



Ο ΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ ΔΙΑΔΡΟΜΩΝ ΤΑ

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

ΙΩΑΝΝΗΣ Ε. ΣΦΑΕΛΟΣ

2004

Π Ε Ρ Ι Ε Χ Ο Μ Ε Ν Α

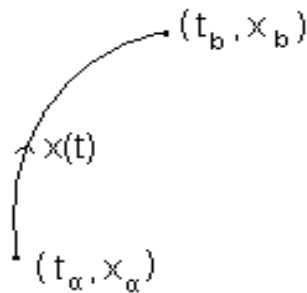
1. Εισαγωγή
2. Η κυματοσυνάρτηση και η εξίσωση του Schrodinger με τον διαδότη
3. Φορμαλισμός “path integral” του πίνακα πυκνότητας
4. Υπολογισμός των path integrals
5. Path integrals με ανάπτυγμα διαταραχών
6. Το ολοκλήρωμα Feynman

1. Εισαγωγή

Από την Κβαντομηχανική γνωρίζουμε ότι, για την μελέτη ενός μικροσκοπικού συστήματος απαιτείται η γνώση των πλατών πιθανότητας. Στα διάφορα φυσικά μεγέθη αντιστοιχίζουμε ερμητιανούς τελεστές, που καθένας από αυτούς συνδέεται με το πείραμα μέσω των στοιχείων ενός πίνακα. Τα στοιχεία αυτά του πίνακα δεν είναι τίποτε άλλο παρά πλάτη πιθανότητας.

Για την χρονική εξέλιξη αυτών των πλατών, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε διαφορικές εξισώσεις (εξ. Schrodinger) ή τον πιο πρόσφατο σχετικά φορμαλισμό των path integrals, δηλαδή μέσω ολοκληρωτικών σχέσεων. Παρόλο που αυτή η μέθοδος για στοιχειώδη προβλήματα είναι πιο πολύπλοκη μαθηματικά είναι διαισθητικά πιο χρήσιμη. Σε προχωρημένα δε προβλήματα συστημάτων με άπειρους βαθμούς ελευθερίας, η μέθοδος αυτή απεδείχθη ισχυρότερη και απλούστερη.

Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίδιο ξεκινά την αρχική χρονική στιγμή t_a από το σημείο x_a και καταλήγει στο τελικό σημείο x_b την χρονική στιγμή t_b (Σχ.1). Μπορούμε να λέμε, ότι η διαδρομή του σωματιδίου μεταξύ αυτών των δύο σημείων συναρτησει του χρόνου t



Σχ. 1

περιγράφεται από την συνάρτηση $x(t)$, που έχει τις ιδιότητες :
 $x(t_a) = x_a$ και $x(t_b) = x_b$.

Στην κλασσική μηχανική υπάρχει μία μόνο καθορισμένη τροχιά μεταξύ των σημείων a και b , η λεγόμενη κλασσική τροχιά (path) $\bar{x}(t)$, η οποία καθορίζεται από την αρχή της ελάχιστης δράσης. Η δράση S ,

δίνεται από την σχέση :

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt L(x, \dot{x}, t) \quad (1.1)$$

όπου L είναι η Lagrangian ενός μονοδιάστατου συστήματος. Για σωματίδιο μάζας m , που κινείται σ'ένα δυναμικό $V(x,t)$ η Lagrangian είναι :

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x,t) \quad (1.2)$$

Η μορφή του path $\bar{x}(t)$, που καθιστά την δράση S ακρότατη, καθορίζεται με την χρήση μεταβολών, οπότε προκύπτει η εξίσωση κίνησης των Euler - Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (1.3)$$

Στην Κβαντομηχανική χρησιμοποιούμε την έννοια του πλάτους, συχνά καλούμενο Kernel ή propagator (διαδότης), που συμβολίζεται με $K(b,\alpha)$ και υπολογίζεται από το σημείο α μέχρι το b , αθροίζοντας τις συνεισφορές της κίνησης ενός σωματιδίου σε μία διάσταση. Πρέπει να γίνει κατανοητό, ότι όλες οι τροχιές από το α μέχρι το b με συντεταγμένες (x_α, t_α) και (x_b, t_b) αντίστοιχα συνεισφέρουν εξίσου στην τιμή του ολικού πλάτους σε διαφορετικές φάσεις. Οι φάσεις αυτές προσδιορίζονται για κάθε path από την δράση αυτού, σε κβαντομηχανικές μονάδες δράσης \hbar .

Ως γνωστόν, η πιθανότητα $P(b,\alpha)$ για να πάμε την χρονική στιγμή t_α από το σημείο x_α στο σημείο b την χρονική στιγμή t_b είναι το απόλυτο τετράγωνο ενός πλάτους $K(b,\alpha)$ πιθανότητας για να πάμε από το α στο b , δηλαδή :

$$P(b,\alpha) = |K(b,\alpha)|^2 \quad (1.4)$$

Το πλάτος αυτό είναι το άθροισμα των συνεισφορών $\varphi[x(t)]$ για κάθε τροχιά, δηλαδή :

$$K(b,\alpha) = \sum_{\substack{\text{σε όλα τα paths} \\ \text{από } \alpha \text{ έως } b}} \varphi[x(t)] \quad (1.5)$$

Το πλάτος πιθανότητας του κάθε path σύμφωνα με τον Dirac, έχει μία φάση ανάλογη της δράσης S και δίνεται από την έκφραση :

$$\varphi[x(t)] = N e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (1.6)$$

