13.02.04.
§16

Статический случай

$\underline{d}$ — дипольный момент:

$$\underline{d} = \sum_a e_a \underline{r}_a ;$$

$$\underline{r}_a \to \underline{r}_a' = \underline{r}_a + \underline{b} \Rightarrow \underline{d} \to \underline{d}' = \sum_a e_a \underline{r}_a' = \sum_a e_a \underline{r}_a + \sum_a e_a \cdot \underline{b}$$

$\varphi(r) = \frac{Q}{r} + \frac{dr}{r^3} + \ldots$ — скалярный потенциал (разложение в ряд Тейлора по степеням $\frac{1}{r}$).

Заметим, что если $Q \neq 0$ $(\sum_a e_a)$, то введение дипольного момента теряет смысл, т.к. он начинает зависеть от выбора начала координат

Стационарный случай

Все динамические переменные в финитном случае ограничены, поэтому:

$$\bar{B}(\underline{r},t) = \overline{\left(\frac{\partial B}{\partial t}\right)} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt\, A(\underline{r},t) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt \frac{\partial B}{\partial t} =$$

$= \lim \frac{B(T)-B(-T)}{2T} = 0$, где среднее значение $\bar{A}(\underline{r}) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt A(\underline{r},t)$ физической величины.

Магнитный момент определяется так:

$$m_\lambda = \frac{1}{2c} \int dV' [\underline{r}', \underline{j}]_\lambda ;$$

$\underline{j}(\underline{r}') = \sum_a \delta(\underline{r}' - \underline{r}_a) e_a \dot{\underline{r}}_a$ — определение плотности тока.

Интегрирование с помощью δ-функции Дирака:

$\int dy f(y) \delta(x-y) = f(x)$, где f — непрерывная

Утверждение: $x\delta(x) = 0$: $\int dx f(x) \cdot x \cdot \delta(x) = 0$,

ибо ~~$\int dy f(y) \delta(x-y) =$~~

$$\int dx f(x) \cdot x \cdot \delta(y-x) \stackrel{?}{=} x f(x) \xrightarrow[x\to 0]{} 0.$$

δ-ф-ция сложного аргумента:

$$\int \delta(\varphi(x)) f(x)\,dx = \int \delta(y) f(x(y))\,dy \cdot \underbrace{\frac{dx}{dy}}_{\text{якобиан}} = \sum_k \frac{f(x_k)}{|\varphi'(x_k)|}$$

$y=0 \Leftrightarrow \varphi(x)=0 \Rightarrow x = x_k$ — корень

Механический момент: $\underline{l}_\alpha = [\underline{p}_\alpha, \underline{r}_\alpha]$; $\underline{p}_\alpha = m_\alpha \dot{\underline{r}}_\alpha$

$$A_\alpha(\underline{r}) = \frac{1}{2c}\cdot \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \cdot \varepsilon_{\alpha\lambda\beta}\cdot \frac{r_\beta}{r^3}\int dV' [\underline{r}', \underline{j}]_\lambda = \varepsilon_{\alpha\lambda\beta}\cdot\frac{r_\beta}{r^3}\cdot \underbrace{\frac{1}{2c}\sum_a [\underline{r}_a\, e_a \dot{\underline{r}}_a]_\lambda}_{m_\lambda};$$

отсюда связь механического и магнитного момента:

$$\underline{m}_a = \frac{e_a}{2cm_a}\underline{l}_a$$ — гиромагнитное соотношение.

Динамический случай

$A_i = \{A, i\varphi\}$, $r_i = \{\underline{r}, ict\}$; $j_i = \{\underline{j}, ic\rho\}$.

Выпишем уравнения Максвелла в 4-мерной форме:

$$\frac{\partial^2 A_k}{\partial r_i \partial r_k} - \frac{\partial^2 A_i}{\partial r_k^2} = \frac{4\pi}{c} j_i,$$

причем при замене вида $A_k \to A_k' = A_k + \frac{\partial f}{\partial r_k}$ ничего в природе вещей не изменяется.

Перепишем уравнение Максвелла в виде системы:

$$\begin{cases} -\dfrac{\partial^2 A_i}{\partial r_k^2} = \dfrac{4\pi}{c} j_i \\ \dfrac{\partial A_k}{\partial r_k} = 0 \end{cases}$$

Применим преобразование Фурье:

$A_i(r) = (2\pi)^{-4}\cdot\frac{1}{c}\int d^4k\, e^{ik_i r_i} A_i(k)$, $k = \{\underline{k}, i\frac{\omega}{c}\}$,

$k_k A_k(k) = 0$, $k_k^2 A_i(k) = \frac{4\pi}{c} j_i(k)$

1. Случай свободного поля: $j_i = 0$. Добавим к A 4-градиент: $A_k \to A_k'' = A_k + \frac{\partial g}{\partial r_k}$, потребуем: $\partial_c^2 g = 0$ (свободное волновое уравнение). При замене условие Лоренца: $\frac{\partial A_k}{\partial r_k} + \underbrace{\frac{\partial^2 g}{\partial r_k^2}}_{=0} = 0$ не меняется.

$$\begin{cases} A_4 = 0, \ \underline{k}\,\underline{A} = 0 \\ (k_4^2 + \underline{k}^2)\underline{A} = 0 \Rightarrow \underline{A}(k) = \delta(k_4^2 + \underline{k}^2)\underbrace{\underline{E}(k)} \end{cases}$$

$$\underline{A}(\underline{r},t) = (2\pi)^{-4}\cdot\frac{1}{c}\int d\omega\, d^3k \cdot e^{i(\underline{k}\underline{r}-\omega t)}\cdot$$ | произвольная ф-ция.

