DIPLOMSKI RAD

O NEKIM PROBLEMIMA NERAVNOTEŽNE KVANTNE STATISTIKE

STEFANOVIĆ MANOJLO
student PMF Novi Sad
- grupa fizika -

NOVI SAD 1981g.

Z A H V A L J U J E M S E

DR. BRATISLAVU TOŠIĆU, ZA POMOĆ KOJU
MI JE PRUŽIO PRI IZRADI DIPLOMSKOG RADA

S A D R Ž A J

U V O D

U neravnotežnoj kvantnoj statistici najčešće se pojavljuju problemi, u kojima, početni hamiltonijan ili hamiltonijan nulte aproksimacije, ne zavisi eksplicitno od vremena, dok se vremenska zavisnost interakcija uključuje u nekom trenutku t_o. Drugim rečima neravnotežni hamiltonijan se može napisati u obliku

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} H_o & ; \quad t \leq t_o \\ \hat{H}_o + \hat{W}(t) & \quad t > t_o \end{cases} \; ; \; \frac{\partial \hat{H}_o}{\partial t} = 0 \tag{A}$$

Osim ove standardne situacije, može da se desi da početni hamiltonijan zavisi eksplicitno od vremena. Tipičan primer za ovakvu situaciju su elektroni, u elektromagnetnom polju. Ovakvi elektroni imaju impuls

$$\mathcal{P} = \vec{p} - \frac{e}{c}\hat{A}(\vec{r},t) \tag{B}$$

i kinetičku energiju

$$\hat{T} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \frac{e}{2mc}\left[\hat{p}\hat{A}(\vec{r},t) + \hat{A}(\vec{r},t)\hat{\vec{p}}\right] + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}(\vec{r},t) \tag{C}$$

Ova kinetička energija kao što se vidi predstavlja hamiltonijan nulte aproksimacije koji zavisi od vremena.

Ako se u trenutku t_o uključi i neka interakcija $\hat{W}(\vec{r},t)$ onda treba rešavati neravnotežni statistički problem u kome i polazni hamiltonijan i uključena interakcija zavise od vremena. Uopšte hamiltonijan u ovakvim situacijama ~~xxx~~ ima oblik

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} H_o(t) & t \leq t_o \\ \hat{H}_o(t) + \hat{W}(t) & t > t_o \end{cases} \; ; \; \frac{\partial \hat{H}_o(t)}{\partial t} \neq 0 \tag{D}$$

Za neravnotežni problem sa hamiltonijanom tipa (A) postoji dobro razradjen formalizam i on će biti izložen u prvoj glavi ovog diplomskog rada.

Što se tiče / D) do danas ne postoji neka pouzdana procedura. Najčešće se u ovakvim slučajevima vrši prelaz na reprezentaciju interakcije ali ne sa operatorom $e^{i\hbar}$ već pomoću nekog unitarnog operatora U (t). Ovakav prilaz sadrži u sebi čitav niz nejasnoća prilikom odredjivanja konkretne forme operatora U (t).

U detalje ovakvog prilaza i različite ideje o tome kako treba odredjivati U (t) nećemo se upuštati.
Ovde ćemo predložiti jedan nov prilaz koji se sastoji u tome što se u izrazu /D/ od hamiltonijana H_o (t) predje unitarnom transformacijom, na novi ekvivalentni sa hamiltonijan h_o koji ne zavisi eksplicitno od vremena. Kada se ovo postigne problem (D) svodi se na:

$$\hat{H}_{eq}(t) = \begin{cases} \hat{h}_o & t \leq t_o \\ \hat{h}_o + \hat{W}(t & t > t_o \end{cases}, \quad \frac{\partial \hat{h}_o}{\partial t} = 0 \qquad (E)$$

i dalje se može primenjivati standardna procedura u slučaju hamiltonijana tipa (A). U diplomskom radu biće izložena opšta teorija ovakvog prilaza i biće rešeni neki prosti problemi koji uglavnom služe kao ilustracija metoda. Problemi ove vrste koji se pojavljuju u praksi zahtevaju duge i komplikovane račune pa stoga neće biti obradjivani jer to daleko premaša zahteve koji se postavljaju pred jedan diplomski rad.

I GLAVA

OSNOVE KVANTNE STATISTIKE

1. OSNOVNI POJMOVI U KVANTNOJ STATISTIČKOJ MEHANICI

Zadatak kvantne statističke mehanike sastoji se u tome da pruži zadovoljavajući teorijski opis makropskopskog ponašanja sistema koji se sastoji od veoma velikog broja kvantnih mikroobjekata. Pošto je ovaj zadatak u suštini isti kao i zadatak klasične statističke mehanike, očigledno je da se pri njegovom rešavanju koriste iste ili bar slične ideje kao i u klasičnoj statistici. Tako se, na primer, ideja ansambla sistema u potpunosti prenosi iz klasične statistike u kvantnu. To znači da se umesto uočenog sistema kvantnih mikroobjekata u kvantnoj statistici analizira veoma veliki broj njegovih kopija, koji sve imaju isti hamiltonijanov operator i nalaze se u istim makroskopskim uslovima, a osnovni zadatak analize sastoji se u nalaženju verovatnoće da prilikom merenja bilo koji od sistema iz ansambla bude registrovan u datom kvantnom stanju. Ove verovatnoće su, kao i u klasičnoj statistici, skoro u potpunosti dirigovane spoljašnjim makroskopskim uslovima. Dinamičke zakonitosti koje regulišu ponašanje kvantnih mikroobjekata u analizama se uglavnom koriste kao kontrola da se prilikom odredjivanja pomenutih verovatnoća ne izdaje van granice kvantne mehanike. Upravo na ovom mestu - klasični mikro objekti se pokoravaju zakonima klasične mehanike, a kvantni mikroobjekti zakonitostima kvantne mehanike - počinju razlike u načinu rešavanja osnovnog statističkog zadatka, tj. korektnog teoriskog opisa makroskopskog ponašanja sistema.

Kvantna statistika, pre svega, ne može da koristi ideju faznog prostora, jer se na osnovu Hajzenbergovih relacija neodredjenosti koordinata i impuls kvantnog objekta ne mogu simultano meriti, pa je prema tome, uvodjenje hiperprostora koji se kontroliše nad koordinatama i impulsima kvantnih čestica, lišenog svakog sistema. Samim tim i pojam klasične funkcije raspodele, koja zavisi od koordinata i impulsa, ne može da se koristi u kvantnostatističkim analizama. Zbog toga kvantna statistika uvodi nove pojmove i nove metode, koji su bitno različiti od pojmova i metoda klasične statistike, ali, ma kako to paradoksalno izgledalo na prvi pogled, daje identične ili barem veoma slične osnovne rezultate kao i klasična statistika. Pomenuta činjenica prestaje da bude paradoksalna ako se uzme u obzir da su verovatnoće nalaženja sistema u datom stanju i u kvantnoj statistici definisane uglavnom spoljašnjim makroskopskim uslovima, a ovi su unapred zadati i nezavisno od toga kakvom su tipu makroobjekata namenuti.

Pre nego što se predje na izgradnju formalizma kvantne statističke mehanike, neophodno je da se nešto više kaže o tome kako se sve mogu opisivati stanja kvantnog sistema. U kvantnoj mehanici je uobičajeno da se sistem opisuje vektorom stanja, čije je poznavanje jedini preduslov za ispitivanje svih fizičkih karakteristika sistema. Prilikom ovakvog opisivanja se prećutno podrazumeva da je sistem potpuno izlolovan od makroskopske okoline. S obzirom na činjenicu da se u kvantnoj statistici uvek analiziraju sistemi koji su u kontaktu sa okolinom, pri čemu ovaj kontakt bitno utiče na statističko ponašanje sistema, očigledno je da poznavanje talasnog vektora sistema ne predstavlja dovoljnu informaciju za kompletno opisivanje njegovog ponašanja. Pored vektora stanja u kvantnostatističke analize moraju da se uključe i neke veličine koje karakterišu kontakt sistema sa okolinom. Interakcija mikroobjekata koji sačinjavaju sistem sa makroskopskim okruženjem je nepredvidljiva i slučajna, pa otuda razumljivo da se opisivanje uticaja okruženja na sistem može vršiti samo probabilistički, tj. zadavanjem verovatnoće W_k da se sistem usled interakcije sa okruženjem nadje u stanju karakterističnom s skupom kvantnih brojeva k. Zbog ovoga se rešavanje kvantnostatističkim problema vrši u dve etape: u prvojetapi se traže vektori stanja izolovanog sistema, a u drugoj se prema tipu kontakta sa okolinom, odredjuju verovatnoće da sistem bude registrovan u kvantnom stanju k. S obzirom na veliki broj čestica koje sačinjavaju sistem, nalaženja vektora stanja izolovanog sistema, predstavlja samo po sebi, veoma komplikovan zadatak. Što se tiče verovatnoće W_k, već iz definicije je jasno da njegovo odredjivanje predstavlja problem koji je potpuno analogan odredjivanju funkcije raspodele u klasičnoj statistici. U kvantnoj statistici se obično predpostavlja da je problem nalaženja vektora stanja rešen, pa su sve analize uglavnom usmerene na nalaženje verovatnoće W_k.

