Θεωρητική Μηχανική

Βασιλείου Χ. Λουκόπουλου

Αναπληρωτή Καθηγητή Τμήματος Φυσικής

Πάτρα 2018

Οι παρούσες σημειώσεις αποτελούν μια πρώτη προσπάθεια συγγραφής θεματολογίας που διδάσκεται από τον συγγραφέα στα πλαίσια του μαθήματος «Κλασική Μηχανική» έτσι ώστε να αναδυθεί ο ενιαίος χώρος της φυσικής και να δοθεί μια πρώτη εικόνα στους φοιτητές για τον τρόπο με τον οποίο οι έννοιες της Αναλυτικής Μηχανικής υπεισέρχονται στα διάφορα πεδία της φυσικής και ειδικά στη σύγχρονη φυσική. Οποιαδήποτε καλοπροαίρετα σχόλια, παρατηρήσεις, διορθώσεις είναι καλοδεχούμενα έτσι ώστε οι σημειώσεις αυτές μελλοντικά να αποτελέσουν ένα πλήρες κεφάλαιο στο βιβλίο «ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ» των Γ. Καραχάλιου και Β. Λουκόπουλου.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΔΕΚΑΤΟ
Η θεωρία μεταβολών και η αρχή του Hamilton

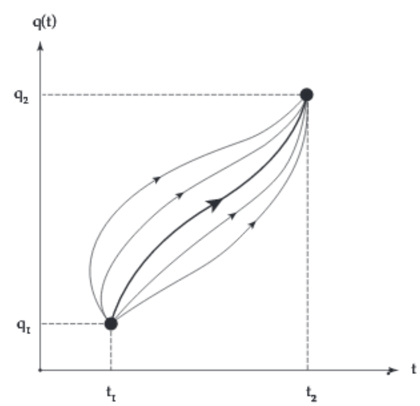
10.1 Λογισμός των μεταβολών. Συναρτησιακό

Ο κλάδος της μαθηματικής ανάλυσης που ασχολείται με τη μεγιστοποίηση ή την ελαχιστοποίηση συναρτησοειδών ονομάζεται **λογισμός των μεταβολών (ή θεωρία μεταβολών)** [11]. Αποτελεί μια ισχυρή μέθοδο με την οποία μπορούμε να μελετούμε τις αρχές που διέπουν τις μεταβολές στη φυσική, ενώ έχει μεγάλη σημασία στην ανάπτυξη της σύγχρονης φυσικής.

Συναρτησοειδή (ή συναρτησιακά) είναι οι απεικονίσεις από ένα σύνολο συναρτήσεων στους πραγματικούς αριθμούς. Δηλαδή, είναι ένα είδος συναρτήσεως, όπου η ανεξάρτητος μεταβλητή είναι και αυτή μια συνάρτηση. Τα συναρτησοειδή συχνά εκφράζονται ως ορισμένα ολοκληρώματα συναρτήσεων και παραγώγων αυτών [1]. Στο λογισμό των μεταβολών το ενδιαφέρον μας στρέφεται γύρω από τις *ακρότατες συναρτήσεις*, που είναι εκείνες για τις οποίες το συναρτησοειδές λαμβάνει μέγιστη ή ελάχιστη τιμή, ή γύρω από τις *στάσιμες συναρτήσεις*, για τις οποίες η τιμή του συναρτησοειδούς παραμένει αμετάβλητη.

Κλασικά προβλήματα του λογισμού των μεταβολών είναι

1. Γραμμή ελαχίστου μήκους.
2. Βραχυστόχρονο.
3. Ελάχιστη επιφάνεια.
4. Γεωδαισιακή επιφάνεια.

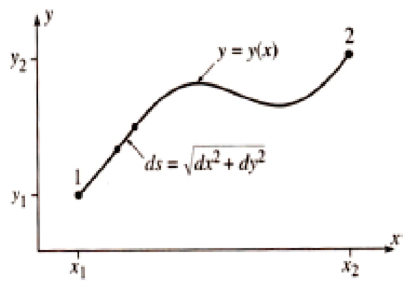


Σχήμα 1. Η έντονη γραμμή είναι η διαδρομή εκείνη για την οποία το συναρτησιακό καθίσταται στάσιμο.

Γραμμή ελαχίστου μήκους: Από όλες τις επίπεδες καμπύλες που συνδέουν δύο δεδομένα σημεία 1 και 2 με συντεταγμένες $\left(x_1, y_1\right)$ και $\left(x_1, y_1\right)$ αντιστοίχως $\left(x_1 < x_2\right)$, να βρεθεί η καμπύλη που έχει το ελάχιστο μήκος. Αν $y = y(x)$ είναι μια καμπύλη που συνδέει τα σημεία 1 και 2, τότε $y(x_1) = y_1$ και $y(x_2) = y_2$. Το μήκος τόξου της καμπύλης μεταξύ των σημείων 1 και 2 δίνεται από το ολοκλήρωμα

$$I(y) = \int_1^2 ds = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + y'^2}\, dx\,, \tag{10.1}$$

όπου $y' = \dfrac{dy}{dx}$. Το πρόβλημα είναι η εύρεση της συναρτήσεως $y(x)$, η οποία καθιστά το ανωτέρω συναρτησιακό, δηλαδή το ολοκλήρωμα $I(y)$ ελάχιστο.



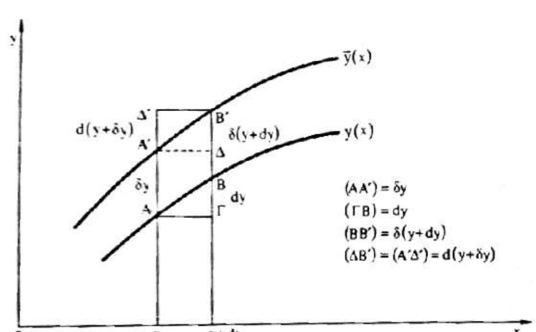
Σχήμα 2. Το πρόβλημα του ελαχίστου μήκους.

Ο δ-Συμβολισμός

Για την οικογένεια $\bar{y}(x,\alpha) = y(x) + \alpha\,\eta(x)$ των γειτονικών καμπύλων της $y(x)$ παίρνουμε καμπύλες απείρως γειτονικές της αρχικής $y(x)$, θεωρώντας ότι η μεταβλητή παράμετρος α τείνει στο μηδέν [1]. Η σύγκριση των τιμών της τροποποιημένης $\bar{y}(x,\alpha)$ με τις τιμές της αρχικής $y(x)$ για κάθε τιμή x της ανεξαρτήτου μεταβλητής, γίνεται μέσω της διαφοράς $\bar{y}(x,\alpha) - y(x)$. Η διαφορά αυτή ονομάζεται **μεταβολή** της συναρτήσεως $y(x)$, συμβολίζεται με δy και είναι επίσης μία συνάρτηση του x, δηλ.

$$\delta y = \bar{y}(x,\alpha) - y(x) = \alpha\,\eta(x). \tag{10.2}$$

Η μεταβολή δy της συναρτήσεως $y(x)$ όπως και η δυνατή μετατόπιση σημείου, είναι μια απειροστή ποσότητα, καθ' όσον η παράμετρος α τείνει στο μηδέν, καθώς επίσης και μία **δυνατή μετατόπιση** της $y(x)$ λόγω του ότι γίνεται με αυθαίρετο τρόπο με την αυθαίρετη επιλογή της συνάρτησης $y(x)$.



Σχήμα 3. Γραφική παράσταση της διαφοράς των απειροστών ποσοτήτων dy και δy.

Η διαφορά των απειροστών ποσοτήτων dy και δy έγκειται στο ότι η dy οφείλεται στην απειροστή μεταβολή dx της ανεξαρτήτου μεταβλητής, ενώ η δy οφείλεται στη μετάβαση σε απείρως γειτονική καμπύλη της οικογένειας $\overline{y}(x,\alpha)$.

Η ανεξάρτητος μεταβλητή x δεν συμμετέχει στη διαδικασία της μεταβολής. Όμως η μεταβολή της συναρτήσεως $y(x)$ ορίζει μια νέα συνάρτηση του x, την $\delta y = \alpha\,\eta(x)$.

Αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι σχέσεις

$$\frac{d}{dx}(\delta y) = \delta\left(\frac{dy}{dx}\right) \qquad \text{ή} \qquad d(\delta y) = \delta(dy) \tag{10.3}$$

και

$$\delta\int_{\alpha}^{b} y(x)\,dx = \int_{\alpha}^{b} \delta y(x)\,dx\,. \tag{10.4}$$

Αυτό σημαίνει ότι η μεταβολή και η διαφόριση, καθώς και η μεταβολή και η ολοκλήρωση, είναι διαδικασίες που μπορούν να εναλλαγούν.

