

Mechanika teoretyczna

Wykład 15

Rozważmy działanie **wzdłuż trajektorii rzeczywistej**, jako funkcję punktu końcowego, przy ustalonym punkcie początkowym.

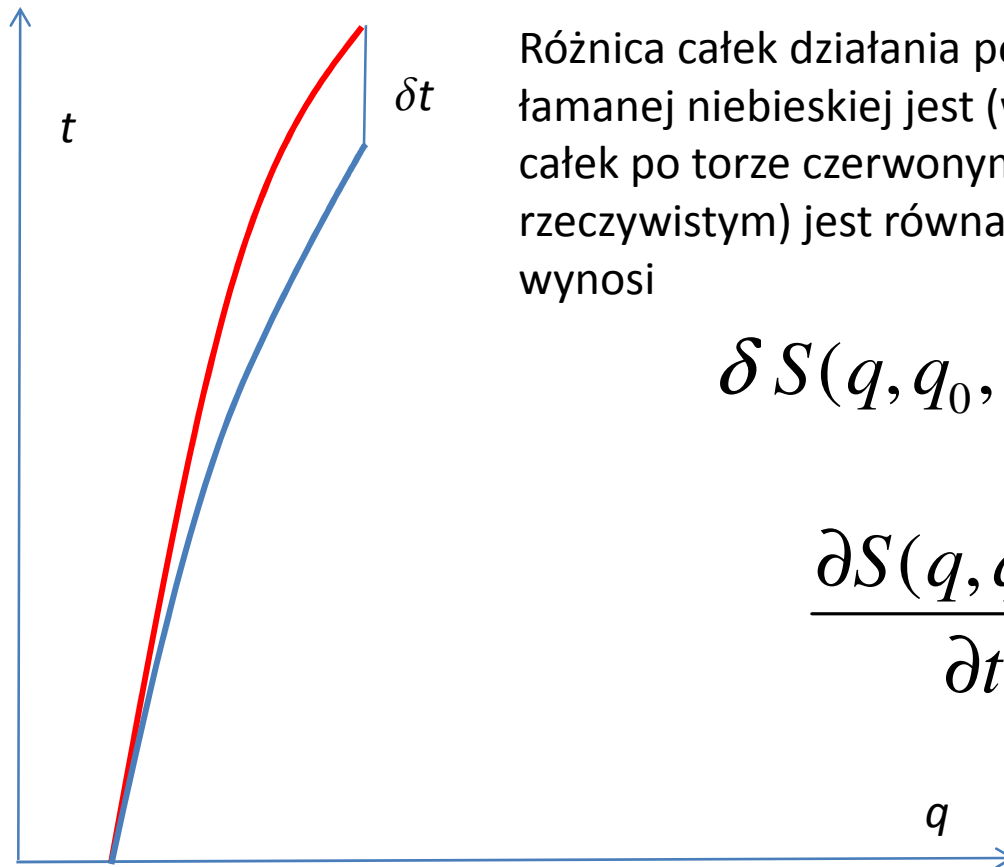
$$\int_{q_0, t_0}^{q, t} (p\dot{q} - H) dt \equiv S(q, q_0, t)$$

Obliczmy pochodne cząstkowe tej funkcji. Zmiana końcowego q (infinitesimalna) pociągnie za sobą (infinitesimalną) zmianę całej trajektorii i zmianę działania:

$$\begin{aligned} \delta S(q, q_0, t) &= \int_{q_0, t_0}^{q, t} (p\delta\dot{q} + \dot{q}\delta p - \delta H) dt = \\ &= p\delta q \Big|_{\text{koniec}} + \int_{q_0, t_0}^{q, t} \left(\left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right) dt \end{aligned}$$