S obzirom da se u kvantnoj statistici traže više podataka za kompletno opisivanje sistema nego u običajenim problemima kvantne mehanike, očigledno je da se kvantnostatistička srednja vrednost ne može poklapati sa kvantnomehaničkom srednjom vrednošću:

$$\hat{A}_{k,t} = \int dx \langle x k t | \hat{A} | t k x \rangle \tag{1}$$

Pošto verovatnoće W_k po svojoj definiciji regulišu pitanje kada će u aktu merenja fizičke veličine A biti dobijen rezultat $A_{k,t}$, to je očigledno da se statistička srednja vrednost veličine A mora definisati kao matematičko očekivanje veličine $A_{k,t}$ po verovatnoćama W_k, tj:

$$\langle A \rangle_t = \sum_k W_k A_{kt} = \sum_k W_k \int dx \langle x k t | \hat{A} | t k x \rangle \tag{2}$$

pri čemu je:

$$W_k \geq 0 \qquad \sum_k W_k = 1 \tag{3}$$

Na osnovu definicije kvantnostatističke srednje vrednosti (2) dolazi se do fundamentalnih pojmova sa kojima operiše kvantna statistika, mehanika, a to su statistički operator i matrica gustine. Ako se u formuli (2) operator A stavi u "sendvič" izmedju projektora $\hat P = \int dx|x\rangle\langle x|$:

$$\langle \hat A \rangle_t = \sum_K W_K \int dz \langle zKt|\hat A(t)|tKz\rangle = \sum_K \int dz \langle zKt|\hat P \hat A(t) \hat P|tKz\rangle =$$
$$= \sum W_K \int dx\,dy\,dz \langle zKt|x\rangle\langle x|\hat A(t)|y\rangle\langle y|tKz\rangle = Sp(\hat A(t)\hat\rho(t))$$

dolazi se do zaključka da se srednja vrednost veličine $\hat A$ može izraziri kao špur proizvoda operatora $\hat A$ i operatora

$$\hat\rho(t) = \sum_K W_K \int dx|tKx\rangle\langle xKt| \qquad (4)$$

koji se naziva statističkim operatorom. Matrica koja se u bazisu x korespondira operatoru $\hat\rho$ i čiji su elementi dati su:

$$\hat\rho(x,y,t) = \langle x|\hat\rho(t)|y\rangle = \sum_K W_K \int dz \langle x|tKz\rangle\langle zKt|y\rangle \qquad (5)$$

naziva se matrica gustine. Matrica gustine igra u kvantnoj statistići ulogu sličnu onoj koju funkcija raspodele ima u klasičnoj statistici. Izmedju matrice gustine i klasične funkcije raspodela postoji i izvesna formalna analogija, jer za sistem od N čestica obe zavise od 6 N varijabli, s tom razlikom što su sve varijabile od kojih zavisi matrica gustine konfiguracione.

Dalje analogije izmedju w kvantne i klasične statistike mogu se ustanoviti analizom s osobina statističkog operatora. Tako na primer:

$$\hat S_p \hat\rho(t) = \int dx \langle x|\hat\rho(t)|x\rangle = \sum_K W_K \int dx\,dy \langle x|tKy\rangle\langle yKt|x\rangle =$$
$$= \sum_K W_K \int dy \langle yKt|\left(\int dx|x\rangle\langle x|\right)|tKy\rangle = \sum W_K \int dy \langle yKt|tKy\rangle =$$
$$= \sum W_K = 1$$

pa uslov

$$Sp(\hat\rho(t)) = 1 \qquad (6)$$

predstavlja kvantnostatistički pandan klasičnom uslovu normiranja.

Ukoliko se od Šredingerovih ~~[illegible]~~ vektora $|tKx\rangle$ u izrazu za $\hat\rho(t)$ predje na Hajzenbergove vektore: $|tKx\rangle = e^{\hat H t/i\hbar}|Kx\rangle$ dolazi se do relacije:

$$\hat\rho(t) = e^{\frac{\hat H t}{i\hbar}} \hat\rho\, e^{-\frac{\hat H t}{i\hbar}} \qquad (7)$$

gde statistički operator:

$$\hat\rho = \sum_K W_K \int dx|Kx\rangle\langle xK| \qquad (8)$$

ne zavisi eksplicitno od vremena. Ako se relacija (7) diferencira po vremenu i primeni potpuno analogan postupak kao prilikom izvodjenja relacije dobija se zakon evolucije statističkog operatora u vremenu:

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

koji predstavlja kvantnostatistički analogon klasične Liuvilove jednačine.

Stanje statističke ravnoteže definiše se u kvantnoj statistici uslovom:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = 0 \tag{10}$$

koji je analogan klasičnom uslovu $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$. Ukoliko važi (1o), onda iz (9) sledi $[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$ što znači da u stanju statističke ravnoteže statistički operator predstavlja integral kretanja. Ova činjenica vodi na zaključak da ravnotežni statistički operator može da se izrazi preko ostalih integrala kretanja koji karakterišu sistem i preko parametara koji karakterišu spoljašnje makroskopske uslove, pa je i u ovom smislu analogija izmedju klasične i kvantne statistike održana.

Analogno pojmu faznog eksponenta, u kvantnoj statistici se uvodi pojam operatora entropije:

$$\hat{S}(t) = -\ln \hat{\rho}(t) \tag{11}$$

a entropija se definiše kao statistička srednja vrednost operatora S, tj:

$$S = -Sp(\hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)) \tag{12}$$

Definicija (12) analogna je Gibsovoj definiciji entropije za klasične ansamble i pati od istog nedostatka, tj. entropija ne zavisi od vremena bez obzira na to da li statistički operator zavisi od vremena ili ne. Ovo se lako može razmotriti na taj način što se operator entropije $\hat{S}(t) = -\ln \hat{\rho}(t)$ razvije u red po stepenima statističkog operatora $\ln \hat{\rho}(t) = \sum_n a_n \hat{\rho}^n(t)$ i uzme u obzir činjenica da su operatori $\hat{\rho}(t)$ i $\hat{\rho}$, na osnovu (7) povezani relacijom $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}\hat{U}^{-1}(t)$ gde je unitarni operator $\hat{U}(t)$ dat sa $\hat{U}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$.

Pošto je

$$\hat{\rho}^2(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}\hat{U}^{-1}(t)\hat{U}(t)\hat{\rho}\hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}^2\hat{U}^{-1}(t)$$

očiglednom posledicom $\hat{\rho}^n(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}^n\hat{U}^{-1}(t)$ operator entropije se može napisati u obliku

$$-\hat{S}(t) = \hat{U}(t)\sum_n a_n \hat{\rho}^n \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(t)[\ln\hat{\rho}]\hat{U}^{-1}(t)$$

što zamenom u (12), posle ciklične permutacije operatora, daje rezultat:

$$S = -Sp(\hat{\rho}(t)\ln\hat{\rho}(t)) = -Sp(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \qquad (13)$$

Entropija kvantnih ansambala se može izraziti i preko verovatnoća W_k. Ako se operator $\ln\hat{\rho}$ razvije u red: $\ln\hat{\rho} = \sum_n a_n \hat{\rho}^n$ onda je

$$\hat{\rho}\ln\hat{\rho} = \sum_n a_n \hat{\rho}^{n+1}$$

S druge strane, na osnovu (8) sledi:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{k\ell} W_k W_\ell \int dx\, dy\, |kx><xk|\ell y><y\ell| =$$

$$= \sum_k W_k^2 \int dx\, |kx><xk| = \sum_k W_k^2 \hat{P}_k$$

sa posledicom

$$\hat{\rho}^n = \sum_k W_k^n \hat{P}_k \qquad \text{pa je:}$$

$$\hat{\rho}\ln\hat{\rho} = \sum_n a_n \sum_k W_k^{n+1} \hat{P}_k = \sum_k \hat{P}_k \sum_n a_n W_k^{n+1} =$$

$$= \sum_k \hat{P}_k W \ln W_k$$

Zamenom poslednjeg izraza u (12) dolazi se do zaključka da je:

$$S = -Sp\left(\sum_k \hat{P}_k W_k \ln W_k\right) = -\sum_k W_k \ln W_k\, Sp(\hat{P}_k) =$$

$$= -\sum_k W_k \ln W_k \qquad (14.)$$

što predstavlja traženu vezu izmedju entropije i verovatnoće W_k.

2. NERAVNOTEŽNA KVANTNA STATISTIKA

U ovom delu biće izloženi neki metodi analize neravnotežnih procesa koji se odigravaju u kvantnim ansamblima. Ovi metodi su zbog svoje efikasnosti našli široku primenu i van granica neravnotežne kvantne statistike, pa je zato neophodno da im se posveti dužna pažnja. Analogni metodi se mogu razviti / i razvijaju se/ i u okvirima neravnotežne klasične statistike, ali, bar za sada, njihova efikasnost i nužnost nije proverena u praksi u onoj meri, koja bi zahtevala da se o njima diskutuje u okviru ovakvog jednog teksta. S obzirom na već ukazanu tesnu analogiju i sličnost rezultata koje daju ravnotežne statistike, realno je očekivati sličnu situaciju i u neravnotežnom domenu, pa je i zbog toga nepotrebno da se dve vrlo analogne metodologije paralelno izlažu.

