδόσεως πρέπει να ικανοποιή την σχέσιν:

$$k(2, 1) = \int K^*(2, 3) K(3, 1) dq_3 \quad (30)$$

διά

$$t_1 \leq t \leq t_2 \quad (31)$$

Καθώς επίσης και την ακόλουθον σχέσιν της unitarity

$$\int_{-\infty}^{\infty} K^*(x, t; x'_1, t_1) K(x_1, t_1; x, t) dx = \delta(x'_1 - x_1) \quad (32)$$

Είναι προφανές εκ της σχέσεως (30) ότι ο $K(2, 1)$ από την χρονικήν στιγμήν t_1 προς την t_2 δύναται να ευρεθεί εκ των $K(2, 3)$ και $K(3, 1)$ από τας χρονικάς στιγμάς t_3 προς την t_2 και από την t_1 προς την t_3 αντιστοίχως, προσθέτοντες επάνω εις όλας τας δυνατάς ενδιάμεσους θέσεις q_3 εις τον χρόνον t_3 . Επίσης εξαρμόζοντες επαναληπτικώς την σχέσιν αυτή δυνάμεθα να υπολογίσωμεν τον πυρήνα διαδόσεως δια πεπερασμένα διαστήματα $t_2 - t_1$, εκ των πυρήνων δια απειροστός χρόνους $t_2 - t_1$. Η παρατήρησις αυτή οδηγεί τελικώς εις το path integral.

Ο πυρήν K δίδεται κατά τον Feynman εκ του ακολούθου path integral.

$$k(2, 1) = \int \exp \{ (i/\hbar) S \} \quad (33)$$

Η ολοκλήρωσις γίνεται επάνω εις όλους του δυνατούς δρόμους εκ του σημείου $q_1 = q_1(t)$ προς το σημείον $q_2 = q_2(t)$. Η συνάρτησις S είναι το ολοκλήρωμα της κλασσικής δράσεως και δύναται να υπολογισθή ευκόλως τη βοήθεια της συναρτήσεως Lagrange του συστήματος.

Κατ' αυτόν τον τρόπον η κλασσική μηχανική του Lagrange γενικεύεται υπό την μορφήν αυτήν των path integrals εις την κβαντομηχανικήν. Εν τούτοις η εφαρμογή της σχέσεως (33) δια τον υπολογισμόν propagators έχει επιτύχει εις ολίγας περιπτώσεις [11] λόγω των αναλυτικών δυσκολιών τας οποίας παρουσιάζουν τα ολοκληρώματα αυτά. Επί πλέον συστήματα με αναλυτικήν εξάρτησιν των συναρτήσεων Lagrange εκ του χρόνου έχουν ελάχιστα μελετηθή [12].

3 Μέθοδοι Υπολογισμού των Propagators

3.1 Στάσιμες καταστάσεις

Ένα σύστημα ευρίσκεται εις στάσιμον κατάστασιν, όταν ο τελεστής του Hamilton είναι ανεξάρτητος του χρόνου. Εις την περίπτωσιν αυτήν ο πυρήν είναι συνάρτησις της διαφοράς $t_2 - t_1$ και η κυματοσυνάρτησις ταλαντούται με μια ορισμένη συχνότητα η οποία είναι ανάλογος της ενέργειας του συστήματος. Η πιθανότης να ευρεθή το σωματίον εις κάποιαν περιοχόν είναι ανεξάρτητος του χρόνου.

Γενικότερον στάσιμαί είναι αι καταστάσεις δια τα οποίας η πυκνότης πιθανότητος $\psi^* \psi$ και η πυκνότης ρεύματος πιθανότητος

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

είναι ανεξάρτητοι του χρόνου.

Αι στάσιμαί καταστάσεις περιγράφονται από κυματοσυναρτήσεις της μορφής

$$\psi(q, t) = \exp \{ -(i/\hbar) Et \} U(q) \quad (34)$$

Εισάγοντες την κυματοσυνάρτησιν αυτήν εις την εξίσωσιν του Schrödinger ευρίσκομεν την ακόλουθον εξίσωσιν ιδιοτιμών εκ της οποίας δυνάμεθα να υπολογίσωμεν τας

συναρτήσεις $U(q)$ και την σταθεράν E .

$$H\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)U(q) = EU(q) \quad (35)$$

Εάν ο τελεστής \hat{H} δέχεται ένα πλήρες και ορθοκανονικόν σύνολον ιδιοσυναρτήσεων $\{U_n(q)\}$ με αντιστοίχους ιδιοτιμάς $\{E_n\}$ ήτοι:

$$\int U_n^*(q)U_m(q)dq = \delta_{nm}, \quad \sum_n U_n^*(q'')U_n(q') = \delta(q'' - q') \quad (36)$$

Τότε ο propagator του συστήματος δύναται να γραφεί υπό την ακόλουθον αναλυτικήν μορφήν.

$$k(q, t; q', 0) = \sum_n U_n^*(q)U_n(q')e^{-iE_n t/\hbar} \quad t > 0$$

$$K(q, t; q', 0) = 0 \quad t < 0 \quad (37)$$

Η σχέση αυτή προκύπτει ευκόλως εάν αντικαταστήσωμεν την έκφραση (36) της δ -συναρτήσεως εις την σχέση (7).

Παρατηρούμε ότι δια του απλού τυπικού μετασχηματισμού $it/\hbar \rightarrow b$ η σχέση (ρεφσξ44) δίδει την στατιστικήν μήτραν πυκνότητος δια την κανονική ολοτητα. Το κάτωθι ολοκλήρωμα,

$$z(b) = \int K(q, -i\hbar b; q, 0)dq = \sum_n e^{-bE_n} \quad (38)$$

είναι το άθροισμα καταστάσεων ενός κβαντικού στατιστικού συστήματος [13].

3.2 Μη στάσιμα καταστάσεις

Ένα σύστημα ευρίσκεται εις μη στάσιμον κατάστασιν όταν ο τελεστής Hamilton αυτού περιέχει αναλυτικώς τον χρόνον.

Η πλέον γνωστή μέθοδος δια την μελέτην αυτών των συστημάτων είναι η χρονικώς εξαρτωμένη θεωρία διαταραχών [14].

Υποθέτομεν ότι ο τελεστής Hamilton του συστήματος δύναται να αναλυθή ως εξής:

$$H = H_0 + V(q, t) \quad (39)$$

Η διαταραχή $V(q, t)$ θεωρείται μικρή συγκρινόμενη με το H_0 .

Υποθέτομεν επιπλέον ότι ο πυρήν $K_0(2, 1)$ της κινήσεως δια τον H_0 είναι γνωστός (για παράδειγμα το H_0 δύναται να είναι τετραγωνικής μορφής και ανεξάρτητον του χρόνου). Τότε ο propagator δέχεται την ανάλυσιν

$$K(2, 1) = K_0(2, 1) + K'(2, 1) \quad (40)$$

Αντικαθιστούμεν τον πυρήνα (40) εις την εξίσωσιν (29) και λαμβάνομεν

$$i\hbar \frac{\partial K'}{\partial t_2} - H_0 K' = V K \quad (41)$$

Η Green συνάρτησις του τελεστού του πρώτου μέλους της (41) είναι ο γνωστός propagator $K_0(2, 1)$, επομένως έχομεν:

$$K'(2, 1) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \int_V K_0(2, 3) V(3) K(3, 1) d3 \quad (42)$$

ένθα $d3 = dq_3 dt_3$.

Τα όρια του ολοκληρώματος ως προς t προκύπτουν εκ της ασυνεχειάς του $K(2, 1)$ δια $t_2 - t_1 \rightarrow 0$.

Εάν προσθέσωμεν και το $K_0(2, 1)$ ευρίσκομεν την ολοκληρωτικήν εξίσωσιν

$$K(2, 1) = K_0(2, 1) - \int K_0(2, 3) V(3) K(3, 1) d3 \quad (43)$$

η οποία δύναται να λυθή δια της επαναληπτικής μεθόδου.

Μια αναλυτική έκφασις ως η σχέσις (37) δύναται να ευρεθή και εις την περίπτωσιν των μη στασίμων καταστάσεων με την βοήθειαν των ολοκληρωμάτων της κινήσεως.

Ένας ερμητιανός τελεστής ονομάζεται ολοκλήρωμα ή σταθερά της κινήσεως εάν η μέση τιμή του είναι ανεξάρτητος του χρόνου [12]. Η ιδιότης αυτή είναι ισοδύναμος με την ταυτότητα

$$\frac{d\hat{I}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{I}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{I}(t), \hat{H}] = 0 \quad (44)$$

Εάν ο τελεστής του Hamilton εξαρτάται αναλυτικώς εκ του χρόνου τότε ούτος δεν είναι πλέον μια σταθερά της κινήσεως. Δύναμεθα απλώς να είπωμεν ότι αποτελεί έναν γεννήτορα της κινήσεως.

Κάθε ολοκλήρωμα της κινήσεως δύναται να εκφρασθή με την βοήθεια του τελεστού χρονικής εξελίξεως $\hat{U}(t)$ ως ακολούθως

$$\hat{I}(t) = \hat{U}(t) \hat{I}_0 \hat{U}^{-1}(t) \quad (45)$$

\hat{I}_0 είναι ένας τελεστής ανεξάρτητος του χρόνου. Κατά συνέπειαν η εξίσωσις (44) έχει λύσιν. Δια κάθε σύστημα με N βαθμούς ελευθερίας υπάρχουν $2N$ ανεξάρτητα

ολοκληρώματα της κινήσεως.

$$\hat{q}_j(t) = \hat{U}(t)q_j\hat{U}^{-1}(t)$$

$$\hat{p}_j(t) = \hat{U}(t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \hat{U}^{-1}(t) \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (46)$$

Τα ολοκληρώματα της κινήσεως έχουν την εξής ιδιότητα:

Εάν Ψ είναι μια λύσις της εξίσωσης Shrödinger τότε δια κάθε τελεστή \hat{I} ο οποίος ικανοποιεί την εξίσωση (44) η συνάρτησις $\tilde{\Psi} = \hat{I}\Psi$ είναι επίσης λύσις της ίδιας εξίσωσης. Οι ιδιοσυναρτήσεις των ολοκληρωμάτων της κινήσεως δύνανται να εκλεγούν εις τρόπον ώστε να ικανοποιούν την εξίσωση Shrödinger.

Έστω ότι $\{\Psi_n(q, t)\}$ είναι ένα πλήρες και ορθοκανονικόν σύνολον ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{I}(t)$ με αντιστοιχούς ιδιοτιμάς $\{\lambda_n\}$

$$\hat{I}(t)\Psi_n(q, t) = \lambda_n\Psi_n(q, t) \quad (47)$$

Αποδεικνύεται [16] τότε ότι ο propagator δέχεται μια ανάλυσιν της μορφής

$$K(2, 1) = \sum_n \exp \{i [a_n(t_2) - a_n(t_1)]\} \Psi_n^*(q_1, t_1)\Psi_n(q_2, t_2) \quad (48)$$

Οι φάσεις $a_n(t)$ ορίζονται εκ της σχέσεως

$$i\hbar \frac{d}{dt}a_n = \int \Psi_n^*(q, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(t) \right] \Psi_n(q, t) dq \quad (49)$$

Δύναται επίσης να δειχθή ότι η λύσις $\tilde{\Psi}_n(q, t)$ της εξίσωσης Shrödinger δίδεται εκ της σχέσεως

$$\tilde{\Psi}_n(q, t) = e^{ia_n(t)}\Psi_n(q, t) \quad (50)$$

και κατά συνέπειαν ο propagator γράφεται

$$K(2, 1) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\Psi}_n^*(q_1, t_1)\tilde{\Psi}_n(q_2, t_2) \quad (51)$$

Δια την ειδικήν περίπτωσιν των στασίμων καταστάσεων ο αναλλοίωτος $\hat{I}(t)$ συμπίπτει με τον τελεστήν του Hamilton και τα Ψ_n είναι ανεξάρτητα του χρόνου. Αι ιδιοτιμαί λ_n είναι αι ενεργειακαί ιδιοτιμαί E_n και οι φάσεις $a_n(t)$ δίδονται εκ της σχέσεως $a_n = -E_n t/\hbar$. Κατά συνέπειαν οι σχέσεις (43) και (46) μεταπίπτουν εις την γνωστήν έκφρασιν (37) του propagator των στασίμων καταστάσεων.