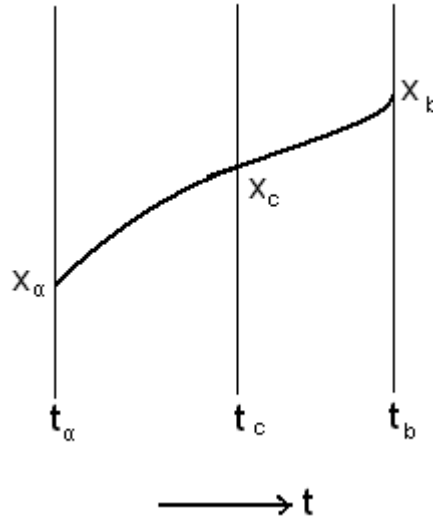
Η σταθερά N που εμφανίζεται στην παραπάνω σχέση υπολογίζεται νορμαλίζοντας το $K(b,\alpha)$.

Μπορούμε επίσης, να αντικαταστήσουμε το άθροισμα πάνω σε όλα τα paths της σχέσης (1.5), με ένα ολοκλήρωμα που θα το ονομάζουμε path integral:

$$K(b,\alpha) = \int_{\alpha}^b Dx(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[b,\alpha]} \quad (1.7)$$

Το $Dx(t)$ το αφήνουμε προς το παρόν, αφού θα το ορίσουμε αργότερα.

Ας υποθέσουμε τώρα, κάποια χρονική στιγμή t_c μεταξύ των t_a και t_b ,



Σχ. 2

δηλαδή $t_a < t_c < t_b$. Επομένως, η δράση κατά μήκος οποιουδήποτε μονοπατιού ανάμεσα στα a και b γράφεται ως εξής :

$$S[b, \alpha] = S[b, c] + S[c, \alpha] \quad (1.8)$$

Αν χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση (1.7), ο διαδότης $K(b, \alpha)$ γίνεται :

$$K(b, \alpha) = \int_{\alpha}^b Dx(t) e^{\frac{i}{\hbar} \{S[b, c] + S[c, \alpha]\}} \quad (1.9)$$

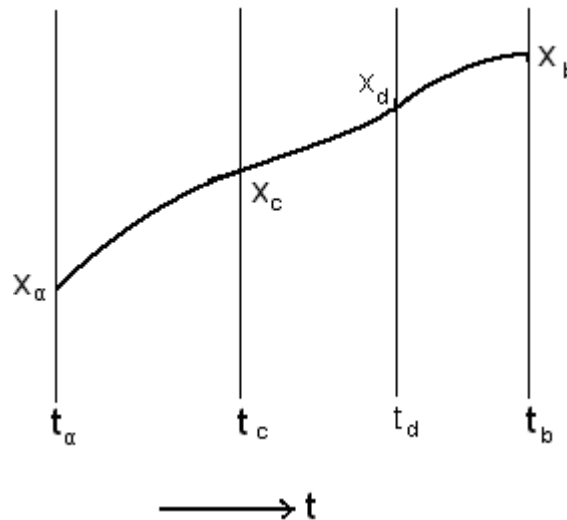
Έχουμε την δυνατότητα να χωρίσουμε οποιοδήποτε μονοπάτι μεταξύ των a και b σε δύο τμήματα. Το πρώτο κομμάτι θα έχει τελικά σημεία τα x_a και x_c , ενώ το δεύτερο θα έχει τελικά σημεία τα x_c και x_b (Σχ.2). Έτσι μπορούμε να ολοκληρώσουμε πρώτα πάνω σε όλα τα paths από το a μέχρι το c και μετά πάνω σε όλα τα paths από το c μέχρι το b και τελικά ολοκληρώνουμε το αποτέλεσμα πάνω σε όλες τις δυνατές τιμές του x_c . Κατά την εκτέλεση του πρώτου βήματος αυτής της ολοκλήρωσης το $S[b, c]$ είναι σταθερό, οπότε το αποτέλεσμα γράφεται ως εξής :

$$K(b, \alpha) = \int_{x_c} dx_c \int_c^b Dx(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[b, c]} K(c, \alpha) \quad (1.10)$$

Υπόψιν, ότι οι ολοκληρώσεις θα πρέπει να γίνουν όχι μόνο κατά μήκος των paths ανάμεσα στα c και b , αλλά και πάνω στο μεταβλητό τελικό σημείο x_c . Ακολούθως, πραγματοποιούμε την ολοκλήρωση πάνω σε όλα τα paths ανάμεσα σε κάποια αυθαίρετα σημεία x_c και το

τελικό σημείο b. Ότι απομένει είναι ένα ολοκλήρωμα πάνω σε όλες τις δυνατές τιμές του x_c . Τελικά παίρνουμε :