Stąd:

$$\frac{\partial S(q, q_0, t)}{\partial q} = p$$



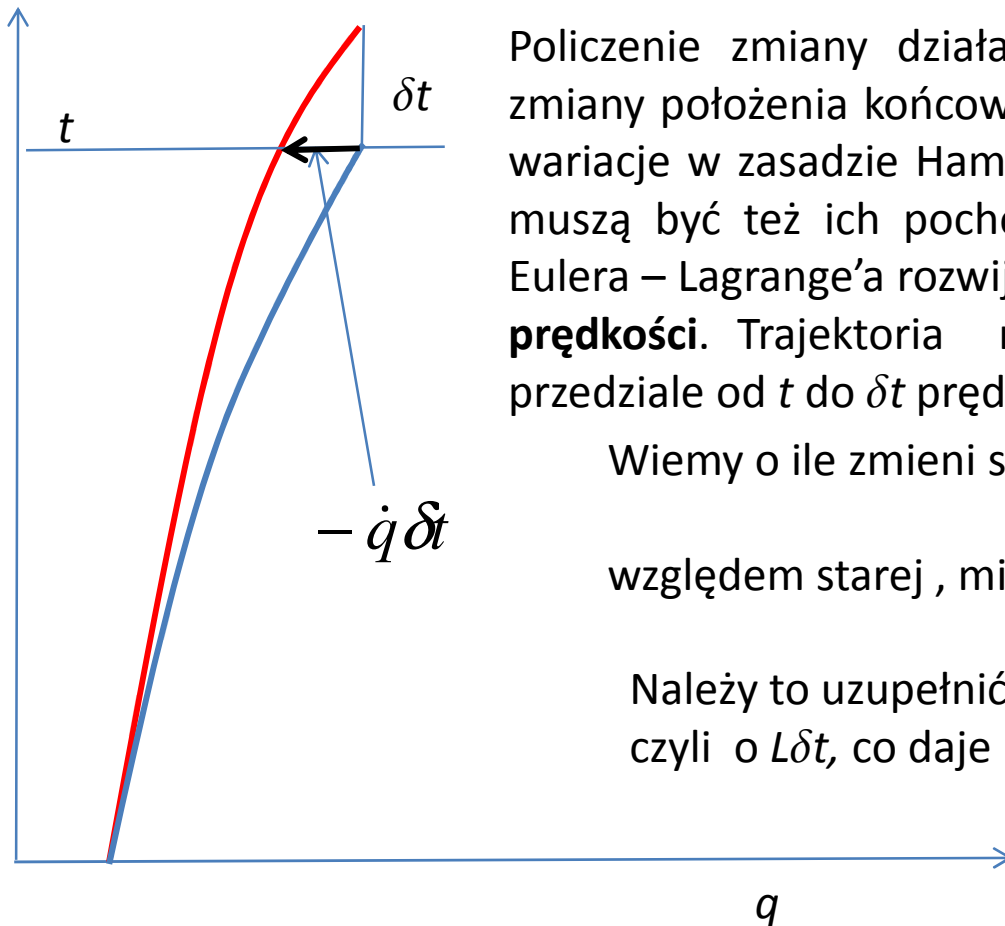
Różnica całek działania po torze czerwonym (rzeczywistym) i łamanej niebieskiej jest (w przybliżeniu liniowym) zero. Różnica całek po torze czerwonym i **grubym niebieskim** (też rzeczywistym) jest równa całce po czasie przy ustalonym q i wynosi

$$\delta S(q, q_0, t) = -H \delta t$$

$$\frac{\partial S(q, q_0, t)}{\partial t} = -H$$

To samo działanie (podkreślam, **nie jako funkcjonal, lecz wartość stacjonarna**) mógłbym też liczyć całkując lagranżian. Pierwsza część liczenia pochodnej wyniku po współrzędnych końcowych wyglądała by tak samo.

$$\delta S(q, q_0, t) = \delta \int_{q_0, t_0}^{q, t} L dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \Big|_{\text{koniec}} + \int_{q_0, t_0}^{q, t} \left(\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right) dt$$



Policzenie zmiany działania przy zmianie czasu końcowego, bez zmiany położenia końcowego trafia na pewną drobną pułapkę. Otóż wariacje w zasadzie Hamiltona muszą być nie tylko małe, ale małe muszą być też ich pochodne! Przecież w wyprowadzeniu równań Eulera – Lagrange’a rozwijamy lagranżian i względem zmian położenia i **prędkości**. Trajektoria niebieska nie spełnia tego wymogu. W przedziale od t do δt prędkość na odcinku niebieskim jest równa 0.