Η μέθοδος αυτή υπολογισμού των propagators μέσω των ολοκληρωμάτων της κινήσεως έχει επιτύχει εις ωρισμένα προβλήματα, ως π.χ. η κβαντική περιγραφή της τριβής [[17] – [23]].

Εν τούτοις η μέθοδος χρειάζεται τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_n(q, t)$ ή τις $\tilde{\Psi}_n(q, t)$, ο υπολογισμός των οποίων δια τελεστής Hamilton εξαρτημένους εκ του χρόνου είναι γενικώς δύσκολος. Εις την επομένην παράγραφον θα προσπαθήσωμεν να λύσωμεν απ' ευθείας την εξίσωσιν (29).

3.3 Μια άμεσος λύσις

Μια άμεσος τυπική λύσις της εξίσωσως (29) προκύπτει ευκόλως εάν πολλαπλασιάσωμεν την εξίσωσιν αυτήν με τον αντίστροφον τελεστήν του δεξιού μέλους

$$K(2, 1) = i\hbar \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(2) \right)^{-1} \delta(2, 1) \quad (52)$$

Προσθέτομεν εις τον παρανομαστήν της σχέσεως αυτής μιαν άπειροστήν φανταστική προσότητα $i\epsilon$ και λαμβάνομεν το όριον του $\epsilon \rightarrow 0_+$

$$K(2, 1) = i\hbar \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(2) \pm i\epsilon \right)^{-1} \delta(2, 1) \quad (53)$$

Κατά τον Feynman [24] αντικαθιστούμεν τις δ - συναρτήσεις με τον γνωστόν Fourier μετασχηματισμόν των και μετά την επίδρασιν των τελεστών επί των εκθετικών συναρτήσεων λαμβάνομεν

$$K(2, 1) = i\hbar \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik(q_2-q_1)-i\omega(t_2-t_1)}}{\hbar\omega - H(k) \pm i\epsilon} dk d\omega \quad (54)$$

Η ολοκλήρωσις γίνεται επάνω εις τον πραγματικόν άξονα και η πρόσθεσις του όρου $\pm i\epsilon$ έχει ως συνέπεια να μεταφέρη τους πόλους, εάν υπάρχουν, του ολοκληρώματος ελαφρώς επάνω ή κάτω του πραγματικού άξονος. Μετά την ολοκλήρωσιν λαμβάνομεν το όριον του $\epsilon \rightarrow 0_+$.

Ο propagator με το σημείον + ονομάζεται advanced επειδή παριστάνει μια διάδοσιν προς τους μετέπειτα χρόνους ενώ εκείνος με τον σημείον - ονομάζεται retarded, επειδή παριστάνει μιαν διάδοσιν πίσω ως προς τον χρόνον.

Εδώ γράφομεν τον τελεστήν της σχέσεως (53) υπό την ακόλουθον ολοκληρωτική μορφήν, λαμβάνοντες κατ' αρχάς το σημείον μείον.

$$K(2, 1) = \int_0^{\infty} dt \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} t \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(t_2) - i\epsilon \right) \right\} \delta(2, 1) \quad (55)$$

Πράγματι η ολοκλήρωσις δίδει εις το 0 την σχέσιν (53), ενώ εις το άπειρον δίδει το μηδέν λόγω του όρου $\exp \{-t\epsilon/\hbar\}$ ο οποίος δια $t \rightarrow +\infty$ δίδει το 0 ακόμη και

δια απειροστά ϵ/\hbar . Η πρόσθεσις του όρου $-i\epsilon$ έχει ως συνέπειαν την σύγκλιση του ολοκληρώματος.

Ακολουθως υποθέτομεν ότι ο εκθετικός τελεστής δέχεται την ανάπτυξιν

$$\exp \left\{ t \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}(2) - \frac{\epsilon}{\hbar} \right) \right\} = \hat{U}(t) e^{t \frac{\partial}{\partial t_2}} e^{-t\epsilon/\hbar} \quad (56)$$

Ο τελεστής $\hat{U}(t)$ είναι μια συνάρτησις των τελεστων \hat{p} , \hat{q} και δεν περιέχει παραγώγισιν ως προς τον χρόνον. Εισάγωμεν την ανάπτυξιν (56) εις την σχέσιν (55) και λαμβάνομεν

$$\begin{aligned} K(2, 1) &= \int_0^\infty dt e^{t \frac{\partial}{\partial t_2}} \delta(t_2 - t_1) \hat{U}(t) \delta(q_2 - q_1) e^{-t\epsilon/\hbar} \\ &= \int_0^\infty dt \delta(t_2 - t_1 + t) \hat{U}(t) \delta(q_2 - q_1) e^{-t\epsilon/\hbar} \end{aligned} \quad (57)$$

Εις την περίπτωσιν ένθα $t_2 - t_1 < 0$ το όρισμα της $\delta(t_2 - t_1 + t)$ συναρτήσεως μηδενίζεται εντός των ορίων της ολοκληρώσεως πράγματι $t = t_1 - t_2 > 0$. Το ολοκλήρωμα λαμβάνοντες τελικώς και το όριον $\epsilon \rightarrow 0_+$ γίνεται

$$K(2, 1) = \hat{U}(t_2, t_1) \delta(q_2 - q_1), \quad t_2 - t_1 < 0 \quad (58)$$

Εάν $t_2 - t_1 > 0$ το όρισμα της $\delta(t_2 - t_1 + t)$ δεν μηδενίζεται εντός των ορίων του ολοκληρώματος και το ολοκλήρωμα γίνεται μηδέν.

$$K(2, 1) = 0, \quad t_2 - t_1 > 0 \quad (59)$$

Κατά συνέπειαν ο propagator αυτός είναι ο retarded propagator.

Λαμβάνοντες το σημείον + της σχέσεως (53) αυτή δύναται να γραφή υπό την ακόλουθον ολοκληρωτική μορφήν

$$K(2, 1) = \int_{-\infty}^0 \exp \left\{ i \frac{i}{\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(2) + i\epsilon \right) \right\} \delta(2, 1) \quad (60)$$

Πράγματι η ολοκλήρωσις δίδει εις το μηδέν την σχέσιν (53) ενώ εις το μείον άπειρον δίδει το μηδέν λόγω του όρου $\exp \{ t\epsilon/\hbar \}$ ο οποίος δια $t \rightarrow -\infty$ γίνεται μηδέν. Ο εκθετικός τελεστής δέχεται μιαν ανάλυσιν παρομοίαν της (56) ο δε propagator κατά τον ίδιον τρόπον γράφεται

$$K(2, 1) = \int_{-\infty}^0 dt \delta(t_2 - t_1 + t) \hat{U}(t) \delta(q_2 - q_1) e^{t\epsilon/\hbar} \quad (61)$$

Εις την περίπτωσιν $t_2 - t_1 < 0$ το όρισμα της $\delta(t_2 - t_1 + t)$ μηδενίζεται εντός των ορίων του ολοκληρώματος και κατά συνέπειαν το ολοκλήρωμα μηδενίζεται

$$K(2, 1) = 0 \quad t_2 - t_1 < 0 \quad (62)$$

Εις την περίπτωσιν $t_2 - t_1 > 0$ υπάρχει μια τιμή του t εντός των ορίων του ολοκληρώματος δια την οποίαν ισχύει η σχέση $t_2 - t_1 + t = 0$. Συνεπώς λαμβάνοντας το όριον $\epsilon \rightarrow 0_+$ το ολοκλήρωμα γράφεται

$$K(2, 1) = \hat{U}(t_1, t_1)\delta(q_2 - q_1) \quad t_2 - t_1 > 0 \quad (63)$$

και κατά συνέπειαν ο propagator αυτός είναι ο advanced propagator.

Εις την κλασσική κβαντική μηχανική κανένα σύστημα και κανένα σήμα δεν διαδίδεται πίσω ως προς τον χρόνο και κατά συνέπειαν ο retarded propagator δεν έχει έννοιαν.

Αντιθέτως εις την σχετικιστική κβαντική μηχανική η έννοια του retarded propagator παραμένει και περιγράφει καταστάσεις αρνητικής ενεργείας.

Δια να κατανοήσωμεν περισσότερο την φυσική σημασίαν του τελεστού $\hat{U}(t)$ θα αναζητήσωμεν την εξίσωσιν την οποίαν ικανοποιεί.

Η παράγωγος της σχέσεως (56) ως προς t δίδει:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t) + \frac{\partial}{\partial t_2}\hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(2)\hat{U}(t) \quad (64)$$

θεωρούμεν ακολούθως τον μετασχηματισμον

$$t = t_1 - t_2 \quad t_2 = t_1 \quad (65)$$

και η εξίσωσις (64) γίνεται

$$\frac{\partial}{\partial t_2}\hat{U}(t_1, t_2) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}(2)\hat{U}(t_1, t_2) \quad (66)$$

Επίσης εκ της σχέσεως (56) φαίνεται ευκόλως ότι ο τελεστής $\hat{U}(t_1, t_2)$ ικανοποιεί την ακόλουθον οριακήν συνθήκην

$$\hat{U}(t, t) = 1 \quad (67)$$

ήτοι ο $\hat{U}(t_1, t_2)$ είναι ο τελεστής χρονικής εξελίξεως.

Εις την περίπτωσιν των στασίμων καταστάσεων ένθα ο τελεστής $\hat{H}(2)$ δεν περιέχει αναλυτικώς τον χρόνο, η λύσις της εξισώσεως αυτής, η οποία ικανοποιεί και την αρχικήν συνθήκην λαμβάνει την ακόλουθον γνωστήν μορφήν:

$$\hat{U}(t_1, t_2) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_1)\hat{H}(2)} \quad (68)$$

Δια τας μη στασίμους καταστάσεις δυνάμεθα να λάβωμεν μια προσεγγιστική έκφρασιν του τελεστού αυτού μετατρέποντες την διαφορικήν εξίσωσιν με την οριακήν συνθήκην (66) εις την ολοκληρωτικήν εξίσωσιν

$$\hat{U}(t_1, t_2) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^{t_1} \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_2)dt \quad (69)$$

Η λύσις της εξίσωσης αυτής με την βοήθειαν της επαναληπτικής μεθόδου δίδεται εκ του αναπτύγματος [25].

$$\hat{U}(t_1, t_2) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \hat{H}(t) + \frac{(-i)^2}{\hbar^2} \int_{t_1}^{t_2} dt_3 \int_{t_1}^{t_2} dt_4 \hat{H}(t_3) \hat{H}(t_4) \cdots \quad (70)$$

ή απλώς δια του κάτωθι Dyson's time ordered ολοκληρώματος

$$\hat{U}(t_1, t_2) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \hat{H}(t) dt \right\} \quad (71)$$

Ένθα πρέπει να αποκλείσωμεν ιδιάζουσες (singular) συναρτήσεις H και θα θεωρήσωμεν μονον συστήματα για τα οποία ο τελεστής (71) υπάρχει πάντα.