10.2 Εξισώσεις Euler-Lagrange

Το απλούστερο πρόβλημα του Λογισμού των Μεταβολών μπορεί να διατυπωθεί ως εξής: Έστω $F(x,y,y')$ μια συνάρτηση με συνεχείς μερικές παραγώγους μέχρι και δευτέρας τάξεως ως προς τις μεταβλητές x, y, y'. Θεωρούμε το συναρτησιακό

$$I(y) = \int_{x_1}^{x_2} F(x,y,y')\,dx \tag{10.5}$$

και ζητείται να προσδιορισθεί μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση $y(x)$, η οποία ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες

$$y(x_1) = y_1 \qquad \text{και} \qquad y(x_2) = y_2 \tag{10.6}$$

και για την οποία το συναρτησιακό $I(y)$ λαμβάνει ακρότατη τιμή.

Αποδεικνύεται ότι το συναρτησιακό (10.5) λαμβάνει ακρότατη τιμή εάν ισχύει η σχέση

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) - \frac{\partial F}{\partial y} = 0\,. \tag{10.7}$$

Η σχέση (10.7) είναι η εξίσωση **Euler-Lagrange** [1, 2, 3].

Είναι δυνατόν η λύση y(x) της εξίσωση **Euler-Lagrange** να αντιστοιχεί σε σημείο καμπής της I. Η λύση y(x) της εξισώσεως Euler-Lagrange, που ικανοποιεί και τις οριακές συνθήκες, λέμε ότι καθιστά το ολοκλήρωμα (10.5) στατικό ή στάσιμο, δηλαδή δI(y)=0.

10.3 Αρχή του Hamilton. Δράση. Γενικευμένη αρχή του Hamilton. Τροποποιημένη αρχή του Hamilton

Αρχή του Hamilton

Θεωρούμε ένα ολόνομο μηχανικό σύστημα με n βαθμούς ελευθερίας, που περιγράφεται από τις γενικευμένες συντεταγμένες $q_1, q_2, ..., q_n$ και το οποίο κινείται σε πεδίο δυνάμεων, που απορρέει από τη δυναμική συνάρτηση V [1]. Για το σύστημα αυτό μπορούμε να προσδιορίσουμε μια συνάρτηση Lagrange $L = L(q_1, q_2, ..., q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, ..., \dot{q}_n, t)$, όπου $L = T - V$.

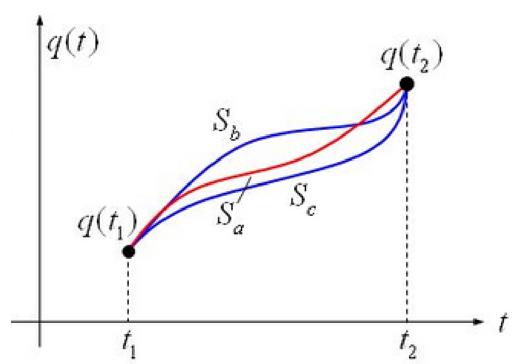
Η έννοια του θεσεογραφικού ή χώρου μορφής (ή μορφικού χώρου) καθιστά δυνατή την επέκταση της μηχανικής του υλικού σημείου για οποιοδήποτε μηχανικό σύστημα.

Θεωρούμε το ολοκλήρωμα $I = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)\,dt$ (το οποίο καλούμε **δράση**). Το ολοκλήρωμα αυτό είναι ένα συναρτησιακό της μορφής (10.5). έτσι λοιπόν ο μηδενισμός της μεταβολής του ολοκληρώματος αυτού, δηλαδή η σχέση

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)\,dt = 0, \tag{10.8}$$

αποτελεί την αναγκαία και ικανή συνθήκη των εξισώσεων Lagrange

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \ , \ i = 1, 2, ..., n. \tag{10.9}$$



Σχήμα 4. Η έντονη γραμμή είναι η διαδρομή εκείνη για την οποία η δράση καθίσταται στάσιμη.

Έτσι, για ολόνομα μηχανικά συστήματα εντός πεδίων που απορρέουν από δυναμική συνάρτηση, μπορούμε να διατυπώσουμε την **αρχή του Hamilton (αρχή της ελάχιστης δράσης)**:

«Η τροχιά, την οποία θα ακολουθήσει ένα δυναμικό σύστημα, μεταξύ των σημείων Α και Β του μορφικού χώρου, στα οποία βρίσκεται τις χρονικές στιγμές t_1 και t_2 αντίστοιχα, είναι εκείνη για την οποία το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα

$$I=\int_{t_1}^{t_2} L\left(q_i,\dot{q}_i,t\right)dt \tag{10.10}$$

παίρνει στατική τιμή». Το είδος του ακροτάτου συνήθως βρίσκεται από την φύση του προβλήματος.

Σημαντικό πλεονέκτημα της αρχής του Hamilton είναι ότι δύναται να εφαρμοσθεί και σε μη μηχανικά συστήματα και να περιγράψει και άλλους κλάδους της Φυσικής.

Γενικευμένη αρχή του Hamilton

Για οποιεσδήποτε δεδομένες δυνάμεις αποδεικνύεται **η γενικευμένη αρχή του Hamilton**:

$$\int_{t_1}^{t_2}\left(\delta T+\bar{\delta}\bar{W}\right)dt=0\,. \tag{10.11}$$

Εάν οι δεδομένες δυνάμεις απορρέουν από δυναμική συνάρτηση V τότε η (10.11) γράφεται ως

$$\int_{t_1}^{t_2}\delta L\,dt=0\,. \tag{10.12}$$

Για ολόνομα και μόνο συστήματα ισχύει

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}L\,dt=0\,, \tag{10.13}$$

η οποία είναι η αρχή του Hamilton.

Τροποποιημένη αρχή του Hamilton

Εάν με την βοήθεια του μετασχηματισμού Legendre, αντικαταστήσουμε στη σχέση (10.13) την συνάρτηση Lagrange με την συνάρτηση Hamilton, τότε λαμβάνουμε την σχέση:

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{j=1}^{n}p_j\dot{q}_j-H\right)dt=0\ , \tag{10.14}$$

η οποία είναι η **τροποποιημένη αρχή του Hamilton**.

Έτσι η (10.14), ως έκφραση των γενικευμένων συντεταγμένων q_j και των γενικευμένων ορμών τους, έχει τη μορφή προβλήματος του λογισμού των μεταβολών στον 2n-διαστάσεων χώρο, το χώρο των φάσεων. Επιπροσθέτως, αποδεικνύεται ότι οι εξισώσεις Euler-Lagrange της τροποποιημένης αρχής Hamilton είναι οι κανονικές εξισώσεις της κινήσεως.

Περαιτέρω διερεύνηση της αρχής του Hamilton (αρχή ελάχιστης δράσης)

Είναι δυνατόν με συστατικό μόνο την αρχή της ελάχιστης δράσης να αναπαραχθεί η Νευτώνεια Μηχανική [12].

Ας δούμε το παράδειγμα ενός αρμονικού ταλαντωτή. Η συνάρτηση Lagrange είναι η L=T-V και είναι μια συνάρτηση θέσης (q) και ταχύτητας $(\dot{q})$. Δηλαδή $L = L(q, \dot{q})$.

Η τιμή της για σώμα στο άκρο ελατηρίου είναι

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\, m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}\, kq^2. \qquad (10.15)$$

Επίσης οι μερικές παράγωγοί της είναι $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$ (με διαστάσεις ορμής) και $\frac{\partial L}{\partial q} = -kq$ (με διαστάσεις δύναμης).

Αντίστοιχα για την συνάρτηση Hamilton έχουμε ότι η H=T+V είναι μια συνάρτηση θέσης (q) και ορμής (p), H = H (q, p).

Η τιμή της για σώμα στο άκρο ελατηρίου είναι

$$H(q, p) = \frac{1}{2}\, \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2}\, kq^2. \qquad (10.16)$$

Όσο για τις μερικές παραγώγους είναι $\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$ (με διαστάσεις ταχύτητας) και $\frac{\partial H}{\partial q} = kq$ (με διαστάσεις δύναμης).