Wiemy o ile zmieni się nowa całka liczona do czasu t

względem starej, mianowicie o $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q = -p \dot{q} \delta t$

Należy to uzupełnić o całkę wzdłuż linii czerwonej w czasie δt , czyli o $L \delta t$, co daje $(-p \dot{q} + L) \delta t = -H \delta t$

Policzmy działanie rzeczywiste dla cząstki swobodnej:

$$\int_{\vec{r}_0, t_0}^{\vec{r}, t} \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} \right)^2 dt = \frac{m}{2} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{t - t_0}$$

$$S(\vec{r}, \vec{r}_0, t) = \frac{m}{2} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{t - t_0}$$

Jest to też rozwiązanie równania Hamiltona Jacobiego! Całkami pierwszymi są tu położenia początkowe! A czym są „całki drugie”?

$$\frac{\partial S(\vec{r}, \vec{r}_0, t)}{\partial \vec{r}_0} = -m \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} = -\vec{p}$$

$$\vec{r} = \frac{\vec{p}}{m} (t - t_0) + \vec{r}_0$$

Kolekcja wszystkich rozwiązań danych powyższym równaniem i równaniami uzyskanymi z

$$S = \vec{r}\vec{P} - \frac{\vec{P}^2}{2m} (t - t_0)$$

jest identyczna. O ile jeden zbiór odpowiada normalnym do frontów fali płaskiej, to drugi kulistej. W pierwszym **pęd jest dobrze określony, w drugim położenie początkowe !!!**

Powierzchniami stałej wartości S (w danej chwili) są w jednym przypadku płaszczyzny prostopadłe do stałej wartości pędu, w drugim sfery o ustalonym środku. Różne ruchy, jakie dostajemy przyrównując pochodne S po całkach pierwszych (przy ustalonych wartościach tych całek) do **różnych** wartości całek drugich są ruchami wzdłuż linii **prostopadłych** do powierzchni stałej wartości S .

Trudno nie mieć natychmiastowego skojarzenia ze szkolnymi metodami opisu światła. Posługujemy się tam i promieniem świetlnym i **frontem falowym**. Jest cechą samych fal, że utworzone z nich zwarte pakiety przemieszczają się właśnie wzdłuż linii prostopadłych do frontów falowych. By zdanie to miało sens, fale wchodzące w skład pakietu muszą mieć **zbliżony** kierunek propagacji. By pakiet był zwarty (w stosunku do ewentualnych obiektów z którymi go porównujemy) **długości** fal użytych do budowy pakietu muszą być zarówno bliskie sobie, jak i **małe** w porównaniu do oświetlanych obiektów.

Przy takim falowym patrzeniu, rozwiązanie uzyskane metodą separacji opisuje falę płaską, to drugie falę kulistą.

Bogactwo rozwiązań równania cząstkowego to bogactwo różnych fal. W granicy krótkofalowej bogactwo to **gdzieś przepada**. W przykładzie cząstki swobodnej, wszystkie ruchy paczek falowych wyczerpują wszystkie ruchy jednostajne. Jest to sześcioparametrowa rodzina ruchów swobodnych.

Zachęteni tą analogią zbadajmy własność paczek falowych utworzonych z fal, których fazą jest rozwiązanie równania Hamiltona – Jacobiego. Ściśle biorąc, rozwiązanie równania Hamiltona – Jacobiego jest wielkością wymiarową: ma **wymiar działania** czyli $\text{dżul}\cdot\text{sekunda}$. Faza musi być bezwymiarowa. Już ponad 100 lat temu odkryto stałą uniwersalną, stałą Plancka, zwaną też kwantem działania ustalającą przelicznik między działaniem mechaniki, a fazą:

$$e^{iS/\hbar}$$

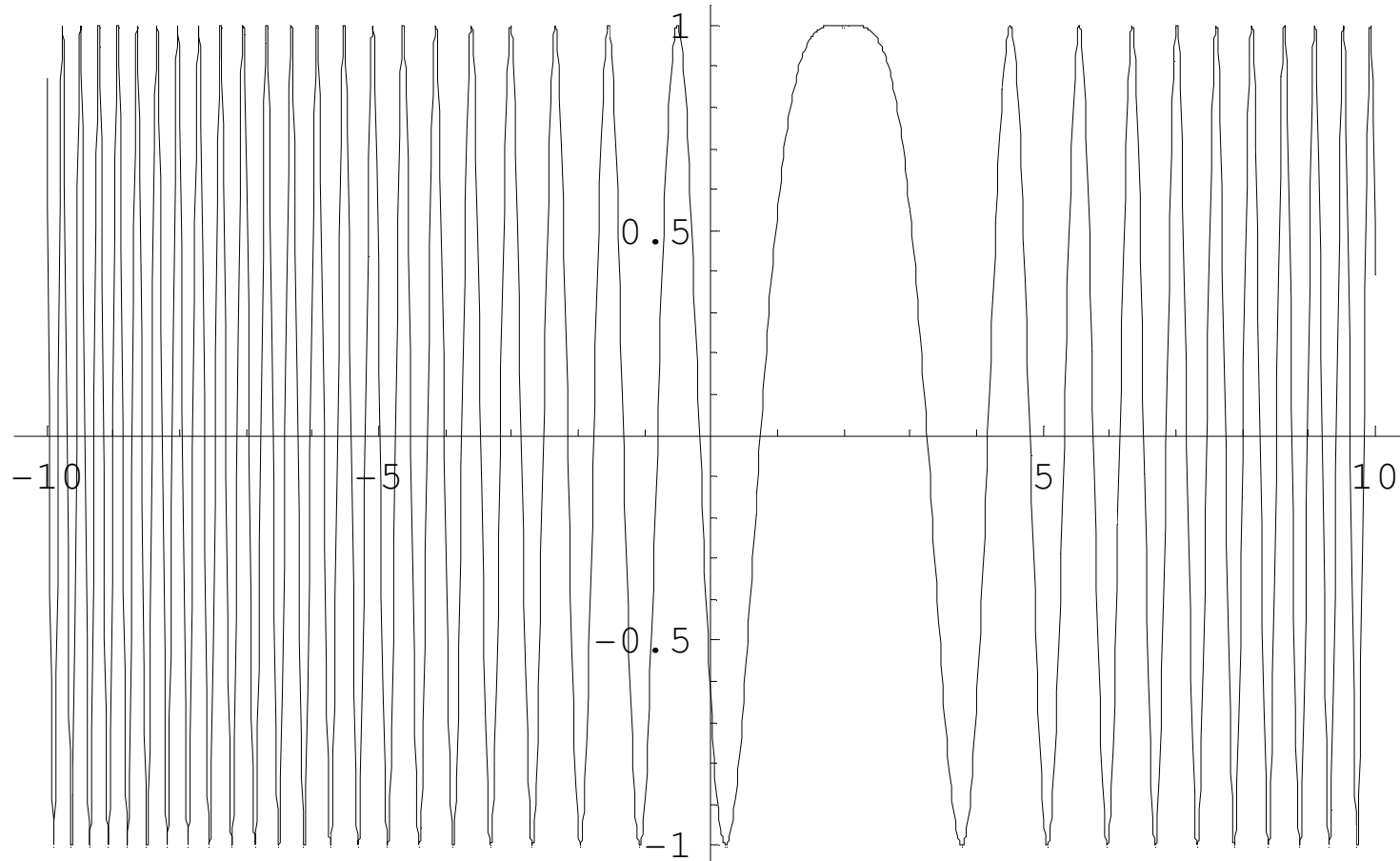
$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Zbadajmy superpozycję takich fal o różnych wartościach całek pierwszych, **ale z wąskiego przedziału** skupionego wokół pewnej wartości P_0 . **Profil** paczki falowej zapiszemy następująco:

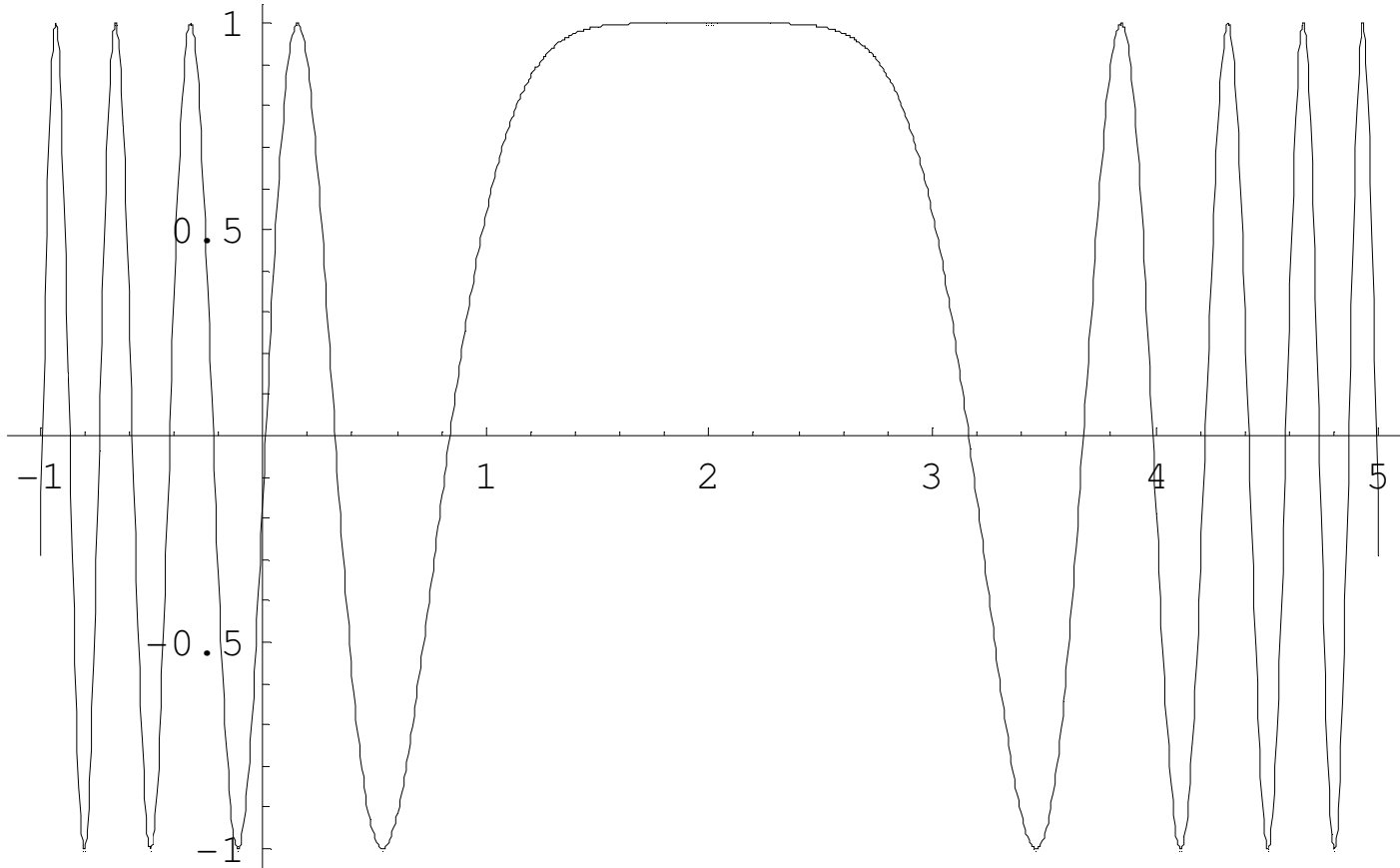
$$\Psi(q, t) = \int M(P - P_0) e^{-i\Phi(P)/\hbar} e^{iS(q, P, t)/\hbar} dP$$

Jeżeli faza jest „duża”, a o to nie jest trudno, gdy dzieli się wszystko i zawsze przez 10^{-34} , to funkcje podcałkowe są szalenie szybko zmienne. Trochę nieoczekiwanie, sytuacja jest podobna jak i wtedy, gdy mamy funkcje wykładnicze rzeczywiste z dużymi wykładnikami. Przewaga obszaru całkowania w okolicy punktu stacjonarnego wykładnika, nad resztą staje się olbrzymia.