Το σύμβολο T παριστάνει τον χρονολογικόν τελεστήν

$$T \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) = \begin{cases} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) & \text{δία } t_1 < t_2 \\ \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) & \text{δία } t_1 > t_2 \end{cases} \quad (72)$$

Η ανάπτυξις (71) του τελεστού χρονικής εξελίξεως έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς εις την κβαντικήν θεωρίαν, ιδιαιτέρως εις την κβαντικήν ηλεκτροδυναμικήν, δια να λάβωμεν προσεγγιστικάς εκφράσεις για τα πλάτη πιθανότητος.

Ως γνωστόν η εξίσωσις (66) λύεται ακριβώς εις ολίγας μονον περιπτώσεις. Εν τούτοις δια μιαν ομάδαν συστημάτων, στασίμων ή μη, είναι δυνατόν να λάβωμεν ακριβείς λύσεις ή μάλλον να εκφράσωμεν τας κβαντομηχανικάς λύσεις τη βοήθεια των αντιστοιχών κλασικών. Η τάξις αυτή συνίσταται από συστήματα των οποίων οι τελεσταί του Hamilton είναι πολυώνυμα δευτέρας τάξεως ως προς τας κανονικάς συζυγείς μεταβλητάς. Εις το επόμενον κεφάλαιον μελετώμεν τα ανωτέρω συστήματα με την βοήθειαν της θεωρίας διατάξεως των τελεστών. Συγκεκριμένα διατάσσομεν τον τελεστήν χρονικής εξελίξεως $\hat{U}(t)$ εις μιαν κατάλληλον μορφήν ικανήν να δώση τον propagator του συστήματος και τα ολοκληρώματα της κινήσεως με έναν απλόν και ευθύν τρόπον.

4 Η Διάταξις των Τελεστών και Εφαρμογαί της Θεωρίας Διατάξεως εις την μη Σχετικιστικήν Κβαντομηχανικήν

4.1 Διάταξις των Boson τελεστών

Οι Boson τελεσταί γενέσεως και εξαφανίσεως a^+ και a δύνανται να ορισθούν δια κάθε σύστημα το οποίον περιγράφεται από το ζεύγος των ερμητιανών τελεστών \hat{p} , \hat{q} δια του γραμμικού συνδυασμού

$$a = (2\hbar)^{-\frac{1}{2}} (\lambda\hat{q} + i\lambda\hat{p}) \quad (73)$$

$$a = (2\hbar)^{-\frac{1}{2}} (\lambda\hat{q} - i\lambda\hat{p}) \quad (74)$$

Ενθα το λ είναι μια πραγματική παράμετρος.

Οι εν λόγω τελεσταί ικανοποιούν την σχέσιν:

$$[a, a^+] = 1 \quad (75)$$

Ονομάζομεν coherent καταστάσεις τα ιδιοδιανύσματα του τελεστού a και τα συμβολίζομε με $|\alpha\rangle$.

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|a^+ = \langle\alpha|\alpha^* \quad (76)$$

Οι coherent καταστάσεις είναι καταστάσεις ελαχίστης διασποράς.

Οι Boson τελεσταί a και a^+ δεν είναι ερμητιανοί και αι ιδιοτιμαί των δεν είναι εν γένει πραγματικοί αριθμοί. Επίσης αι coherent καταστάσεις δεν είναι ορθογώνιοι. Εν τούτοις σχηματίζουν ένα πλήρες σύνολον καταστάσεων και η σχέσις πληρότητος εκφράζεται δια της σχέσεως:

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi} = 1 \quad (77)$$

ενθα 1 είναι ο ταυτοτικός τελεστής και η ολοκλήρωσις γίνεται εις το μιγαδικόν επίπεδον.

Εις τα επόμενα κάθε συνάρτησις των τελεστών a και a^+ ορίζεται από μίαν ανάπτυξιν της μορφής:

$$f(a, a^+) = \sum_{i,j,\dots,k} a^{+i} a^j a^{+r} \dots a^k \quad (78)$$

ένθα i, j, \dots, k είναι θετικοί ακέραιοι ή και μηδέν.

Δυνάμεθα να χρησιμοποιήσωμεν την σχέσιν αντιμεταθέσεως (75) δια να διατάζωμεν κάθε συνάρτησιν $f(a, a^+)$ εις οιανδήποτε επιθυμητήν μορφή. Θα λέγομεν ότι η συνάρτησις $f(a, a^+)$ έχει γραφή υπό κανονικήν (μη κανονικήν) μορφήν, εάν όλαι οι δυνάμεις του τελεστού a ευρίσκονται εις τα δεξιά (αριστερά) όλων των δυνάμεων του a^+ .

$$f(a, a^+) = f^{(n)}(a, a^+) = \sum_{i,j} f_{i,j}^{(n)} a^{+i} a^j \quad (79)$$

$$f(a, a^+) = f^{(a)}(a, a^+) = \sum_{i,j} f_{i,j}^{(a)} a^j a^{+i} \quad (80)$$

αν και $f(a, a^+) = f^{(n)}(a, a^+) = f^{(a)}(a, a^+)$ αι σταθεραί αναπτύξεως $f_{i,j}^{(n)}$ και $f_{i,j}^{(a)}$ είναι εν γένει διάφοραι. Η συνάρτησις $f(a, a^+)$ δύναται επίσης να αναπτυχθή εις μιαν μορφήν πλήρως συμμετρική (Weyl μορφή) ως προς a και a^+ , η χρησιμότης της οποίας έχει αναπτυχθή εις την παράγραφο 2. Τέλος ωρισμένοι άλλαι διατάξεις έχουν αναπτυχθή εις την βιβλιογραφία. [[26] – [29]]

Επειδή η κανονική και μη κανονική μορφή των τελεστών είναι μοναδικαί, δυνάμεθα να ορίσωμεν μίαν αμφιμονοσήμαντον αντιστοιχίαν μεταξύ των συναρτήσεων των τελεστών $f^{(n)}(a, a^+)$ και $f^{(a)}(a, a^+)$ και των συνήθων συναρτήσεων $\bar{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$, $\bar{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*)$ μιας μιγαδικής μεταβλητής α . Διά να λάβωμεν την συνάρτησιν $\bar{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$ ή την $\bar{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*)$ γράφομεν τον τελεστήν $f(a, a^+)$ υπό την κανονική ή μη κανονική μορφή και αντικαθιστώμεν τους τελεστές a και a^+ με τους μιγαδικούς αριθμούς α και α^* αντιστοίχως. Εάν συμβολίσωμεν με N^{-1} και A^{-1} τας αντιστοιχίας αυτάς, έχομεν:

$$N^{-1} \{f(a, a^+)\} = N^{-1} \sum_{i,j} f_{i,j}^{(n)} a^{+i} a^j = \bar{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) \quad (81)$$

$$A^{-1} \{f(a, a^+)\} = A^{-1} \sum_{i,j} f_{i,j}^{(a)} a^{+i} a^j = \bar{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) \quad (82)$$

Επίσης η κανονική και μη κανονική μορφή της συναρτήσεως $f(a, a^+)$ δύναται να ευρεθί εκ των σχέσεων

$$f^{(n)}(a, a^+) = N \left\{ \bar{f} \left(\alpha + \frac{\partial}{\partial \alpha^*}, \alpha^* \right) 1 \right\} \quad (83)$$

$$f^{(a)}(a, a^+) = A \left\{ \bar{f}(\alpha, \alpha^* - \frac{\partial}{\partial \alpha}) 1 \right\} \quad (84)$$

Οι σχέσεις αυταί μετατρέπουν τους μεταθέτας εις διαφορικές εξισώσεις [30]. Επίσης αι αντιστοιχία N^{-1} και A^{-1} μετατρέπουν τα ίχνη των τελεστών εις συνήθη ολοκληρώ-

ματα.

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho(a, a^+) &= \int \bar{\rho}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) \bar{f}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2 \alpha}{\pi} = \\ &= \int \bar{\rho}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) \bar{f}^{(a)}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2 \alpha}{\pi} \end{aligned} \quad (85)$$

Εις τα δύο αυτές σχέσεις έγκειται και η χρησιμότης της θεωρίας της διατάξεως των τελεστών. Αι αντίστοιχαι σχέσεις δια την συμμετρικήν αντιστοιχίαν είναι αι (21) και (23). Αι τρεις αύται αμφομονοσήμαντοι αντιστοιχίαι συνδέονται με τας coherent καταστάσεις (76).

4.2 Κανονική διάταξις του τελεστού

$$\exp \left\{ k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (a a^+ + a^+ a) \right\}$$

Η διάταξις των συναρτήσεων $f(a, a^+)$ εις κανονικήν ή μη μορφήν είναι δυνατή διότι όλες τας συναρτήσεις αι οποίαι δύνανται να αναπτυχθούν εις σειράς δυνάμεων των a και a^+ . Εν τούτοις, εκτός ορισμένων περιπτώσεων, ως π.χ. αι τετραγωνικαί μορφαί, η διάταξις των τελεστών είναι αρκετά δύσκολος. Αι μέθοδοι αι οποίαι χρησιμοποιήθησαν κατά καιρούς [[31] – [34]] φαίνεται ότι έχουν περιορισμένην εφαρμογήν. Διά την ανάπτυξιν του εκθετικού τελεστού $f(a, a^+)$ χρησιμοποιούμεν εδώ την μέθοδον της παραμετρικής παραγωγίσεως [35].

Προσθέτομεν στον τελεστήν μίαν βοηθητικήν παράμετρον b ως ακολούθως

$$f(a, a^+, b) = \exp \left\{ b \left[k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (a a^+ + a^+ a) \right] \right\} \quad (86)$$

Υποθέτωμεν ότι ο τελεστής $f(a, a^+, b)$ δύναται να γραφή υπό την μορφήν

$$f(a, a^+, b) = \exp \left\{ f_0(b) + f_1(b) a^{+2} \right\} \exp \left\{ f_2(b) a^+ a \right\} \exp \left\{ f_3(b) a^2 \right\} \quad (87)$$

Λόγω της κάτωθι κανονικής αναπτύξεως

$$\exp \left\{ -f_2 a^+ a \right\} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(e^{-f_2} - 1 \right)^l a^{+l} a^l \quad (88)$$

ο τελεστής τους δευτέρου μέλους της (87) είναι γραμμένος υπό την κανονικήν του μορφήν. Συνεπώς απομένει να προσδιορίσουμε τας αγνώστους συναρτήσεις $f_i(b)$ αι οποίαι προφανώς ικανοποιηθούν τας αρχικάς συνθήκας

$$f_i(0) = 0 \quad (89)$$

Εκ της σχέσεως (86) αποδεικνύεται ευκόλως ότι η συνάρτησις $f(a, a^+, b)$ ικανοποιεί την διαφορικήν εξίσωσιν

$$f^{-1}(a, a^+, b) \frac{\partial}{\partial b} f(a, a^+, b) = k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (aa^+ + a^+a) \quad (90)$$

Υπολογίζομεν ακολούθως την έκφρασιν του πρώτου μέλους της (90) με την βοήθειαν της κανονικής αναπτύξεως (87)

$$f^{-1}(a, a^+, b) \frac{\partial}{\partial b} f(a, a^+, b) = \exp \{-f_3 a^2\} \exp \{-f_2 a^+ a\} \left[\frac{\partial f_0}{\partial b} + \frac{\partial f_1}{\partial b} a^{+2} \right] \\ \exp \{f_2 a^+ a\} \exp \{f_3 a^2\} + \exp \{-f_3 a^2\} \left[\frac{\partial f_2}{\partial b} a^+ a \right] \exp \{f_3 a^2\} + \frac{\partial f_3}{\partial b} a^2 \quad (91)$$

Το δεύτερον μέλος της (90) δύναται να απλοποιηθή τη βοήθειά της γνωστής ταυτότητος.