$$K(b, \alpha) = \int_{x_c} dx_c K(b, c) K(c, \alpha) \quad (1.11)$$

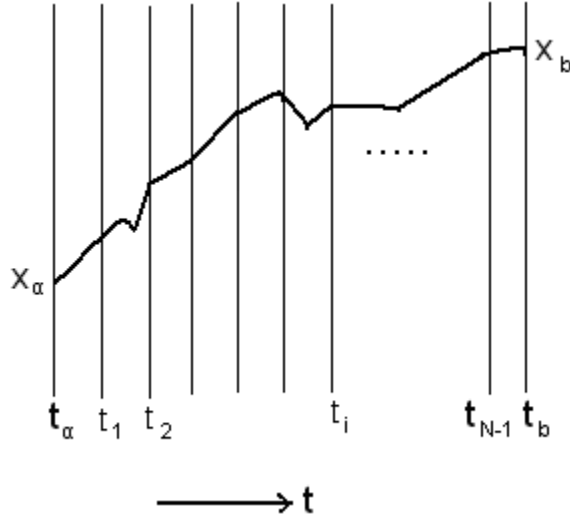


Σχ. 3

Μπορούμε να επεκταθούμε επίσης και σε περιπτώσεις, που λαμβάνουν χώρα περισσότερα από δύο διαδοχικά γεγονότα. Για παράδειγμα (Σχ. 3), διαιρούμε στα δύο όλα τα μονοπάτια με μια διαίρεση στο t_c και μία στο t_d . Έτσι ο διαδότης σ' αυτή την περίπτωση γράφεται :

$$K(b, \alpha) = \int \int_{x_d x_c} dx_d dx_c K(b, d) K(d, c) K(c, \alpha) \quad (1.12)$$

Το αποτέλεσμα αυτό από φυσικής πλευράς ερμηνεύεται ως εξής : εξετάζουμε ένα σωματίδιο που πηγαίνει από το α στο b , σαν να πήγαινε πρώτα από το α στο c , μετά από το c στο d και τέλος από το d στο b . Αυτό το πλάτος θα είναι το αποτέλεσμα όλων των Kernel για κάθε μονοπάτι.



Σχ. 4

Συνεχίζοντας την διαδικασία αυτή μέχρι να έχουμε την κλίμακα του χρόνου διαιρεμένη σε N διαστήματα (Σχ.4), παίρνουμε :

$$K(b, \alpha) = \int_{x_1} \int_{x_2} \dots \int_{x_{N-1}} dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \dots K(i+1, i) \dots K(1, \alpha) \quad (1.13)$$

Υποθέτουμε τώρα ότι $N \rightarrow \infty$, οπότε ορίζουμε τον διαδότη του σωματιδίου για να πάει από μια θέση σε κάποια άλλη που απέχει ένα απειροελάχιστο χρονικό διάστημα ε :

$$\begin{aligned} K(i+1, i) &= \sigma \alpha \theta e^{\frac{i}{\hbar} S[i+1, i]} = \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int dt L \right] = \\ &= \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.14)$$

2. Η κυματοσυνάρτηση και η εξίσωση του Schrodinger με τον διαδότη

Ως γνωστόν η εξίσωση του Schrodinger για σωματίδιο, που κινείται σε μια διάσταση είναι :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (2.1)$$

όπου H η Hamiltonian, που είναι της μορφής :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \quad (2.2)$$

Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ είναι το πλάτος πιθανότητας άφιξης του σωματιδίου στην θέση (x,t) , χωρίς να μας ενδιαφέρει η αρχική του θέση από την οποία ξεκίνησε. Η συνάρτηση του διαδότη $K(x_2,t_2;x_1,t_1)$, την οποία για συντομία συμβολίζουμε με $K(2,1)$ είναι επίσης κυματοσυνάρτηση και είναι το πλάτος πιθανότητας άφιξης στο (x_2,t_2) , για την ειδική περίπτωση που έρχεται από το (x_1,t_1) δηλαδή η έκφραση $K(2,1)$ αναφέρεται και στις αρχικές συνθήκες, συνεπώς εκτός από το πλάτος της κίνησης δίνει πληροφορίες και για το παρελθόν του σωματιδίου. Άρα η $K(2,1)$ ως μια συνάρτηση των μεταβλητών 2, είναι μια ειδική συνάρτηση κύματος, που θα πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση του Schrodinger. Έτσι για την περίπτωση αυτή η εξίσωση (3.2) γράφεται :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_2} K(2,1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} K(2,1) + V(2)K(2,1) \quad \text{για } t_2 > t_1 \quad (2.3)$$

Γενικά έχουμε :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_2} K(2,1) = H_2 K(2,1) \quad \text{για } t_2 > t_1 \quad (2.4)$$

όπου η Hamiltonian H_2 επιδρά μόνο πάνω στις μεταβλητές 2.

Εφόσον η κυματοσυνάρτηση είναι ένα πλάτος, θα ικανοποιεί τους κανόνες συνδυασμού των πλάτων για γεγονότα που συμβαίνουν διαδοχικά στον χρόνο. Έτσι, αφού η εξίσωση που έχουμε αναφέρει

στην προηγούμενη παράγραφο : $K(b,\alpha) = \int_{x_c}^b dx_c \int_c D\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[b,c]} K(c,\alpha)$

ισχύει για όλα τα σημεία (x_1,t_1) , η κυματοσυνάρτηση θα ικανοποιεί την ολοκληρωτική εξίσωση :

$$\Psi(x_2,t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2,t_2;x_3,t_3) \Psi(x_3,t_3) dx_3 \quad (2.5)$$

Το αποτέλεσμα αυτό μπορεί να ερμηνευτεί ως εξής : το ολικό πλάτος για να φθάσει στο σημείο (x_2, t_2) , που είναι η $\Psi(x_2, t_2)$, είναι το άθροισμα ή το ολοκλήρωμα πάνω σε όλες τις δυνατές τιμές x_3 του ολικού πλάτους για να φθάσει στο σημείο (x_3, t_3) , που είναι η $\Psi(x_3, t_3)$, πολλαπλασιαζόμενο με το πλάτος για να πάει από το 3 στο 2, που είναι ο διαδότης $K(x_2, t_2; x_3, t_3)$. Έτσι όλες οι προηγούμενες ιστορίες του σωματιδίου μπορούν να εκφραστούν με μια απλή συνάρτηση.