Ξεκινάμε από την εξίσωση Euler Lagrange $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$, όπου $\frac{\partial L}{\partial q} = -kq$ και $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$ (ορμή), ενώ είναι $F = -kq$. Άρα $F = \frac{dp}{dt}$, δηλαδή ο δεύτερος νόμος της κίνησης του Νεύτωνα.

Η αρχή του Hamilton διατυπώθηκε για ολόνομο σύστημα, παρουσία διατηρητικών (δεδομένων) δυνάμεων. Έτσι, θα μπορούσε κάποιος να ισχυριστεί ότι σε ένα σύστημα μη διατηρητικό (με τριβή) δεν υπάρχει απαραίτητα η συνάρτηση Lagrange η οποία μέσω των εξισώσεων Euler-Lagrange να οδηγεί στις εξισώσεις κίνησης του συστήματος. Επομένως, βασιζόμενος σε αυτό θα μπορούσε να καταλήξει στο συμπέρασμα ότι «οι νόμοι του Νεύτωνα είναι γενικότεροι από την αρχή του Hamilton». Όμως, η αρχή του Hamilton μας δίνει τη δυνατότητα να προσεγγίσουμε βαθύτερα τους νόμους της μηχανικής, να καταλάβουμε πώς παράγονται οι διατηρήσιμες ποσότητες, και να διαμορφώσουμε ένα πλαίσιο με το οποίο να μπορούμε να πραγματευτούμε τις νεώτερες θεωρίες της Φυσικής. Επιπροσθέτως, το γεγονός «ότι δεν μπορούμε πάντοτε με την αρχή του Hamilton να πραγματευτούμε την κίνηση σε μη συντηρητικά πεδία» δεν αποτελεί πρόβλημα διότι ***τα θεμελιώδη πεδία δυνάμεων τα οποία γνωρίζουμε είναι όλα συντηρητικά*** [12].

Σημαντικό είναι δε η κατασκευή της συνάρτησης του Lagrange από συμμετρίες. Δηλαδή, η συνάρτηση του Lagrange μπορεί να βρεθεί με τη χρήση γενικών επιχειρημάτων που βασίζονται στις συμμετρίες του φυσικού συστήματος (δες παράδειγμα κατωτέρω, παράγραφος 10.5). Με τον τρόπο αυτό η θεωρία του Lagrange μας δίνει τη δυνατότητα να προβλέπουμε τις εξισώσεις κίνησης όταν αυτές δεν είναι γνωστές, και να αναπτύσσουμε φυσικές θεωρίες για φαινόμενα για τα οποία οι νόμοι μας είναι άγνωστοι. Για τον λόγο αυτό η έννοια της δράσης έχει δεσπόζουσα θέση με ιδιαίτερη φυσική σημασία, σε αυτή τη θεώρηση. Τέλος, μέσω της έννοιας της δράσης μπορεί να θεμελιωθεί η κβαντομηχανική με ένα ιδιαίτερα διαισθητικό και πρωτότυπο τρόπο με τη βοήθεια των ολοκληρωμάτων διαδρομής (path integrals) που εισήγαγαν ο Dirac και ο Feynman [12].

10.4 Συμμετρίες και νόμοι διατήρησης - Θεώρημα Noether

Συμμετρία είναι η ιδιότητα ενός αντικειμένου ή συστήματος, να παραμένει αναλλοίωτο μετά από ένα σύνολο αλλαγών (μετασχηματισμών).

Τις πιο χαρακτηριστικές περιπτώσεις συμμετρίας που συναντάμε στη φύση, μπορούμε να τις κατατάξουμε σε δύο μεγάλες κατηγορίες οι οποίες από μαθηματική άποψη αποτελούν τελείως διαφορετικά είδη συμμετριών.

Α) Συνεχείς συμμετρίες (π.χ. Περιστροφές).

Β) Διακριτές συμμετρίες (π.χ. Ανακλάσεις).

"**Θεώρημα Noether**". Σύμφωνα με το θεώρημα αυτό: "Για κάθε συνεχή συμμετρία των νόμων της φυσικής πρέπει να υπάρχει ένας νόμος διατήρησης και αντιστρόφως". Οι νόμοι διατήρησης, όπως της ενέργειας, της ορμής και της στροφορμής πηγάζουν από αρχές συμμετρίας πολύ βαθύτερες από τους νόμους του Νεύτωνα. Έτσι

- Η «Αρχή διατήρησης της ορμής» αντιστοιχεί στη μεταφορική συμμετρία στο χώρο (ομογένεια του χώρου).
- Η «Αρχή διατήρησης της στροφορμής» πηγάζει από την στροφική συμμετρία (ισοτροπία του χώρου).
- Η «Αρχή διατήρησης της ενέργειας» αντιστοιχεί στη χρονική μεταφορική συμμετρία (ομογένεια του χρόνου).
- Η «Αρχή διατήρησης του ηλεκτρικού φορτίου» αντιστοιχεί σε μια τοπική συμμετρία βαθμίδας.

Δηλαδή, στη κβαντική θεωρία έχουμε μια άλλη συμμετρία. Επειδή οι φυσικές ποσότητες είναι πραγματικές, θα πρέπει οι μιγαδικές φάσεις να μπορούν ν' αλλάζουν κατ' επιθυμίαν χωρίς να επηρεάζουν το φυσικό περιεχόμενο της θεωρίας. Η συμμετρία του αναλλοίωτου ως προς τις αλλαγές φάσης, γνωστή σαν *συμμετρία βαθμίδας*, οδηγεί στη διατήρηση του φορτίου. Η κβαντική ηλεκτροδυναμική είναι μια κβαντική θεωρία πεδίου με συμμετρία βαθμίδας [7].

Οι νόμοι διατήρησης επομένως είναι απόρροια αλλά και θεμέλιο της κατανόησης του χωρόχρονου όπως τον ξέρουμε σήμερα και ισχύουν, τουλάχιστον μέχρι εκεί που μπορεί να φτάσει η ακρίβεια των πειραμάτων μας. Η μόνη εξαίρεση έχει παρατηρηθεί στις συμμετρίες των *Ασθενών αλληλεπιδράσεων*. Σε αυτές έχει παρατηρηθεί παραβίαση της διατήρησης της ομοτιμίας (parity) και της συμμετρίας χρόνου. Η ταυτόχρονη όμως συμμετρία ομοτιμίας-χρόνου-φορτίου (CPT) ισχύει πάντοτε.

10.5 Κατασκευή συνάρτησης Lagrange από συμμετρίες

Η βαθύτερη προέλευση της συνάρτησης του Lagrange θα φανεί ακολούθως όπου θα κατασκευάσουμε τη συνάρτηση του Lagrange για ελεύθερο σωματίδιο στηριζόμενοι αποκλειστικά στις συμμετρίες του χώρου και του χρόνου (τις συμμετρίες του φυσικού κόσμου) [13].

Βέβαια, στην πραγματικότητα κάνουμε άλλη μια παραδοχή, δηλαδή ότι η συνάρτηση του Lagrange ενός μηχανικού συστήματος είναι συνάρτηση μόνο των θέσεων και των χρονικών παραγώγων τους (και εν γένει του χρόνου), όχι όμως ανώτερων παραγώγων. Αυτό είναι αποκλειστικά πειραματικό αποτέλεσμα αφού έχουμε διαπιστώσει ότι η αρχική θέση και η ταχύτητα ενός συστήματος καθορίζουν πλήρως την εξέλιξή του.

Πράγματι, ας ξεκινήσουμε με κάποια γενική συνάρτηση Lagrange για το ελεύθερο σωματίδιο της μορφής $\mathrm{L}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}},t)$ [13].

Λόγω **ομογένειας του χρόνου** δεν είναι δυνατόν η συνάρτηση Lagrange του σωματιδίου να εξαρτάται από το χρόνο και επομένως οποιαδήποτε χρονική στιγμή η συνάρτηση Lagrange πρέπει να είναι η ίδια. Έτσι πρέπει να έχει την απλούστερη μορφή $\mathrm{L}(\mathbf{x},\dot{\mathbf{x}})$.

Αντιστοίχως λόγω **ομογένειας του χώρου** δεν είναι δυνατόν να εξαρτάται ούτε από τη θέση του σωματιδίου. Αυτός σημαίνει ότι όπου και αν βρίσκεται το ελεύθερο σωματίδιο πρέπει να περιγράφεται από την ίδια συνάρτηση Lagrange. Επομένως η μορφή αυτής πρέπει να είναι ακόμη πιο απλή: $\mathrm{L}(\dot{\mathbf{x}})$.