$$e^{\xi A} f(B) e^{-\xi A} = f \left(B + \xi [A, B] + \frac{\xi^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \right) \quad (92)$$

η οποία ισχύει δια κάθε συνάρτησιν της μορφής $f(B) = \sum_n c_n B^n$. Μετά από ορισμένους υπολογισμούς λαμβάνομεν

$$f^{-1}(a, a^+, b) \frac{\partial}{\partial b} f(a, a^+, b) = \frac{\partial f_0}{\partial b} + \frac{\partial f_1}{\partial b} e^{-2f_2} (a^+ - 2f_3 a)^2 + \\ \frac{\partial f_2}{\partial b} (a^+ - 2f_2 a) a + \frac{\partial f_3}{\partial b} a^2 \quad (93)$$

Εκ των εκφράσεων (93) και (90) λαμβάνομεν το κάτωθι διαφορικόν σύστημα.

$$\frac{\partial f_3}{\partial b} = k_1 + 4k_3 f_3 + 4k_2 f_3^2 \quad \frac{\partial f_1}{\partial b} = k_2 e^{2f_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial b} = 2k_3 + 4k_2 f_3 \quad f_0 = \frac{1}{2} f_2 \quad (94)$$

$$f_i(0) = 0 \quad (95)$$

Η πρώτη των εξισώσεων αυτών είναι τύπου Riccati, ενώ αι υπόλοιποι είναι γραμμικάί. Η λύσις του συστήματος αυτού δίδει τας ζητούμενας συναρτήσεις

$$f_0 = -\frac{1}{2} \ln \left\{ \cosh(2\lambda b) - \frac{k_3}{\lambda} \sinh(2\lambda b) \right\} \quad f_1 = \frac{(k_2/2\lambda) \sinh(2\lambda b)}{\cosh(2\lambda b) - (k_3/\lambda) \sinh(2\lambda b)} \\ f_2 = -\ln \left\{ \cosh(2\lambda b) - \frac{k_3}{\lambda} \sinh(2\lambda b) \right\} \quad f_3 = \frac{(k_1/2\lambda) \sinh(2\lambda b)}{\cosh(2\lambda b) - (k_3/\lambda) \sinh(2\lambda b)} \quad (96)$$

$$\lambda = (k_3^2 - k_1 k_2)^{1/2} \quad (97)$$

θέτομεν $b = 1$ και λαμβάνομεν τελικώς την κάτωθι κανονικήν ανάπτυξιν.

$$\begin{aligned} \exp \left\{ k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (a a^+ + a^+ a) \right\} &= \left(\cosh (2\lambda) - \frac{k_3}{\lambda} \sinh (2\lambda) \right)^{-1/2} \\ &\exp \left\{ \frac{(k_2/2\lambda) \sinh (2\lambda)}{\cosh (2\lambda) - (k_3/\lambda) \sinh (2\lambda)} a^{+2} \right\} \exp \left\{ -\ln \{ \cosh (2\lambda) - \right. \\ &\left. (k_3/\lambda) \sinh (2\lambda) \} a^+ a \right\} \exp \left\{ \frac{(k_1/2\lambda) \sinh (2\lambda)}{\cosh (2\lambda) - (k_3/\lambda) \sinh (2\lambda)} a^2 \right\} \quad (98) \end{aligned}$$

Η αντίστοιχος κανονική συνάρτησις $f^{(n)}(\alpha, \alpha^*)$ του τελεστού $f(a, a^+)$ δύναται να ευρεθή ευκόλως, λαμβάνοντες υπ' όψιν και την κανονικήν διάταξιν (88). Αντικαθιστούμε απλώς τους τελεστάς a και a^+ με τις μεταβλητές α και α^* .

$$\begin{aligned} N^{-1} \left\{ \exp \left[k_1 a^2 + k_2 a^{+2} + k_3 (a a^+ + a^+ a) \right] \right\} &= \\ \left(\cosh (2\lambda) - \frac{k_3}{\lambda} \sinh (2\lambda) \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{k_1 \alpha^2 + k_2 \alpha^{*2} + 2(k_3 - \lambda \tanh \lambda) \alpha \alpha^*}{2(\lambda \coth 2\lambda - k_3)} \right\} \quad (99) \end{aligned}$$

Η παράμετρος λ δύναται να λάβει όλας τας μιγαδικάς τιμάς και το μηδέν, εκτός από την ιδιάζουσα περίπτωσιν $\lambda \coth 2\lambda = k_3$.

Εξετάζομεν ακολούθως μιαν άμεσον εφαρμογήν της κανονικής διατάξεως εις την στατιστικήν

Εκ της σχέσεως (68) και της παρατηρήσεως της παραγράφου 4 προκύπτει ότι η μήτρα πυκνότητος ενός συστήματος το οποίον περιγράφεται από τον ανεξάρτητον του χρόνου τελεστήν του Hamilton \hat{H} δίδεται εκ της σχέσεως.

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}', b) = e^{-b\hat{H}} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (100)$$

Εις την περίπτωσιν του αρμονικού ταλαντωτού εις μίαν διάστασιν, η σχέσις (8.13) γράφεται.

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}', b) = \exp \left\{ b \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \right\} \delta(x - x') \quad (101)$$

Ο τελεστής της ανωτέρω σχέσεως αναπτύσσεται εις κανονικήν μορφήν τη βοήθεια της σχέσεως (98). Θέτοντες

$$\begin{aligned} a = \frac{\partial}{\partial x}, \quad a^+ = x &\implies [a, a^+] = \left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right] = 1 \quad \text{και} \\ k_1 = \frac{\hbar^2 b}{2m}, \quad k_2 = \frac{1}{2} m \omega^2 b, \quad k_3 = 0, \quad \lambda = 2f = \hbar \omega b \quad (102) \end{aligned}$$

Η σχέση (101) γράφεται:

$$\rho(x, x', b) = (\cosh(2f))^{-1/2} \exp\left\{\frac{m\omega}{2\hbar} \tanh(2f)x^2\right\} \\ \exp\left\{\ln\left\{(\cosh(2f))^{-1}\right\}x\frac{\partial}{\partial x}\right\} \exp\left\{\frac{\hbar}{2m\omega} \tanh(2f)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right\} \delta(x-x') \quad (103)$$

Οι τελεσταί της σχέσεως (103) επιδρούν επί της $\delta(x-x')$ συναρτήσεως ως ακολούθως.

$$e^{b\frac{\partial^2}{\partial x^2}}\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{b\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-ik(x-x')} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{bk^2 - ik(x-x')} dk = \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi b}} e^{-\frac{1}{4b}(x-x')^2} dk \quad (104)$$

$$e^{bx\frac{\partial}{\partial x}}g(x) = g(e^bx) \quad (105)$$

Κατά συνέπειαν έχομεν:

$$\rho(x, x', b) = \frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(2f)} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh(2f)} \left[(x^2 + x'^2) \cosh(2f) - 2xx'\right]\right\} \quad (106)$$

Εις την βιβλιογραφίαν [26], έχει υπολογισθή η κανονική ανάπτυξις τελεστών τετραγωνικής μορφής ως προς \hat{p} και \hat{q} και με γραμμικούς όρους. Τη βοήθεια των αναπτύξεων αυτών έχει υπολογισθή η μήτρα πυκνότητας του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου [37]. Επίσης έχουν υπολογισθή και οι συμμετρικά Weyl μορφαι των τελεστών αυτών οι οποίαι χρησιμοποιήθησαν εις τον υπολογισμόν της Wigner συναρτήσεως κατανομής. Εις τας επομένας παραγράφους, εξετάζομεν τα ανωτέρω προβλήματα δια την περίπτωσιν χρονικώς εξαρτωμένων τελεστών Hamilton.

4.3 Μη στάσιμα συστήματα τετραγωνικής μορφής

Εξετάζομε εις την παράγραφον αυτήν συστήματα τα οποία δύνανται να περιγραφούν από τελεστάς του Hamilton τετραγωνικούς ως προς τας θέσεις και τας ορμάς.

Εις μίαν διάστασιν οι εν λόγω τελεσταί γράφονται

$$\hat{H}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x, t\right) = -\hbar^2 a(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2} + b(t)x^2 \quad (107)$$

Ο τελεστής (107) περιγράφει έναν ταλαντωτήν μεταβλητής συχνότητας $\omega(t) = 4a(t)b(t)$ παρουσία τριβής $\gamma(t) = \frac{\dot{a}}{a}$ η οποία είναι επίσης συνάρτηση του χρόνου.

Ο τελεστής χρονικής εξελίξεως του εν λόγω συστήματος, ως προκύπτει εκ της (6.5) είναι:

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ t \left[\frac{\partial}{\partial t_2} - i\hbar a(t_2) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{i}{\hbar} b(t_2) x_2^2 \right] \right\} \exp \left\{ -t \frac{\partial}{\partial t_2} \right\} \quad (108)$$

Υποθέτομεν ότι ο ανωτέρω τελεστής δέχεται την κανονικήν ανάπτυξιν

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ f_0(t) + f_1(t) x_2^2 \right\} \exp \left\{ f_2(t) x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right\} \exp \left\{ f_3(t) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right\} \quad (109)$$

Ακολούθως θα υπολογίσωμεν τας αγνώστους συναρτήσεις $f_i(t)$ αι οποίαι προφανώς ικανοποιούν τας αρχικάς συνθήκας.

$$f_i(0) = 0 \quad (110)$$

Υπολογίζομεν την έκφρασιν $\hat{U}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}$ εις το σημείον $t = t_1 - t_2$. Εκ των σχέσεων (108) και (109) λαμβάνομεν.

$$\begin{aligned} \hat{U}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} \Big|_{t=t_1-t_2} &= -i\hbar a(t_1) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{i}{\hbar} b(t_1) x_2^2 = \\ \frac{\partial f_0}{\partial t_1} + \frac{\partial f_1}{\partial t_1} e^{-2f_2} \left(x_2 - 2f_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{\partial f_2}{\partial t_1} \left(x_2 - 2f_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial f_3}{\partial t_1} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \end{aligned} \quad (111)$$

Εκ της σχέσεως αυτής, μετά από ωρισμένας πράξεις, λαμβάνομεν τελικώς το διαφορικό σύστημα.

$$\begin{aligned} \dot{f}_3 &= -i\hbar a(t_1) + 4 \frac{i}{\hbar} b(t_1) f_3^2 & \dot{f}_1 &= \frac{i}{\hbar} b(t_1) e^{2f_2} \\ \dot{f}_2 &= 4 \frac{i}{\hbar} b(t_1) f_3 & \dot{f}_0 &= \frac{1}{2} f_0 \end{aligned} \quad (112)$$

Ενθα αι τελείαι σημαίνουν παραγώγισιν ως προς t_1 . Τα f_i είναι συναρτήσεις των t_1 και t_2 και ικανοποιούν τας αρχικάς συνθήκας:

$$f_i(t_1, t_2) = 0 \quad \text{δια} \quad t_1 = t_2 \quad (113)$$

Το σύστημα (112) διαφέρει από το αντίστοιχον (94) των στασίμων καταστάσεων, εις το ότι εδώ τα a και b είναι συναρτήσεις του χρόνου t_1 , ενώ ο χρόνος t_2 εισέρχεται εις τας αρχικάς συνθήκας.