3. Φορμαλισμός «path integrals» του πίνακα πυκνότητας

Ως γνωστόν, οι πίνακες πυκνότητας ικανοποιούν την διαφορική εξίσωση :

$$\frac{\partial \rho(\beta)}{\partial \beta} = -H\rho(\beta) \Rightarrow \boxed{\hbar \frac{\partial \rho(u)}{\partial u} = -H\rho(u)} \quad (3.1)$$

με προφανή φορμαλιστική λύση :

$$\boxed{\rho(u) = e^{-Hu/\hbar}} \quad (3.2)$$

όπου η ποσότητα $\beta\hbar$ έχει τις διαστάσεις του χρόνου. Ο «χρόνος» μπορεί να χωριστεί σε διαστήματα μήκους ε ($u = n\varepsilon$), έτσι ώστε τελικά ο πίνακας πυκνότητας γράφεται ως γινόμενο n παραγόντων ως εξής :

$$\rho(u) = e^{-H\varepsilon/\hbar} e^{-H\varepsilon/\hbar} \dots e^{-H\varepsilon/\hbar} = \rho_\varepsilon \rho_\varepsilon \dots \rho_\varepsilon \quad (n \text{ φορές}) \quad (3.3)$$

Στην αναπαράσταση χωρικών συντεταγμένων του πίνακα πυκνότητας $\rho(x, x'; u)$, η λύση αναπαρίσταται ως εξής :

$$\rho(x, x'; u) = \int \dots \int \rho(x, x_{n-1}; \varepsilon) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \varepsilon) \dots \rho(x_1, x'; \varepsilon) dx_1 \dots dx_{n-1} \quad (3.4)$$

Η τελευταία έκφραση μας θυμίζει το Σχ. 4 στην προηγούμενη παράγραφο, όπου τώρα το σωματίδιο ταξιδεύει από την θέση x' στην θέση x , ακολουθώντας μια σειρά από ενδιάμεσα βήματα, x_1, x_2, \dots, x_{n-1} , τα οποία προσδιορίζουν μια διαδρομή (path). Ο πίνακας πυκνότητας $\rho(x, x'; u)$ για ένα σωματίδιο που ακολουθεί την διαδρομή από την θέση x' στην θέση x , δίνεται από το άθροισμα πάνω σε όλες τις δυνατές διαδρομές.

Καθώς το χρονικό βήμα ε τείνει στο μηδέν ο αριθμός των ολοκληρώσεων γίνεται πολύ μεγάλος ($n = u/\varepsilon \rightarrow \infty$). Αν θέσουμε :

$$\Phi[x(u)] = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ n\varepsilon = u}} \rho(x, x_{n-1}; \varepsilon) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \varepsilon) \dots \rho(x_1, x'; \varepsilon) \quad (3.5)$$

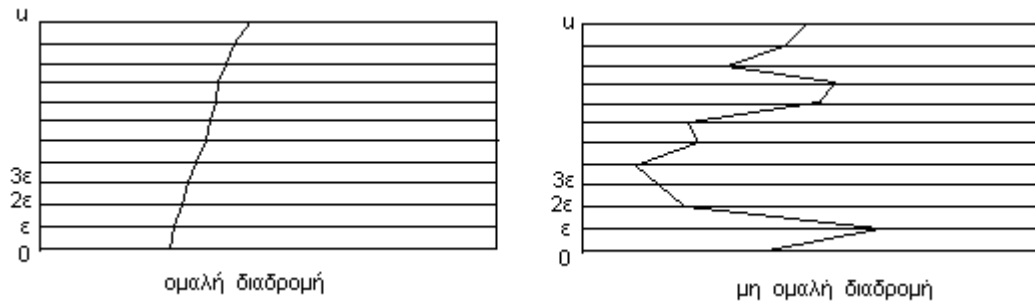
$$\mathcal{D}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} (dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1}) \quad (3.6)$$

τότε η σχέση (3.4) γράφεται :

$$\boxed{\rho(x, x'; u) = \int \Phi[x(u)] \mathcal{D}x(u)} \quad (3.7)$$

Το σημαντικό σ' αυτή την μεθοδολογία είναι, ότι αν και όλες οι δυνατές διαδρομές πρέπει να ληφθούν υπόψιν στην σχέση (3.7), η κύρια συνεισφορά προέρχεται από εκείνες που το $\rho(x, x'; \varepsilon)$ δεν είναι πολύ μικρό.

Σαν παράδειγμα αναφέρουμε τον τελεστή του πίνακα πυκνότητας στην κανονική συλλογή ενός μονοδιάστατου ελεύθερου σωματιδίου. Αυτός δίνεται από την σχέση :



Σχ. 5

$$\rho(x, x'; \varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\varepsilon\hbar}} \exp\left[-\frac{m}{2\varepsilon\hbar}(x' - x)^2\right] \quad (3.8)$$

Ο όρος $\rho(x, x'; \varepsilon)$ είναι πολύ μικρός αν : $x - x' > \sqrt{\frac{2\varepsilon\hbar}{m}}$, όπου μπορούμε να αντιληφθούμε ότι η σημαντικότερη συνεισφορά προέρχεται από τις ομαλές διαδρομές (Σχ. 5).

