N. N.
25.10.13
-1-

Квантова теория на полето и елементарните частици: Лекция 4

Николай М. Николов

ВНИМАНИЕ: ИМА СМЯНА НА АУДИТОРИЯТА!

Следващата лекция ще се проведе на 8.11.2013 от 9:45 в 305 ауд. на ФМИ

В тази лекцията с червено са отбелязани части, в които е имало пропуски или са приведени допълнителни сведения.

В миналата лекция въведохме два типа описания на квантови трансформации:

- картина на Шрьодингер: $\phi \mapsto T\phi$ (трансформират се векторите на състояния ϕ);
- картина на Хайзенберг: $A \mapsto T^{-1} A T$ (трансформират се наблюдаемите A),

където $T : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ е унитарна (и обратима) трансформация на Хилбертовото пространство на състоянията $\mathcal{H}$, $T^* = T^{-1}$, а връзката между двете картини е такава, че средните стойности се трансформират еднакво:

$$\langle \phi | A \phi \rangle \mapsto \langle T\phi | A T \phi \rangle = \langle \phi | T^{-1} A T \phi \rangle .$$

В тази лекция ще разгледаме структурата на уравненията за движение за наблюдаемите (т.е., в картината на Хайзенберг). Това ще ни даде основание да направим връзка с класическата механика и да допълним нашата аксиоматична схема на квантовата механика с така наречения принцип на съответствието.

Преди това обаче, ще направим една дикусусия по конвенции, което макар и да няма задължителен (логически) характер, е от "естетично" значение.

Нека приложим последователно две квантови трансформации:

$$A \mapsto T_1^{-1} A\, T_1 \mapsto T_2^{-1}\left(T_1^{-1} A\, T_1\right) T_2 = \underbrace{\left(T_1 T_2\right)^{-1} A \left(T_1 T_2\right)}$$

(действие на T_2) $\circ$ (действие на T_1)

Виждаме, че реда на прилагане на трансформациите е противоположен на реда на произведение, $T_1 T_2$, на представящите трансформации T_1 и T_2. Това би се коригирало, а положим закона за трансформация на наблюдаемите да е от вида:

$$A \mapsto T A T^{-1} . \qquad (\text{left } A)$$

Тогава обаче при еквивалентното описание в картината на Шрьодингер състоянията ще се трансформират по формулата:

$$\phi \mapsto T^{-1} \phi .$$

<u>Забележка.</u> От гледна точка на теория на групите тук имаме дилема за избор между така наречените ляво и дясно действия. За повече подробности – виж допълнението към Лекция 3.

Ние ще приемем по-нататък в нашия курс картината на Хайзенберг за "водещо описание". Ето защо ще изберем и трансформационния закон (left A).

Тогава обаче еволюцията при състоянията ще "тече на дясно"

Например, неравенствата $\tau_1 > \dots > \tau_n$ в областите на интегриране ще се обърнат, $\tau_1 < \dots < \tau_n$.

1. Уравнения за движение в картината на Хайзенберг

Както отбелязахме в миналата лекция основен интерес представляват автономните динамични системи, при които операторите на еволюция приемат вида:

$$U(t) = e^{itH}, \quad a \quad H = \frac{1}{i}\frac{d}{dt}U(t)\Big|_{t=0} \text{ е оператора на Хамилтон.}$$

Тук t играе ролята на времето протекло между началния и крайния момент и затова законът за композиция приема вида

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1+t_2) \quad (t_1, t_2 \in \mathbb{R}), \qquad U(0) = \hat{1}.$$

<u>Забележка</u>. Такива системи $\{U(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ от унитарни оператори се наричат "едно-параметрични унитарни групи".

Уравнението на Шрьодингер за операторите на еволюция има вида

$$\frac{dU}{dt}(t) = i\,H\,U(t) = i\,U(t)\,H,$$

където второто равенство е следствие от факта, че $U(t) = e^{itH} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(itH)^n$ е функция на H и следователно, комутира с H.

Една наблюдаема A ще еволюира в картината на Хайзенберг по формулата

$$A(t) = e^{itH}A\,e^{-itH},$$

съгласно конвенцията по-горе.