Η πρώτη των εξισώσεων αυτών είναι τύπου Riccati και ως γνωστόν εξισώσεις του τύπου αυτού δύνανται να μετατραπούν εις γραμμικές διαφορικές εξισώσεις δευτέρας τάξεως. Θέτομεν ως λύσιν της εν λόγω εξισώσεως την κάτωθι έκφρασιν

$$f_3 = i\hbar a(t_1) \frac{Y}{\dot{Y}} \quad (114)$$

και λαμβάνομεν

$$\ddot{Y} + 4abY - \frac{\dot{a}}{a}\dot{Y} = 0 \quad (115)$$

Η συνάρτησις $Y(t_1, t_2)$, λόγω των σχέσεων (113), ικανοποιεί τας αρχικάς συνθήκας.

$$Y(t_1, t_2) = 0, \quad \dot{Y}(t_1, t_2) = a(t_1) \quad \text{δια} \quad t_1 = t_2 \quad (116)$$

Εάν $X(t_1, t_2)$ είναι η άλλη ανεξάρτητος λύσις της (115) με αρχικάς συνθήκας

$$X(t_1, t_2) = 1, \quad \dot{X}(t_1, t_2) = 0 \quad \text{δια} \quad t_1 = t_2 \quad (117)$$

τότε οι δύο λύσεις συνδέονται δια των σχέσεων.

$$X\dot{Y} - \dot{X}Y = a(t_1), \quad X = -Y \int \frac{a}{Y^2} dt \quad (118)$$

Η κλασσική εξίσωσις (115) δέχεται και μίαν άλλην λύσιν [39] της μορφής:

$$Y = S(t_1, t_2) \sin \int_{t_1}^{t_2} \Omega(t) dt \quad (119)$$

Ενθα η συχνότης $\Omega(t)$ και το πλάτος $S(t_1, t_2)$ της ταλαντώσεως δίδονται εκ των σχέσεων.

$$\Omega = \frac{a}{S^2} \quad (120)$$

$$\ddot{S} + (\omega^2 - \Omega^2) S - \frac{\dot{a}}{a}\dot{S} = 0 \quad (121)$$

Αι ζητούμεναι συναρτήσεις f_i δύνανται να εκφρασθούν συναρτήσει των δύο ανεξαρτήτων λύσεων X και Y .

$$\begin{aligned} f_3 &= -i\hbar a \frac{Y}{\dot{Y}} & f_1 &= -\frac{i}{4\hbar} \frac{\dot{X}}{\dot{Y}} \\ f_2 &= \ln \left\{ \frac{a}{\dot{Y}} \right\} & f_0 &= \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{a}{\dot{Y}} \right\} \end{aligned} \quad (122)$$

Ο τελεστής χρονικής εξελίξεως (109) του συστήματος λαμβάνει την κάτωθι κανονική μορφή.

$$\hat{U}(t_1, t_2) = \sqrt{\frac{a}{\dot{Y}}} \exp \left\{ -\frac{i}{4\hbar} \frac{\dot{X}}{\dot{Y}} x_2^2 \right\} \exp \left\{ \ln \left\{ \frac{a}{\dot{Y}} \right\} x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right\} \exp \left\{ -i\hbar a \frac{Y}{\dot{Y}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} \quad (123)$$

Η επίδραση του τελεστού αυτού επί της $\delta(x_2 - x_1)$ συναρτήσεως δίδει τον propagator του συστήματος. Με την βοήθεια των σχέσεων (104) και (105) λαμβάνομεν [40]

$$K(2, 1) = \frac{1}{\sqrt{4i\hbar\pi Y}} \exp \left\{ -\frac{i}{4\hbar Y} \left[X x_2^2 + \frac{\dot{Y}}{a} x_1^2 - 2x_2 x_1 \right] \right\} \quad (124)$$

Η ανάπτυξη του τελεστού χρονικής εξελίξεως εις κανονική μορφήν, είναι ιδιαίτερος χρήσιμος εις τον υπολογισμόν των δύο ανεξαρτήτων ολοκληρωμάτων της κινήσεως.

$$\begin{bmatrix} x_2(t) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2}(t) \end{bmatrix} = \hat{U}(0, t) \begin{bmatrix} x_2 \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \end{bmatrix} \hat{U}(0, t)^{-1} = \begin{bmatrix} X & 2Y \\ \frac{1}{2} \frac{\dot{X}}{a} & \frac{\dot{Y}}{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \end{bmatrix} \quad (125)$$

Η ανωτέρω μέθοδος δύναται να επεκταθή και εις περισσότερας διαστάσεις, ένας ταλαντωτής π.χ. εις δύο διαστάσεις περιγράφεται εκ του κάτωθι τελεστού του Hamilton.

$$\hat{H} \left(-i\hbar \vec{\nabla}, \vec{r}, t \right) = \hat{H}_1 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x, t \right) + \hat{H}_2 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, y, t \right) \quad (126)$$

ένθα \hat{H}_i , $i = 1, 2$ είναι ο τελεστής (107)

Επειδή οι τελεσταί \hat{H}_1 και \hat{H}_2 αντιμετωπίζονται, ο propagator του συστήματος δίδεται εκ της σχέσεως:

$$K(2, 1) = \frac{1}{4i\hbar\pi Y} \exp \left\{ -\frac{i}{4\hbar Y} \left[X r_2^2 + \frac{\dot{Y}}{a} r_1^2 - 2\vec{r}_2 \cdot \vec{r}_1 \right] \right\} \quad (127)$$

Εξετάζομεν ακολούθως το ανωτέρω σύστημα εντός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, διανυσματικού δυναμικού $\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \vec{H}(t) \times \vec{r}$, ένθα το $H(t)$ έχει την z διεύθυνσιν. Ο τελεστής του Hamilton δίδεται εκ της σχέσεως.

$$\hat{H} \left(-i\hbar \vec{\nabla}, \vec{r}, t \right) = a(t) \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{2c} \mathcal{H}(t) \times \vec{r} \right)^2 + \delta(t) r^2 \quad (128)$$

Ο τελεστής χρονικής εξελίξεως εις την περίπτωσιν αυτήν γράφεται

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ t \left[\frac{\partial}{\partial t_2} - i\hbar a(t_2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) - \omega(t_2) \left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) + \frac{i}{\hbar} b(t_2) (x_2^2 + y_2^2) \right] \right\} \quad (129)$$

Ενθα

$$\omega(t_2) = \frac{eH}{c}a(t_2) \quad b(t_2) = \frac{1}{4a(t_2)} \left(\omega^2(t_2) + 4\delta(t_2)a(t_2) \right) \quad (130)$$

Επειδή ο τελεστής της στροφορμής $x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2}$ αντιμετωπίζεται με τους τελεστές της κινητικής ενέργειας $\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$ της δυναμικής ενέργειας $x_2^2 + y_2^2$ καθώς και με τον τελεστή της τριβής, $x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial y_2}$, ο τελεστής (129) δύναται να αναπτυχθή ως εξής

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \exp \left\{ t \left[\frac{\partial}{\partial t_2} - \omega(t_2) \left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right] \right\} \exp \left\{ -t_2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right\} \hat{U}_\tau(t) \\ &= \exp \left\{ - \int_0^t \omega(t_2 + t') dt' \left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right\} \hat{U}_\tau(t) \quad (131) \end{aligned}$$

Ενθα $\hat{U}_\tau(t)$ είναι ο τελεστής χρονικής εξελίξεως του ταλαντωτού εις δύο διαστάσεις. Επιδρώμεν τέλος τον τελεστήν αυτόν επί της $\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ συναρτήσεως και θέτοντες $t = t_1 - t_2$ λαμβάνομεν τον ζητούμενον propagator

$$K(2, 1) = \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} \omega(t) dt \left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) K_\tau(2, 1) \right\} \quad (132)$$

Ο πυρήν $K_\tau(2, 1)$ δίδεται εκ της σχέσεως (127).

Ο εκθετικός τελεστής της σχέσεως (132) παριστάνει μια περιστροφή εις το x, y επίπεδον υπό γωνίαν

$$f = \int_{t_1}^{t_2} \omega(t) dt \quad (133)$$

και επιδρά επί μίαν τυχούσαν αναλυτικήν συνάρτησιν $g(x_2, y_2)$ ως εξής:

$$\exp \left\{ f \left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right\} g(x_2, y_2) = g(x_2 \cos f - y_2 \sin f, y_2 \cos f + x_2 \sin f) \quad (134)$$

Κατά συνέπειαν η σχέσις (132) δύναται να γραφή αναλυτικότερον ως εξής:

$$\begin{aligned} K(2, 1) &= \frac{1}{4i\hbar\pi Y} \exp \left\{ -\frac{i}{4\hbar Y} \left[X(x_2^2 + y_2^2) + (\dot{Y}/a)(x_1^2 + y_1^2) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 2(x_2x_1 + y_2y_1) \cos f - 2(x_2y_1 - x_1y_2) \sin f \right] \right\} \quad (135) \end{aligned}$$

Επίσης τα τέσσερα ανεξάρτητα ολοκληρώματα της κινήσεως δύναται να ευρεθούν ευκόλως τη βοήθεια της αναπτύξεως (131).

$$\begin{bmatrix} x_2(t) & y_2(t) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2}(t) & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_2}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X & 2Y \\ \frac{1}{2} \frac{\dot{X}}{a} & \frac{\dot{Y}}{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 & y_2 \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos f & \sin f \\ -\sin f & \cos f \end{bmatrix} \quad (136)$$

ένθα

$$f = \int_0^t \omega(t') dt' \quad (137)$$

4.4 Μη στάσιμα συστήματα τετραγωνικής μορφής με γραμμικούς όρους

Εις την παράγραφον αυτήν μελετώμεν συστήματα τα οποία δύνανται να περιγραφούν από τελεστάς του Hamilton της μορφής.

$$\hat{H}(-i\hbar\vec{\nabla}, \vec{r}, t) = a(t) \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + c(t)r^2 - i\hbar\vec{d}(t) \cdot \vec{\nabla} - \vec{E}(t) \cdot \vec{r} \quad (138)$$

Ο τελεστής χρονικής εξελίξεως εις την περίπτωσιν αυτήν γράφεται:

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ t \left[\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}_n(2) + \vec{d}(t) \cdot \vec{\nabla}_2 - \frac{i}{\hbar} \vec{E}(t) \cdot \vec{r}_2 \right] \right\} \exp \left\{ -t \frac{\partial}{\partial t_2} \right\} \quad (139)$$

και δύνανται να αναπτυχθή ως ακολούθως,

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} k_0 + \frac{i}{\hbar} k_1 x_2 + \frac{i}{\hbar} k_2 y_2 \right\} \exp \left\{ \lambda_1 \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial y_2} \right\} \quad (140)$$

Οι τελεσταί $\hat{H}_m(2)$ και $\hat{U}_m(2)$ δίδονται εκ των σχέσεων (128) και (131) αντιστοίχως. Εκ των σχέσεων (139) και (140) λαμβάνομεν την ισότητα:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \Big|_{t=t_1-t_2} &= \frac{i}{\hbar} \hat{H}_m(t_1) + \vec{d}(t) \cdot \vec{\nabla}_2 - \frac{i}{\hbar} \vec{E}(t) \cdot \vec{r}_2 = \dot{k}_0 - \dot{k}_1 \lambda_1 - \dot{k}_2 \lambda_2 + \\ \hat{U}_m^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \dot{k}_1 x_2 + \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \dot{k}_2 y_2 + \lambda_1 \frac{\partial}{\partial x_2} + \lambda_2 \frac{\partial}{\partial y_2} \right) \hat{U}_m(t) \Big|_{t=t_1-t_2} & \end{aligned} \quad (141)$$

Ο τελευταίος όρος της ταυτότητος (141) υπολογίζεται τη βοήθεια της σχέσεως (9.28). Εξισώνοντες τους συντελεστάς των ομοίων όρων λαμβάνομεν το κάτωθι διαφορικόν σύστημα.