Τώρα μπορούμε να υπολογίσουμε επακριβώς την συνάρτηση $\Phi[x(u)]$ για ένα ελεύθερο σωματίδιο.

Η Hamiltonian γι' αυτό το σωματίδιο ως γνωστόν είναι :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (3.9)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις (3.4) και (3.8) θα έχουμε :

$$\rho(x, x'; u) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \exp\left\{-\frac{m\varepsilon}{2\hbar} \left[\left(\frac{x - x_{n-1}}{\varepsilon}\right)^2 + \left(\frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{\varepsilon}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_1 - x'}{\varepsilon}\right)^2 \right]\right\} \cdot \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/m}} \cdot \frac{dx_2}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/m}} \dots \frac{dx_{n-1}}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/m}} \quad (3.10)$$

Άρα σύμφωνα με την σχέση (3.5) βρίσκουμε :

$$\Phi[x(u)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \exp\left\{-\frac{m\varepsilon}{2\hbar} \left[\left(\frac{x - x_{n-1}}{\varepsilon}\right)^2 + \left(\frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{\varepsilon}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_1 - x'}{\varepsilon}\right)^2 \right]\right\} \quad (3.11)$$

Όσο το διάστημα ε γίνεται όλο και πιο μικρό, θα έχουμε :

$$\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon}\right) \rightarrow \frac{dx(u)}{du} \Big|_{u=k\varepsilon} \equiv \dot{x}(u) \Big|_{u=k\varepsilon} \quad (3.12)$$

Επομένως με την εξίσωση (3.11) καταλήγουμε :

$$\boxed{\Phi[x(u)] = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^u \frac{m}{2} [\dot{x}(u)]^2 du \right\}} \quad (3.13)$$

Αντίστοιχα στην περίπτωση σωματιδίου που κινείται σε μία διεύθυνση μέσα σε ένα δυναμικό $V(x)$ θα έχουμε :

$$\boxed{\Phi[x(u)] = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^u \left[\frac{m}{2} [\dot{x}(u)]^2 + V[x(u)] \right] du \right\}} \quad (3.14)$$

4. Υπολογισμός των path integrals

Για τον υπολογισμό των path integrals χρησιμοποιούμε κυρίως δύο τεχνικές. Η πρώτη αναφέρεται σε ολοκληρώματα, στα οποία τα εκθετικά είναι δευτέρου βαθμού ως προς \dot{x} και ως προς x . Αυτά τα ολοκληρώματα μπορούν να υπολογιστούν επακριβώς.

Η δεύτερη είναι τα αναπτύγματα διαταραχών.

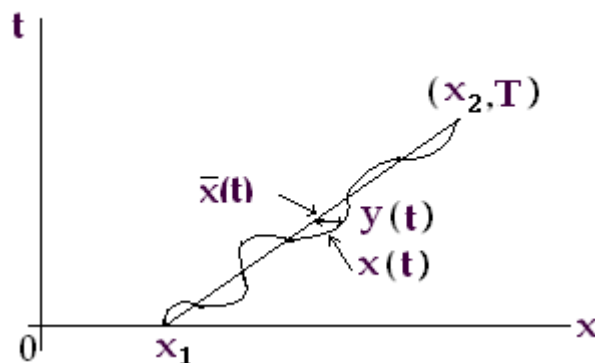
Θεωρούμε το στοιχείο :

$$\rho(x_2, x_1, T) = \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \frac{m[\dot{x}(t)]^2}{2} dt \right\} \mathcal{D}x(t) \quad (4.1)$$

όπου $x(0) = x_1$ και $x(T) = x_2$. Αυτός είναι ο πίνακας πυκνότητας στοιχείων για ένα ελεύθερο σωματίδιο. Ας αναπτύξουμε τώρα κάθε διαδρομή γύρω από την ευθείας γραμμής διαδρομή στο x - επίπεδο. Συμβολίζουμε την ευθείας γραμμής διαδρομή (κλασσικό path) με $\bar{x}(t)$, οπότε αντικαθιστούμε το $x(t)$ με ένα άθροισμα του $\bar{x}(t)$ και μιας νέας μεταβλητής $y(t)$, δηλαδή :

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \quad (4.2)$$

Έτσι αντί να προσδιορίσουμε ένα σημείο του path, από την απόσταση του $x(t)$, από έναν αυθαίρετο άξονα συντεταγμένων, μετράμε την απόκλιση του $y(t)$ από το κλασσικό path, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα 6.



Σχ. 6

Για κάθε τιμή του t οι μεταβλητές x και y διαφέρουν κατά μία σταθερά $\bar{x}(t)$. Φυσικά, η σταθερά αυτή αλλάζει για κάθε τιμή του t .

Επομένως, για κάθε συγκεκριμένο σημείο t_i της υποδιαιρέσεως του χρόνου ισχύει : $dx_i = dy_i$.