Тогава: $$\frac{dA}{dt}(t) = \underbrace{\frac{dU}{dt}}(t)\, A\, U(t)^{-1} + U(t)\, A\, \underbrace{\frac{dU^{-1}}{dt}}$$

$$= iH\, \underbrace{U(t)\, A\, U(t)^{-1}}_{A(t)} - \underbrace{U(t)\, A\, U(t)^{-1}}_{A(t)}\, \frac{dU}{dt}\, U^{-1}$$

$$= iH\, A(t) - A(t)\, iH\, \cancel{U(t)}\, \cancel{U(t)^{-1}}$$

$$= i\big(H\cdot A(t) - A(t)\cdot H\big) =: i\,[H, A(t)],$$

където сме положили

$$[A, B] := A\cdot B - B\cdot A,$$

което наричаме комутатор на A и B. И така,

$$\frac{dA(t)}{dt} = i\,[H, A(t)] \qquad (H)$$

представлява и търсеното диференциално уравнение за движение, т.е., за еволюцията на наблюдаема A в картината на Хайзенберг. (То може да се нарече също и "квантово уравнение за движение".)

Уравненията (H) ще ни дадат възможност да направим съответствие с понятия от класическата механика. Преди това обаче ще обърнем внимание на въведеното ново понятие комутатор, което стои в началото на няколко области от математиката.

2. Свойства на комутаторите

Непосредствено от определението $[A,B] = A\cdot B - B\cdot A$ следва:

(C1) антисиметрия: $[A,B] = -[B,A]$.

(C2) Правило на Лайбниц (Leibniz rule):

$$[A, B\cdot C] = [A,B]\cdot C + B\cdot[A,C].$$

Ще отбележим алгебричната аналогия с правилото за диференциране на произведение на матрично-значни функции:

$$\frac{d}{dt}\big(B(t)\cdot C(t)\big) = \frac{dB(t)}{dt}\cdot C(t) + B(t)\cdot\frac{dC(t)}{dt}$$

По такъв начин, лявата и дясната страни на уравнението (H) се държат еднакво върху произведения.

Прилагайки правилото на Лайбниц върху самия комутатор:

$$[A,[B,C]] \equiv [A, B\cdot C] - [A, C\cdot B]$$

$$= \underline{[A,B]\cdot C} + \underline{\underline{B\cdot[A,C]}} - \underline{\underline{[A,C]\cdot B}} - \underline{C\cdot[A,B]}$$

получаваме:

(C3) тъждество на Якоби (Jacobi's identity)

$$[A,[B,C]] = [[A,B],C] + [B,[A,C]].$$

(C4) Реалност: $[A^*, B^*] = -[A,B]^*$.

Забележка. Ако V е векторно пространство снабдено с дву-местна билинейна операция $\mu: V \times V \to V$ и $\delta: V \to V$ е линейно изображение такова, че за $\forall u, v \in V$:

$$\delta(\mu(u,v)) = \mu(\delta(u), v) + \mu(u, \delta(v))$$

то казваме, че δ е диференциране на операцията μ. Смисълът на диференциранията е на "инфинитезимални" морфизми: ако $\alpha_\varepsilon: V \to V$ е еднопараметрично семейство от морфизми на операцията μ:

$$\alpha_\varepsilon(\mu(u,v)) = \mu(\alpha_\varepsilon(u), \alpha_\varepsilon(v))$$

зависещо от параметър $\varepsilon \in \mathbb{R}$ така, че:

$$\alpha_\varepsilon(u) = u + \varepsilon \cdot \delta(u) + O(\varepsilon^2), \text{ тогава}$$

$$\alpha_\varepsilon(\mu(u,v)) = \mu(u,v) + \varepsilon \underline{\delta(\mu(u,v))} + O(\varepsilon^2)$$

$$\|$$

$$\mu(\alpha_\varepsilon(u), \alpha_\varepsilon(v)) = \mu(u,v) + \varepsilon\left(\underline{\mu(\delta(u),v) + \mu(u,\delta(v))}\right) + O(\varepsilon^2)$$

т.е., δ е диференциране на μ.