Kao što je već više puta isticano, neravnotežni procesi se analiziraju pomoću statističkog operatora koji zavisi eksplicitno od vremena. Pre nego što se predje na definisanje ovakvog operatora, koji se obično naziva neravnotežnim statističkom operatorom, potrebno je razjasniti u kakvim se fizičkim situacijama pojavljuje potreba da se on uvede u račun. U devetom paragrafu odnosno jednačini devet uvedeni su operatori:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_K W_K \int dx \, |tKx><xKt| \quad i \quad \hat{\rho} = \sum_K W_K \int dx \, |Kx><xK| \qquad (15)$$

i ustanovljena je veza izmedju njih:

$$\hat{\rho}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \, \hat{\rho} \, e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \qquad (16)$$

ali se pri tome uvek pretpostavljalo da hamiltonijan sistema $\hat{H}$ ne zavisi eksplicitno od vremena. Veza izmedju $\hat{\rho}(t)$ i $\hat{\rho}$ dobijena je na osnovu formalnog rešenja $|tKx> = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} |Kx>$

Šredingerove jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |tKx> \hat{H} |tKx>$$
$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \qquad (17)$$

Pošto u /17/ operator $\hat{H}$ ne zavisi eksplicitno od vremena, vektor $|tKx>$ se može napisati kao proizvod neke funkcije f(t) koji zavisi samo od vremena i vektora $|Kx>$ tj. $|tKx> = f(t)|Kx>$

i tada nije teško zaključiti da se rešenje jednačine (17) može napisati u obliku

$$|tKx> = e^{\frac{E_K t}{i\hbar}} |Kx> \, ; \quad <xKt = <xK| \, e^{-\frac{E_K t}{i\hbar}} \qquad (18)$$

gde su E_K svojstvene vrednosti hamiltonijana, tj. rešenja svojstvenog problema:

$$\hat{H}|Kx> = E_K |Kx> \qquad (19)$$

Zamenom (17) u izrazu (14) za $\hat{\rho}$ (t) odmah se dobija $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}$, što znači da je zavisnost operatora $\hat{\rho}(t)$ od vremena samo fiktivna i da je on isto tako ravnotežni operator kao i operator $\hat{\rho}$ koji je konstruisan od vremenski nezavisnih vektora $|k\,x>$. Odavde sledi opštiji zaključak, koji se može ovako formulisati: ako hamiltonijan sistema ne zavisi eksplicitno od vremena, odgovarajući ansambli su uvek ravnotežni. Treba napomenuti da se do istog zaključka $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}$, moglo doći i na osnovu formule (15), jer svi ravnotežni operatori $\hat{\rho}$, koji su navedeni u jedanaestom paragrafu komutiraju se hamiltonijanom. Na osnovu svega ovoga postaje jasno da o neravnotežnim procesima i neravnotežnoj statistici ima smisla govoriti samo u onim slučajevima kada hamiltonijan sistema eksplicitno zavisi od vremena.

Najopštija forma u kojoj se može zadati vremenski zavisni hamiltonijan je sledeća:

$$\hat{H}(t) = \begin{Bmatrix} \hat{H}_0 & \text{za } t \leq t_0 \\ \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}(t) & t > t_0 \end{Bmatrix}; \quad \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = 0 \qquad (19)$$

Trenutak vremena t_0 naziva se momentom uključenja interakcije, a mogućnost $t_0 \to -\infty$ je dopuštena i predstavlja samo jednu od mogućih varijanti opšte formule (19). Šredingerovi vektori sistema $|S\,t\,k\,x>$ (ovde je potrebno da se uvede dopunski indeks koji označava o kojoj se reprezentaciji radi, Šredingerovi vektori biće označavani dopunskim indeksom S) za sve trenutke vremena $t > t_0$ dobijaju se rešavanjem jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|StKx> = (\hat{H}_0 + \hat{H}_{int}(t))|StKx>; \quad t > t_0 \qquad (20)$$

Jednačina (2o) se rešava tako što se uvode novi vremenski zavisni vektori $|J\,t\,k\,x>$ i to na sledeći način:

$$|StKx> = e^{\hat{H}_0 t/i\hbar}|JtKx> \qquad (21)$$

Vektori stanja $|J\,t\,k\,x>$ nazivaju se vektorima stanja u reprezentaciji interakcije, a dopunskim indeksom J označena je njihova pripadnost ovoj reprezentaciji. Ako se (21) diferencira po vremenu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|StKx> = \hat{H}_0|StKx> + i\hbar\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \frac{\partial}{\partial t}|JtKx> \qquad (22)$$

i rezultat zameni u (2o) dobija se sledeća jednačina:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|JtKx> = \hat{W}(t)|JtKx>; \quad \hat{W}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} H_{int}(t)\, e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \qquad (23)$$

koja reguliše evoluciju vektora $|J\,t\,k\,x>$ u vremenu.

Jednačina (23) rešava se tako što se obe strane integriraju po vremenu i to od t_0 do nekog tekućeg trenutka vremena t, pri čemu je, očigledno, $t > t_0$. Kao rezultat ove operacije dobija se ~~integraciju~~ integralna jednačina Voltera - tipa sa operatoriskim jezgrom:

$$|J t k x> = |J t_0 k x> + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{W}(t') \, |J t' k x> \qquad (24)$$

Vektor stanja $|J \; t_0 \; k \; x>$ se na osnovu (21) može napisati kao

$$|J t_0 k x> = e^{-\hat{H}_0 t_0 / i\hbar} |S t_0 k x>$$

S druge strane za sve trenutke vremena $t \leq t_0$, hamiltonijan sistema je nezavisan od vremena: $\hat{H}(t) = \hat{H}_0$, pa se Šredingerovi vektori mogu izraziti preko Hajzenbergovih x vektora $|H \; k \; x>$ na

$$|S t k x> = e^{\hat{H}_0 t / i\hbar} |H k x>$$

već poznati način: $|S \; t \; k \; x = e \quad H \; k \; x$. Pošto ova veza važi i za $t = t_0$ tj. $|S \; t_0 \; k \; x> = e^{\frac{\hat{H}_0 t_0}{i\hbar}} |H \; k \; x>$ odmah se može zaključiti da je:

$$|J t_0 k x> = |H k x> \qquad (25)$$

Jednačina (24) se rešava integracijom i njeno se rešenje može napisati u obliku sledećeg beskonačnog reda:

$$|J t k x> = \Big[1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \hat{W}(t_1) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) + \cdots$$

$$+ \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \, \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) \cdots \hat{W}(t_n) + \cdots \Big] |J t_0 k x>$$

$$t_0 < t_n < t_{n-1} < \cdots < t_1 < t \qquad (26)$$

Red konvergira ukoliko je $\hat{H}_{int}(t) < \hat{H}_0$.

Rešenje (26) se može koristiti u obliku u kome je dato, ali se češće piše u nešto kompaktnijem obliku. Da bi se (26) moglo izraziti u kompaktnoj formi uvodi se operator $\hat{T}$, koji ima sledeću osobinu:

$$\hat{T} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & za \;\; t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & za \;\; t_1 < t_2 \end{cases} \qquad (27)$$

Operator $\hat{T}$ je Dajsanov hronološki operator. Na osnovu definicije (27) je očigledno da važi:

$$\hat{T}^n = \hat{T} \qquad (28)$$

Pošto su u izrazu (26) operatori $\hat{W}$ već uredjeni po vremenu, očigledno je da se na osnovu definicije operatora $\hat{T}$ može pisati:

$$|Jtkx> = \hat{T}\Big[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{W}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) + \dots$$

$$+ \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)\dots\hat{W}(t_n) + \dots\Big]|Jtkx> \qquad (29)$$

Mogućnost dobijanja kompaktnijeg izraza za $|J\,t\,k\,x>$ kao i uloga operatora $\hat{T}$ mogu se demonstrirati na trećem članu reda (29). Ako se iskoristi Dirihleova pravilo za promenu reda integracije onda se može pisati:

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) = \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_2}^{t} dt_1 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) =$$

$$= \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) - \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0} dt_1 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) \qquad (30)$$

Pošto dva ista operatora ne komutiraju ukoliko deluju u različitim trenicima vremena, ne sme se pisati $\hat{W}(t_1)\,\hat{W}(t_2) = \hat{W}(t_2)\,\hat{W}(t_1)$. Ukoliko ispred ovakvog proizvoda stoji hronološki operator onda je svejedno kojim su redom napisani faktori, jer na osnovu definicije (27), hronološki operator "pamti" red po kome oni treba da se množe i uvek ih može dovesti na taj "zakoniti" red množenja. Zahvaljujući ovome, u poslednjem stavu formule (3o) može se promeniti red množenja operatora $\hat{T}\,\hat{W}(t_1)\,\hat{W}(t_2) = \hat{T}\,\hat{W}(t_2)\,\hat{W}(t_1)$ i zatim izvršiti zamena integracionih promenljivih $t_1 \to t_2$, što na kraju daje sledeći rezultat:

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) = \frac{\left[\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{W}(t_1)\right]^2}{2!} \qquad (31)$$

Analogna procedura se može primeniti na svaki od članova reda (29). Za opšti član se dobija izraz:

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)\dots\hat{W}(t_n) = \frac{\left[\hat{T}\int_{t_0}^{t}\hat{W}(t_1)\right]^n}{n!} \qquad (32)$$

pa se prema tome, rešenje za vektore $|J\,t\,k\,x>$ može napisati u obliku:

$$|Jtkx> \hat{S}(t,t_0)|Jt_0kx>$$

$$\hat{S}(t,t_0) = e^{\hat{T}/i\hbar \int_{t_0}^{t} dt' \hat{W}(t')} = \hat{T}\, e^{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \hat{W}(t')} \qquad (33)$$

Unitarni operator $\hat{S}(t, t_0)$ naziva se matrica rasejanja ili, prosto S-matrica.