Η **ισοτροπία του χώρου**, η ανεξαρτησία δηλαδή της περιγραφής από οποιαδήποτε κατεύθυνση, επιβάλλει ακόμη πιο στενό περιορισμό της συνάρτηση Lagrange του ελευθέρου σωματιδίου ως $\mathrm{L}\left(|\dot{\mathbf{x}}|^2\right)$.

Τέλος **η γαλιλαϊκή συμμετρία**, δηλαδή η συμμετρία περιγραφής του συστήματος σε διαφορετικά αδρανειακά συστήματα, επιβάλει το φυσικό περιεχόμενο της συνάρτησης Lagrange να μην αλλάζει όταν η κίνηση του σωματιδίου περιγραφεί από κάποιο άλλο αδρανειακό σύστημα αναφοράς. Θα πρέπει λοιπόν η αλλαγή $\mathbf{x} \to \ \mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{v}t$ (όπου $\mathbf{v}$ είναι η σχετική ταχύτητα κίνησης των δύο αδρανειακών συστημάτων, του αρχικού και του νέου) να επιφέρει το πολύ ένα μετασχηματισμό βαθμονόμησης (ή βαθμίδας) στη συνάρτηση Lagrange, ο οποίος δεν αλλάζει το φυσικό περιεχόμενο της συνάρτησης Lagrange αφού οδηγεί στις ίδιες εξισώσεις κινήσεως, δηλαδή:

$$\mathrm{L}\left(|\dot{\mathbf{x}}'|^2\right) = \mathrm{L}\left(|\dot{\mathbf{x}}|^2\right) + \frac{\mathrm{d}f(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} \tag{10.17}$$

Όμως $\mathrm{L}\left(|\dot{\mathbf{x}}'|^2\right) = \mathrm{L}\left(|\dot{\mathbf{x}} - \mathbf{v}|^2\right) = \mathrm{L}\left((\dot{\mathbf{x}})^2 + \mathbf{v}^2 - 2\,\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{x}}\right)$.

Οι δύο τελευταίοι όροι στο όρισμα της συνάρτησης αποτελούν μια τέλεια χρονική παράγωγο: $\mathbf{v}^2 - 2\,\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{x}} = \dfrac{\mathrm{d}\left(\mathbf{v}^2 t - 2\,\mathbf{v}\cdot\mathbf{x}\right)}{\mathrm{d}t}$, επομένως θέλουμε μια συνάρτηση Lagrange για την οποία να ισχύει $\mathrm{L}\left(u^2 + \dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t}\right) = \mathrm{L}\left(u^2\right) + \dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}$, όπου g μια δεδομένη συνάρτηση (δηλαδή, $g = \mathbf{v}^2 t - 2\,\mathbf{v}\cdot\mathbf{x}$) και f μια τυχαία συνάρτηση. Μια τέτοια κατάλληλη συνάρτηση είναι η $L\left(u^2\right) = au^2 + b$ [13].

[*Απόδειξη*: Θα αποδείξουμε ότι μια τέτοια τύπου συνάρτηση είναι η μοναδική που μπορούμε να κατασκευάσουμε για την οποία να ισχύει η παραπάνω ιδιότητα. Θεωρούμε ότι η συνάρτηση g είναι καταλλήλως μικρή (αυτό επιτυγχάνεται επιλέγοντας μικρή σχετική ταχύτητα $\mathbf{v}$), πολλαπλασιάζοντάς την με κάποιο μικρό αριθμό ε και αναπτύσσοντας την L σε όρους μέχρι τάξης ε.

$$L\left(u^2 + \varepsilon \frac{dg}{dt}\right) = L\left(u^2\right) + \varepsilon \frac{dL\left(u^2\right)}{du^2}\frac{dg}{dt} + O\left(\mathbf{v}^2\right), \quad \text{όπου } \frac{dg}{dt} = \mathbf{v}^2 - 2\,\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{x}} \approx -2\,\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{x}}.$$

Για να είναι ο τελευταίος όρος (γραμμικός ως προς $\mathbf{v}$) μια τέλεια χρονική παράγωγος πρέπει να είναι $\dfrac{dL\left(u^2\right)}{du^2} = a$ (μια σταθερά), δηλαδή $L\left(u^2\right) = au^2 + b$].

Συνοπτικά η συνάρτηση Lagrange ενός ελευθέρου σωματιδίου σε ένα κόσμο που παρουσιάζει όλες τις παραπάνω συμμετρίες πρέπει να έχει τη μορφή:

$$L_{\text{ελευθ. σωματιδ.}} = \frac{1}{2}m\left|\dot{\mathbf{x}}\right|^2. \tag{10.18}$$

Η σταθερά b αφαιρέθηκε ως μη έχουσα φυσική σημασία (μπορεί να θεωρηθεί ως μετασχηματισμός βαθμονόμησης) ενώ η σταθερά a απλώς γράφτηκε αυθαίρετα ως $\frac{1}{2}m$, διότι οποιοσδήποτε πολλαπλασιαστικός παράγοντας θα ήταν ικανοποιητικός. Παρόλα αυτά πρόκειται για μια λογική επιλογή αφού, στην κλασσική φυσική, η μοναδική ιδιότητα ενός υλικού σωματιδίου που το διακρίνει από άλλα είναι η μάζα του. Τέλος το ½ είναι και αυτό αυθαίρετο και η επιλογή του έγινε έτσι ώστε να μας θυμίζει την κινητική ενέργεια [13].

10.6 Κανονικοί μετασχηματισμοί. Γεννήτριες συναρτήσεις

Ο σημειακός μετασχηματισμός και ο μετασχηματισμός βαθμίδος είναι μετασχηματισμοί οι οποίοι αφήνουν αναλλοίωτες τις εξισώσεις Lagrange. Ο μετασχηματισμός λαμβάνει χώρα στο χώρο μορφής. Στους μετασχηματισμούς αυτούς συμμετέχουν μόνο οι γενικευμένες συντεταγμένες.

Στη διατύπωση Hamilton θα θεωρήσουμε γενικότερους μετασχηματισμούς, στους οποίους συμμετέχουν όχι μόνο οι συντεταγμένες αλλά και οι γενικευμένες ορμές.

Αντίστοιχα προς το σημειακό μετασχηματισμό, που ορίζει μετασχηματισμό του μορφικού χώρου, οι αντίστοιχες εξισώσεις ορίζουν μετασχηματισμό του χώρου των φάσεων.

Οι κύριοι σκοποί της θεωρίας μετασχηματισμών στη διατύπωση Hamilton είναι:

i. Ο προσδιορισμός των μετασχηματισμών που διατηρούν τη μορφή των εξισώσεων Hamilton και
ii. Η εύρεση μεταξύ των μετασχηματισμών αυτών, εκείνων για τους οποίους η Hamiltonian μετασχηματίζεται σε συνάρτηση απλής μορφής.

Οι μετασχηματισμοί που διατηρούν την μορφή των εξισώσεων Hamilton ονομάζονται **κανονικοί μετασχηματισμοί**. Οι μετασχηματισμοί αυτοί πραγματοποιούνται με την βοήθεια αυθαίρετων συναρτήσεων της μορφής $F = F_1(q, Q, t)$, $F = F_2(q, P, t)$, $F = F_3(p, Q, t)$ και $F = F_4(p, P, t)$ που ονομάζονται **γεννήτριες συναρτήσεις**, διότι «γεννούν» τον μετασχηματισμό.

10.7 Εξίσωση Hamilton-Jacobi

Από συνάρτηση της μορφής $F = F(q, Q, t)$ (γεννήτρια συνάρτηση) απορρέει ο κανονικός μετασχηματισμός, που ορίζεται από τις σχέσεις

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i}, \tag{10.19}$$

ενώ η μετασχηματισμένη Hamiltonian είναι

$$H' = H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{10.20}$$

Εάν υποθέσουμε ότι η γεννήτρια συνάρτηση F είναι τέτοια, ώστε να ικανοποιεί την συνθήκη

$$H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0, \tag{10.21}$$

τότε θα είναι $H' = 0$ και από τις εξισώσεις Hamilton

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} = 0, \quad \dot{P}_i = \frac{\partial H'}{\partial Q_i} = 0, \tag{10.22}$$

προκύπτει ότι οι νέες κανονικές μεταβλητές είναι σταθερές της κινήσεως. Δηλαδή $Q_i = \alpha_i$ και $P_i = \beta_i$. Οι 2n σταθερές α_i και β_i εξαρτώνται από τις αρχικές συνθήκες. Έτσι οι εξισώσεις μετασχηματισμού (10.19) με την βοήθεια των σχέσεων (10.22) λαμβάνουν την μορφή

$$p_i = \frac{\partial F(q_i, \alpha_i, t)}{\partial q_i} \qquad \beta_i = -\frac{\partial F(q_i, \alpha_i, t)}{\partial \alpha_i} . \tag{10.23}$$

Αντικαθιστώντας στη σχέση (10.21) την έκφραση (10.23α) προκύπτει ότι η γεννήτρια συνάρτηση F θα πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση

$$H\left(q_i, \frac{\partial F(q_i, \alpha_i, t)}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

ή

$$H\left(q_1, \ldots, q_n, \frac{\partial F}{\partial q_1}, \ldots, \frac{\partial F}{\partial q_n}, t\right) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0. \tag{10.24}$$

Η εξίσωση (10.24) είναι η **εξίσωση Hamilton-Jacobi**.