И така, едноместната операция "комутатор с A", $[A, \sqcup]$, е диференциране както на произведението "$\cdot$" така и на самия комутатор $[\sqcup, \sqcup]$.

Виждаме, че свойствата (C1) и (C3) включват единствено комутатори. Те определят алгебрична структура наречена алгебра на Ли / Lie algebra. По-подробно, алгебра на Ли е векторно пространство V снабдено с дву-местна билинейна операция

$$V \times V \longrightarrow V \ : \ (u, v) \longmapsto [u, v]$$

наричана скобка на Ли, която е антисиметрична, $[u,v] = -[v,u]$ $(\forall u, v \in V)$ и изпълнява тъждеството на Якоби (C3), което с отчитане на антисиметрията се записва в еквивалентна форма:

$$[u,[v,w]] + \underbrace{[v,[w,u]] + [w,[u,v]]}_{\text{циклични пермутации на } u,v,w \in V} = 0.$$

Трите свойства (C1), (C2) и (C3) определят алгебрична структура наречена (евентуално некомутативна) алгебра на Поасон / (noncommutative) Poisson algebra. С други думи, това е асоциативна алгебра $\mathcal{A}$, която е допълнително снабдена със структура на алгебра на Ли, така че скобката на Ли е диференциране на произведението (т.е., изпълнява се правилото на Лайбниц (C2)). Отбелязваме, че в една абстрактна (некомутативна) Поасонова алгебра скобката на Ли може да не бъде непременно равна на комутатора, макар от друга страна, всяка асоциативна алгебра да се превръща в Поасонова спрямо комутатора.

Пример. Ако $M_n(\mathbb{C})$ е асоциативната алгебра на $n \times n$ комплексни матрици и $\delta: M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$ е диференциране на произведението, то се доказва, че δ е "вътрешно диференциране" в смисъл, че $\exists X \in M_n(\mathbb{C})$ такава, че

$$\delta(A) = [X, A] \quad \forall A \in M_n(\mathbb{C}).$$

Следователно, всяка скобка на Ли върху $M_n(\mathbb{C})$, която я превръща в некомутативна алгебра на Поасон трябва да е пропорционална на комутатора.

Забележка. Обикновено под "Поасонова алгебра" (т.е. "алгебра на Поасон") без допълнителни прилагателни се разбира комутативна алгебра на Поасон, т.е. произведението е комутативно. В този случай скобката на Ли в алгебрата, която също наричат и скобка на Поасон, не може да идва от комутатор понеже алгебрата е комутативна и комутаторите са нула. Така, в този случай скобката на Поасон (Ли) е напълно независима структура. Това е именно структурата на класическата механика, която ще разгледаме по-нататък в тази лекция. По такъв начин, преходът от комутатор към скобка на Поасон се явява основния свързващ елемент между квантовата и класическата механика.

Забележка. Съществува силна връзка между алгебри на Ли и "непрекъснати" групи или по-точно многообразия с гладка структура на група, наричани групи на Ли. В определен смисъл алгебрата на Ли можем да си мислим като инфинитезималната структура на груповото произведение в околност на единицата.

Да вземем например групата на обратими $n \times n$ матрици $GL(n)$. Всяка такава матрица може да се запише като експонента

$$e^{A} = \hat{1} + A + \frac{1}{2}A^2 + \cdots + \frac{1}{n!}A^n + \cdots,$$

където $A \in M_n$ е $n \times n$-матрица. Това представяне, макар и по принцип нееднозначно, може да послужи в околност на $\hat{1}$ за еднозначна параметризация. Експонентата има освен това и важно мултипликативно свойство:

$$e^A e^B = e^{A+B} \quad \text{ако} \quad A \cdot B = B \cdot A.$$

Това свойство се обобщава за произволни $A, B \in M_n$ по формулата на Бейкър-Камбел-Хаусдорф / Baker-Campbell-Hausdorff (BCH)

$$e^A e^B = e^{A + B + \frac{1}{2}[A,B] + \cdots}$$
$$= e^{A + B + BCH'(A,B)},$$

където $BCH'(A,B)$ е безкраен ред включващ само вложени (итерирани) комутатори:

$$BCH'(A,B) = \frac{1}{2}[A,B] + \frac{1}{12}[A,[A,B]] - \frac{1}{2}[B,[A,B]] + \cdots.$$

В частност, при параметризацията e^A в околност на $\hat{1} \in GL(n)$ $(A \to 0)$ ние виждаме, че отклонението от адитивността на произведението във втори порядък (по A и B) се дава от комутатора.