Na osnovu (33), (25) i (21) može se pisati:

$$|H\kappa x\rangle = \hat{S}^{-1}(t,t_0)|Jt\kappa x\rangle = \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-H_0 t/i\hbar}|St\kappa x\rangle$$

$$|St\kappa x\rangle = e^{H_0 t/i\hbar}\,\hat{S}(t,t_0)|H\kappa x\rangle \tag{34}$$

$$\langle x\kappa tS| = \langle x\kappa H|\,\hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-H_0 t/i\hbar}$$

Vremenski zavisni statistički operator izražava se, kao i ranije preko Šredingerovih vektora stanja:

$$\hat{\rho}_t = \sum_\kappa \hat{W}_\kappa \int dx\,|St\kappa x\rangle\langle x\kappa tS| =$$

$$= e^{\hat{H}_0 t/i\hbar}\,\hat{S}(t,t_0)\Big\{\sum_\kappa \hat{W}_\kappa \int dx\,|H\kappa x\rangle\langle x\kappa H|\Big\}\hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \tag{35}$$

i povezan je, kao što se vidi, sa vremenski nezavisnim statitstičkim operatorom:

$$\hat{\rho}_0 \equiv \sum_\kappa W_\kappa \int dx\,|H\kappa x\rangle\langle x\kappa H| \tag{36}$$

na sledeći način:

$$\hat{\rho}_t = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\,\hat{S}(t,t_0)\,\hat{\rho}_0\,\hat{S}(t,t_0)\, e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \tag{37}$$

Formula (27) koja povezuje neravnotežni statistički operator $\hat{\rho}_t$ sa ravnotežnim operatorom $\hat{\rho}_0$ predstavlja fundamentalnu relaciju neravnotežne kvantne statistike, jer omogućava da se neravnotežne srednje vrednosti izračunavaju korišćenjem ravnotežnih raspodela. Neravnotežna srednja vrednost fizičke veličine $\hat{A}(t)$ definiše se kao: $\langle \hat{A}(t)\rangle_t = S_p(\hat{A}(t)\hat{\rho}_t)$ (38)

$$S_p(\hat{A}(t)\hat{\rho}_t) = S_p\Big(\hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\hat{A}(t)\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\,\hat{S}(t,t_0)\hat{\rho}_0\Big) \tag{39}$$

ili

$$\langle \hat{A}(t)\rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t,t_0)\mathcal{A}(t)\hat{S}(t,t_0)\rangle;\quad \mathcal{A}(t) = e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}}\hat{A}(t)\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \tag{40}$$

gde indeks "t" van uglaste zagrade označava neravnotežnu srednju vrednost, a indeks "o" na istom mestu-ravnotežnu srednju vrednost. S obzirom na vezu (21) izmedju vektora stanja u reprezentaciji interakcije i u Šredingerovoj reprezentaciji, očigledno je da $\mathcal{A}(t)$ predstavlja Šredingerov operator $\hat{A}(t)$ napisan u reprezentaciji interakcije.

Na kraju, treba razjasniti koji je od ravnotežnih operatora $\hat{\rho}_0$ najpogodniji za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti. Tokom analiza koje su izvršene u prva dva dela više puta se moglo konstatovati da je velika kanonička raspodela najopštija i da su u nju uključeni i zakon konzervacije srednje energije i zakon konzervacije srednjeg broja čestica, pa zato pri usračunavanju neravnotežnih srednjih vrednosti treba koristiti ravnotežni operator velikog konačnog ansambla, tj.:

$$\rho_0 = e^{\frac{\Phi + \mu \hat{N}_0 - \hat{H}_0}{\theta}} \tag{41}$$

Ovo tim pre što u neravnotežnoj kvantnoj statistici još uvek nije potpuno jasno koliki je domen primene stava o termodinamičkoj ekvivalentnosti ansambla.

II GLAVA

PROBLEM VREMENSKE ZAVISNOSTI HAMILTONIJANA NULTE APROKSIMACIJE U NERAVNOTEŽNOJ STATISTICI

U skladu sa napred formulisanim zadatkom, u statističkoj fizici se kao nepphodno nameće tretman pojava u sistemu. U prethodnoj glavi izložena je procedura u kojoj se neravnotežnoj kvantnoj statistici rešavaju problemi kod kojih polazni hamiltonijan ne zaviši od vremena.

Ovde ćemo analizirati slučaj kada polazni hamiltonijan zavisi eksplicitno od vremena kao što je već rečeno u prethodnom stavu.

U uvodnom izlaganju, problem sa vremenskim zavisnim polaznim hamiltonijanom rešavaćemo tako što ćemo unitarnom transformacijom ovog hamiltonijana preći na ekvivalentni hamiltonijan, koji ne zavisi eksplicitno od vremena. Opšta procedura i primeri sa matematičkom interpretacijom II glave čini će sadržaj ovog diplomskog rada, k kme će biti i glavno težište.

1. PRELAZ NA EKVIVALENTNI HAMILTONIJAN

Hamiltonijan sistema zadat je u sledećem obliku

$$\hat{H}(\tilde{\xi},t)=\begin{cases}\hat{H}_0(\tilde{\xi},t) & t\le t_0\\ \hat{H}_0(\tilde{\xi},t)+\hat{W}(\tilde{\xi},t) & t>t_0\end{cases}$$

$$\vec{\xi}=\sum_{j=1}^{n}(\hat{x}_j\vec{e}_j+\hat{p}_j\vec{h}_j);\quad \vec{e}_j\vec{e}_{j'}=\delta_{jj'}\quad \vec{h}_j\vec{h}_{j'}=\delta_{jj'} \qquad (1.)$$

Da bi se mogao primeniti standardni formalizam za neravnotežne statističke procese, potrebno je da se od hamiltonijana $\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)$ predje na neki ekvivalentni hamiltonijan $h_0(\tilde{\xi})$ koji ne bi eksplicitno zavisiod od vremena:

$$\hat{h}(\tilde{\xi})=e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)};\quad \hat{\varphi}^{+}(\tilde{\xi},t)=\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t);\quad \frac{\partial\hat{h}_0(\tilde{\xi})}{\partial t}=0 \qquad (2)$$

U opštem slučaju, operator $\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)$ i njegov izvod po vremenu ne moraju da komutiraju tj.

$$\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\right]\neq 0 \qquad (3.)$$

Испишимо услов (2)

$$\frac{\partial\hat{h}_0(\tilde{\xi})}{\partial t}=0=\frac{1}{2}i\left[\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}+e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\right]\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}-$$

$$-\frac{1}{2}ie^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)\left[\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}+e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\right]+$$

$$+e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}\frac{\partial\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t}e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}$$

Ako se poslednja relacija pomnoži sa $e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}$ s leva i sa desna imamo

$$e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}$$

$$\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} H_0(\tilde{\xi},t) - H_0 \frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} +$$

$$+ e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} \frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} \hat{H}_0(\tilde{\xi},t) - \hat{H}_0(\tilde{\xi},t) e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}$$

$$\frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} = 2i \frac{\partial\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t}$$

уводимо ознаке:

$$\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t) = \frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} \, ; \quad \hat{F}(\tilde{\xi},t) = e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} \frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} \qquad (4)$$

i uslov za odredjivanje nepoznate funkcije $\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)$ koja daje ekvivalentni hamiltonijan $\hat{h}_0(\tilde{\xi})$ glasi:

$$[\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t), \hat{H}_0(\tilde{\xi},t)] + [\hat{F}(\tilde{\xi},t), \hat{H}_0(\tilde{\xi},t)] = 2i \frac{\partial H_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t}$$

$$\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t) = \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{\Phi}(\tilde{\xi},t') \qquad (5)$$

уколико је: $$\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t), \frac{\partial\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\right] = 0 \qquad (6)$$

једначина (5) се упрошћава и постаје:

$$[\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t), \hat{H}_0(\tilde{\xi},t)] = i \frac{\partial\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t} \qquad (7)$$

јер је према (4)

$$\hat{F} = \hat{\Phi}$$

Problem ekvivalentnog potencijala može se rešiti preko jednačine(5) ili preko jednačine (7), u zavisnosti od tipa hamiltonijana $H_0(\tilde{\xi},t)$.
U principu, procedura bi se sastojala u sledećem/ za opšti slučaj jednačina (5)