Έτσι, μπορούμε να πούμε γενικά ότι : $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$

Οπότε :

$$f(x_2, x_1, T) = \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \frac{m}{2} \int_0^T [\dot{\bar{x}}(t) + \dot{y}(t)]^2 dt \right\} \mathcal{D}y(t) \quad (4.3)$$

Αλλά : $\frac{d\bar{x}(t)}{dt} = \frac{\bar{x}_2 - \bar{x}_1}{T} = v = \text{ταχύτητα}$, συνεπώς έχουμε :

$$\int_0^T \left[\frac{d\bar{x}}{dt} + \frac{dy}{dt} \right]^2 dt = \int_0^T (v^2 + 2v\dot{y} + \dot{y}^2) dt = v^2 T + 2v[y(T) - y(0)] + \int_0^T \dot{y}^2 dt \quad (4.4)$$

Αλλά επειδή, όλα τα paths πρέπει να ξεκινήσουν από το ίδιο αρχικό σημείο και να φθάσουν στο ίδιο τελικό σημείο, θα πρέπει να ισχύει : $y(T) = y(0) = 0$. Επομένως :

$$\rho(x_2, x_1, T) = \exp \left[-\frac{mv^2 T}{2\hbar} \right] \iint \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int_0^T \dot{y}^2 dt \right] \mathcal{D}y \quad (4.5)$$

Έτσι, διασπάσαμε το path integral σε ένα παράγοντα που εξαρτάται από τα τελικά σημεία και το T και σε ένα path integral εξαρτώμενο μόνο από το T . Άρα, μπορούμε να γράψουμε :

$$\iint_{y(0)=y(T)=0} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int_0^T \dot{y}^2 dt \right] \mathcal{D}y = F(T) \quad (4.6)$$

Συνεπώς ο πίνακας πυκνότητας γράφεται :

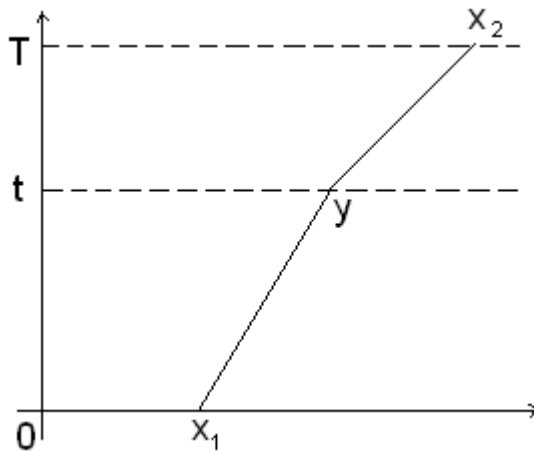
$$\boxed{\rho(x_2, x_1, T) = F(T) \exp \left[-\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar T} \right]} \quad (4.7)$$

Βλέπουμε ότι, ο πίνακας πυκνότητας καθορίζεται πλήρως, εκτός από μία συνάρτηση του T .

5. Path integrals με ανάπτυγμα διαταραχών

Ας υποθέσουμε, ότι έχουμε βρει τον πίνακα πυκνότητας $\rho_0(x_2, x_1, T)$ για κάποιο σύστημα με δυναμικό V_0 . Θέλουμε να βρούμε τον πίνακα πυκνότητας $\rho(x_2, x_1, T)$ για ένα άλλο σύστημα με δυναμικό $V_0 + V'$, όπου $V' \ll V_0$. Τότε θα έχουμε :

$$\begin{aligned} \rho(x_2, x_1, T) &= \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_0(x) + V'(x) \right] dt \right\} \mathcal{D}x = \\ &= \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_0(x) \right] dt \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^T V'(x) dt \right\} \mathcal{D}x \end{aligned} \quad (5.1)$$



Σχ. 7

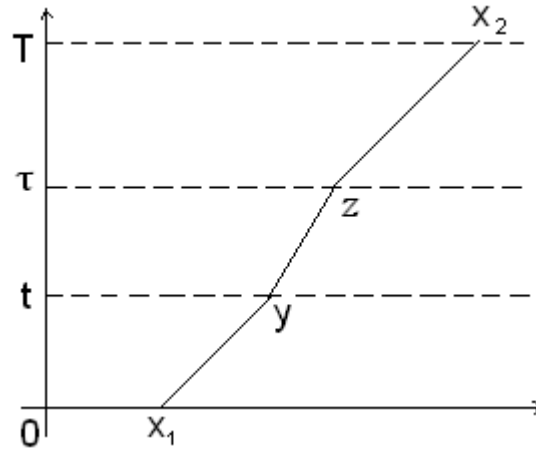
Αναπτύσσουμε τώρα το δεύτερο εκθετικό της (5.1) και παίρνουμε :

$$\begin{aligned}
\rho(x_2, x_1, T) &= \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_O(x) \right] dt \right\} \cdot \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^T V'[x(t)] dt + \right. \\
&+ \frac{1}{2\hbar^2} \left(\int_0^T V'[x(t)] dt \right)^2 + \dots \Big] \mathcal{D}x = \rho_O - \frac{1}{\hbar} \iiint_0^T \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_O(x) \right] dt' \right\} \\
&\cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_t^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_O(x) \right] dt' \right\} V'[x(t)] dt \mathcal{D}x + \dots = \\
&= \rho_O - \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \iint \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_O(x) \right] dt' \right\} \cdot \\
&\cdot V'[x(t)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_t^T \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V_O(x) \right] dt' \right\} + \dots
\end{aligned}$$

Για να υπολογίσουμε το path integral, ολοκληρώνουμε πρώτα πάνω σε όλα τα paths για τα οποία: $x(t) = y$ (με $x(0) = x_1$, $x(T) = x_2$) και μετά ολοκληρώνουμε πάνω στο y . Συνεπώς έχουμε :

$$\rho(x_2, x_1, T) = \rho_O - \frac{1}{\hbar} \int_0^T \int_{\text{all } y} \rho_O(x_2, y, T-t) V(y) \rho_O(y, x_1, t) dy dt + \dots \quad (5.2)$$

Όλα αυτά φαίνονται σχηματικά στο Σχ. 7. Το συμπέρασμα που βγαίνει από την τελευταία σχέση είναι ότι ο μηδενικής τάξης όρος ρ_O , είναι η συνεισφορά στον πίνακα πυκνότητας, λόγω της μετακίνησης του σωματιδίου από το x_1 στο x_2 σε χρόνο T , χωρίς την επίδραση δυναμικού (ελεύθερο σωματίδιο). Ακολουθως, ο όρος πρώτης τάξης, είναι η συνεισφορά του στοιχειωδώς ελεύθερου σωματιδίου, αλλά σκεδαζόμενου μια φορά κάποια χρονική στιγμή t σε κάποια θέση y .