$$\begin{bmatrix} E_1 & E_2 \\ d_1 & d_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\dot{Y}}{a} & \frac{\dot{X}}{2a} \\ -2Y & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{k}_1 & \dot{k}_2 \\ \dot{\lambda}_1 & \dot{\lambda}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos f & \sin f \\ -\sin f & \cos f \end{bmatrix} \quad (142)$$

$$\dot{k}_0 = \dot{d}_1 \lambda_1 + \dot{k}_2 \lambda_2 \quad (143)$$

Το οποίο λύνεται ευκόλως ως προς τας αγνώστους συναρτήσεις και δίδει τας ακόλουθους κλασσικάς (δεν περιέχουν το \hbar) διαφορικές εξισώσεις

$$\begin{bmatrix} \dot{k}_1 & \dot{k}_2 \\ \dot{\lambda}_1 & \dot{\lambda}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -X & \frac{\dot{X}}{2a} \\ -2Y & \frac{\dot{Y}}{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 & E_2 \\ d_1 & d_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos f & -\sin f \\ \sin f & \cos f \end{bmatrix} \quad (144)$$

$$\dot{k}_0 = \dot{d}_1 \lambda_1 + \dot{k}_2 \lambda_2 \quad (145)$$

με αρχικάς συνθήκας

$$k_i(t_1, t_2) = \lambda_i(t_1, t_2) = 0 \quad \delta i \alpha \quad t_1 = t_2 \quad (146)$$

Επιδρούμεν κατόπιν τον τελεστήν χρονικής εξελίξεως εις την $\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ συνάρτησιν

$$K(2, 1) =$$

$$\frac{1}{4i\hbar\pi Y} \exp \left\{ -\frac{i}{4\hbar Y} \left[X(x_2^2 + x_1^2) + (\dot{Y}/a)(y_2^2 + y_1^2) + 2(X\lambda_1 - 2Yk_1)x_2 + \right. \right. \\ \left. \left. 2(X\lambda_2 - 2Yk_2)y_2 - 2(\lambda_1 \cos f - \lambda_2 \sin f)x_1 - 2(\lambda_2 \cos f + \lambda_1 \sin f)y_1 + \right. \right. \\ \left. \left. X(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - 4Yk_0 - 2(x_2x_1 + y_2y_1) \cos f - 2(y_2x_1 - y_1x_2) \sin f \right] \right\} \quad (147)$$

Επίσης εκ της αναπτύξεως (140) τα τέσσερα ανεξάρτητα ολοκληρώματα της κινήσεως υπολογίζονται ευκόλως.

$$\begin{bmatrix} x_2(t) & y_2(t) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2}(t) & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_2}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X & 2Y \\ \frac{\dot{X}}{2a} & \frac{\dot{Y}}{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 & y_2 \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_2} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \cos f & \sin f \\ -\sin f & \cos f \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} X & 2Y \\ \frac{\dot{X}}{2a} & \frac{\dot{Y}}{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ -k_1 & -k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos f & \sin f \\ -\sin f & \cos f \end{bmatrix} \quad (148)$$

Οι τελεσταί (148) καθώς και οι (134) και (125) είναι λύσεις της εξισώσεως κινήσεως (44) του Heisenberg η οποία εις την προκειμένην περίπτωσιν γράφεται.

$$\dot{q}(t) = \frac{1}{i\hbar} [q, H] = \frac{\partial H(t)}{\partial p(t)}, \quad \dot{p}(t) = \frac{1}{i\hbar} [p, H] = -\frac{\partial H(t)}{\partial q(t)} \quad (149)$$

5 Εφαρμογές της Θεωρίας Διατάξεως εις την Σχετικιστικήν Κβαντομηχανικήν

5.1 Wigner Παράστασις

Εις το κεφάλαιον αυτό γενικεύομεν την παράστασιν Wigner καθώς και την μέθοδον υπολογισμού των propagators δια της διατάξεως των τελεστών εις την σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν. Θα περιορισθώμεν εις στάσιμα συστήματα με spin 1/2.

Η κυματική εξίσωσις ενός σωματίου εντός δεδομένου εξωτερικού πεδίου γράφεται ως και εις την μή σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν [41] ως ακολούθως.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \quad (150)$$

Συμβολίζομεν με Ψ την τετραδιάστατον κυματοσυνάρτησιν η οποία εις την spinor παράστασιν είναι ένα bispinor. Εάν $A^\mu = (V, \vec{A})$ είναι το τετραδιάστατον δυναμικόν ενός εξωτερικού σταθερού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, ο τελεστής \hat{H} του Dirac είναι

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) = c \vec{a} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + mc^2 + eV \quad (151)$$

Αι μήτραι a_i , b ικανοποιούν τας σχέσεις:

$$a_i b + b a_i = 0, \quad a_i a_j + a_j a_i = 2\delta_{ij}, \quad b^2 = 1 \quad (152)$$

Μια άλλη παράστασις [42] της εξισώσεως Dirac (150) προκύπτει πολλαπλασιάζοντες την (150) με την μήτραν b και θέτοντες

$$\gamma_i = b a_i, \quad \gamma^0 = b, \quad x_0 = ct \quad (153)$$

λαμβάνομεν

$$\left[c \vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) - mc^2 \right] \Psi = 0 \quad (154)$$

Αι μήτραι γ ορίζονται μέσω των μητρών σ του Παυλι

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad \vec{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \quad (155)$$

Αι πρώτης τάξεως εξισώσεις (154) δύναται να μετασχηματισθούν εις δευτέρας τάξεως εξισώσεις πολλαπλασιάζοντες με τον τελεστήν $c \vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + mc^2$. Το αποτέλεσμα είναι:

$$\left[c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 - \frac{1}{2} i e c^2 F_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu} \right] \Psi = 0 \quad (156)$$

ένθα

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (157)$$

είναι ο ηλεκτρομαγνητικός πεδιακός τανυστής και

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = (\vec{a}, i\vec{\Sigma}) \quad (158)$$

Η εξίσωσις (156) εις συνήθεις μονάδας γράφεται

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eV \right)^2 - c^2 \left(i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 + e\hbar c \vec{\mathcal{H}} \cdot \vec{\Sigma} - ie\hbar c \vec{E} \cdot \vec{a} \right] \Psi = 0 \quad (159)$$

Ορίζομεν τον σχετικιστικόν Wigner τελεστήν \hat{W} δια της εκφράσεως [43]

$$\hat{W}(F) = \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})F(\hat{P}, \hat{Q}) - F(\hat{P}, \hat{Q})\hat{H}(\hat{P}^*, \hat{Q}^*) \quad (160)$$

Τα \hat{P} , \hat{Q} είναι οι τελεσταί (20) του Bopp.

Η εξίσωσις Wigner λαμβάνει την μορφήν

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} F(p, q, t) = \hat{H} \left(p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}, q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) F(p, q) - F(p, q) \hat{H} \left(p + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}, q - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad (161)$$

Η διαφορά της εξίσωσεως αυτής από την αντίστοιχον μη σχετικιστικήν (21) οφείλεται εις το γεγονός ότι τα \hat{H} και F είναι μήτραι και εν γένει δεν αντιμετατίθενται.

Εάν θέσωμεν ως λύσιν της (161) την

$$F(p, q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} f(p, q) \quad (162)$$

λαμβάνομεν την εξίσωσιν ιδιοτιμών

$$\hat{W}F(p, q) = Ef(p, q) \quad (163)$$

Την εξίσωσιν αυτήν θα μελετήσωμεν κατωτέρω, ήτοι θα εύρωμεν τας ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμάς της. Χάριν απλότητος περιοριζόμεθα εις τον τελεστήν

$$\hat{H}(p, q) = c\vec{a} \cdot \vec{p} + bmc^2 + eV(q) \quad (164)$$

Η εξίσωσις ιδιοτιμών λαμβάνει την μορφήν

$$c \left(p_i - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) a_i F - c \left(p_i + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) F a_i + mc^2 (bF - Fb) = \left\{ E - eV \left(q + \frac{i\hbar}{2} \right) \frac{\partial}{\partial q} + eV \left(q - \frac{i\hbar}{2} \right) \frac{\partial}{\partial q} \right\} F \quad (165)$$

Εκφράζομεν τας ιδιοσυναρτήσεις $f(p, q)$ τη βοήθεια του κάτωθι Fourier μετασχηματισμού

$$f(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{2(i/\hbar)pq'\} \Psi(q, q') dq' \quad (166)$$

Αποδεικνύεται ευκόλως, μετά από μίαν μερικήν ολοκλήρωσιν ότι η συνάρτησις $\Psi(q, q')$ επαληθεύει την εξίσωσιν.

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar c}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial}{\partial q'_i} \right) a_i \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{\partial}{\partial q'_i} \right) \Psi a_i + mc^2(b\Psi - \Psi b) = \\ \{E - eV(q_i - q'_i) + eV(q_i + q'_i)\} \Psi \end{aligned} \quad (167)$$

Η εξίσωσις (167) δια του μετασχηματισμού

$$q + q' = x, \quad q - q' = y \quad (168)$$

λαμβάνει την μορφήν

$$\begin{aligned} -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_i} a_i \Psi(x, y) + \frac{\partial}{\partial y_i} \Psi(x, y) a_i + mc^2 b \Psi(x, y) - \Psi(x, y) b = \\ \{E - eV(x) + eV(y)\} \Psi(x, y) \end{aligned} \quad (169)$$

Επειδή η ιδιοσυνάρτησις της εξισώσεως του Dirac έχει 4 διαστάσεις η συνάρτησις $\Psi(x, y)$ πρέπει να είναι μια μήτρα 4×4 . Πράγματι δια του μετασχηματισμού

$$\Psi_{ij}(x, y) = \Psi_i(x) \Psi_j^*(y), \quad E = E_x - E_y \quad (170)$$

Η εξίσωσις (169) διαχωρίζεται εις τα εξισώσεις

$$\left\{ -i\hbar c a_i \frac{\partial}{\partial x_i} + mc^2 b \right\} \Psi(x) = \{E_x + eV(x)\} \Psi(x) \quad (171)$$

$$\left\{ i\hbar c \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\Psi}^*(y) a_i + mc^2 \right\} \tilde{\Psi}^*(y) b = \tilde{\Psi}^*(y) \{E_y + eV(y)\} \quad (172)$$

Κατά συνέπειαν η ιδιοσυνάρτησις της εξισώσεως ιδιοτιμών του Wigner είναι μια μήτρα 4×4 με στοιχεία

$$f_{ij}(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{2(i/\hbar)pq'\} \Psi_i(q + q') \Psi_j^*(q - q') dq' \quad (173)$$

ένθα τα $\Psi_i(x)$ είναι τα spinor του Dirac [44]. Αι δε ιδιοτιμαί της είναι η διαφορά των ιδιοτιμών δύο ισοδυνάμων εξισώσεων του Dirac.

Δια την περίπτωση των ελευθέρων σωματίων οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμείς της σχετικιστικής εξίσωσης του Wigner δίδονται εκ των σχέσεων.

$$F_{ij}(p, q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} A_i(k) A_j(k') e^{i(k-k')t} \delta\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{k+k'}{2}\right)$$

$$E = \pm c\sqrt{m^2c^2 + \hbar^2k^2} \pm c\sqrt{m^2c^2 + \hbar^2k'^2} \quad (174)$$

Η σχετικιστική συνάρτησις Wigner παίζει και εδώ τον ρόλον κατανομής και συνδέεται επίσης με τον τελεστήν της μήτρας πυκνότητος [45].