Odabere se probni operator $\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$ i nadje se, preko (4), i operator $\hat{F}(\tilde{\xi},t)$ .Ova dva operatora zamene u jednačinu (5) i pokuša se za izjednačavanjem koeficijenata u jednačini (5) zadovolji. Tada se, za ono Φ koje zadovoljava (5) , moć operatora je:

$$\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t) = \int_{t_0}^{t} dt' \hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$$

i pomoću $\hat{\varphi}$ konačno dobija ekvivalentni hamiltonijan:

$$\hat{h}_0(\tilde{\xi}) = e^{i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)} \hat{H}_0(\tilde{\xi},t)\, e^{-i\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)}$$

U konkretnim računima, nalaženje $\hat{F}$ i $\hat{h}_0$ zahteva korišćenjeVijlovog identiteta. Do Vijlovog identiteta se može doći na sledeći način. Neka je $\hat{A}$- ermitski operator tj. $\hat{A}^+ = \hat{A}$ i $\hat{S}$- antiermitski operator, tj. $\hat{S}^+ = -\hat{S}$
Uvedimo realni parametar β i potražimo sledeći operator:

$$\hat{A}_\beta = e^{\beta\hat{S}} \hat{A}\, e^{-\beta\hat{S}} \tag{8}$$

Ako je $\hat{A}_\beta$ razvijeno u red u okolini tačke β imamo:

$$\hat{A}_\beta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \frac{\partial^n \hat{A}_\beta}{\partial \beta^n} \tag{9}$$

Diferencirajući (8) po β imamo:

$$\frac{\partial \hat{A}_\beta}{\partial \beta} = e^{\beta\hat{S}} \hat{S}\hat{A}\, e^{-\beta\hat{S}} - e^{\beta\hat{S}} \hat{A}\hat{S}\, e^{-\beta\hat{S}} =$$

$$= e^{\beta\hat{S}} [\hat{S},\hat{A}]\, e^{-\beta\hat{S}}$$

$$\frac{\partial^2 \hat{A}_z}{\partial z^2} = e^{z\hat{S}}\,\hat{S}[\hat{S},\hat{A}]\,e^{-z\hat{S}} - e^{z\hat{S}}[\hat{S},\hat{A}]\hat{S}\,e^{-z\hat{S}} = e^{z\hat{S}}[\hat{S},[\hat{S},\hat{A}]]e^{-z\hat{S}}$$

Сада је очигледно да је:

$$\frac{\partial^n \hat{A}_z}{\partial z^n} = e^{z\hat{S}}\underbrace{[\hat{S},[\hat{S},\ldots[\hat{S},\hat{A}]]\ldots]}_{n-\text{пута}} \qquad (10)$$

Ако се (10) замени у (11) и узме $z=1$, онда,

$$\hat{A} = e^{\hat{S}}\hat{A}\,e^{-\hat{S}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\underbrace{[\hat{S},[\hat{S},\ldots[\hat{S},\hat{A}]]\ldots]}_{n-\text{пута}}$$

комбиновано са (8) добили смо:

$$\underbrace{[\hat{S},[\hat{S},\ldots[\hat{S},\hat{A}]]\ldots]}_{0-\text{пута}} = \hat{A} \qquad (11)$$

При налажењу оператора $\hat{F}(\hat{\xi},t)$ имамо: $\hat{S} \equiv -i\hat{\varphi}$ па је:

$$\hat{F}(\hat{\xi},t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\underbrace{[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t)\ldots[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)]]}_{n-\text{пута}} \qquad (12)$$

При нормирању оператора $\hat{h}_0(\tilde{\xi})$ је $\hat{S}=i\hat{\varphi}$, па имамо:

$$\hat{h}_0(\tilde{\xi}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),\ldots[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t),\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)]]\ldots]}_{n-\text{пута}} \qquad (13)$$

Sada se konačno može izložiti, po koracima, procedura nalaženja hamiltonijana:

1. Za dato $\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)$ napiše se jednačina:

$$\left[\left(\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)+\hat{F}(\tilde{\xi},t)\right),\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)\right]=2i\frac{\partial H_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\qquad (a)$$

2. Odbere se operator $\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$ u formi koja bi mogla da zadovolji gornju jednačinu i nadje se operator

$$\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0)=\int_{t_0}^{t}dt'\,\Phi(\tilde{\xi},t')\qquad (b)$$

3. Pronadje se operator $\hat{F}(\tilde{\xi},t)$ po formuli:

$$\hat{F}(\tilde{\xi},t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\underbrace{\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\dots\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)\right]\right]\dots\right]}_{n\text{-puta}}\qquad (c)$$

4. Operator $\hat{\Phi}$ i $\hat{F}$ koji u sebi moraju sadržati neke proizvoljne parametre uvrste se u jednačinu (a) i proizvoljni parametri odrede tako da (a) bude identični zadovoljno. Na taj način konkretizuje se operator $\hat{\Phi}$ i konačno operator $\hat{\varphi}$

5. Za nadjeno i konkretizovano $\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0)$ konačno se nalazi ekvivalentni hamiltonija po formuli.

$$\hat{h}_0(\tilde{\xi})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\dots\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)\right]\right]\dots\right]$$

U slučaju da se $\hat{\Phi}$ može odabrati tako da $[\hat{\Phi},\hat{\varphi}]$ procedura se uprošćava i sastoji se od sledećih koraka

1. Za dato $H_0(\tilde{\xi},t)$ piše se u jednačinu:

$$\left[\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t),\hat{H}(\tilde{\xi},t)\right]=i\frac{\partial\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)}{\partial t}\qquad (a)$$

2. Odabere se operator $\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$ koji u sebi sadrži proizvoljne parametre; ovaj izraz za $\hat{\Phi}$ uvrsti se u (a) i proizvoljni parametri odrede tako da jednačina (a) bude identična i zadovoljena. Na taj način se konkretizuje forma operatora $\hat{\Phi}$

3. Nadje se operator $\hat{\varphi}$ po formuli:

$$\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0)=\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')\qquad (b)$$

4. Konkretizovano $\hat{\varphi}$ konačno dobijamo ekvivalentni hamiltonijan tj.

$$\hat{h}_0(\tilde{\xi})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0),\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0)\dots\left[\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0)\hat{H}_0(\tilde{\xi},t)\right]\right]\dots\right]}_{n\text{-puta}}$$

Ukazana procedura uvek zahteva intuitivno biranje probnog operatora $\Phi(\tilde{\xi},t)$ i stoga sadrži u sebi izvestan element nagadjanja. Bar formalno ovo nagadjanje može izbeći ukoliko dosada izloženu proceduru dalje razradimo.

2. PARCIJALNA DIFERENCIJALNA JEDNAČINA ZA NALAŽENJE EKVIVALENTNOG HAMILTONIJANA

Poznato je da Hajzenbergove jednačine kretanja koje odredjuju evoluciju operatora $\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)$ **u vremenu imaju sledeći oblik:**

$$\frac{d\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{dt} = \frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{dt} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t),\hat{H}(\tilde{\xi},t)\right] \qquad (14)$$

где је $\hat{H}(\tilde{\xi}t)$ - хамилтонијан система
С обзиром на чињеницу да је:

$$\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t) = \hat{\alpha}(\hat{x}_1,\hat{x}_2 \ldots \hat{x}_n, \hat{p}_1, \hat{p}_2 \ldots p_n, t) \qquad (15)$$

$$d\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t) = \frac{1}{2}\left[\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial x_j}dx_j + \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial p_j}dp_j + \sum_{j=1}^{n}dx_j\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial x_j} + \sum_{j=1}^{n}dp_j\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial p_j}\right] + \frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial t}dt$$

односно:

$$\frac{d\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{dt} = \frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial t} + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\left(\left\{\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial\hat{x}_j},\dot{\hat{x}}_j\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial\hat{p}_j},\dot{\hat{p}}_j\right\}\right)$$

$$\{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} = \hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha} \qquad \dot{u} \equiv \frac{du}{dt} \qquad (16)$$

С друге стране

$$\dot{\hat{x}}_j = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}_j, \hat{H}_0\right] \quad ; \quad \dot{\hat{p}}_j = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}_j, \hat{H}\right] \tag{17}$$

тако да можемо писати:

$$\frac{d\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{dt} = \frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{\partial t} + \frac{1}{2i\hbar}\sum_{j=1}^{n}\left(\left\{\frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{\partial\hat{x}_j}, \left[\hat{x}_j, \hat{H}(\tilde{\xi},t)\right]\right\} + \right.$$

$$\left. + \left\{\frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{\partial\hat{p}_j}, \left[\hat{p}_j, \hat{H}(\tilde{\xi},t)\right]\right\}\right) \tag{18}$$

Kombinujući (14) sa) 18) dolazimo do parcijalne diferencijalne jednačine za odredjivanje operatora.