Σχ. 8

Παρόμοια, αν συνεχίζουμε την ανάπτυξη της σχέσης (5.2), ο όρος δεύτερης τάξης μπορεί να θεωρηθεί σαν η συνεισφορά από δύο σκεδάσεις (Σχ. 8), οπότε αυτός ο όρος μπορεί να γραφεί ως εξής :

$$+ \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho_0(x_2, z, T-t) V(z) \rho_0(z, y, t-\tau) V(y) \rho_0(y, x_1, \tau)$$

(5.3)

6. Το ολοκλήρωμα Feynman

Αν χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό Dirac, η κυματοσυνάρτηση $\psi(q,t)$ μπορεί να γραφεί : $\psi(q,t) = \langle qt | \psi \rangle$ (6.1)

Η εξίσωση Heisenberg : $H|q,t\rangle = -i\hbar \frac{d}{dt}|q,t\rangle$ είναι η διαφορική εξίσωση, που ικανοποιούν οι καταστάσεις $|q,t\rangle$ ως προς τον χρόνο.

Η γενική λύση αυτής της διαφορικής εξίσωσης είναι :

$$|qt\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |q\rangle \quad (6.2)$$

Η συνάρτηση μετασχηματισμού θα είναι :

$$\langle q_2 t_2 | q_1 t_1 \rangle = \langle q_2 | e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)} | q_1 \rangle$$

Επομένως, ο διαδότης μπορεί να γραφεί ως εξής :

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \langle q_f | e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} | q_i \rangle \quad (6.3)$$

όπου: $\Delta t = t_f - t_i > 0$.

Έστω ότι διασπάμε το χρονικό διάστημα μεταξύ των t_i , t_f σε $(n+1)$ ίσα διαστήματα τ , οπότε θα έχουμε :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \dots \int dq_1 dq_2 \dots dq_n \langle q_f t_f | q_n t_n \rangle \langle q_n t_n | q_{n-1} t_{n-1} \rangle \dots \langle q_1 t_1 | q_i t_i \rangle \quad (6.4)$$

Υπολογίζουμε τον διαδότη πάνω σε ένα μικρό τμήμα, οπότε σύμφωνα και με την σχέση (6.3), έχουμε :

$$\langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}H\tau} | q_j \rangle \quad (6.5)$$

Αν θεωρήσουμε το τ πολύ μικρό, μπορούμε να αναπτύξουμε το εκθετικό, οπότε :

$$\langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \langle q_{j+1} | 1 - \frac{i}{\hbar}H\tau + O(\tau^2) | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | q_j \rangle - \frac{i}{\hbar}\tau \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle$$

Ο πρώτος όρος είναι μια συνάρτηση δέλτα, οπότε έχουμε :

$$\langle q_{j+1} | q_j \rangle = \delta(q_{j+1} - q_j) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1} - q_j)} \quad (6.6)$$

Από τις δύο τελευταίες σχέσεις βρίσκουμε :

$$\langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1} - q_j)\right] - \frac{i}{\hbar}\tau \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle \quad (6.7)$$

Στην περίπτωση, που η Hamiltonian είναι της μορφής : $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ μπορούμε να εισάγουμε στον δεύτερο όρο της (6.7) έναν παράγοντα 1 μεταξύ των q_{j+1}, H και έναν παράγοντα 1 μεταξύ των H, q_j , ώστε να πάμε στην αναπαράσταση των ορμών, άρα έχουμε :

$$\langle q_{j+1} | \frac{p^2}{2m} | q_j \rangle = \int dp' dp \langle q_{j+1} | p' \rangle \langle p' | \frac{p^2}{2m} | p \rangle \langle p | q_j \rangle \quad (6.8)$$

Τώρα στην (6.8) αντικαθιστούμε την σχέση:

$$\langle q_{j+1} | p' \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ip'q_{j+1}/\hbar) \quad (6.9)$$

και καταλήγουμε :

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | \frac{p^2}{2m} | q_j \rangle &= \int \frac{dp' dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'q_{j+1} - pq_j)\right] \frac{p^2}{2m} \delta(p - p') = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1} - q_j)\right] \frac{p^2}{2m} \end{aligned} \quad (6.10)$$

Να σημειώσουμε εδώ ότι, το p^2 στο αριστερό μέλος της (6.10) είναι ένας τελεστής, ενώ στο δεξιό μέλος είναι ένας αριθμός.