`Plot [Cos [(x - 2) ^2], {x, -10, 10}, PlotPoints → 1000]`

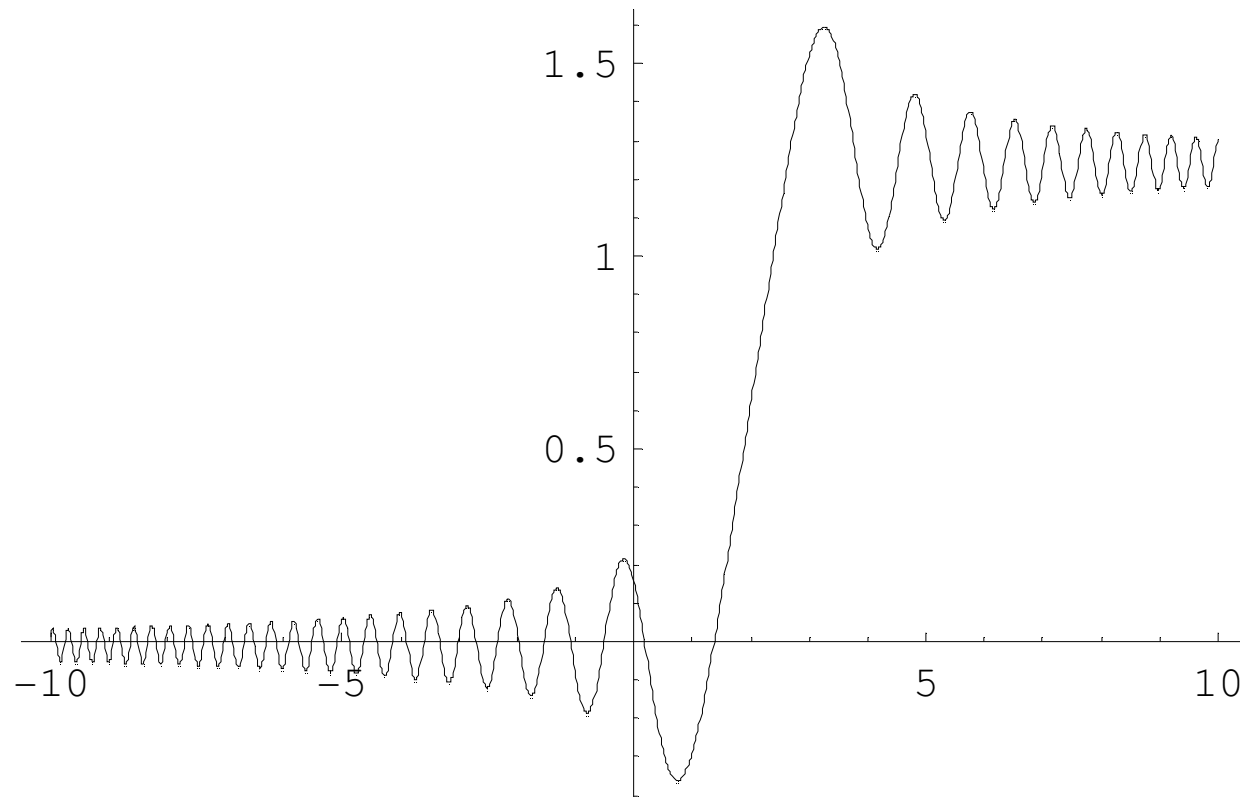



```
Plot[Cos[(x - 2)^3], {x, -1, 5}, PlotPoints -> 1000]
```



Plot [

Evaluate[Integrate[Cos[(y - 2) ^2], {y, -10.27, x}],
{x, -10., 10}, PlotPoints → 1000]



Całkowanie takiej szybko zmiennej funkcji pomnożonej przez inną, gładką, która znika (czy jest znikoma) tam, gdzie „rozkwita” aktywność funkcji szybkozmiennej da nam wynik znikomy. Gdy funkcja mnożąca ma wartość różną od zera w punkcie stacjonarności fazy, wystarczy zastąpić ją tą wartością.

$$\Psi(q, t) = \int M(P - P_0) e^{i(S(q, P, t) - \Phi(P)) / \hbar} dP$$

Wkład do tej całki da otoczenie punktu stacjonarnego:

$$\Psi(q, t) = \int M(P - P_0) e^{i(S(q, P, t) - \Phi(P)) / \hbar} dP$$

$$\frac{\partial}{\partial P} (S(q, P, t) - \Phi(P)) = 0$$

Jeśli (przy jakimś zestawie q i t) rozwiązanie tego równania jest **różne od P_0** „falowanie” w otoczeniu tego punktu czasoprzestrzeni jest znikome. **Fala jest różna od zera**, gdy punkt stacjonarny (w przestrzeni całek pierwszych) pokrywa się z punktem P_0 !!!

$$\frac{\partial}{\partial P_0} S(q, P_0, t) = \frac{\partial \Phi(P_0)}{\partial P_0}$$

Równanie to (dokładniej układ f równań), dla każdego czasu t wyznacza współrzędne miejsca gdzie jest fala. Już nie tylko tory i promienie, ale **kompletny ruch** jest niczym innym jak ruchem **paczki falowej**.