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\left\{\frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{\partial\hat{x}_j}, \left[\hat{x}_j, \hat{H}(\tilde{\xi},t)\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t)}{\partial\hat{p}_j}, \left[\hat{p}_j, \hat{H}(\tilde{\xi},t)\right]\right\}\right) =$$

$$= 2\left[\hat{\alpha}(\tilde{\xi},t), \hat{H}(\tilde{\xi},t)\right] \tag{19}$$

Ako dobijeni rezultat iskoristimo za dalje proširenje jednačine (5), ona se svodi na parcijalnu diferencijalnu jednačinu:

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}_j}, \left[\hat{x}_j, \hat{H}_0\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}_j}, \left[\hat{p}_j, \hat{H}_0\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{x}_j}, \left[\hat{x}_j, \hat{H}_0\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}_j}, \left[\hat{p}_j, \hat{H}_0\right]\right\}\right) =$$

$$= 4i\frac{\partial\hat{H}_0}{\partial t} \qquad \hat{F} = e^{-i\varphi}\hat{\Phi}\, e^{i\varphi}; \quad \hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0) = \int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t') \quad t \leq t_0 \tag{20}$$

у случају да је $\left[\hat{\varphi}, \frac{\partial\hat{\varphi}}{\partial t}\right] = 0$ тј. $\hat{F} = \hat{\Phi}$ једначина (20) прелази у:

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}_j}, \left[\hat{x}_j, \hat{H}_0\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}_j}, \left[\hat{p}_j, \hat{H}_0\right]\right\}\right) = 2i\frac{\partial\hat{H}_0}{\partial t}$$

$$\hat{\varphi}(\tilde{\xi},t,t_0) = \int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t') \qquad t \leq t_0 \tag{21}$$

Kao što se vidi iz dobijenih jednačina(20)i (21), problem nalaženja operatora $\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$, a samim tim i ekvivalentnog hamiltonijana $\hat{h}_0(\tilde{\xi})$ svodi se na rešavanje parcijalne jednačine (2o) (u opštem slučaju) ili na rešavanje parcijalne jednačine (21)u izvesnom posebnom slučaju. U praktičnim računima uvek treba pokušati sa prostijom jednačinom (21), pa tek ako ona nema rešenja koja bi odgovaralo fizičkim uslovima, treba pokušati jednačinom (21) koja je mnogo komplikovanija, jer u sebi sadrži integrale po vremenu od traženog operatora $\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)$. Zaista:

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{x}_j} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j}\left[e^{-i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')} \hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')\, e^{i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')} \right]$$

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial p_j} = \frac{\partial}{\partial \hat{p}_j}\left[e^{-i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t)} \hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')\, e^{i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{\Phi}(\tilde{\xi},t')} \right] \qquad (22) \quad t \leq t_0$$

Takodje treba naglasiti da u jednačini (2o) ili (21) figurišu operatori, a ne obični skalari, pa je problem njihovog rešavanja daleko teži nego kada su u pitanju standarne parcijalne diferencijalne jednačine. Zbog toga je, u praksi lakše da se koristi jednačina(5) ili (7) nego jednačina(2o)i(21). Ma da u ovom pogledu ne treba tražiti probni operator, obično je rešavanje jednačina daleko teže(ako ih je uopšte moguće rešiti) nego "isprobavanje" nekoliko pogodnih operatora za jednačine (5)ili(7).

3. SLOBODNA ČESTICA SA PROMENLJIVOM MASOM

Posmatraćemo kretanje čestice u jednoj dimenziji. Čestica je slobodna, ili joj se menja masa sa vremenom, recimo zbog toga što je naelektrisana, pa skuplja jone iz okoline. Takav slučaj je često u Vilsonovoj komori kada čestica koja kroz nju prolazi sakuplja vodenu paru.

Hamiltonijan čestice je:

$$\hat{H}_0(\hat{p},t) = \frac{\hat{p}^2}{2m(t)} ; \qquad m(t_0) = M \qquad (23)$$

Koristimo prvu jednačinu (7). Znači predpostavlja se sa φ; $\hat{F}=\hat{\Phi}$, odnosno $\left[\varphi, \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial t}\right]=0$
Funkciju $\hat{\Phi}$ napisaćemo u obliku:

$$\hat{\Phi} = f(t)(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \qquad (24)$$

Za dalji račun potrebni su nam komutatori:

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar; \; [\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] \; ; \; [\hat{A}\hat{B},C] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \qquad (25)$$

Osnovna jednačina glasi:

$$[\hat{\Phi},\hat{H}_0] = i\frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} \qquad \hat{\varphi} = \int_{t_0}^{t} dt'\hat{\Phi}(t') \qquad (26)$$

$$\frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{m'(t)}{m^2(t)}\hat{p}^2; \quad [\hat{\Phi},\hat{H}_0] = \frac{1}{2}\frac{f(t)}{m(t)}\left([\hat{x}\hat{p},\hat{p}^2] + [\hat{p}x,\hat{p}^2]\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{f(t)}{m(t)}\left(\hat{x}[\hat{p},\hat{p}^2] + [\hat{x},\hat{p}^2]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x},\hat{p}^2] + [\hat{p},\hat{p}]\hat{x}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{f(t)}{m(t)}\left([\hat{x},\hat{p}^2]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x}\,\hat{p}^2]\right) = \frac{1}{2}\frac{f(t)}{m(t)}\left([\hat{x},\hat{p}]\hat{p}^2 + \right.$$

$$\left. + \hat{p}[\hat{x}\,\hat{p}]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x},\hat{p}] + \hat{p}^2[\hat{x},\hat{p}]\right) = 2i\hbar\frac{f(t)}{m(t)}\hat{p}^2 = 4i\hbar f(t)\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} \qquad (27)$$

На основу (26) се може писати као:

$$2i\hbar\frac{f(t)}{m(t)}\hat{p}^2 = -\frac{1}{2}\frac{m'(t)}{m^2(t)}\hat{p}^2; \quad f(t) = -\frac{1}{4\hbar}\frac{m'(t)}{m(t)} \qquad (28)$$

Сада је: $$\hat{\varphi}(t\,t_0) = \int_{t_0}^{t} -\frac{1}{4\hbar}\frac{m'(t')}{m(t')}dt'(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}) =$$

$$= \frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln m(t')\Big|_{t}^{t_0} = \frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln\frac{m(t_0)}{m(t)};$$

Коначно: $$\hat{\varphi}(\hat{x},\hat{p},t,t_0) = \frac{1}{4\hbar}\ln\frac{M}{m(t)}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}) \qquad (29)$$

Применимо формулу (13)

$$\hat{h}_0 = \sum_{n=0}\frac{i^n}{n!}\underbrace{[\hat{\varphi},[\hat{\varphi}\ldots\ldots[\hat{\varphi},\hat{H}_0]]\ldots]}_{n\text{-пута}} \qquad (30)$$

уведимо смену $$\frac{1}{4\hbar}\ln\frac{M}{m(t)} = f_1(t) \qquad (31)$$

Na osnovu (27) možemo pisati:

$$[\hat{\varphi},\hat{H}_0]=4i\hbar f_1(t)\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\ ;\ [\hat{\varphi},[\hat{\varphi},\hat{H}_0]]=(4i\hbar)^2 f_1^2(t)\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\ ;$$

$$[\hat{\varphi},[\hat{\varphi},[\hat{\varphi},\hat{H}_0]]]=(4i\hbar)^3 f_1^3(t)\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\ \ldots\ldots$$

$$\underbrace{[\hat{\varphi},[\hat{\varphi}\ldots[\hat{\varphi},\hat{H}_0]]\ldots]}_{n-\text{пута}}=(4i\hbar)^n f_1^n(t)\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} \qquad (32)$$

Значи:

$$\hat{h}_0=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^{2n}}{n!}[4\hbar f_1(t)]^n\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\left(\ln\frac{M}{m(t)}\right)^n=$$

$$=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}e^{-\ln\frac{M}{m(t)}}=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}e^{\ln\frac{m(t)}{M}}=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\frac{m(t)}{M}=\frac{\hat{p}^2}{2M}$$

Znači, ekvivalentni hamiltonijan ima oblik:

$$h_0(\hat{p},t_0)=\frac{\hat{p}^2}{2m(t_0)}=\frac{\hat{p}^2}{2M} \qquad (33)$$

što znači da promena mase tokom vremena ne utiču na svojstvene vrednosti energije. Zato se ove promene mogu u izvesnom smislu shvatiti kao virtualni procesi.