3. Класическа граница и принцип на съответствието

3.1. Оператор на Хамилтон и енергия

Особен интерес при автономните динамични системи представляват запазващите се величини в хода на еволюцията, които както още казваме, задават закони за запазване. В теорията на обикновените диференциални уравнения запазващите се величини (функции) се наричат първи интеграли. В случая на квантова динамична система, от уравненията (H) за еволюция на наблюдаеми получаваме, че

$$A \text{ е запазваща се величина} \iff [H, A] = 0 .$$

В частност, H и A са едновременно измерими. Също така,

$$[H, H] = 0 . \implies H \text{ е запазваща се величина.}$$

От друга страна, енергията на системата е един от основните примери на запазваща се величина. Разбира се това само по себе си не е достатъчен мотив да отъждествим оператора на Хамилтон H с операторът представящ енергията. В полза на такова отъждествяване обаче има друг основен мотив: както отбелязахме уравненията (H) за еволюцията на наблюдаемите имат естествен аналог в класическата механика и по специално, в Хамилтоновата механика. Там те имат вида

$$\frac{dA}{dt} = \{H, A\} ,$$

където H е функцията на Хамилтон, представяща именно енергията на системата, а $\{\sqcup, \sqcup\}$ е така наречената скобка на Поасон в класическата механика. Тази скобка превръща алгебрата от наблюдаеми в класическата механика в Поасонова алгебра. Преглед на тези понятия ние ще направим по-нататък в лекцията.

<u>Постулат.</u> Операторът на Хамилтон H представя наблюдаемата величина съответстваща на енергията на системата.

От гледна точка на размерности обаче, връзката

$$\frac{d}{dt} = i\,[H, \sqcup]$$

идваща от уравненията (H) означава, че H има за сега размерност на $1/t$, т.е., на 1/време.

Да си припомним от първата лекция, че

$$\text{Енергия} \cdot \text{време} = [\hbar] \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{размерността на} \\ \text{константата на Планк.} \end{array} \right.$$

Следователно, 1/време = Енергия / $[\hbar]$ и така, операторът на Хамилтон ще придобие размерност на енергия, ако ние го предефинираме като: $$H \mapsto \frac{1}{\hbar} H,$$

което следва се положи във всички досегашни формули, съдържащи хамилтониани, като например:

$$U(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H \cdot t}, \qquad \frac{dU}{dt} = \frac{i}{\hbar} H\, U(t)$$

$$\frac{dA}{dt}(t) = \frac{i}{\hbar}\,[H, A(t)].$$

Разбира се, това предефиниране може да се избегне като положим да работим в система от единици в която $\hbar = 1$, както обяснихме в първата лекция. В този пункт обаче ние ще искаме да изследваме явната роля на контантата на Планк $\hbar$.

3.2. Класическа граница.

Нека си представим абстрактно $\hbar$ като един евентуално свободен параметър в квантовата физика и да разгледаме границата

$$\hbar \longrightarrow 0 .$$

Това се нарича "класическа граница" (classical limit) тъй като ние очакваме, че при този преход квантовата механика ще премине в класическа механика. Разбира се, това е една чисто мислена процедура: до днес още не е открит уредът, който изменя константата на Планк $\hbar$. Квантовите системи обаче при определени условия, като например:

$$\left(\text{Енергия на системата}\right) \cdot \left(\text{Време за еволюция}\right) \gg \hbar$$

могат да "емитират" прехода $\hbar \to 0$ и да се поддават на класическо описание.

И така, при прехода $\hbar \to 0$ в уравненията (H) за изменение на наблюдаемите получаваме неопределеност:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H, A(t)\right] \sim \frac{0}{0} .$$

Наистина, освен че $\hbar \to 0$ ние очакваме при този преход наблюдаемите да станат комутиращи (и следователно, едновременно измерими), както е в класическата физика; и затова

$$\left[H, A(t)\right] = HA - AH \longrightarrow 0 \quad (\text{при } \hbar \to 0) .$$

Ние ще постулираме обаче, че горната неопределеност има граница.