Η εξίσωση Hamilton-Jacobi αποτελεί μια άλλη περιγραφή της κλασικής μηχανικής και μας επιτρέπει να κάνουμε μια επέκταση, που θα μας οδηγήσει στην κυματομηχανική και στην εξίσωση του Schrodinger. Μας επιτρέπει δε να εκφράσουμε την συμπεριφορά ενός σωματιδίου με την περιγραφή ενός κύματος.

10.8 Θεώρημα Liouville

Στο χώρο των φάσεων οι κανονικές μεταβλητές q_j, p_j θεωρούνται ως οι ορθογώνιες συντεταγμένες του σημείου που αναπαριστά τη θέση του συστήματος [1]. Επομένως η απόκλιση της (φασικής) ταχύτητας $\mathbf{v} = \left(\dot{q}_j, \dot{p}_j\right)$ λόγω των εξισώσεων Hamilton είναι

$$\mathrm{div}\mathbf{v} = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{p}_j}{\partial p_j}\right) = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_j}\right) = 0 . \tag{10.25}$$

Έτσι το θεώρημα του Gauss στον 2n-διαστάσεων χώρο των φάσεων γράφεται

$$\int \cdots \int_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{dS} = \int \int \cdots \int_{V_S} \mathrm{div}\mathbf{v}\, dV_S = 0 , \tag{10.26}$$

όπου V_S η περιοχή του χώρου των φάσεων που περιέχεται στην κλειστή επιφάνεια S. Αυτό σημαίνει ότι η ολική ροή του φασικού ρευστού διά μέσου κλειστής επιφάνειας του χώρου των φάσεων είναι μονίμως μηδενική. Δηλαδή, το φασικό ρευστό συμπεριφέρεται σαν ασυμπίεστο ρευστό. Η ιδιότητα αυτή του φασικού ρευστού ονομάζεται **θεώρημα Liouville**. Μία άλλη διατύπωση του θεωρήματος Liouville είναι ότι ο όγκος μιας περιοχής του φασικού ρευστού παραμένει αναλλοίωτος, δηλαδή παραμένει σταθερός καθ' όλη τη διάρκεια της κινήσεως. Το θεώρημα Liouville αποτελεί μία νέα αρχή διατηρήσεως και βρίσκει εφαρμογή στη Στατιστική Φυσική.

10.9 Οι έννοιες της Αναλυτική Μηχανικής στη Κβαντομηχανική, στη Στατιστική Μηχανική, στη Θεωρία Πεδίου (Κλασική-Κβαντική ΘΠ), στη Μοριακή Δυναμική, στην Ουράνια Μηχανική,...

Η **διατύπωση κατά Hamilton** συμβάλει στη βαθύτερη θεώρηση της μηχανικής και χρησιμεύει ως αφετηρία στην κβαντομηχανική και στατιστική μηχανική. Επίσης η διατύπωση κατά Hamilton είναι κατάλληλη για την ανάπτυξη της θεωρίας των διαταραχών, δηλαδή τη θεώρηση των συστημάτων εκείνων, για τα οποία δεν μπορούμε να λάβουμε ακριβή λύση και τα οποία μάλιστα είναι ο κανόνας και όχι η εξαίρεση. Η **διατύπωση κατά Lagrange** είναι χρήσιμη στην ανάπτυξη της θεωρίας πεδίου [1].

Κατά τον 20^{o} αιώνα η Μηχανική του Hamilton διαδραματίζει σημαντικό ρόλο για τους φυσικούς. Έτσι, το 1915 ο Hilbert βασιζόμενος σε αυτήν, θα αποδείξει τις εξισώσεις της Γενικής Σχετικότητας (ο Einstein τις είχε αποδείξει με διαφορετικό τρόπο). Επίσης, το 1920, ο de Broglie θα οδηγηθεί στη διατύπωση μιας θεωρίας των κβάντα, ενώ το 1942 ο Richard Feynman θα επαναδιατυπώσει την Κβαντομηχανική [12].

Κβαντική Μηχανική

Στην Κβαντομηχανική συναντάμε τις έννοιες του δυϊσμού της ακτινοβολίας, δηλαδή τον σωματιδιακό χαρακτήρα της ακτινοβολίας (φωτόνιο) και του δυϊσμού της ύλης, δηλαδή τον κυματικό χαρακτήρα της ύλης (υλικό κύμα, κύμα De Broglie, κυματόδεμα ή κυματοπακέτο). Έτσι για το υλικό κύμα μπορούμε να προσδιορίσουμε μια κυματοσυνάρτηση με την βοήθεια της εξίσωσης Schrödinger. Η κυματοσυνάρτηση εκφράζει ένα κύμα πιθανότητας, της οποία το τετράγωνο της απόλυτης τιμής $|\Psi|^2$ δίνει την πυκνότητα της πιθανότητας να βρεθεί ένα σύστημα σε μια περιοχή του χώρου [5, 6].

Σε κάθε μετρήσιμο φυσικό μέγεθος A (π.χ. θέση, ταχύτητα, ορμή, ενέργεια, κ.λπ.) ενός φυσικού συστήματος αντιστοιχεί ένας ερμιτιανός τελεστής $\hat{A}$.Οι ερμιτιανοί τελεστές συνδέονται μεταξύ τους με τις ίδιες σχέσεις που συνδέουν και τα αντίστοιχα μεγέθη της κλασική φυσικής. Οι τιμές που μπορεί να πάρει ένα φυσικό μέγεθος είναι οι ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή.

Οι περισσότερο χρησιμοποιούμενοι τελεστές στη Κβαντομηχανική που αντιστοιχούν σε φυσικά μεγέθη μπορούν να εκφραστούν ως συνάρτηση των τελεστών θέσεως και ορμής (χώρος των φάσεων) των σωματιδίων που απαρτίζουν το σύστημα.

Οι τελεστές ορίζονται έτσι ώστε αν δράσουν στην απλούστερη δυνατή λύση της εξισώσεως του Schrödinger, δηλαδή σε ένα επίπεδο κύμα

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\exp\left(i\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t\right)\right)=e^{i\left(k_x x+k_y y+k_z z-\omega t\right)}, \qquad (10.27)$$

να δίνουν ιδιοτιμές που συμπίπτουν με τις τιμές των αντίστοιχων φυσικών μεγεθών.

Με την βοήθεια της αντιστοιχίας φυσικών μεγεθών και τελεστών μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση του Schrödinger για κάθε φυσικό σύστημα του μικροκόσμου, ακόμα και εάν αυτό είναι πολύπλοκο και αποτελείται από πολλά σωματίδια (κανονική κβάντωση). Επομένως η εξίσωση του Schrödinger προκύπτει ως εξής [6]:

Στην κλασική μηχανική η Χαμιλτώνειος H ενός φυσικού συστήματος είναι μια συνάρτηση που δίνει την ολική ενέργεια συστήματος (όταν το σύστημα είναι ολόνομο, η συνάρτηση Lagrange δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από το χρόνο, το σύστημα είναι σκληρόνομο και το δυναμικό ανεξάρτητο των γενικευμένων ταχυτήτων). Επομένως, αν ο Χαμιλτώνειος τελεστής $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$ επιδράσει στην κυματοσυνάρτηση Ψ του συστήματος, πρέπει να δώσει το ίδιο αποτέλεσμα που δίνει ο τελεστής $\hat{E}$ της ενέργειας αν δράσει στην ίδια κυματοσυνάρτηση. Δηλαδή, πρέπει να είναι:

$$\hat{H}\Psi=\hat{E}\Psi \quad \text{ή} \quad \left(\hat{T}+\hat{V}\right)\Psi=\hat{E}\Psi. \qquad (10.28)$$

Εκφράζουμε την κλασική κινητική ενέργεια T και την κλασική δυναμική ενέργεια V του συστήματος συναρτήσει των συντεταγμένων (x,y,z) και των συνιστωσών της ορμής (p_x,p_y,p_z) των σωματιδίων του συστήματος. Στη συνέχεια λαμβάνουμε τις εκφράσεις των αντίστοιχων τελεστών $\hat{T}$ και $\hat{V}$ με αντικατάσταση των συντεταγμένων και συνιστωσών της ορμής με τους αντίστοιχους τελεστές.