Oczywiście, takie „zero – jedynkowe” mówienie P musi być równe P_0 albo q musi spełniać

równanie $\frac{\partial}{\partial P_0} S(q, P_0, t) = \frac{\partial \Phi(P_0)}{\partial P_0}$ odnosi się do granicy nieskończenie krótkich fal.

W sytuacjach pośrednich pojawi się rozmycie „nieoznaczoność”. Bodaj ciekawsze od „nieoznaczoności” jest zjawisko **kwantowania** możliwych wartości całek pierwszych.

$$S = -Et + p_\varphi \varphi \pm \int \sqrt{J^2 - \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta}} d\vartheta \pm \int \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr$$

Najprościej jest z p_φ . Jeśli fala $e^{iS/\hbar}$ ma mieć sens jako wielkość określona w konkretnym punkcie, to idąc po okręgu i dochodząc do punktu wyjścia mamy – z jednej strony **ten sam**

Punkt w przestrzeni, z drugiej, wartość jego współrzędnej, która przyrosła o 2π . Fala **musi być okresową funkcją kąta biegunowego z okresem 2π** .

$$e^{ip_\varphi\varphi/\hbar} = e^{ip_\varphi(\varphi+2\pi)/\hbar} \Rightarrow e^{i2\pi p_\varphi/\hbar} = 1 \Rightarrow p_\varphi/\hbar = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$p_\varphi = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Tak oto pojawia się **liczba kwantowa**. W ważnym przykładzie cząstki w polu centralnym, są jeszcze dwa człony w działaniu wymagające analizy. Człon z odseparowaną energią ma wyjątkowo prostą interpretację: $E/\hbar = \omega$ mnożone jest przez czas, jest to częstość fali.

$$E = \hbar\omega = \frac{h}{2\pi}\omega = h\nu$$

Pozostałe dwa człony zawierają tajemniczy znak \pm .

$$S_r = \pm \int \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr$$

Zbadajmy warunek, jaki powstaje po zróżniczkowaniu działania po E i przyrównaniu do stałej. Dla prostoty zacznijmy od cząstki swobodnej. I wybierzmy znak „-”

$$\begin{aligned}
-t + \frac{\partial}{\partial E} \int (-1) \sqrt{2mE - \frac{J^2}{r^2}} dr &= -t - \int \frac{m}{\sqrt{2mE - \frac{J^2}{r^2}}} dr = \\
&= -t - \int \frac{mr dr}{\sqrt{2mEr^2 - J^2}} = -t - \frac{1}{2E} \sqrt{2mEr^2 - J^2} = \text{const.}
\end{aligned}$$

Przesuwając, w razie potrzeby, początek liczenia czasu, mogą zawsze uzyskać to, że stała będzie równa zero. Zatem::

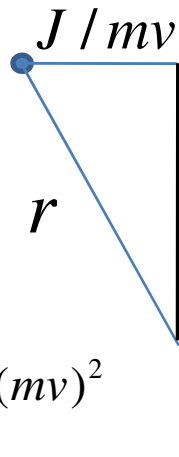
$$\sqrt{2mEr^2 - J^2} = -2Et$$

Dla ujemnych czasów równanie powyższe ma oczywiście rozwiązanie dla r . Gdy czas płynie, jego wartość bezwzględna maleje – maleje też odległość do centrum! Gdy czas zacznie przyjmować wartości dodatnie paczka falowa utworzona z fal z takim ujemnym znakiem **przepada!** Fizyczna fala, jaka by nie była jej natura, nie może tak dziwnie się zachować. Paczka falowa (a więc i cząstka) po osiągnięciu maksymalnego zbliżenia do centrum, płynnie i gładko zacznie się oddalać. Takie oddalanie opisuje akurat fala wzięta z przeciwnym znakiem!