Постулат. При границата $\hbar \to 0$ асоциативната алгебра на наблюдаемите преминава в комутативна алгебра, а границата

$$\frac{i}{\hbar}[A, B] \xrightarrow[\hbar \to 0]{} \{A, B\}$$

съществува за всеки две наблюдаеми величини A и B, и задава скобка на Поасон, превръщайки граничната комутативна алгебра на наблюдаемите в алгебра на Поасон. Тази именно Поасонова алгебра съответства на класическата динамична система, която е класическата граница на изходната квантова динамична система.

Коментари. 1.) Горният постулат може да се приеме като една преформулировка на така наречения "принцип на съответствието" (correspondence principle) на Нилс Бор (Niels Bohr).

2.) Обратният преход от $\hbar = 0$ към $\hbar \neq 0$, т.е., от класическа към квантова система носи името "квантуване" и е, по-принцип нееднозначна процедура, която често се свързва от множество допълнителни физични съображения (според случаите).

Следват два допълнителни математически коментари, които излизат извън задължителния материал на лекциите.

3.) При математическото уточнение на горния постулат ние следва да разглеждаме едно-параметрична фамилия от произведения

$$*_{\hbar} : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{A}$$

във векторното пространство $\mathcal{A}$ на асоциативната алгебра на наблюдаемите, такова че $*_0$ е комутативно и

$$\frac{i}{\hbar}\left(A *_\hbar B - B *_\hbar A\right) \xrightarrow[\hbar \to 0]{} \{A, B\}$$

задава структура на алгебра на Поасон в граничната комутативна алгебра. Тази постановка е изходната позиция за така нареченото деформационно квантуване (Deformation Quantization). В тази област има даден Филдсов медал (Fields medal) през 1998 на Максим Концевич (Maxim Kontsevich).

4.) От гледна точка на предходния коментар константата на Планк $\hbar$ е параметър на деформация: деформира се структурата на асоциативна алгебра в пространството от наблюдаеми от комутативна към некомутативна алгебра. Подобни деформации във физиката се въвеждат и от другите две фундаментални константи c и k_g, с които се запознахме в първата лекция. Скоростта на светлината c деформира причинната структура на пространството и времето (ние ще разгледаме тази тема по-подробно в следващи лекции). Гравитационната константа k_g е свързана с допълнителна деформация в геометрията на пространството и времето идваща от въздействието на материята върху него. Граничните случаи

$$\hbar = 0\,, \qquad \frac{1}{c} = 0 \quad (c = \infty)\,, \quad k_g = 0$$

могат да се разглеждат в известен смисъл, който няма напълно да разтълкуваме, като "изродени", "нестабилни" структури. Нека да илюстрираме тази изроденост за случая на $\hbar = 0$.

Както отбелязахме вече, в случая на комутативна алгебра, която е и Поасонова алгебра, скобката на Поасон е напълно независима структура от произведението. В известен смисъл, който най-добре се илюстрира от теоремата на Гелфанд (Gelfand) за комутативни (C^*) алгебри, произведението закодира единствено топологичната (и евентуално, гладката) структура на фазовото пространство (т.е. пространството на състоянията в класическата механика). Скобката на Поасон обаче е свързана с допълнителна геометрична структура върху множеството (многообразието) от състояния. Тази структура се нарича симплектична структура и е обект на симплектичната геометрия.

От друга страна, при $\hbar \neq 0$, некомутативния аналог на скобката на Поасон – комутаторът $[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$, се поражда от произведението, т.е., тази структура се индуцира още на ниво "квантова статистика". В тази връзка ще припомним и примера ни от страница 8 по-горе, в който отбелязахме (без доказателство), че върху алгебрата $M_n(\mathbb{C})$ има единствена скобка, с точност до мултипликативна константа, която задава структура на некомутативна Поасонова алгебра.

Така, именно пълната независимост на Поасоновата структура при $\hbar = 0$ е "израждането", което по-горе отбелязахме.

4. Преглед на класическата механика.