5.2 Σχετικιστικός propagator

Ορίζομεν ως electron propagator ένα bispinor τάξεως δύο ως ακολούθως

$$K_{ij}(2, 1) = -i \langle 0|T\Psi_i(x_1)\bar{\Psi}_j(x_2)|0 \rangle \quad (175)$$

Έκαστος των τελεστών ψ είναι ένα άθροισμα της μορφής

$$\Psi_i = \sum_p a_p \Psi_{pi} + b_p^+ \Psi_{-pj}$$

$$\tilde{\Psi}_i = \sum_p a_p^+ \tilde{\Psi}_{pi} + b_p \tilde{\Psi}_{-pj} \quad (176)$$

Ο δεύτερος όρος των εκφράσεων αυτών περιέχει τους ποσιτρον όρους. Μια σχέσις παρομοία με την μη σχετικιστικήν (37) δύναται να ευρεθή και εδώ. Εισάγοντες τους τελεστές (176) εις την (175) και λαμβάνοντες υπ' όψιν τα σχέσεις:

$$\langle 0|a_p a_p^+|0 \rangle = \langle 0|b_p b_p^+|0 \rangle = 1 \quad (177)$$

ευρίσκομεν

$$K_{ij}(2, 1) = -i \sum_p e^{-iE_p(t_2-t_1)} \Psi_{pi}(\vec{r}_2) \tilde{\Psi}_{pk}(\vec{r}_1), \quad \text{δία } t_2 > t_1$$

$$K_{ij}(2, 1) = i \sum_p e^{iE_p(t_2-t_1)} \Psi_{-pi}(\vec{r}_2) \tilde{\Psi}_{-pk}(\vec{r}_1), \quad \text{δία } t_2 < t_1 \quad (178)$$

Η επέκτασις αυτή των μη σχετικιστικών σχέσεων δια χρόνους $t_2 < t_1$ είναι αναγκαία δια να συμπεριλάβωμεν και τας σχετικιστικάς καταστάσεις αρνητικής ενεργείας.

Δύναται ναδειχθή ότι ο propagator (175) ικανοποιεί την σχέσηιν.

$$\left\{ c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) - mc^2 \right\} K(2, 1) = i\delta(2, 1) \quad (179)$$

Είναι δηλαδή η Green συνάρτησις της σχετικιστικής Dirac εξισώσεως.

Κατωτέρω δια της αναπτυχθείσης μεθόδου θα υπολογίσωμεν τον advanced propagator δια τας περιπτώσεις του ελευθέρου σωματίου και δια το ηλεκτρομαγνητικόν πεδίων. Εις τους υπολογισμούς μας θα παραλείψωμεν την βοηθητικήν σταθεράν ϵ , δεχόμενοι ότι η μάζα περιέχει μίαν απειροστήν φανταστικήν ποσότητα $m \rightarrow m - i\epsilon$.

Ο σχετικιστικός propagator δια έν σωματίον εντός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου δίδεται εκ της σχέσεως.

$$K^+(2, 1) = \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ -\frac{it}{\hbar} \left[c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) - mc^2 \right] \right\} \delta(2, 1) \quad (180)$$

Η σχέσηιν (180) γράφεται

$$K^+(2, 1) = \left\{ c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + mc^2 \right\} \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ -\frac{it}{\hbar^2} \left[c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + mc^2 \right] \left[c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) - mc^2 \right] \right\} \delta(2, 1) \quad (181)$$

Εκ της σχέσεως (159) λαμβάνομεν

$$K^+(2, 1) = \left\{ c\vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + mc^2 \right\} \Delta(2, 1) \quad (182)$$

ένθα ο spinor $\Delta(2, 1)$ είναι εις συνήθεις μονάδας ο εξής:

$$\Delta(2, 1) = \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ -\frac{it}{\hbar^2} \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - eV(\vec{r}_2) \right)^2 - c^2 \left(i\hbar \vec{\nabla}_2 + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}_2) \right)^2 - m^2 c^4 + e\hbar c \vec{H} \cdot \vec{\Sigma} - ie\hbar c \vec{E} \cdot \vec{a} \right] \right\} \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \delta(t_2 - t_1) \quad (183)$$

Δια την περίπτωσιν των ελευθέρων σωματίων ήτοι $\vec{E} = \vec{H}$ η σχέσηιν (183) γράφεται

$$\Delta(2, 1) = \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ it \frac{\partial^2}{\partial t_2^2} - ic^2 t \vec{\nabla}_2^2 + i \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} t \right\} \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \delta(t_2 - t_1) = \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ it \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} t \right\} \exp \left\{ it \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right\} \delta(t_2 - t_1) \exp \left\{ ic^2 t \vec{\nabla}_2^2 \right\} \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad (184)$$

Εις την περίπτωσιν αυτήν το $\Delta(2, 1)$ είναι μια βαθμωτή συνάρτησις.

Εκ της σχέσεως (104) λαμβάνομεν

$$\Delta(2,1) = -\frac{1}{(4\pi)^2 c^3} \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{t^2} \exp \left\{ \frac{i}{4t} \left[(t_2 - t_1)^2 - \frac{1}{c^2} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2 \right] + i \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} t \right\} \quad (185)$$

Το ολοκλήρωμα αυτό είναι στοιχειώδες [46]. Θέτοντες

$$\begin{aligned} s &= \left[(t_2 - t_1)^2 - \frac{1}{c^2} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2 \right]^{1/2} & \Delta t^2 > \Delta r^2 \\ s &= i \left[\frac{1}{c^2} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2 - (t_2 - t_1)^2 \right]^{1/2} & \Delta t^2 < \Delta r^2 \end{aligned} \quad (186)$$

λαμβάνομεν

$$\Delta(2,1) = \frac{m}{8\pi s} H_1^{(2)} \left(\frac{m s c^2}{\hbar} \right) + \frac{1}{2\pi} \delta(s^2) \quad (187)$$

ένθα $H_1^{(2)}$ είναι η συνάρτησις Hankel.

Ο spinor $\Delta(2,1)$ δύναται να υπολογισθή ακριβώς και εις την πλήρη μορφήν του. Εκλέγομεν τα δυναμικά της μορφής.

$$\vec{A}(\vec{r}) = (0, Hx, 0) \quad \text{και} \quad V(\vec{r}) = -Ex \quad (188)$$

Ητοι σταθερόν μαγνητικόν πεδίων - παράλληλον προς τον z άξονα και σταθερόν ηλεκτρικόν πεδίων - παράλληλον προς τον x άξονα

Ο spinor $\Delta(2,1)$ γράφεται:

$$\begin{aligned} \Delta(2,1) = \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ t \left[i \frac{\partial^2}{\partial t_2^2} - ic^2 \vec{\nabla}_2^2 + \frac{i\omega^2}{c^2} x_2^2 + 2x_2 \left(\frac{\omega_2}{c} \frac{\partial}{\partial t_2} - \omega_1 \frac{\partial}{\partial y_2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + i \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} - i\omega_2 \Sigma_3 + \omega_1 a_1 \right] \right\} \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \delta(t_2 - t_1) \end{aligned} \quad (189)$$

ένθα έχομεν θέσει

$$\omega_1 = \frac{ec}{\hbar} H, \quad \omega_2 = \frac{ec}{\hbar} E \quad (190)$$

και

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{ec}{\hbar} \sqrt{H^2 - E^2} & \delta i \alpha & \quad 0 \leq E < H \\ \omega &= i \frac{ec}{\hbar} \sqrt{E^2 - H^2} & \delta i \alpha & \quad 0 \leq H < E \end{aligned} \quad (191)$$

Ακολούθως θεωρούμεν του μετασχηματισμούς.

$$\begin{aligned} y'_2 - y'_1 &= \frac{\omega_1}{\omega}(y_2 - y_1) - \frac{\omega_2 c}{\omega}(t_2 - t_1) \\ t'_2 - t'_1 &= \frac{\omega_2}{\omega c}(y_2 - y_1) - \frac{\omega_1}{\omega}(t_2 - t_1) \end{aligned} \quad (192)$$

Οι ανωτέρω μετασχηματισμοί ως γνωστόν αφήνουν αναλλοιώτους τας εκφράσεις $c^2 \Delta t^2 - \Delta r^2$, $\partial^2 / \partial t_2^2 - c^2 \vec{\nabla}_2^2$, καθώς και το γινόμενο των $\delta(2, 1)$ συναρτήσεων. Αντιθέτως αλλοιώνουν τον παράγοντα $\frac{\omega_2}{c} \frac{\partial}{\partial t_2} - \omega_1 \frac{\partial}{\partial y_2}$, ο οποίος και λαμβάνει την κάτωθι μορφήν.

$$\frac{\omega_2}{c} \frac{\partial}{\partial t_2} - \omega_1 \frac{\partial}{\partial y_2} = -\omega \frac{\partial}{\partial y'_2} \quad (193)$$

Εκφράζοντας την σχέση (189) εις το τονούμενον σύστημα και διατάσσοντας καταλλήλως τους τελεστές έχομεν:

$$\begin{aligned} \Delta(2, 1) &= \int_{-\infty}^0 dt \exp \left\{ t \left[i \frac{\partial^2}{\partial t_2'} - ic^2 \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right] \right\} \delta(z_2 - z_1) \delta(t_2 - t_1) \\ &\quad \exp \left\{ t \left[-ic^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + i \frac{\omega^2}{c^2} (x_2 - i \frac{c^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'})^2 \right] \right\} \delta(x_2 - x_1) \delta(y_2 - y_1) \\ &\quad \exp \left\{ t \left[i \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} - i \omega_2 \Sigma_3 + \omega_1 a_1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (194)$$

Οι τελεσταί οι οποίοι περιέχουν τους spin όρους υπολογίζονται ευκόλως τη βοήθεια των σχέσεων.

$$a_1^2 = \Sigma_2^2 = 1, \quad a_2 \Sigma_3 + \Sigma_3 a_1 = 0 \quad (195)$$

Αναλύοντας το εκθετικόν κατά Taylor λαμβάνομεν:

$$\exp \{ -i \omega_1 t \Sigma_3 + \omega_2 t a_1 \} = \cos(\omega t) + (\omega_2 t a_1 - i \omega_1 t \Sigma_3) \frac{\sin \omega t}{\omega t} \quad (196)$$

Επίσης εκ της σχέσεως (104) λαμβάνομεν:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ t \left[i \frac{\partial^2}{\partial t_2'} - ic^2 \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right] \right\} \delta(z_2 - z_1) \delta(t_2 - t_1) &= \\ \frac{1}{4\pi c t} \exp \left\{ \frac{i}{4t} \left[(t_2' - t_1')^2 - \frac{1}{c^2} (z_2 - z_1)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (197)$$

Ακολούθως αναλύομεν τον τρίτον εκθετικόν τελεστήν της (194) εις κανονικὴν μορφήν. Θέτοντες

$$a = \frac{\partial}{\partial x_2}, \quad a^+ = x_2 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \implies [a, a^+] = 1$$

$$k_1 = -ic^2 t, \quad k_2 = it \frac{\omega^2}{c^2}, \quad k_3 = 0, \quad \lambda = i\omega t \quad (198)$$

λαμβάνομεν, δυνάμει της σχέσεως (98)

$$\exp \left\{ \left[-ic^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + i \frac{\omega^2}{c^2} \left(x_2 - i \frac{c^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right)^2 \right] \right\} \delta(x_2 - x_1) \delta(y_2' - y_1') =$$

$$(\cos(\omega t))^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{2c^2} \tan(2\omega t) \left(x_2 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right)^2 \right\}$$

$$\exp \left\{ -\ln \{ \cos(2\omega t) \} \left(x_2 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right) \frac{\partial}{\partial x_2} \right\}$$

$$\exp \left\{ -\frac{ic^2}{\omega} \tan(2\omega t) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right\} \delta(x_2 - x_1) \delta(y_2' - y_1') = \left(-\frac{2ic^2}{\omega} \sin(2\omega t) \right)^{-1/2}$$

$$\exp \left\{ -\frac{i}{2c^2} \cot 2\omega t \left[\left(x_2 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right)^2 + \left(x_1 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right)^2 \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{2}{\cos(2\omega t)} \left(x_2 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right) \left(x_1 - \frac{ic^2}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_2'} \right) \right] \right\} \delta(y_2' - y_1') = \frac{\omega}{4\pi c^2 \sin \omega t}$$

$$\exp \left\{ -\frac{i\omega}{4c^2} \cot \omega t \left[(y_2' - y_1')^2 + (x_2 - x_1)^2 \right] - \frac{i\omega}{2c^2} (y_2' - y_1')(x_2 + x_1) \right\} \quad (199)$$