Pokušajmo da sada rešimo isti problem koristeći jednačinu (21)

Узмимо да је $\hat{\Phi}=f(t)(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})$ ј-на (21) гласи

$$\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}},[\hat{x},\hat{H}_0]\right\}+\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}},[\hat{p},\hat{H}_0]\right\}=2i\frac{\partial H_0}{\partial t} \qquad (34)$$

пошто је $[\hat{p},\hat{H}_0]=\frac{1}{2m(t)}[\hat{p},\hat{p}^2]=0$; $\frac{\partial H_0}{\partial t}=-\frac{1}{2}\frac{m'(t)}{m(t)}\hat{p}^2$

Ostaje da se pronadje:

$$\left[\hat{x},\hat{H}_\circ\right] = \frac{1}{2m(t)}\left[\hat{x},\hat{p}\right] = \frac{i\hbar}{m(t)}\hat{p}\ ;\ \frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}} = 2\hat{p}f(t) \qquad (35)$$

Jednačina (35) postaje:

$$\frac{4i\hbar}{m(t)}f(t)\hat{p}^2 = -i\frac{m'(t)}{m(t)}\hat{p}^2$$

odakle sledi da je:

$$f(t) = -\frac{1}{4\hbar}\frac{m'(t)}{m(t)}\ ; \qquad \Phi(\hat{x},\hat{p},t) = -\frac{1}{4\hbar}\frac{m'(t)}{m(t)}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})$$

$$\hat{\varphi}(\hat{x},\hat{p},t,t_\circ) = \frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln\frac{M}{m(t)} \qquad (36)$$

što za ekvivalentni hamiltonijan $h_\circ(\hat{p},t)$ daje isti rezultat kao i ranije

4. LINEARNI HARMONISKI OSCILATOR SA PROMENLJIVOM MASOM

Razmotrimo slučaj lineranog osčilatora čija se masa menja tokom vremena. Hamiltonijan osčilatora ima oblik:

$$\hat{H}_\circ = \frac{\hat{p}}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2 \qquad (37)$$

$$m(t_\circ) = M \qquad \omega - \text{frekvencija oscilatora}$$

Koristićemo odmah jednačimu (21) koja u ovom slučaju ima oblik:

$$\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}},\left[\hat{x},\hat{H}_\circ\right]\right\} + \left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}},\left[\hat{p},\hat{H}_\circ\right]\right\} = 2i\frac{\partial H_\circ}{\partial t} \qquad (38.)$$

Znači da se i u ovom slučaju pretpostavlja da je:

$$\hat{\Phi} = \hat{F}, \qquad \left[\hat{\varphi}, \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial t}\right] = 0 \quad \text{на основу} \qquad (37) \text{ je}$$

$$\frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{m'(t)}{m^2(t)}\hat{p}^2 + \frac{1}{2} m'(t)\omega^2 \hat{x}^2 \tag{39}$$

$$\left[\hat{x}, \hat{H}_0\right] = \frac{1}{2m(t)}\left[\hat{x}, \hat{p}^2\right] + \frac{1}{2} m(t)\omega^2\left[\hat{x}, \hat{x}^2\right]$$

$$\left[\hat{x}, \hat{H}_0\right] = \frac{i\hbar}{m(t)}\hat{p} \tag{40}$$

$$\left[\hat{p}, \hat{H}_0\right] = \frac{1}{2} m(t)\omega^2\left[\hat{p}, \hat{x}^2\right] + \frac{1}{2m(t)}\left[\hat{p}, \hat{p}^2\right] = \frac{m(t)\omega^2}{2}\left[\hat{p}, \hat{x}^2\right]$$

$$\left[\hat{p}, \hat{x}^2\right] = \left[\hat{p}, \hat{x}\right]\hat{x} + \hat{x}\left[\hat{p}, \hat{x}\right] = -2i\hbar\hat{x}$$

$$\left[\hat{p}, \hat{H}_0\right] = -i\hbar m(t)\omega^2\hat{x} \tag{41}$$

Заменом (39), (40) и (41) у (38)

$$\frac{i\hbar}{m(t)}\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}}, \hat{p}\right\} - i\hbar\omega^2 m(t)\left\{\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}}, \hat{x}\right\} = -i\frac{m'(t)}{m^2(t)}\hat{p}^2 + i\omega^2 m'(t)\hat{x}^2$$

$$\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}}\hat{p} + \hat{p}\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}} - \omega^2 m(t)\left(\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}}\hat{x} + \hat{x}\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}}\right) =$$

$$= -\frac{m'(t)}{\hbar m(t)}\hat{p}^2 + \frac{\omega^2 m'(t) m(t)}{\hbar}\hat{x}^2 \tag{42}$$

$$\hat{\Phi} = f(t)\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right) \tag{43}$$

тада је $\dfrac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}} = 2\hat{p}f(t); \; \dfrac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}} = 2\hat{x}f(t)$ (44)

$$\left[\hat{p}^2 - \omega^2 m(t)\hat{x}^2\right] f(t) = -\frac{m'(t)}{4\hbar\, m(t)}\hat{p}^2 + \frac{\omega^2 m'(t)\, m(t)}{4\hbar}\hat{x}^2 \qquad (45.)$$

Uzmimo da je:

$$f(t) = -\frac{m'(t)}{4\hbar\, m(t)} \qquad (46.)$$

Tada je:

$$-\omega^2 m^2(t) f(t) = +\omega^2 m^2(t)\frac{m'(t)}{4\hbar\, m(t)} = \frac{\omega^2 m'(t)\, m(t)}{4\hbar}$$

Što znači da je izborom (46) jednačina (45) zadovoljena.

Znači:

$$\hat{\Phi}(\hat{x},\hat{p},t) = -\frac{m'(t)}{4\hbar\, m(t)}\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right) \qquad (47.)$$

$$\hat{\varphi}(\hat{x},\hat{p},t,t_0) = -\frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\frac{m'(t')}{m(t)} = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln m(t')\Big|_{t}^{t_0} =$$

$$= \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln\frac{m(t_0)}{m(t)}$$

tj. konačno

$$\hat{\varphi}(\hat{x},\hat{p},t\,t_0) = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{4\hbar}\ln\frac{M}{m(t)} \qquad (48.)$$

Da bismo našli ekvivalentni komutator, treba prethodno naći kumutator:

$$\left[\lambda(t)(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}), \hat{H}_0\right] = \hat{K} \qquad (49.)$$

$$\hat{K} = \lambda(t)\left[\frac{1}{2m(t)}\left(\left[\hat{x}\hat{p},\hat{p}^2\right] + \left[\hat{p}\hat{x},\hat{p}^2\right]\right) + \frac{1}{2}m(t)\omega^2\left(\left[\hat{x}\hat{p},\hat{x}^2\right] + \left[\hat{p}\hat{x},\hat{x}^2\right]\right)\right]$$

$$\left[\hat{x}\hat{p},\hat{p}^2\right] = \left[\hat{x},\hat{p}^2\right]\hat{p} = 2i\hbar\hat{p}^2 ; \quad \left[\hat{p}\hat{x},\hat{p}^2\right] = \hat{p}\left[\hat{x}\,\hat{p}^2\right] = 2i\hbar\hat{p}^2$$

$$\left[\hat{x}\hat{p},\hat{x}^2\right] = \hat{x}\left[\hat{p}\,\hat{x}^2\right] = -2i\hbar\hat{x}^2 ; \quad \left[\hat{p}\hat{x},\hat{x}^2\right] = \left[\hat{p},\hat{x}^2\right] = -2i\hbar\hat{p}^2$$

$$\left[\lambda(t)(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}), \hat{H}_0\right] = 4i\hbar\lambda(t)\left[\frac{\hat{p}^2}{m(t)} - \frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\right] \qquad (50.)$$

Ekvivalentni hamiltonijan ima oblik:

$$\hat{h}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} [\hat{\varphi}, [\hat{\varphi}, \dots [\hat{\varphi}, H_0]] \dots] \qquad (51.)$$

$$\hat{\varphi} = \lambda(t)(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \qquad \lambda(t) = \frac{1}{4\hbar} \ln \frac{M}{m(t)} \qquad (52.)$$

$$\hat{K}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2$$

$$\hat{K}_1 = [\hat{\varphi}, \hat{H}_0] = 4i\hbar\lambda(t)\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right]$$

$$\hat{K}_2 = [\hat{\varphi}, \hat{K}_1] = [4i\hbar\lambda(t)]^2\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right]$$

$$\hat{K}_3 = [\hat{\varphi}, \hat{K}_2] = [4i\hbar\lambda(t)]^3\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right]$$

. . . .

Konačno:

$$\hat{K}_{2n} = [4i\hbar\lambda(t)]^{2n}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right]$$

$$\hat{K}_{2n+1} = [4i\hbar\lambda(t)]^{2n+1}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right] \qquad (53.)$$

$$\hat{h}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!}\hat{K}_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n}}{(2n)!}\hat{K}_{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n+1}}{(2n+1)!}\hat{K}_{2n+1} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!}[4i\hbar\lambda(t)]^{2n}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right] +$$

$$+ i\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}[4i\hbar\lambda(t)]^{2n+1}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{1}{2}\omega^2 m(t)\hat{x}^2\right] =$$

$$=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}+\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\right]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{[4\hbar\lambda(t)]^{2n}}{2n!}-$$

$$-\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}-\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\right]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{[4\hbar\lambda(t)]^{2n+1}}{(2n+1)!}=$$

$$=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}+\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\right]ch\,4\hbar\lambda(t)-\left[\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}-\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\right]$$

$$sh\,4\hbar\lambda(t)=$$

$$=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\left[ch\,4\hbar\lambda(t)-sh\,4\hbar\lambda(t)\right]+\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\left[ch\,4\hbar\lambda(t)+\right.$$

$$\left.+sh\,4\hbar\lambda(t)\right]=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}e^{-4\hbar\frac{1}{4\hbar}\ln\frac{M}{m(t)}}+\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2$$

$$e^{\ln\frac{M}{m(t)}}=$$

$$=\frac{\hat{p}^2}{2m(t)}\frac{m(t)}{M}+\frac{1}{2}m(t)\omega^2\hat{x}^2\frac{M}{m(t)}=\frac{\hat{p}^2}{2M}+\frac{1}{2}M\omega^2\hat{x}^2$$

Konačno možemo pisati:

$$\hat{h}_0(\hat{x},\hat{p},t_0)\equiv\frac{\hat{p}^2}{2m(t_0)}+\frac{1}{2}m(t_0)\omega^2\hat{x}^2=$$

$$=\frac{\hat{p}^2}{2M}+\frac{1}{2}M\omega^2\hat{x}^2 \qquad (54.)$$

što znači da svojstvene vrednosti hamiltonijana u svim trenucima vremena ostaju isti kao i u početnom trenutku vremena, pa promene mase ax sa vremenom predstavljaju samo virtuelne procese.