В лекциите ни до тук ние изложихме основите на квантовата механика по независим път от класическата механика и едва на последния етап ние направихме връзка между двете теории. В тази точка ние ще направим преглед на необходимите за курса понятия от класическата механика с минимални допълнения целящи да направят изложението логически по-последователно. От гледна точка на настоящия курс класическата механика ще има значение единствено като "доставяща" модели, които ние следва да трансформираме в квантови модели, т.е., да ги квантуваме. Самият произход ("генезис") на тези модели обаче остава извън целите на настоящия курс.

4.1. Нютонова механика

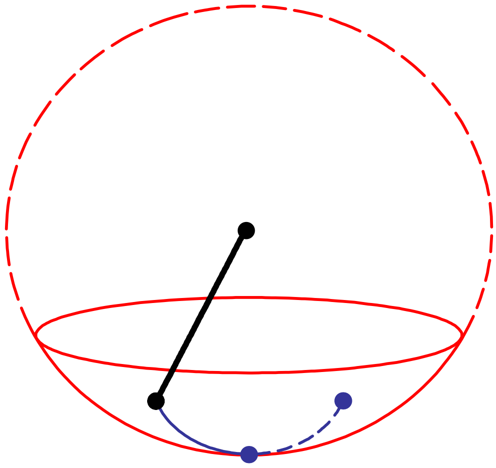
В Нютоновата механика ние описваме движението на една система, като крива $q(t) = (q_1(t), \ldots, q_n(t)) \equiv (q_j(t))_{j=1}^{n}$ в пространство параметризирано с "вътрешни" координати

$$q = (q_1, \ldots, q_n)$$

и наричано конфигурационно пронстранство на системата. На следващата фигура е изобразен примера на махало, чието конфигурационно е сфера (изобразена с червен цвят), а траекторията на движение е определена дъга (нарисувана в синьо) върху тази сфера.

N. N.

25. 10. 13



Числото n е един от основните параметри на системата и се нарича брой на степените на свобода.

Основният въпрос е каква информация трябва да зададем в един определен момент от време t_0 за да определим напълно закона за движение $q(t)$ на системата. Отговорът се дава от втория принцип на Нютон: освен положението на системата $q(t_0)$ в момента t_0 ние трябва да зададем и нейната скорост:

$$\dot{q}(t_0) = \left(\dot{q}_j(t_0)\right)_{j=1}^{n} = \left(\frac{dq_j}{dt}(t_0)\right)_{j=1}^{n}.$$

С това е определен закона за движение $q(t)$ и в частност

$$\ddot{q}(t_0) := \left(\frac{d^2 q_j}{dt^2}(t_0)\right)_{j=1}^{n} = \text{функция на } q(t_0) \text{ и } \dot{q}(t_0).$$

С други думи, ускорението на системата може да се представи като функция на положението q и скоростта $\dot{q}$ на системата в даден момент от време:

$$\left|\, \ddot{q}_j(t) = A_j\big(q(t), \dot{q}(t), t\big), \quad j = 1, \dots, n. \qquad (N)\right.$$

Получаваме система от обикновени диференциални уравнения от втори ред, които обратно, определят еднозначно еволюцията на системата при зададени начални условия, $(q(t_0), \dot{q}(t_0))$.

Всичко това може да се изкаже лаконично като: законите за движение на една механична система са диференциални уравнения от втори ред.

От теорията на обикновените диференциални уравнения е известно, че произволна система от обикновени диференциални уравнения от произволен ред е еквивалентна на система от първи ред (с определени връзки). Това в случая на механиката се реализира, като се обединят координатите и скоростите на системата, $(q, \dot{q})$, в една обща точка от пространство наречено фазово пространство на системата. Така, именно точките на фазовото пространство задават пълна информация за състоянието на системата в даден момент от време и оттам и за нейната еволюция.

4.2. Лагранжева механика.

При Лагранжевата механика уравненията за движение (N) се получават от принципа за най-малкото действие (action principle). Предполага се, че е зададена функция върху множеството от всевъзможните закони за движение $\{q(t)\}$, която е от вида

$$S\left(\{q(t)\}_t\right) = \int_{t_0}^{t_1} dt\, L\left(q(t), \dot{q}(t), t\right)$$

и се нарича действие (или още, функционал на действието). Функцията $L(q, \dot{q}, t)$ участваща в S се нарича лагранжиан.