$\cdot\delta\left(-\frac{\omega^2}{c^2} + \underline{k}^2\right)\underline{E}(k)$, возьмем интеграл при помощи формулы „$\delta(\varphi(t))$":

$$-\frac{\omega^2}{c^2} + \underline{k}^2 = 0 \Rightarrow \omega = \pm ck;$$

$$\left|\frac{d}{d\omega}\left(\underline{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right)\right| = \frac{2\omega}{c^2} = \frac{2k}{c}, \quad k = |\underline{k}|$$

$$A(\underline{r},t) = (2\pi)^{-4}\frac{1}{2k}\int d\underline{k}\left\{e^{i(\underline{k}\underline{r}-ckt)}\underline{E}(ck,\underline{k}) + e^{i(\underline{k}\underline{r}+ckt)}\underline{E}(-ck,\underline{k})\right\} =$$

$$= (2\pi)^{-4}\cancel{\tfrac{1}{2k}}\int\frac{d\underline{k}}{2k}\left\{e^{i(\underline{k}\underline{r}-ckt)}\underline{F}^{\oplus}(k) + e^{i(\underline{k}\underline{r}+ckt)}\underline{F}^{\ominus}(k)\right\}.$$

Вектор-потенциал обязан быть вещественным, ибо он есть наблюдаемая величина. Условие вещественности:

$$\underline{F}^{\pm}(-k) = (\underline{F}^{\pm}(k))^*. \ [dk \to -dk = d(-k)]$$

[Стандартный прием решения дифференциальных уравнений 2-го порядка — преобразование Фурье. Поскольку для свободного поля решение уравнений Максвелла возможно лишь в обобщенных функциях, мы использовали свойства δ-ф-ции, и, найдя корни аргумента и подставив их в исходное выражение.]

~~$A(\underline{r},t)\int$~~

$$A(\underline{r},t) = (2\pi)^{-4}\cdot\int\frac{d\underline{k}}{2k}\left\{e^{-ickt+\underline{k}\underline{r}}\underline{F}(\underline{k}) + e^{ickt-\underline{k}\underline{r}}\underline{F}^*(\underline{k})\right\}$$

Вспомним определение напряженности:

$$\underline{E} = -\frac{\partial A}{\partial t} = \left\{\frac{\partial}{\partial t}\text{ под знаком „}\int\text{"}\right\} = i\cdot(2\pi)^{-4}\cdot\int\frac{d\underline{k}}{2k}ck\left\{\exp\ldots\cdot\underline{F} - \exp\ldots\cdot F^*\right\} -$$

напряженность электрического поля.

$$\underline{H} = \operatorname{rot}\underline{A} \overset{?}{=} \text{„grad"}\times A = (2\pi)^{-4}ic\int\frac{d\underline{k}}{2k}\cdot c\cdot[\underline{k},\{\exp\cdot F - \exp\cdot \underline{F}^*]$$

С другой стороны, $\underline{E} = (2\pi)^{-4}\int \frac{d\underline{k}}{2\underline{k}}\cdot c\exp\cdot E(k)$, $\quad (\underline{E}(k))$

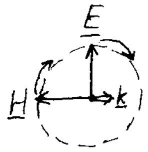
Fourier → $\quad \underline{H} = (2\pi)^{-4}\int \frac{d\underline{k}}{2k}\, c\cdot\exp\cdot \quad \ldots \quad (\underline{H}(k))$

Итак, $\underline{H}(\underline{k}) = [\underline{k}, \underline{E}(\underline{k})]\cdot\frac{1}{k}$, — компоненты Фурье векторов $E(k)$, $H(k)$ перпендикулярны.

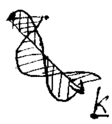
$\underline{k}\,\underline{E}(\underline{k}) = 0$

— $\underline{E}\perp\underline{k}$, $\underline{k}$ — волновой вектор.

Вывод: можно составить схему распространения электромагнитной волны:



— вращение — это ЭМВ с круговой поляризацией



— ЭМВ с плоской поляризацией (предельный случай вращения — колебание в плоскости)

$\varepsilon = \int d\underline{r}\,\frac{\underline{E}^2(\underline{r}) + \underline{H}^2(\underline{r})}{4\pi}$ — энергия волны (плотность энергии)

$\underline{P} = c\cdot\int d\underline{r}\cdot\frac{[\underline{E},\underline{H}]}{4\pi}$ — импульс волны, $\underline{P} = \underline{k}$.

19 в.: Максвелл выяснил, что траектория свободной ЭМВ есть геометрическая. Выяснено, что эта траектория такова, что $S = \min$.

Если молекула нейтральна, то: $\varphi = \frac{\underline{d}\,\underline{r}}{r^3}$ (на больших расстояниях); $\underline{E} = -\nabla\varphi$; $\underline{E} = \frac{\underline{d}r^2 - 3\underline{r}\,\underline{d}\,\underline{r}}{r^5}$.