Τέλος αν αντικαταστήσουμε στην (10.28) τους τελεστές $\hat{T}$, $\hat{V}$ και $\hat{E}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$ προκύπτει η εξίσωση του Schrödinger του φυσικού συστήματος που μελετάμε.

Κλασική Στατιστική Μηχανική

Στην παράγραφο 10.8 αναφερθήκαμε στο θεώρημα Liouville και την εφαρμογή του στη Στατιστική Φυσική. Θεωρούμε μια ορισμένη χρονική στιγμή ένα σύνολο σημείων του χώρου των φάσεων. Τα σημεία αυτά παριστάνουν ένα σύνολο πιθανών αρχικών συνθηκών ενός συστήματος, ή ισοδύναμα μπορεί να ληφθούν ως αντιπροσωπευτικά σημεία ενός συνόλου ομοίων συστημάτων (δηλαδή συστημάτων που χαρακτηρίζονται από την ίδια συνάρτηση Hamilton H) που δεν αλληλεπιδρούν [1].

Τα σημεία αυτά ορίζουν ένα στατιστικό σύνολο, όπως π.χ. το σύνολο των μορίων ενός αερίου σε δοθέντα όγκο. Σε κάθε ***στοιχειώδη όγκο*** dV του φασικού χώρου μπορούμε να αντιστοιχήσουμε ως ***«μάζα»*** dμ τον αριθμό των συστημάτων, που τα αντιπροσωπευτικά τους σημεία, περιέχονται στον όγκο dV και ως **πυκνότητα** του στατιστικού συνόλου την $\rho(q,p,t)={}^{d\mu}\!/\!_{dV}$. Με την μεταβολή του χρόνου ο στοιχειώδης όγκος κινείται και αλλάζει μορφή, αλλά σύμφωνα με το θεώρημα του Liouville το μέτρο του παραμένει σταθερό. Επίσης ο αριθμός των αντιπροσωπευτικών σημείων παραμένει σταθερός, δηλαδή το μέτρο του dμ παραμένει σταθερό. Πράγματι ένα σημείο που βρίσκεται αρχικά μέσα στον όγκο, ή έξω από τον όγκο dV, για να εξέλθει, ή για να εισέλθει αντίστοιχα, πρέπει να διαπεράσει την επιφάνεια που περιβάλλει τον όγκο dV, δηλαδή να συμπέσει μια χρονική στιγμή με σημείο που να αντιπροσωπεύει άλλη κατάσταση (διαφορετικές αρχικές συνθήκες). Αυτό δεν είναι δυνατό, διότι η κίνηση ενός συστήματος καθορίζεται μονοσήμαντα από τη θέση του αντιπροσωπευτικού του σημείου σε δοσμένη χρονική στιγμή [1]. Άρα, για την πυκνότητα του στατιστικού συνόλου έχουμε:

$$\rho(q,p,t)=\frac{d\mu}{dV}=\sigma\tau\alpha\theta. \;,\quad \acute{\eta}\quad \frac{d\rho}{dt}=0 \quad \acute{\eta} \quad \frac{\partial\rho}{\partial t}+[\rho,H]=0 \qquad (10.29)$$

Έτσι έχουμε μια άλλη διατύπωση του θεωρήματος Liouville, προσφορότερη στην Στατιστική Μηχανική: «η πυκνότητα ενός στατιστικού συνόλου είναι ένα ολοκλήρωμα της κινήσεως». Έτσι, π.χ. οποιαδήποτε συνάρτηση της ενέργειας ενός διατηρητικού συστήματος μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως πυκνότητα του στατιστικού συνόλου.

Η **στατιστική μηχανική** αποτελεί τη σύνθεση της Νευτώνειας μηχανικής (στη Χαμιλτονιανή της μορφή) και της θεωρίας πιθανοτήτων. Αναπτύχθηκε προκειμένου να προσφέρει μία μικροσκοπική εξήγηση των νόμων της θερμοδυναμικής, οι οποίοι εμφανίζονται στο μακροσκοπικό επίπεδο. Τόσο επειδή περιέχει την έννοια της πιθανότητας, όσο και γιατί ενσωματώνει τη διάκριση μεταξύ μικροσκοπικού και μακροσκοπικού επιπέδου παρατήρησης αποτελεί την πιο κατάλληλη θεωρία της κλασικής φυσικής να συγκριθεί με την κβαντική μηχανική [4, 9].

Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα N σωματιδίων όπου N μεγάλος αριθμός. Τα σωμάτια αυτά χαρακτηρίζονται από τον καταστατικό χώρο $\Gamma = R^{6N}$. Σ’ αυτό το σύστημα των N σωματιδίων κάνουμε μετρήσεις διαφόρων φυσικών ποσοτήτων. Σε μία αιτιοκρατική θεωρία, αν ξέρουμε πλήρως την αρχική κατάσταση του συστήματος (και τη δυναμική του) θα μπορούσαμε να προσδιορίσουμε πλήρως και μοναδικά το αποτέλεσμα κάθε μέτρησης. Αλλά, είτε επειδή η πλήρης γνώση της αρχικής κατάστασης του συστήματος στο μικροσκοπικό επίπεδο είναι πρακτικά αδύνατη, είτε επειδή το σύστημα πάντα δέχεται μικρές εξωτερικές αλληλεπιδράσεις που σωρευτικά καταστρέφουν την πλήρη αιτιοκρατία, το αποτέλεσμα των μετρήσεων θα υπόκεινται σε διακυμάνσεις. Αυτό σημαίνει ότι μία φυσική μέτρηση μπορεί να ταυτιστεί με ένα πείραμα τύχης [4, 9].

Επιπλέον, στην κλασική φυσική δεν υπάρχει περιορισμός στο πόσο ακριβής μπορεί να είναι μία μέτρηση, οπότε ιδεατά θα μπορούσε κανείς να προσδιορίσει τη θέση και την ορμή του κάθε σωματιδίου με οσοδήποτε μεγάλη ακρίβεια. Αυτό σημαίνει ότι τα σημεία του Γ αποτελούν τα λεπτομερή ενδεχόμενα για αυτό το σύστημα, άρα είναι λογικό να ταυτιστεί ο **καταστατικός χώρος** με το **δειγματικό χώρο** που αντιστοιχεί στις παραπάνω μετρήσεις. Στα πλαίσια αυτής της ταύτισης, έχει επικρατήσει η χρήση της λέξης ”μικροκατάσταση” για τα σημεία του Γ, δηλαδή για τα λεπτομερή ενδεχόμενα. Εξ ορισμού δύο μικροκαταστάσεις είναι αμοιβαία αποκλειόμενες (για μία δεδομένη χρονική στιγμή): δεν μπορεί, για παράδειγμα, ένα μόριο να έχει ορμή 5m/s και ταυτόχρονα το ίδιο μόριο να έχει ορμή 10m/s. Έχουμε λοιπόν τις ακόλουθες ταυτίσεις εννοιών (μέτρηση = πείραμα τύχης), (καταστατικός χώρος = δειγματικός χώρος), (μικροκατάσταση = λεπτομερές ενδεχόμενο) [4,9].

Θεωρία πεδίου (κλασική θεωρία πεδίου - κβαντική θεωρία πεδίου)

Μια κλασσική θεωρία πεδίων είναι μια φυσική θεωρία που προβλέπει πώς ένα ή περισσότερα φυσικά πεδία αλληλεπιδρούν με την ύλη μέσω εξισώσεων πεδίων. Ο όρος «**κλασσική θεωρία πεδίων**» συνήθως προορίζεται για την περιγραφή εκείνων των φυσικών θεωριών που περιγράφουν τον ηλεκτρομαγνητισμό και τη βαρύτητα, δύο από τις θεμελιώδεις δυνάμεις της φύσης. Οι θεωρίες που ενσωματώνουν την κβαντική μηχανική ονομάζονται «**κβαντικές θεωρίες πεδίου**» [15].