5. ČESTICA U VREMENSKI ZAVISNOM PERIODIČNOM POTENCIJALU

Čestica mase m kreće se u potencijalu obleka:

$$\hat{V}(x,t) = V_o e^{ikx - i\omega t} + \overset{*}{V_o} e^{-ikx + i\omega t} \qquad (55)$$

Hamiltonijan $\hat{H}_o$ ima oblik:

$$\hat{H}_o = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_o e^{ikx - i\omega t} + \overset{*}{V_o} e^{-ikx + i\omega t} \qquad (56)$$

Potražićemo pre svega komutator, $[\hat{V}(\hat{x},t), \hat{p})$ gde $\hat{V}(x,t)$ bilo kakva funkcija :

$$\hat{V}\hat{p}\Psi = -i\hbar \hat{V}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\hat{p}\hat{V}\Psi = -i\hbar \frac{\partial\hat{V}}{\partial\hat{x}}\Psi - i\hbar \hat{V}\frac{\partial\Psi}{\partial\hat{x}}$$

ovde sledi:

$$(\hat{V}\hat{p} - \hat{p}\hat{V})\Psi = i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial\hat{x}}\Psi$$

što znači da je

$$[\hat{V}(\hat{x},t), \hat{p}] = i\hbar\frac{\partial\hat{V}(\hat{x},t)}{\partial\hat{x}} \qquad (57)$$

I ovde ćemo pokušati sa jednačinom(21) . Pošto je:

$$[\hat{x}, \hat{H}_o] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

$$[\hat{p}, \hat{H}_o] = \hbar k\left(\hat{V}_o e^{ikx - i\omega t} - \overset{*}{V_o} e^{-ikx + i\omega t}\right)$$

$$\frac{\partial\hat{H}_o}{\partial t} = -i\omega\left(V_o e^{ikx - i\omega t} - \overset{*}{V_o} e^{-ikx + i\omega t}\right) \qquad (58)$$

tada se jednačina (21) svodi na :

$$\frac{i\hbar}{m}\left\{\left[\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}},\hat{p}\right]\right\}+\hbar k\left\{\left[\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}},\left(V_0 e^{ikx-i\omega t}-\overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)\right]\right\}=$$

$$=2\omega\left(V_0 e^{ikx-i\omega t}-\overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right) \qquad (59)$$

Funkciju $\hat{\Phi}$ potražićemo u obliku:

$$\hat{\Phi}(\hat{p})=\lambda\hat{p}\,; \qquad \lambda=\text{const.} \qquad (60.)$$

Pošto je:

$$\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{x}}=0\,; \qquad \frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial\hat{p}}=\lambda \qquad (61.)$$

to jednačina (59) postaje:

$$\hbar k\lambda\left(V_0 e^{ikx-i\omega t}-\overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)=\omega\left(V_0 e^{ikx-i\omega t}-\overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)$$

odakle je:

$$\lambda=\frac{\omega}{\hbar k}\,; \qquad \hat{\Phi}=\frac{\omega\hat{p}}{\hbar k} \qquad (62.)$$

$$\hat{\varphi}(t,t_0)=\int_{t_0}^{t}dt'\frac{\omega\hat{p}}{\hbar k}=\frac{\omega(t-t_0)}{\hbar k}\hat{p}$$

$$\hat{\varphi}(t,t_0)=\gamma(t,t_0)\hat{p}\,; \qquad \gamma(t,t_0)=\frac{\omega(t-t_0)}{\hbar k} \qquad (63.)$$

Ekvivalentni hamiltonijan ćemo tražiti po formuli:

$$\hat{h}_0=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\underbrace{\left[\hat{\varphi},\left[\hat{\varphi},\ldots\ldots\left[\hat{\varphi},\hat{H}_0\right]\right]\ldots\right]}_{n\text{-пута}} \qquad (64.)$$

$$[\hat{\varphi},\hat{H}_0] = \gamma\left[\hat{p},\left(V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)\right] \equiv \hat{R}_1$$

$$\hat{R}_1 = \hbar k \gamma \left(V_0 e^{ikx-i\omega t} - \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)$$

$$\hat{R}_2 = [\hat{\varphi},\hat{R}_1] = (\hbar k \gamma)^2 \left(V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)$$

$$\hat{R}_3 = [\hat{\varphi},\hat{R}_2] = (\hbar k \gamma)^3 \left(V_0 e^{ikx-i\omega t} - \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)$$

Sada je jasno da je:

$$\hat{R}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}$$

$$\hat{R}_{2n} = (\hbar k \gamma)^{2n} \left(V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right) \qquad n=1,2\ldots \quad (65.)$$

$$\hat{R}_{2n+1} = (\hbar k \gamma)^{2n+1} \left(V_0 e^{ikx-i\omega t} - \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right) \qquad n=0,1,2\ldots$$

Sada se možemo vratiti formuli (64)

$$\hat{h}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i)^n}{n!}\hat{R}_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n}}{(2n)!}\hat{R}_{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n+1}}{(2n+1)!}\hat{R}_{2n+1} =$$

$$= \hat{R}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!}\hat{R}_{2n} + i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\hat{R}_{2n+1} =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\hbar k \gamma)^{2n}(-1)^n}{(2n)!}\left(V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right) +$$

$$+ V_0 e^{ikx-i\omega t} + \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t} + i\left(V_0 e^{ikx-i\omega t} - \overset{*}{V}_0 e^{-ikx+i\omega t}\right)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hbar k \gamma)^{2n+1}(-1)^n}{(2n+1)!} =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \left(V_0 e^{ikx - i\omega t} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (\hbar k \gamma)^{2n} +$$

$$+ i \left(V_0 e^{ikx - i\omega t} - \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} (\hbar k \gamma)^{2n+1} =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \left(V_0 e^{ikx - i\omega t} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t}\right) \cos \hbar k \gamma + i \left(V_0 e^{ikx - i\omega t} -\right.$$

$$\left. - \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t}\right) \sin \hbar k \gamma =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx - i\omega t} (\cos \hbar k \gamma + i \sin \hbar k \gamma) + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t}$$

$$(\cos \hbar k \gamma - i \sin \hbar k \gamma) =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx - i\omega t} e^{i\hbar k \gamma} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t} e^{-i\hbar k \gamma} =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx - i\omega t + i\omega(t - t_0)} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t - i\omega(t - t_0)} =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx - i\omega t_0} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t_0}$$

Znači da je i ovde, kao i ranije

$$h_0(\hat{x}, \hat{p}, t_0) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 e^{ikx - i\omega t_0} + \overset{*}{V_0} e^{-ikx + i\omega t_0} \qquad (66.)$$

Što znači da su sve vremenske promene u potencijalu virtualnog tipa i da su svojstvene vrednosti hamiltonijana $\hat{H}_0$ odredjene njegovim početnim vrednostima tj. vrednošću u trenutku t_0.

Z A K L J U Č A K

Kao što se vidi iz dobijenih rezultata neravnotežni statistički problem sa vremenski zavisnim polaznim hamiltonijanom može da se svede na standardni problem u kome je prolazni hamiltonijan nezavisan. Takodje se vidi da je traženje ekvivalentnog hamiltonijana (u opštem slučaju) veoma komplikovano sa matematičke tačke gledišta jer se transformaciona funkcija dobija kao rešenje parcijalne diferencijalne jednačine u kojoj umesto ~~bikk~~ običnih skalara figurišu objekti sa operatorskom strukturom.

Neki prosti primeri koji su ovde rešeni ukazuju na jednu vrlo interesantnu činjenicu. Radi se o tome da vremenske promene u polaznom hamiltonijanu ne menjaju svojstvene vrednosti ovoga hamiltonijana, koji on ima u trenutku t_o, pa se vremenske promene mogu shvatiti kao vremenski procesi. Ovaj zaključak je interesantan što navodi na misao da se možda može formulisati opšte pravilo po kome ~~zz zbika~~ za bilo kakav vremenski zavisan polazni hamiltonijan, svojstvene vrednosti ostaju iste kao u početnom trenutku t_o. Provera ovakve hipoteze trebalo bi da bude prvi dalji cilj analiza statističkih problema sa vremenski zavisnim polaznim hamiltonijanom.

L I T E R A T U R A

1. T.L. Hill: Statistikal Mechanics (Principles and Selectd Opplikations), Mc Craw-Hill Compamm Inc. New-Yorc-Toronto-London, 1956.

2. D.N. Zubarev: Neravnovesnaja statističeskaja termodinamika, "Nauka", Moskva, 1971.

3. P.A.M. Dirac: Principles of Quantum Mechanicu, Clarendon Press, Ohford, 1959.

4. A.S. Davidov: Kvantovaja mehanika, GIFML, Moskva, 1963.

5. L.D. Landau i E.M. Lifšic: Statističeskaja fizika, GIFML, Moskva, 1964.

6. Dr. Bratislav S. Tošić: Statistička fizika.