20.02.04.
§17

Излучение электромагнитного поля

Запишем урав. Максвелла с условием Лоренца:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial x_k^2} A_i(x) = -\dfrac{4\pi}{c} j_i(x) \\ \dfrac{\partial A_i}{\partial x_i} = 0 \end{cases}$$

$j_i = \sum_a e_a \delta(x - x_a(t)) \times \{\dot{x}_a, ic\}$ — 4-ток

После преобразования Фурье:

$A_i(x) = (2\pi)^{-4} \cdot \frac{1}{i} \cdot \int d^4k e^{ik_ix_i} A_i(k)$; $k = \{\underline{k}, \frac{i\omega}{c}\}$

(для j то же);

$k_j^2 A_i(k) = \frac{4\pi}{c} j_i(k)$ (?) (из обратной формулы для j)

Запишем решение:

$$\left.\begin{array}{l} A_i(x) = \dfrac{4\pi}{c} \cdot \dfrac{1}{i} \displaystyle\int d^4y\, G(x-y) j_i(y) \\ \underset{\text{(ф-ция Грина)}}{G(x-x')} = (2\pi)^{-4} \dfrac{1}{i} \displaystyle\int d^4k \dfrac{1}{k^2} e^{ik_l(x_l - x_l')} \end{array}\right| \Rightarrow \frac{1}{4\pi} \theta(t-t') \frac{1}{|\underline{x}-\underline{x}'|} [\delta(|\underline{x}-\underline{x}'| - c(t-t')) - \underbrace{- \delta(|x-x'| + c(t-t'))}_{=0 \text{ (из-за } \theta)}],$$

где θ — heaviside(x);

В итоге получим интеграл типа интеграла Пуассона:

$A_i(x,t) = \frac{4\pi}{c} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \int d\underline{x}' \frac{j_i(x, t - \frac{|x-x'|}{c})}{|x-x'|}$, где

$j_i\left(x, t - \frac{|x-x'|}{c}\right)$ — запаздывающий потенциал.

Рассматривая систему с большого расстояния:

$A_i(x,t) = \frac{1}{c} \int d\underline{r}' \frac{j_i(\underline{r}', t - \frac{|\underline{R}-\underline{r}'|}{c})}{|\underline{R} - \underline{r}'|}$ (сменили обозначения);

разложим в ряд Тейлора по степеням $\frac{1}{R}$:

$$|\underline{R}-\underline{r}'| = R - \frac{\underline{r}'\underline{R}}{R} + \underline{0} = R - \underline{n}\underline{r}'; \quad \underline{n} = \frac{\underline{R}}{R};$$

$$t - \frac{|\underline{R}-\underline{r}'|}{c} = \frac{1}{c}\{\underbrace{ct-R}_{\sim\lambda\sim cT} + \underbrace{\underline{r}'\underline{n}}_{b} + \underline{0}\},$$ где $(ct-R)$ имеет

при финитном движении размерность длины волны λ;

$\underline{r}'\underline{n}$ — размер системы (обозначим его b).

Имеем в виду, что $R \gg b$. Оставим в разложении знаменателя только главный член. Итак, в главном приближении получим:

$A_4 = 0$ (из условия Лоренца):

$$\underline{A}(\underline{R},t) = \frac{1}{cR}\int d\underline{r}' j(r, t - \frac{R}{c} + \frac{\underline{r}'\underline{n}}{c}). \quad (*)$$

Оценим величину полученного интеграла.

$R \gg b$, $R \gg \lambda$ (λ — характерная длина волны сис-мы) (для процесса в системе)

$$\frac{\partial}{\partial R_\alpha} = -\frac{n_\alpha}{c}\cdot\frac{\partial}{\partial t}$$ (см. формулу $*$)

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial R_\alpha} = 0; \quad \varphi = \underbrace{c\int dt \frac{\partial \underline{A}}{\partial \underline{R}}}_{=0 \text{ (усреднение)}} + \varphi_{кул}$$

По определению, $\underline{E} = -\frac{\partial\varphi}{\partial \underline{R}} - \frac{1}{c}\dot{\underline{A}} \ominus \underline{E}_{кул}$ ~~(из-за усреднения~~

[Определение $\underline{E} = -\frac{\partial\varphi}{\partial \underline{R}} - \frac{1}{c}\dot{\underline{A}}$ происходит из:

$$F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k}; \quad \hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & H_3 & H_2 - iE_1 \\ / & 0 & H_1 - iE_2 \\ & / & 0 - iE_3 \\ & & / \; 0 \end{pmatrix}; \quad F_{14} = \frac{\partial i\varphi}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial ict}$$]

$$\ominus\ \underline{E}_{кул} - c\int dt \underbrace{\underline{\nabla}(\underline{\nabla}\underline{A})} - \frac{1}{c}\dot{A} = \underline{E}_{кул} + c\int dt \,\mathrm{rot}\,\underline{H}$$ — напряженность поля (излучающего) вдали от системы зарядов.

$$= [\nabla\underbrace{[\underline{\nabla}\underline{A}]}_{H}] + \underbrace{\left(\underline{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2}\cdot\frac{1}{c_2}\right)}_{\Box}\underline{A} \quad (**)$$

$$\Box \xrightarrow{R\to\infty} = \underline{j} = \underline{0}$$

В волновой зоне имеет место утверждение:

$$\frac{\partial}{\partial R_\alpha} = -\frac{n_\alpha}{c}\frac{\partial}{\partial t}. \quad (***)$$

Рассмотрим переменную часть φ в волновой зоне:

$$\varphi = \underline{n}\underline{A} \quad (\text{см } ** \text{ и } ***);$$

$$\left.\begin{aligned} \underline{H} &= \frac{1}{c}[\underline{\dot{A}}, \underline{n}] \\ \underline{E} &= [\underline{H}, \underline{n}] \end{aligned}\right\} \quad \underline{H} \perp \underline{E} \perp \underline{R}$$

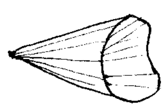
Рассчитаем энергетические параметры:

$\underline{S}$ — плотность потока энергии:

$$\underline{S} = \frac{c}{4\pi}\cdot[\underline{E}, \underline{H}] = \frac{cH^2}{4\pi}\underline{n}$$

Поток энергии через площадь:

$$dJ = \underline{S}\,\underline{n}\,d\Omega\,R^2 = cH^2R^2\frac{d\Omega}{4\pi}$$

 — телесн. угол Ω

Поток энергии:

$$-\frac{d\varepsilon}{dt} = \int \frac{\underline{E}^2 d\Omega}{4\pi}.$$

Запишем мультипольное разложение для $\underline{A}$

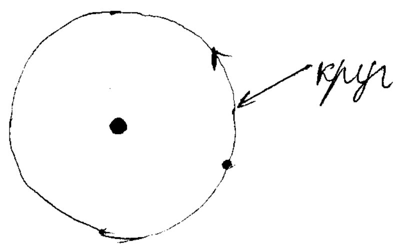
$$A_\alpha = \frac{1}{cR}\Big\{ \underbrace{\dot{d}_\alpha\left(t - \frac{R}{c}\right)}_{\text{главный член}} + \underbrace{[\underline{\dot{m}}\,\underline{n}]_\alpha}_{\text{диполь}} + \underbrace{\frac{1}{2c}\ddot{d}_{\alpha\beta} n_\beta + \ldots}_{\text{квадруполь}} \Big\}$$

$$\underline{H} = \frac{1}{c}[\underline{\dot{A}}, \underline{n}] = \left[\frac{\partial}{\partial R_\alpha} = -\frac{n_\alpha}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right] = \ldots = \frac{1}{c^2R}[\underline{\ddot{d}}\,\underline{n}];$$

Плотность потока энергии: $\underline{S} = \frac{n}{4\pi R^2}\cdot\frac{[\underline{\ddot{d}}\,\underline{n}]}{c^3}$

(для магн. поля).

Оценим время жизни атома водорода в классическом подходе.



(см. II з-н Кеплера)

H·

Вычислим скорость изменения d (дипольного момента).

$\underline{d} = -r_0 e\{\cos\varphi, \sin\varphi, 0\}$; r_0 — боровский радиус.

$r_0 = \frac{Ze^2}{2|\varepsilon|}$, ε — энергия вращения.

$\varphi = \varphi_0 + \omega t$; $\bar{U} = \bar{E} = \frac{Ze^2}{r_0}$;

$\omega^2 = \frac{Ze}{\mu r_0^3}$

$-\frac{d\varepsilon}{dt} = \int dJ = \int \frac{\overline{[\ddot{d}, n]^2}}{c^3} \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{\ddot{d}^2 - (\ddot{d}n)^2}{c^3} =$ [после усреднения] $=$

$= \frac{2\ddot{d}^2}{3c^3}$; („$\cos^2\varphi \, d\Omega \Rightarrow \frac{2}{3}$")

$\ddot{d}^2 = \left(\frac{2}{3c^3} r_0^2 \omega^2 e^2\right)^2$

Имеем уравнение для r_0:

$\frac{d}{dt}\frac{Ze^2}{2r_0} = \frac{2}{3c^3}\omega^2 \cdot (r_0 \omega e)^2$;

$-\frac{dr_0}{dt} = \frac{4c}{3} Z \frac{e^2/\mu c^2}{r_0}$ $\} \rightarrow 2,8 \cdot 10^{-13}$

r уменьшается со скоростью ~ 1 см/сек;

Время жизни атома водорода ~ 10^{-8} сек !

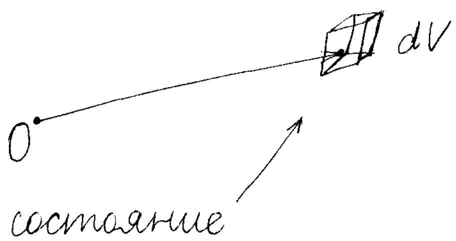
<u>Вывод</u>: Классические модели не „работают" на расстоянии 10^{-8} см.

6.03.2004
§18

Квантовая механика

Классическое описание невозможно для квантовых систем ($\tau \cong 10^{-8}$ сек — время жизни классического атома).

Гипотеза (эргодическая): усреднение по времени эквивалентно усреднению по состояниям (для финитной системы).



$$dW = \underbrace{\chi}\, dV$$

χ — плотность вероятности в фазовом пространстве.

Эргодическая гипотеза не доказана, хотя

Усредним функцию $f(q,p)$ согласно эргодической гипотезе:

$$\overline{f(q,p)} = \int dp\, dq\, f(p,q) \exp\left\{\frac{\Psi - H(q,p)}{kT}\right\},$$

где $H_{p,q} = \sum_a \frac{p_a^2}{2m} + U(q) = T + U;$

Очевидно, что $p_1 \cdot \frac{\partial H}{\partial p_1} = 2K_1$. Усредняя, получим:

$$\overline{p_1 \frac{\partial H}{\partial p_1}} = e^{\Psi/kT} \int \prod_{i=2}^{N} dp_i\, dq_i\, dq_1 \int dp_1\, p_1 \frac{\partial H}{\partial p_1} e^{-H/kT} = -kT \int dp_1 p_1 \frac{\partial}{\partial p_1} e^{-H/kT} =$$

$$= -kT \underbrace{\left(p_1 e^{-H/kT}\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} + kT \int \underbrace{dp_1 e^{-H/kT}}_{\text{„усреднение единицы"}} = 1 \Leftarrow \Psi \text{ так подобрано.}$$

$$\boxed{\overline{K}_1 = \frac{kT}{2}}$$

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt\, L[q,\dot q]$$ — по Лагранжу

$$S[q,p] = \int_{t_1}^{t_2} dt \{-H(q,p) + p\dot q\}$$ — по Гамильтону;

$$H = -L + \frac{\partial L}{\partial \dot q}\dot q \Big|_{\dot q = Q(q,p)}$$ — ф-ция Гамильтона,

где $p = p(q,\dot q) = \dfrac{\partial L}{\partial \dot q_i}$ (по т. Нетер).

p можно разрешить относительно $q, \dot q$, если матрица $A_{ik} = \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot q_i \partial \dot q_k}$ не вырождена.