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{r_{\min}}^r \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr} - e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{r_{\min}}^r \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr} =$$

$$= 2i \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_{\min}}^r \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr \right)$$

Gdy występuje przyciągający potencjał, wystąpi drugie miejsce zerowe pod pierwiastkiem, drugi punkt zwrotny. Funkcja powinna być **zarazem** sinusem znikającym w drugim punkcie zwrotnym.



$$-vt = \sqrt{r^2 - (J/mv)^2}$$

$$-2Et = \sqrt{2mEr^2 - J^2}$$

$$2mE = (mv)^2$$

$$\sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_{\min}}^r \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr \right) =$$

$$= \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr - \frac{1}{\hbar} \int_r^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr \right)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr = n\pi$$

$$\frac{1}{\hbar} \oint p_r dr = 2n\pi$$

$$\oint p_r dr = nh$$

$$\oint \sqrt{J^2 - \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta}} d\vartheta = 2l\pi\hbar$$

Nie mamy czasu, i nie byłoby celowe przyglądanie się licznym sytuacjom fizycznym, w których ta metoda, zwana „starą teorią kwantów” prowadziła do niezwykle użytecznych rezultatów – czasami wręcz dokładnie takich jak późniejsza, czyli ciągle „współczesna” teoria kwantów, przeważnie bardzo bliskich, a jakościowo zawsze poprawnych. Policzenie dwóch całek dla atomu wodoru zostawiam na czwartkowe ćwiczenia, tutaj pokażę tylko oscylator. Oscylator trójwymiarowy, nawet nieizotropowy, nie jest niczym trudniejszym niż oscylator jednowymiarowy:

$$H = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega_x^2 x^2}{2} \right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2} \right) + \left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_z^2 z^2}{2} \right)$$

Widać iż działanie będące sumą składników prowadzi do rozdzielenia zmiennych. Każdy pęd zostanie zastąpiony pochodną zwyczajną, a suma jego kwadratu wraz z odpowiednim składnikiem energii potencjalnej to będzie stała separacji:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_x}{dx} \right)^2 + \frac{m\omega_x^2 x^2}{2} = E_x$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_y}{dy} \right)^2 + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2} = E_y$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_z}{dz} \right)^2 + \frac{m\omega_z^2 z^2}{2} = E_z$$

$$S = -(E_x + E_y + E_z)t + S_x + S_y + S_z$$

$$S_x = \int \sqrt{2mE_x - m^2 \omega_x^2 x^2} dx$$

$$S_y = \int \sqrt{2mE_y - m^2 \omega_y^2 y^2} dy$$

$$S_z = \int \sqrt{2mE_z - m^2 \omega_z^2 z^2} dz$$

Warunek kwantyzacji:

$$\int_{-\sqrt{2E_x/m/\omega_x}}^{\sqrt{2E_x/m/\omega_x}} 2\sqrt{2mE_x - m^2 \omega_x^2 x^2} dx = 2\pi\hbar n_x$$

$$\sqrt{2mE_x} \sqrt{\frac{2mE_x}{m^2 \omega_x^2}} \int_{-1}^1 2\sqrt{1 - \xi^2} d\xi = 2\pi\hbar n_x$$

$$E_x = n_x \hbar \omega_x$$

Funkcja falowa, dla której wymóg jednoznaczności prowadzi do obserwowanych warunków kwantowania jest czymś bardziej podstawowym, niż jej faza, która cierpi na niejednoznaczność. Wiemy, że faza spełnia równanie H-J. Ciekawe byłoby sprawdzić jakie równanie spełnia sama funkcja falowa!

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{iS(\vec{r}, t)/\hbar}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}}$$

Mnożymy r. H – J przez $\Psi(\vec{r}, t)$

$$-\Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2m} \Psi(\vec{r}, t) \left(\frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \right)^2 + \Psi(\vec{r}, t) V(r)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}}$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \Psi(\vec{r}, t) \left(\frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \right)^2 + \Psi(\vec{r}, t) V(r)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) &= \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \end{aligned}$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta \Psi - \frac{\hbar}{i} \Psi \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S}{\partial \vec{r}} \right) + V\Psi$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) &= \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{i}{\hbar} \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \end{aligned}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp \frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}\vec{r} - \frac{\vec{p}^2}{2m} t \right)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt} u(\vec{r}, t)$$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) u(\vec{r}, t) = Eu(\vec{r}, t)$$