Ένα φυσικό πεδίο μπορεί να θεωρηθεί ως η αντιστοίχιση μιας φυσικής ποσότητας σε κάθε σημείο του χώρου και του χρόνου. Για παράδειγμα, σε μια πρόγνωση καιρού, η ταχύτητα του ανέμου κατά τη διάρκεια μιας ημέρας σε μια χώρα περιγράφεται αντιστοιχίζοντας ένα διάνυσμα σε κάθε σημείο του χώρου. Κάθε διάνυσμα αντιπροσωπεύει την κατεύθυνση της κίνησης του αέρα σε αυτό το σημείο, έτσι ώστε το σύνολο όλων των διανυσμάτων του ανέμου σε μια περιοχή σε μια δεδομένη χρονική στιγμή να αποτελεί ένα διανυσματικό πεδίο. Καθώς η ημέρα εξελίσσεται, οι κατευθύνσεις των διανυσμάτων αλλάζουν καθώς αλλάζουν οι κατευθύνσεις του ανέμου.

Οι κλασσικές θεωρίες πεδίου συνήθως κατηγοριοποιούνται ως *μη σχετικιστικές* και *σχετικιστικές*. Οι πρώτες θεωρίες πεδίου, η Νευτώνεια βαρύτητα και οι εξισώσεις Maxwell για τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία αναπτύχθηκαν στην κλασική φυσική πριν από την έλευση της θεωρίας της σχετικότητας το 1905 και έπρεπε να αναθεωρηθούν για να είναι συνεπείς με αυτή τη θεωρία. Οι σύγχρονες θεωρίες πεδίων εκφράζονται συνήθως με τη χρήση της τανυστικής ανάλυσης. Ένας πιο πρόσφατος εναλλακτικός μαθηματικός φορμαλισμός περιγράφει τα κλασικά πεδία ως τμήματα μαθηματικών αντικειμένων που ονομάζονται δέσμες ινών [15].

Παραδείγματος χάριν [14]:

Έστω μια ελαστική ράβδο σταθερού μήκους ℓ, που υφίσταται μικρές διαμήκεις δονήσεις. Η συνεχής ράβδος μπορεί να προσεγγιστεί με ένα σύνολο διακεκριμένων συντεταγμένων που αντιπροσωπεύει μία μακρά αλυσίδα από n ίσης μάζας σωματίδια σε απόσταση α μεταξύ τους διαχωρισμένα και συνδεδεμένα με ομοιόμορφα άκαμπτα ελατήρια που έχουν σταθερές k. Η μετατόπιση κάθε σωματιδίου από τη θέση ισορροπίας δίνεται από την συνάρτηση φ και όταν $\alpha \to 0$, $n \to \infty$. Επίσης είναι $\ell = (n+1)\alpha$, ενώ οι $\mu = m/\alpha$ και $Y = k\alpha$ είναι σταθερές. Έτσι, θεωρώντας ως γενικευμένη συντεταγμένη το πεδίο φ=φ(x,t) μπορούμε για ένα συνεχές σύστημα να κατασκευάσουμε την συνάρτηση του Lagrange ως το ολοκλήρωμα επί της x, της πυκνότητα του Lagrange ($\mathcal{L}$):

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\mu\dot{\phi} - \frac{1}{2}Y\left(\partial_x \phi\right)^2 . \tag{10.30}$$

Δηλαδή η συνάρτηση του Lagrange είναι $L = \int_0^\ell \mathcal{L}\, dx$. Γενικεύοντας, η συνάρτηση του Lagrange μπορεί να είναι μια συνάρτηση της $\phi(x,t)$ και των πρώτων τάξεως παραγώγων της ως προς t και x, $\dot{\phi}(x,t), \partial_x \phi(x,t)$. Στη θεωρία πεδίων συνηθίζεται να καλούμε την πυκνότητα της συνάρτησης του Lagrange ως συνάρτηση του Lagrange. Έτσι η δράση για το σύστημα γράφεται ως ένα ολοκλήρωμα στο χώρο και στο χρόνο

$$S\left[\phi(x,t)\right] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^\ell dx\, \mathcal{L}\left(\phi(x,t), \dot{\phi}(x,t), \partial_x \phi(x,t)\right). \tag{10.31}$$

Οι σύγχρονες διατυπώσεις των κλασικών θεωριών πεδίου απαιτούν γενικά τη «συναλλοιωτότητα κατά Lorentz (covariance Lorentz)» (η «συναλλοιωτότητα κατά Lorentz» είναι μια ιδιότητα της χωροχρονικής πολλαπλότητας και συσχετίζεται με την συμμετρία Lorentz, δηλαδή ότι οι νόμοι της φυσικής παραμένουν οι ίδιοι για όλους τους παρατηρητές που κινούνται σε σχέση με τον άλλον κινούμενοι σε κάποιο αδρανειακό σύστημα αναφοράς), καθώς αυτό αναγνωρίζεται πλέον ως θεμελιώδης πτυχή της φύσης. Μια θεωρία πεδίου συνηθίζεται να εκφράζεται μαθηματικά με τη χρήση της συνάρτησης Lagrange. Αυτή είναι μια συνάρτηση που όταν υπόκειται σε μια αρχή δράσης, δημιουργεί τις εξισώσεις πεδίων και έναν νόμο διατήρησης της θεωρίας. Από την δράση μπορούν εύκολα να εξαχθούν οι εξισώσεις πεδίου και οι συμμετρίες. Χρησιμοποιούμε μονάδες έτσι ώστε η ταχύτητα του φωτός στο κενό να είναι 1, δηλ. C = 1 [15].

Δοσμένου ενός τανυστικού πεδίου φ , μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα βαθμωτό μέγεθος, δηλαδή την πυκνότητας του Lagrange ($\mathcal{L}$), από την φ και τις παραγώγους της:

$$\mathcal{L}\left(\phi, \dot{\phi}, \partial_x \phi, \partial_{xx}\phi, \ldots, x\right). \tag{10.32}$$

Από την πυκνότητα αυτή μπορεί να κατασκευαστεί η δράση ολοκληρώνοντας στο χωροχρόνο.

$$S = \int \mathcal{L}\sqrt{-g}\, d^4x , \tag{10.33}$$

όπου $\sqrt{-g}$ είναι η «Ιακωβιανή» στο καμπύλο χωροχρόνο $g \equiv det\left(g_{\mu\nu}\right)$. Από την αρχή ελάχιστης δράσης προκύπτουν οι εξισώσεις Euler-Lagrange

$$\frac{\delta S}{\delta \phi}=\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \phi}-\partial_{\mu}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\partial_{\mu}\phi\right)}\right)+\ldots+\left(-1\right)^{m}\partial_{\mu_1}\partial_{\mu_2}\ldots\partial_{\mu_{m-1}}\partial_{\mu_m}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\partial_{\mu_1}\partial_{\mu_2}\ldots\partial_{\mu_{m-1}}\partial_{\mu_m}\phi\right)}\right). \quad (10.34)$$

Όπως αναφέραμε, στις θεωρίες πεδίου εξετάζουμε πως μπορούμε να περιγράψουμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των θεμελιωδών πεδίων. Για την κβαντική θεωρία πεδίου οι αλληλεπιδράσεις υπαγορεύονται από τις ονομαζόμενες τοπικές συμμετρίες βαθμίδας. Οι συμμετρίες αυτές συνδέονται με την απαίτηση οι διατηρούμενες ποσότητες (π.χ. ηλεκτρικό φορτίο χρώμα κ.λπ.) να διατηρούνται τοπικά και όχι μόνο εκτεταμένα [7].

Η σύνδεση ανάμεσα σε συμμετρίες και νόμους διατήρησης (Θεώρημα Noether) μπορεί να συζητηθεί με τον καλύτερο τρόπο στο πλαίσιο της Λαγκρανζιανής διατύπωσης της θεωρίας πεδίου. Η Λαγκρανζιανή διατύπωση βοηθά στη κατανόησή μας για τις αλληλεπιδράσεις και τις συμμετρίες. Στη κλασική φυσική η βάση της Λαγκρανζιανής διατύπωσης είναι η «αρχή της ελάχιστης δράσης». Το ίδιο ισχύει και στην κβαντική θεωρία πεδίου, όπου ο φορμαλισμός του Feynman με τα τροχιακά ολοκληρώματα συνδέεται στενά με την αρχή της ελάχιστης δράσης της κλασικής θεωρίας πεδίου [7].