Με παρόμοιο τρόπο επίσης, βρίσκουμε :

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | V(q) | q_j \rangle &= V\left(\frac{q_{j+1} + q_j}{2}\right) \langle q_{j+1} | q_j \rangle = V(\bar{q}_j) \delta(q_{j+1} - q_j) = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1} - q_j)\right] V(\bar{q}_j) \end{aligned} \quad (6.11)$$

όπου $\bar{q}_j = \frac{1}{2}(q_j + q_{j+1})$, και το $V(q)$ στο αριστερό μέλος της (6.11) είναι τελεστής, ενώ το ολοκλήρωμα στο δεξιό μέλος δεν περιέχει τελεστή.

Με βάση τις σχέσεις (6.10) και (6.11) παίρνουμε :

$$\langle q_{j+1} | H | q_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1} - q_j)\right] H(p, \bar{q}_j) \quad (6.12)$$

οπότε αντικαθιστώντας στην σχέση (6.7) βρίσκουμε :

$$\langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)\right] \quad (6.13)$$

όπου p_j είναι η ορμή μεταξύ των t_j, t_{j+1} ή ισοδυνάμως μεταξύ των q_j, q_{j+1} .

Συνεπώς, για να πάρουμε τον ολικό διαδότη, σύμφωνα με την (6.4) έχουμε :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n [p_j (q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)]\right] \quad (6.14)$$

με $q_0 = q_i, q_{n+1} = q_f$.

Η σχέση (6.14) μπορεί να γραφεί συμβολικά :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \frac{\mathcal{D}q \mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [p\dot{q} - H(p, q)] \right] \quad (6.15)$$

με $q(t_i) = q_i, q(t_f) = q_f, \dot{q}_j = \frac{q_{j+1} - q_j}{\tau}$.

Η εξίσωση (6.15) είναι γνωστή σαν το ολοκλήρωμα διαδρομών στον χώρο των φάσεων ή ολοκλήρωμα Feynman στον χώρο των φάσεων.

Αν η Hamiltonian είναι της μορφής : $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$, τότε η εξίσωση (6.14) γίνεται :

$$\begin{aligned} \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left[p_j (q_{j+1} - q_j) - \frac{p_j^2}{2m} \tau - \tau V(\bar{q}_j) \right] \right] = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \tau \sum_{j=0}^n \tau V(\bar{q}_j) \right] \int \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau \sum_{j=0}^n \left(p_j \dot{q}_j - \frac{p_j^2}{2m} \right) \right] \quad (6.16) \end{aligned}$$

Αν χρησιμοποιήσουμε το γνωστό Gaussian ολοκλήρωμα :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 + bx + c) dx = \exp \left(\frac{b^2}{4a} + c \right) \left(\frac{\pi}{a} \right)^{1/2}$$

τότε έχουμε : $\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau \left(p\dot{q} - \frac{p^2}{2m} \right) \right] = \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\tau}} \exp \left(\frac{i\tau m \dot{q}^2}{2\hbar} \right)$

Άρα η (6.16) γίνεται :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} \int \prod_{j=1}^n dq_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau \sum_{j=0}^n \left(\frac{m\dot{q}_j^2}{2} - V(\bar{q}_j) \right) \right] \quad (6.17)$$

Στο συνεχές όριο η προηγούμενη σχέση γίνεται σε πιο συμπαγή μορφή :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}) dt \right] \quad (6.18)$$

όπου $L = T - V$ η κλασική Lagrangian. Στο όριο $n \rightarrow \infty$, το N γίνεται άπειρο, αλλά αυτό δεν δημιουργεί πρόβλημα, αφού ενδιαφερόμαστε πάντα με νορμαλισμένα πλάτη μετάβασης.

Το ολοκλήρωμα στην εξίσ. (6.18) είναι η κλασική δράση $S = \int L dt$, οπότε γίνεται :

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[q(t)]} \quad (6.19)$$

Για παράδειγμα, ας υπολογίσουμε τον ελεύθερο διαδότη (free propagator), για ένα ελεύθερο σωματίδιο με ορμή p και Hamiltonian $H = p^2/2m$. Έχουμε :

$$\begin{aligned} K(x, t; x_0, t_0) &= \langle x | \exp[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t-t_0)] | x_0 \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle x | \exp[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t-t_0)] | p \rangle \langle p | x_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp(\frac{i}{\hbar} px) \exp[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t-t_0)] \exp(-\frac{i}{\hbar} px_0) \end{aligned} \quad (6.20)$$

(Χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις : $\mathbf{H} | p \rangle = (p^2/2m) | p \rangle$,
 $\langle x | p \rangle = (1/2\pi\hbar)^{1/2} \exp(ipx/\hbar)$).

Η εξ. (6.20) καταλήγει σε ένα Gaussian ολοκλήρωμα, δηλαδή :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t-t_0) + \frac{i}{\hbar} p(x-x_0) \right] \quad (6.21)$$

οπότε σύμφωνα με το γνωστό Gaussian ολοκλήρωμα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 + bx) dx = \exp \left(\frac{b^2}{4a} \right) \left(\frac{\pi}{a} \right)^{1/2}$$

καταλήγουμε στο τελικό αποτέλεσμα του ελεύθερου διαδότη :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \exp \left[\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)} \right] \quad (6.22)$$

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

1. Statistical Mechanics (A set of Lectures)
“R. P. Feynman”
2. Quantum Field theory
“ L. H. Ryder ”
3. Field Quantization
« Greiner R. »
4. Path Integrals in Quantum Mechanics-Statistics
„Hagen Kleinert“
5. Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική
«Κ. Ταμβάκη»
6. Dissipation and path integrals
“ Gert-Ludwig Ingold ”
7. Path Integral Methods and Applications
“ R. MacKenzie “