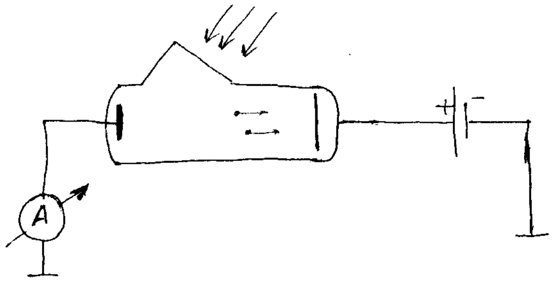
Тривиальное выражение $p = m\dot q$ получается лишь в случае декартовых координат. Чаще обобщенные координаты удобнее.

Т. о., получили, что на каждую степень свободы приходится одинаковая кинетическая энергия.

Число степеней свободы N частиц: $3N$; число степеней свободы поля: $3\cdot[\infty]$; в состоянии равновесия: частицы не движутся, пространство заполнено полем (тепловая смерть). В реальности такая ситуация не наблюдается. Значит, неправильно судили о энергии поля. Постулат Планка: $T_{эм} = n\mathcal{E}_0$, $\mathcal{E}_0 = \hbar\omega$ — квантование энергии поля. $\mathcal{E}_0$ — квант энергии. Число n здесь конечно в связи с ограниченностью T Вселенной.

Рассмотрим фотоэффект:

$$\mathcal{E} = \underbrace{A_{ион}}_{\text{работа ионизации}} + \underbrace{A_{вых}}_{\text{работа выхода}} + \underbrace{eV}_{\text{притяжение электронов к металлу}}$$

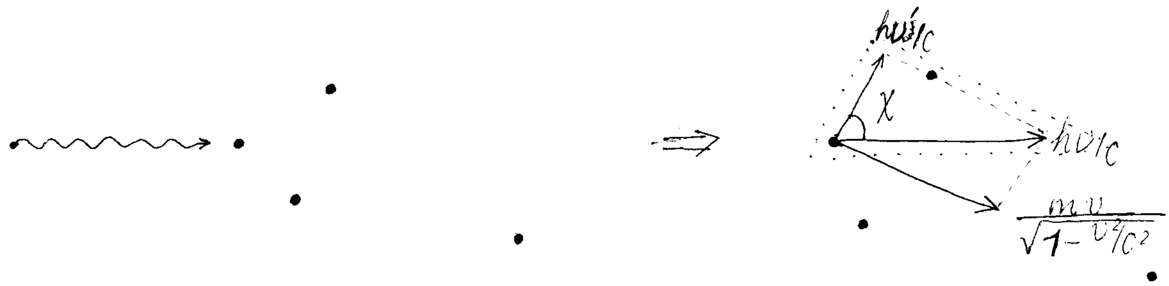


$$\mathcal{E} = \frac{c}{4\pi}\int dS\, \underline{E}^2$$

Фототок не зависит от амплитуды колебаний E! Фототок зависит только от частоты ν.

Эйнштейн: $\mathcal{E} = \hbar\omega$ (в применении к фототоку).

Рассмотрим эффект Комптона. Это рассеяние фотонов на <u>квази</u>свободных электронах.



χ — угол между направлениями набегающей и рассеянной волны.

Запишем уравнения сохранения импульса и энергии.

Для энергии:
$$\underbrace{h\nu}_{``\sim"} + \underbrace{mc^2}_{\substack{``e"\\ \text{покоится}}} = \underbrace{\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}}_{\substack{``e'"\\ \text{движется}\\ /\text{формально}/}} + \underbrace{h\nu'}_{``\sim'"} \qquad (1)$$

Используя теорему косинусов, получаем:
$$\frac{m^2v^2}{1-v^2/c^2} = \frac{h^2(\nu'^2+\nu^2-2\nu\nu'\cos\chi)}{c^2} \qquad (2)$$

Совместное решение (1) и (2) дает:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\frac{h}{mc^2}\sin^2\frac{\chi}{2} \qquad (*)$$

Комптон обнаружил, что:
— наблюдается и λ', и λ, притом $\lambda' > \lambda$
— формула (*) в опыте справедлива во всех отношениях на опыте (в частности, с ростом угла рассеяния χ сдвиг $\Delta\lambda$ растет).

Вывод: у электромагнитного излучения есть свойства частиц! (Т.е., уравнение (*) Комптона, полученное в корпускулярном предположении, дает подтверждаемые на опыте следствия).

Комбинационный принцип Ритца:

$$\nu_{mn} = R\cdot\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right).$$

12.03.2004
§ 19

Квантовая механика

① На расстояниях $\div 10^{-8}$ см нет возможности точно измерить некоторые пары динамических переменных.