Κατά συνέπειαν εκ των σχέσεων (196), (197) και (199) λαμβάνομεν τελικώς τον ζητούμενον propagator.

$$\Delta(2, 1) = \frac{-1}{(4\pi)^2 c^3} \exp \left\{ -\frac{i\omega}{2c^2} (y_2' - y_1')(x_2 + x_1) \right\} \int_{-\infty}^0 dt \left[\cos(\omega t) + \right.$$

$$\left. (\omega_2 t a_1 - i\omega_1 t \Sigma_3) \frac{\sin(\omega t)}{\omega t} \right] \frac{1}{t^2} \frac{\omega t}{\sin(\omega t)} \exp \left\{ it \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} + \right.$$

$$\left. \frac{i}{4t} \left[(t_2 - t_1)^2 - \frac{1}{c^2} (z_2 - z_1)^2 - \frac{1}{\omega^2} \omega t \cos(\omega t) ((x_2 - x_1)^2 + (y_2' - y_1')^2) \right] \right\} \quad (200)$$

Η σχέση αυτή ισχύει δι' όλες τας οριακάς μεταβάσεις ήτοι $E = 0$ ή $H = 0$. Επίσης εάν $E = H = 0$, συμπίπτει με την σχέση (185) του ελευθέρου σωματίου. Την ίδιαν σχέση λαμβάνομεν, εκτός από τας spin μήτρας και δια του ορίου $e = H$ ήτοι $\omega = 0$. Ολοκληρώματα της μορφής (200) αναφέρονται εις την βιβλιογραφίαν [47].

6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Εις την παρούσαν εργασία, μελετώμεν τας εφαρμογάς της θεωρίας διατάξεως των τελεστών εις την κβαντομηχανικήν

Δια των αντιστοιχιών των διατεταγμένων τελεστών προς τας συνήθεις μιγαδικάς συναρτήσεις, αι κβαντομηχανικά σχέσεις λαμβάνουν την συνήθη κλασικήν των μορφήν. Το σύστημα περιγράφεται κατεύθειαν εις τον χώρο των φάσεων από μίαν συνάρτησιν κατανομής και τα παρατηρήσιμα μεγέθη, παρίστανται αμφοιμοσημάντως από συνήθεις μιγαδικάς συναρτήσεις. Η συμμετρική ή Weyl αντιστοιχία έχει μελετηθή περισσότερο, διότι η αντίστοιχος συνάρτησις του τελεστού της μήτρας πυκνότητος συμπίπτει με την γνωστήν κατανομήν του Wigner. Μελετώμεν την περιγραφήν αυτή της κβαντομηχανικής δια την μη σχετικιστικήν περίπτωσιν και την επειτένομεν και εις την σχετικιστικήν τοιαύτην. Ορίζομεν τον σχετικιστικόν Wigner τελεστή και ευρίσκομεν τόσον τας ιδιοσυναρτήσεις όσον και τας ιδιοτιμάς του. Αποδεικνύομεν ότι η ιδιοσυνάρτησις είναι μια μήτρα με στοιχεία τον φ μετασχηματισμον του γινομένου δύο spinor του Dirac, ενώ αι ιδιοτιμαί είναι η διαφορά των ιδιοτιμών δυο εξισώσεων του Wigner.

Αφ' ετέρου η διάταξις των τελεστών διευκολύνει και απολοποιεί την επίδρασιν των τελεστών επί των διαφόρων συναρτήσεων. Αποδεικνύεται ότι δυνάμεθα να γράψωμεν τον τελεστήν χρονικής εξέλιξεως ενός συστήματος υπό εκθετικήν μορφήν. Αναπτύσσομεν ακολούθως τον τελεστήν αυτόν εις μίαν κατάλληλον διατεταγμένην μορφήν, τοιαύτη ώστε η επίδρασις του εν λόγω τελεστού επί την δέλτα συνάρτησιν υπολογίζεται με έναν απλόν και ευθύν τρόπον. Η προκύπτουσα συνάρτησις είναι ο propagator του συστήματος και παίζει ουσιώδη ρόλον εις την παράστασιν Feynman της κβαντομηχανικής η οποία αναπτύσσεται επίσης. Διά χρονικώς εξαρτωμένους ή ανεξάρτητους τελεστάς του t , οι οποίοι είναι πολώνυμα δευτέρας τάξεως ως προς τας κανονικάς συζυγείς μεταβλητάς, η διάταξις επιτυγχάνεται δια της μεθόδου της παραμετρικής παραγωγίσεως. Δίδωμεν περαιτέρω την χρονική εξέλιξιν των τελεστών και ήτοι ευρίσκομεν τα ανεξάρτητα ολοκληρώματα της κινήσεως. Τέλος η μέθοδος επεκτείνεται και εις την σχετικιστικήν κβαντομηχανικήν ένθα υπολογίζομεν τον propagator του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

7 SUMMARY

In this thesis we study the applications of the theory of the ordering of the operators in quantum mechanics.

With the help of some correspondences between ordered operators and the usual complex functions, the quantum mechanical relations become similar with those of classical mechanics. The system is now described directly in the phase space by a distribution function and the physical observables are represented by the usual complex functions. The symmetric or Weyl correspondence has been studied extensively since the corresponding function of the density matrix operator, coincides with the known Wigner distribution function, We study this Wigner formulation of non relativistic quantum theory and we extend this in the relativistic one. We define the relativistic Wigner operator and we find its eigenfunctions and eigenvalues. We prove that the eigenfunctions are matrices whose elements are Fourier transforms of the product of two Dirac spinors, while the eigenvalues are deferences of the eigenvalues of two Dirac equations.

On the other hand the ordering of the operators simplify the calculation of the action of the operators on the various functions. We write the time evolution operator in an exponential form and we expand this operator in an appropriate form so that its action on the function, follows in a simple and straightforward manner. The resulting function is the propagator of the system which plays a central role in the Feynman formulation of quantum mechanics, which is also developed. For Hamiltonians, time dependent or time independent, which are polynomials of second degree in the canonical conjugate variables, the ordering can be achieved with the method of parametric differentiation. We also evaluate the time evolution of the operators p and q which constitute the independent integrals of motion. Finally we extend the method to the case of relativistic mechanics where we evaluate the propagator of the electromagnetic field.

8 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Αναφορές

- [1] G. Rosen, Formulation of classical and quantum dynamical theory Acad. Press (1969)
- [2] A. Jannussis, A. Streclas, D. Sourlas, K. Vlachos, Physics Scripta vol 15 163 – 166 (1977)
- [3] W. Brittin, W. Wyse, Commun. Math. Phys. 49, 107, (1976)
- [4] F. Bopp, W. Heisenberg und die Physik unserer Aeit (Verl. Viewig and Sohn 128 (1961)
- [5] R. Kubo, Journ. Soc. Japan 19, 2197 (1964)
- [6] E. Wigner, Phys. Rev. 40, 743 (1932)
- [7] L. Suttorp, S. Groot, Foundation of electrodynamics (Appendix) N. Holl. publ. com (1972)
- [8] Ν. Παραργιάς, Τελεσταί Wigner και κβαντομηχανικός χώρος των φάσεων Διατριβή επί διδακτορία Πάτραι 1977
- [9] P. Dirac, Selected paper on quantum electrodynamics p. 312 Dover publ. inc (1958)
- [10] R. Feynman, Phys. Rev. 76, 749 (1949)
- [11] R. Feynman, R. Hibbs, Quantum Mechanics and path integrals Mc Graw – Hill (1965)
- [12] J. Papadopoulos, J. Devreese, Path integral Plenum Publ. Corp. (1978) και σχετική βιβλιογραφία.
- [13] A. Isihara, Statistical Physics chp. 10 Acad. Press (1971)
- [14] E. Fick, Einführung in die Grundlagen Der Quantentheory & 7 A.V.F. (1968)
- [15] V. Dodonov, V. Man'ko, P. N. Lebedev Inst. of physics Preprints No 209 (1977)
- [16] D. Khandekar, S. Lewande, J. Math. Phys. 20(9) (1979)
- [17] F. Bopp, Z. Anrew, Physik 14, 699 (1962)

- [18] E. Kerner, *Can. J. Phys.* vol 36, 371 (1958)
- [19] A. Jannussis, G. Brodimas A. Streclas, *Letters al Nuovo Cimen.* 25 283 (1979)
- [20] A. Jannussis, G. Brodimas A. Streclas, *Physics Lett.* (preprint)
- [21] V. Dodonov, V. Man'ko, *Il Nuovo Cimento col.* 44B N.2 (1978)
- [22] H. Dekker, *Phys. Rev.* A16 2126 (1971)
- [23] H. Lewis, W. Riesenfeld, *J. Math. Phys.* vol. 10. N. 8 (1969)
- [24] P. Roman, *Introduction to Quantum field theory Chap. 1* John Wiley and Sons (1969)
- [25] D. Lurie, *Particles and fields & 6 Inter. Publ.* (1968)
- [26] K. Cahill, R. Glauber, *Phys. Rev.* 177, 5, 1857 (1969)
- [27] K. Cahill, R. Glauber, *Phys. Rev.* 177, 5, 1882 (1969)
- [28] G. Agarwal, E. Wolf, *Phys. Rev. D* 2, 10, 2161 (1969)
- [29] G. Agarwal, E. Wolf, *Phys. Rev. D* 2, 10, 2187 (1969)
- [30] W. Louisell, *Quantum statistical properties of radiation Chp. 3* J. Wiley and Sons (1973)
- [31] G. Mehta, *J. Math. Phys.* vol. 18 No 3, 404 (1977)
- [32] R. Feynman, *Phys. Rev.* 84, 108 (1951)
- [33] M. Kolsrud, *Physica mathematica Univ. Olsoensis Inst. report N. 28* (1965)
- [34] K. Husimi, *Prog. of theor. Phys.* vol. 9, No 4, 381 (1953)
- [35] R. Wilcox, *J. math. phys.* vol 8, No 4, 962 (1967)
- [36] A. Jannussis, A. Streclas, N. Patargias, D. Sourlas, K. Vlachos, *Phys. Scripta* vol. 18, 13 – 17 (1978)
- [37] A. Jannussis, *Phys. Status Sol.* 36, 417 (1969)
- [38] R. Courant, *Differential and Integral calculus W. Inter.* V. 2.
- [39] D. Khandekar, S. Lewande, *J. Math. Phys.* vol. 16, No 2, (1975)
- [40] D. ter Haar, *Problems in quantum mechanics* Pion London (1975)

- [41] J. Eisele, Modern quantum mechanics with application to elementary particle Physics Wiley Int. (1969)
- [42] V. Berestetskii, E. Lifschits, L. Pitaevskii, Relativistic quantum theory vol. 4 Part 1 Perg. Press (1971)
- [43] A. Jannussis, A. Streklas, D. Sourlas, K. Vlachos, Lettere al nuovo cimento vol. 18 No 11 (1977)
- [44] C. Weert, W. Boer, Physica 81A 597 – 612 (1975)
- [45] R. Balescu, Acta physica Austriaca 28, 336 – 352 (1958)
- [46] I. Gradshteyn, I. Ryzhik, Tables of integral p. 340 Acad. press (1965)
- [47] H. Bucholtz, The confluent hypergeometric function Springer – Verlag (1969)