Μοριακή Δυναμική

Με την μέθοδο της μοριακής δυναμικής και των προσομοιώσεων στον ηλεκτρονικό υπολογιστή είναι δυνατή η μελέτη μακροσκοπικών (παρατηρήσιμων) και μικροσκοπικών καταστάσεων ενός συστήματος μέσω μιας μικροσκοπικής ανάλυσης που βασίζεται στην περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μορίων/ατόμων του συστήματος. Οι διάφορες μέθοδοι της μοριακής δυναμικής χαρακτηρίζονται από τον τρόπο προσδιορισμού της ολικής ενέργειας του συστήματος που μπορεί να γίνει είτε με την κλασική είτε με την κβαντική φυσική [8].

Έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε μακροσκοπικές ιδιότητες ενός συστήματος όπως η θερμοκρασία, η πίεσης, η συνάρτηση κατανομής των ατόμων, κ.λπ. ή να υπολογίσουμε τις μικροσκοπικές ιδιότητες ενός συστήματος όπως οι ιδιότητες των δεσμών μεταξύ των ατόμων, η γεωμετρική δομή μια ομάδας πεπερασμένου αριθμού ατόμων (cluster), κ.λπ. Άλλο παράδειγμα είναι ο υπολογισμός της δομής των ηλεκτρονιακών ζωνών κρυσταλλικών συστημάτων.

Για ένα σύστημα N σωματιδίων η συνάρτηση Hamilton είναι [9]

$$H=E_K+E_\Delta=\sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i}+\sum_{i>j=1}^{N}V\left(\mathbf{r}_{ij}\right)+\sum_{i=1}^{N}U\left(\mathbf{r}_i\right), \quad (10.35)$$

όπου E_K και E_Δ είναι η κινητική (μεταφορική, περιστροφική, λόγω δόνησης) και δυναμική ενέργεια του συστήματος αντιστοίχως, ενώ m_i , $\mathbf{r}_i$ και $\mathbf{p}_i$ είναι η μάζα, το διάνυσμα θέσεως και η ορμή του i-στου σωματιδίου. Επιπροσθέτως, $V\left(\mathbf{r}_{ij}\right)$ και

$U(\mathbf{r}_i)$ είναι η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων και η εξωτερική δυναμική ενέργεια. Από τις εξισώσεις του Hamilton έχουμε ότι

$$\dot{\mathbf{r}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \quad \text{και} \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i} = \mathbf{f}_i \ . \tag{10.36}$$

Η δύναμη $\mathbf{f}_i$ δίδεται ως

$$\mathbf{f}_i = -\sum_{j \neq i}^{N} \nabla_i V(\mathbf{r}_{ij}) - \nabla_i U(\mathbf{r}_i) . \tag{10.37}$$

Ο καθορισμός των δυνάμεων μας επιτρέπει να παρακολουθήσουμε την εξέλιξη του συστήματος (αφού μπορούμε να γνωρίζουμε επιτάχυνση, ταχύτητα, θέση κάθε σωματιδίου για κάθε χρονική στιγμή) και χρησιμοποιώντας τους νόμους της στατιστικής φυσικής να περιγράψουμε επιτρεπτές καταστάσεις φυσικής ισορροπίας και να υπολογίσουμε διάφορες φυσικές ιδιότητες.

Ουράνια Μηχανική

Η Ουράνια Μηχανική αποτελεί έναν από τους βασικούς κλάδους της Αστρονομίας. Κύριο αντικείμενο έρευνας και μελέτης είναι οι φυσικοί νόμοι επί των οποίων βασίζονται οι κινήσεις των ουρανίων σωμάτων και οι τροχιές τους εξετάζοντας την κινηματική και δυναμική αυτών.

Κατά την μελέτη ενός συστήματος αλληλεπιδρώντων σωμάτων, βασικός παράγοντας που καθορίζει τη δυσκολία της μελέτης είναι ο αριθμός των σωμάτων που το συνιστούν. Το απλούστερο πρόβλημα, για το οποίο έχει βρεθεί αναλυτική λύση, είναι το πρόβλημα δύο αλληλεπιδρώντων σωμάτων με αμοιβαίες βαρυτικές δυνάμεις. Παρόλα αυτά το πρόβλημα των τριών σωμάτων, έχει λυθεί μόνον αριθμητικά. Μία απλοποιημένη μορφή του προβλήματος των τριών σωμάτων είναι γνωστή ως «Το Περιορισμένο Πρόβλημα των Τριών Σωμάτων».

Στην απλοποιημένη αυτή μορφή μελετάται η κίνηση του τρίτου σώματος, το οποίο θεωρείται ότι έχει αμελητέα μάζα σε σχέση με αυτή των άλλων δύο, με αποτέλεσμα ενώ κινείται στο πεδίο τους δεν επηρεάζει την κίνησή τους. Ως παράδειγμα τέτοιου προβλήματος είναι το σύστημα Γη – Σελήνη ως τα δύο σώματα σημαντικής μάζας και ένα τρίτο σώμα αμελητέας μάζας [16, 17].

Επομένως κατά τη μελέτη του συστήματος, τα δύο σώματα θα έχουν καθορισμένες τροχιές (που υπαγορεύονται από την μεταξύ τους αλληλεπίδραση, πρόβλημα των δύο σωμάτων), ενώ η κίνηση του τρίτου θα δίνεται από τη λύση της διαφορικής εξίσωσης του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα $m\gamma = \mathbf{F}$, όπου $\mathbf{F}$ είναι η συνολική δύναμη που δέχεται το σώμα αμελητέας μάζας από τα άλλα δύο.

Χρησιμοποιώντας το ολοκλήρωμα του Jacobi μπορεί να γίνει η ποιοτική μελέτη του περιορισμένου προβλήματος των τριών σωμάτων. Έτσι με την βοήθεια του ολοκληρώματος Jacobi κατασκευάζονται οι ισοδυναμικές καμπύλες του συστήματος για αντιπροσωπευτικές ενέργειες και με τη βοήθεια αυτών βρίσκονται οι περιοχές στις οποίες μπορεί να κινείται το σώμα, ενώ στη συνέχεια μπορεί να γίνει η μελέτη των σημείων ισορροπίας του συστήματος.

Η δυναμική του Hamilton και οι κανονικοί μετασχηματισμοί μπορούν να εφαρμοστούν στο χώρο των φάσεων και στον εκτεταμένο χώρο των φάσεων για το περιορισμένο πρόβλημα των τριών σωμάτων. Επιλέγοντας κατάλληλο περιστρεφόμενο σύστημα μπορούμε να οδηγηθούμε στον ορισμό ενός ολοκληρώματος κίνησης. Αυτό επιτυγχάνεται με έναν κανονικό μετασχηματισμό από το αδρανειακό στο περιστρεφόμενο σύστημα, ο οποίος εξαλείφει την εκπεφρασμένη παρουσία του χρόνου στην έκφραση της συνάρτησης του Hamilton και τελικά μετατρέπει την συνάρτηση σε ολοκλήρωμα της κίνησης.

Βιβλιογραφία

1. «Θεωρητική Μηχανική. Μαθήματα Αναλυτικής Μηχανικής», Γ. Κατσιάρης, Πάτρα 1994.
2. «Classical_Mechanics», H.Goldstein, C.Poole, J. Safko, 3ed 2000.
3. «A Treatise on Analytical Dynamics», L. A. Pars, HEB, 1968.
4. «Κβαντική Μηχανική», Χ. Αναστόπουλος.
5. «Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική», Ι. Ανδριτσόπουλος, 1984.
6. «Κβαντομηχανική», Χ. Γεωργαλάς, 2012.
7. «Σωματιδιακή Φυσική και Κοσμολογία», Κ. Ε. Βαγιονάκη, 1997.
8. “Υπολογιστική Φυσική”, Α. Ανδριώτη, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
9. «An Introduction to Computational Physics», Tao Pang, Cambridge University Press.
10. https://eclass.upatras.gr/modules/document/file.php/PHY1946/quantum_book.pdf.
11. https://el.wikipedia.org/wiki/Λογισμός των μεταβολών.
12. http://users.sch.gr/kassetas/zzzzzzzzzzPrinscipeACTION.htm.
13. http://users.uoa.gr/~pjioannou/mech2/BIBLIO/ch3.pdf.
14. https://www.nikhef.nl/~t45/ftip/Ch01-1.pdf.
15. https://en.wikipedia.org/wiki/Classical_field_theory.
16. http://users.auth.gr/~voyatzis/SeniorThesis/pAntwniadou.pdf.
17. http://users.auth.gr/~voyatzis/SeniorThesis/pAntwniadis.pdf.