② Принцип суперпозиции (из теории волновых ф-ций): наложение двух состояний A и B есть также определенное состояние, которое с определенной вероятностью либо A, либо B.

③ Описание состояний: посредством линейного пространства. В этом пространстве существуют объекты, переводящие один элемент в другой.

(4) Динамическая переменная есть матрица; значение (собственное) матрицы — значение переменной.

К одному значению наблюдаемой соответствует <u>класс эквивалентности</u> (луч)

Обозначения и символы:

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} ; \quad \langle A| = (A_1 \ A_2 \ldots A_n)$$ — одному состоянию соответствует пара пространств (строк и столбцов).

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \ldots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \ldots & \alpha_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} \ldots & \alpha_{nn} \end{pmatrix};$$

$$\alpha|A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_{1k} A_k \\ \alpha_{2k} A_k \\ \ldots \\ \alpha_{nk} A_k \end{pmatrix}$$

Большинство матриц в квантовой механике по своей размерности стремятся к бесконечности. В математике прекрасно развита теория бесконечномерных пространств.

Объекты линейного пространства в квантовой механике заданы в общем случае над комплексным полем.

Собственные значения и собственные векторы:

$\exists$: $\alpha|A\rangle = a|A\rangle$, причем $\alpha(\lambda|A\rangle) = a(\lambda|A\rangle)$ (класс эквивалентности).

Заметим, что $\langle A|\alpha = (A_k \alpha_{k1} \; A_k \alpha_{k2} \ldots A_k \alpha_{kn})$.

Тогда:

$\exists: \; \alpha|A\rangle = a|A\rangle \iff \langle A|\alpha = \langle A|\cdot a,$

где α диагонально симметрична.

Если потребовать: $a \in \mathbb{R}$, то $\alpha = \alpha^{+}$ – эрмитова.

$|A\rangle$ – вектор

$\langle A|$ – ковектор

Определена билинейная операция $\langle A|B\rangle$, причем рассматриваемое пространство таково, что $\langle A|A\rangle \in \mathbb{R}$. Билинейная операция введена таким образом, что $\langle A|B\rangle = \langle B|A\rangle^{*}$, причем норма $\langle A|A\rangle = \|A\|^2 \in \mathbb{R}$.

Эрмитово сопряжение:

$\langle B|\alpha|A\rangle = \langle A|\alpha^{+}|B\rangle^{*}$: α, α^{+} — эрмитово-сопряжены

Эрмитовость: $\alpha = \alpha^{+}$, собств. значения их вещественны.

Наблюдаемым отвечают эрмитовы операторы; состояниям системы отвечают „лучи" — классы эквивалентности. Такой выбор линейного пространства обусловлен требованиями физической интерпретации.

$$\langle A|\alpha|A\rangle = \underbrace{a}_{\text{наблюдаемая}}\langle A|A\rangle = a$$ — борновская интерпретация.

Сменим обозначения на более удобные для интерпретации. Пусть у матрицы $n \times n$ имеется n различных собственных значений:

$|A\rangle \qquad \alpha|A\rangle = a|A\rangle$

$\downarrow \qquad\qquad \downarrow$

$|\alpha_i\rangle \qquad \alpha|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle$ (не сумма!)

Возьмем $|\alpha_i\rangle, |\alpha_j\rangle$: $\alpha_i' \neq \alpha_j'$. Тогда:

$$\langle\alpha_i|\alpha|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle\alpha_j' = \alpha_i'\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle\cdot(\alpha_i'-\alpha_j') = 0 \Rightarrow \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = 0.$$

Возьмем вектор $|\alpha_i\rangle$ из класса ~~эк~~ эквивалентности:

$\langle\alpha_i|\alpha_i\rangle = 1$ (ортонормированный базис).

Разложим вектор $|A\rangle$ по данному базису:

$$|A\rangle = \sum a_i|\alpha_i\rangle, \text{ где } a_j = \langle\alpha_j|A\rangle$$

Множество собственных значений матрицы наз. её спектром.

В бесконечномерном случае:

[$$|A\rangle = \int d\alpha'\, a(\alpha')|\alpha'\rangle$$

нормировка: $\langle\alpha'|\alpha''\rangle = \delta(\alpha'-\alpha'')$, в смысле интеграла.

$$\left(\text{Ср. } \langle\alpha''|A\rangle = \int d\alpha'\, a(\alpha')\langle\alpha''|\alpha'\rangle = \int d\alpha'\, a(\alpha')\delta(\alpha'-\alpha'') = a(\alpha'')\right)$$

Коммутирующие операторы

Коммутирующие операторы имеют общий набор собственных векторов:

$$\alpha\beta = \beta\alpha$$
$$\Downarrow$$
$$\alpha\underbrace{\beta|\alpha'\rangle} = \beta\alpha|\alpha'\rangle = \alpha'\underbrace{\beta|\alpha'\rangle},$$
$$\beta|\alpha'\rangle = \beta'|\alpha'\rangle.$$

Возьмем такой полный набор ~~онс~~ коммутирующих операторов α_i. Тогда, если $\forall i\ [\omega, \alpha_i] = 0$, то $\omega = f(\alpha)$.

$[f(\alpha), \alpha_i] = 0$ (в смысле ряда Тейлора).

Тогда: $f(\alpha)|\alpha'\rangle = f(\alpha')|\alpha'\rangle$:

$$f(\alpha) = \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\alpha^n|\alpha'\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\cdot(\alpha')^n|\alpha'\rangle =$$

$$= |\alpha'\rangle \cdot \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(\alpha)\cdot(\alpha')^n .$$

В дальнейшем в качестве базиса выберем ~~полный~~ набор собств. значений полного набора коммутирующих операторов. Этот выбор наз. представлением. $a(\alpha'') = \int d\alpha' a(\alpha') \langle\alpha''|\alpha'\rangle$ — наз. волновой ф-цией.

Постулат квантования

Для систем, имеющих механический аналог, постулат квантования формулируется в декартовых координатах. Используем гамильтоново описание (координаты и импульсы):

r_i, p_i (в классике), $i = 1,2,3$.

$\{p_i, q_j\} = \delta_{ik}\delta_{jk} - 0 = \delta_{ij}$ (скобка Пуассона).

$$\{f,g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}$$

$\{p_i, q_j\} \longleftrightarrow [p_i, q_j]$ (сопоставление);

$\boxed{[p_i, q_j] = \delta_{ij}\frac{\hbar}{i}}$ (не абелева алгебра, алгебра Гейзенберга).

$|\hbar| = |S|$.

19.03.2004
§19

Пространство состояний

Постулат коммутации:

$$[p_i, q_j] = \delta_{ij}\frac{\hbar}{i} = -\delta_{ij}\, i\hbar$$

Рассмотрим одномерный случай:

$$[p, q] = \frac{\hbar}{i};$$

перейдем к другим переменным:

$$a^{\pm} = \frac{p \pm i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}}, \quad \omega \text{ — произвольный параметр.}$$

$$[a^+, a^-] = \frac{1}{2\omega\hbar}[p - i\omega q, p + i\omega q] = \frac{1}{2\omega\hbar}\Big\{\underbrace{[p,p]}_{=0} - i\omega\underbrace{[q,p]}_{i\hbar} +$$

$$+ i\omega\underbrace{[p,q]}_{-i\hbar} - (i\omega)^2\underbrace{[q,q]}_{=0}\Big) = \frac{1}{2\omega\hbar}\cdot 2\omega\hbar = 1,$$ так как

коммутатор линеен по каждому своему компоненту.

<u>Утв.</u> a^+a^- эрмитов:

$$(a^+a^-)^\dagger = (a^-)^\dagger (a^+)^\dagger = a^+a^-$$

<u>Утв.</u> a^+a^- — „положительный оператор":

$$\langle A | a^+a^- | A\rangle \geqslant 0;$$

введем базис $|\xi_i\rangle$; $|\xi_i\rangle\langle\xi_i|$ — оператор,

$$I|\xi_k\rangle = |\xi_i\rangle\langle\xi_i|\xi_k\rangle = |\xi_k\rangle = |\xi_i\rangle\delta_{ik};$$

Фон Нейман: $I = |\xi_i\rangle\langle\xi_i|$ наз. разложением единицы:

$$\langle A|a^+a^-|A\rangle = \langle A|a^+ I a^-|A\rangle = \langle A|a^+|\xi_i\rangle\langle\xi_i|a^-|A\rangle =$$

$$= \langle A|a^+|\xi_i\rangle\langle A|a^+|\xi_i\rangle^* = |\langle A|a^+|\xi_i\rangle|^2 \geqslant 0,$$

а у положительного оператора собственные значения неотрицательны.

$$n \equiv a^+a^-,$$

$|n'\rangle$: $n|n'\rangle = n'|n'\rangle$ (собств. значения и в-ры).

Вычислим:

$$a^- n|n'\rangle = a^-a^+a^-|n'\rangle = [a^-a^+ = 1 + a^+a^-] =$$

$$= (1 + \underbrace{a^+a^-}_{n})a^-|n'\rangle \Rightarrow n a^+|n'\rangle = (n'-1)\,a^-|n'\rangle.$$

аналогично, $a^+ n|n'\rangle = (n'+1)a^+|n'\rangle$.

Среди собств. векторов a^- найдется нулевой $|0\rangle$, ибо $n = a^+a^-$ положителен. При действии a^+ на вакуумный вектор $|0\rangle$ получаются векторы (ортонормированные) пространства Фока:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle, \text{ где } a^-|0\rangle = 0.$$

$\frac{1}{\sqrt{n!}}$ — нормировочный множитель.

a^+ — оператор рождения

a^- — оператор уничтожения;

$|n\rangle$ — собств. вектор оператора n „числа частиц" (формально!)

Как выразить операторы p, q в пространстве Фока?

$$a^\pm = \frac{p \pm i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}} \Rightarrow p = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(a^+ + a^-),\; q = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(a^+ - a^-)$$

$$\langle n'|q|n''\rangle = \{\langle n'|a^+|n''\rangle - \langle n'|a^-|n''\rangle\}\cdot\frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} =$$

$$= \left[a^+|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^{n+1}|0\rangle = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}(a^+)^{n+1}|0\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right] =$$

$$= \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left\{\underbrace{\langle n'|n''+1\rangle}_{\delta_{n',n''+1}}\sqrt{n''+1} - \underbrace{\langle n'|n''-1\rangle}_{\delta_{n',n''-1}}\frac{1}{\sqrt{n''}}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad p = \begin{pmatrix} 0 & i\sqrt{1} & & & \\ -i\sqrt{1} & 0 & i\sqrt{2} & & \\ & -i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{3} & \\ & & -i\sqrt{3} & 0 & \ldots \\ & & & \vdots & \end{pmatrix}\cdot\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}$$

$$p=\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \vdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \vdots \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \vdots \\ & & \sqrt{3} & 0 \ldots & \vdots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \vdots \end{pmatrix}$$

Перейдем к координатному представлению (переход к базису собств. векторов оператора q):

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle;$$
$$\langle n'|q|q'\rangle = q'\langle n'|q'\rangle;$$
$$\cancel{\langle q} \quad q'\langle n'|q'\rangle = q'\langle n'|n''\rangle\langle n''|q'\rangle = q'\langle n'|q'\rangle,$$

$$x=\sqrt{\frac{2\omega}{\hbar}}\, q', \quad c_n = \frac{x}{i\sqrt{n}}c_{n+1} + \sqrt{\frac{n-1}{n}}\, c_{n+1},$$

где $c_n(q')$: $\begin{pmatrix} c_0(q') \\ c_1(q') \\ \ldots \\ \\ \end{pmatrix}$

запишем решения системы

$$c_n = \frac{x}{i\sqrt{n}}c_{n+1} + \sqrt{\frac{n-1}{n}}\, c_{n+1} = (-1)^n \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) c_0(x),$$

$$c_0(x) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2/2}.$$

Условие нормировки: $\langle q'|q''\rangle = \delta(q''-q')$

H_n — полиномы Эрмита:

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2}\cdot\left(-\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}, \quad H_n = 2\xi H_{n-1} - 2(n-1)H_{n-2};$$

c_n — ф-ция перехода: $c_n = \langle n|q\rangle$ (элементы унитарной матрицы перехода.

Можно перейти к импульсному представлению:

$$\langle p|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipq}{\hbar}};$$

$$\langle q'|p|q''\rangle = \int dp'dp'' \langle q'|p'\rangle \underbrace{\langle p'|p|p''\rangle}_{p'\delta(p''-p')} \langle p''|q''\rangle =$$

$$= \int dp' p' e^{-\frac{ip'q'}{\hbar} + ip'q''/\hbar} \cdot \frac{1}{2\pi\hbar} = \left[\int dp' e^{i(p'(q''-q'))/\hbar} = 2\pi\delta(q'-q'') \right] =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q'-q'').$$

Т.о., оператор дифференцирования переводит одну ф-цию в другую ($p \leftarrow q$)

Соотношение неопределенностей

Возьмем состояние $|A\rangle$:

$\langle A|A\rangle = 1.$

Предположим, что

$\bar{p} = \langle A|p|A\rangle = 0$, $\bar{q} = \langle A|q|A\rangle = 0$

Определим среднее квадратичное отклонение величины:

$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p-\bar{p})^2} = \overline{p^2} - 2\overline{p\bar{p}} + \overline{\bar{p}^2} = \overline{(p^2)}$;

$\overline{(\Delta q)^2} = \overline{(q^2)}$

Возьмем состояние $|B\rangle$:

$|B\rangle = a^-|A\rangle$, $|B\rangle$: $\langle B|B\rangle \geq 0$

Вычислим $\langle B|B\rangle$:

$$0 \leq \langle B|B\rangle = \frac{1}{2\omega\hbar}\left(\langle A|p^2|A\rangle - i\omega \langle A|[p,q]|A\rangle + \omega^2 \langle A|q^2|A\rangle\right)$$

$$0 \leq \omega^2 (\Delta q)^2 - \hbar\omega + \overline{(\Delta p)^2}\ ; \quad \cdot (\Delta q)^2$$

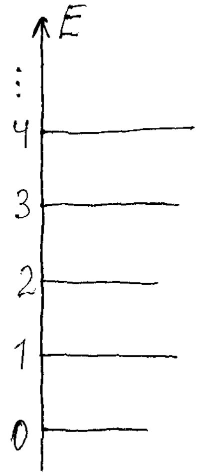
$$D = \hbar^2 - 4\overline{(\Delta p)^2} \leq 0\ ; \qquad \boxed{\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$|B\rangle = 0$ ($|A\rangle = |0\rangle$) — $\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}$, для „вакуума".

Осциллятор

В классике: $L=\frac{m}{2}(\dot{q}^2-\omega^2q^2)\longrightarrow H=\frac{1}{2m}(p^2+\omega^2q^2)=$
$=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(a^+a^-+a^-a^+\right)=\frac{1}{2}\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\cdot 2=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ — получен спектр оператора Гамильтона в фоковском представлении.

В фоковском пространстве спектр энергии осциллятора изобразится так:



Частицы, о которых идет речь, есть квазичастицы, описываемые обобщенными переменными. Квазичастицы есть возбуждения над основными состояниями.

Динамика

В классике: $\dot{\alpha}=\{H,\alpha\}$

$\Downarrow$

$\dot{\alpha}=\frac{i}{\hbar}[H,\alpha]$ — уравнение движения для оператора α, картина Гейзенберга.

Запишем ~~урав~~ решение уравнения:

$\alpha(t)=U(t,t_0)\alpha(t_0)U^{-1}(t,t_0)$, где $U(t,t_0)=e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$,

$\alpha(t_0)=\alpha_0$ — начальные условия.

Предполагая, что в ходе эволюции векторы состояния не меняются, получим:

$$\langle A|\alpha|A\rangle = \underbrace{\langle A|U(t,t_0)}_{\langle A(t)|}\,\alpha(t_0)\,\underbrace{U^{-1}(t,t_0)|A\rangle}_{A(t)}$$

временная зависимость перенесена с оператора на вектор состояния

$\frac{d}{dt}|A(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} H|A(t)\rangle$ — динамич. уравнение эволюции, уравнение Шредингера, (Картина Шредингера).

Картина (представление) взаимодействия: смешанная картина (для элементарных частиц).