Така, $S(\{q(t)\}_t)$ е определен за произволна крива $\{q(t)\}_t$, но кривите отговарящи на реално движение съответстват на минимум на S или по-точно, на екстремум на S. Със средствата на вариационното смятане това условие се записва, като нулиране на вариационната производна на S върху законите за движение:

$$\left|\ \frac{\delta S}{\delta q_j(t)} = 0\ , \qquad j = 1, \ldots, n\ . \qquad (S)\right.$$

Уравненията (S) се наричат уравнения на Лагранж. Ние ще въведем правилата на вариационното смятане по-късно в нашия курс. В настоящия момент ще отбележим единствено, че при определени условия (така наречената неизроденост на лагранжиана) системата от уравнения (S) може да се приведе във вида (N), т.е., да се изрази спрямо ускоренията. Обратният преход обаче: зададена система от уравнения (N) да се изведе от някакво действие е в много по-ограничени случаи. В допълнение, дори и да е възможно, то може да се стане за различни действия.

Така, действието (и Лагранжиана в него) се явява допълнителна структура към уравненията за движение. Тази структура е свързана с отделянето на специални запазващи се величини (т.е., закони за запазване) главно място от които заема енергията на системата. Тя се дефинира като:

$$H(q, \dot{q}, t) = \sum_{j=1}^{n} \dot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - L$$

и се нарича функция на Хамилтон или още хамилтониан.

Динамични системи за които L, а от там и функциите H и A_j $(j = 1, \ldots, n)$ не зависят от времето t се наричат автономни.

4.3. Хамилтонова механика

Споменатото по-горе условие за неизроденост на Лагранжиана е свързано с (локалната) обратимост на следната трансформация във фазовото пространство:

$$(q, \dot{q}) \mapsto (q, p) \quad , \text{където } p = (p_j)_{j=1}^{n} := \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right)_{j=1}^{n},$$

наречена трансформация на Льожандър (Legendre), а функциите p се наричат (обобщени) импулси (спрегнати на координатите q). В координатите (q, p) уравненията за движение $(\mathcal{S})$ приемат по-симетричен вид – това са уравненията на Хамилтон:

$$\left| \begin{aligned} \dot{q}_j &= \frac{\partial H}{\partial p_j} = \{H, q_j\} \\ \dot{p}_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} = \{H, p_j\} \end{aligned} \right. \qquad (j = 1, \ldots, n), \qquad (H)$$

където за произволни функции $f(q,p)$ и $g(q,p)$, тяхната скобка на Поасон $\{f, g\}$ е отново функция на q и p, която е определена по формулата:

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} - \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} \right) . \qquad (PB)$$

Непосредствено се проверява с помощта на правилата на диференциалното смятане, че алгебрата на гладките функции върху фазовото пространство се превръща в Поасонова алгебра спрямо скобката (PB).

В частност, за скобките на Поасон на основните координатни функции получаваме:

$$\{q_j, q_k\} = 0 = \{p_j, p_k\}, \qquad \text{(classical CCR)}$$

$$\{p_j, q_k\} = \delta_{j,k} := \begin{cases} 1 & \text{при } j = k \\ 0 & \text{при } j \neq k \end{cases}$$

нарича се символ на Кронекер (Kronecker' symbol).

Съотношенията (classical CCR) ще наречем класически канонични "комутационни" съотношения / canonical "commutation" relations (CCR).

Съществуват и други координатни системи

$$(q,p) \mapsto (q',p'), \qquad \left| \begin{array}{l} q'_j = q'_j(q,p) \\ p'_j = p'_j(q,p) \\ \quad j = 1,\dots,n \end{array} \right.$$

със свойството:

$$\{q'_j, q'_k\} = 0 = \{p'_j, p'_k\},$$

$$\{p'_j, q'_k\} = \delta_{j,k}.$$

Такива координати се наричат канонични координати, а дифеоморфизми F (т.е., взаимно-еднозначни гладки изображения, които имат гладки обратни изображения) на фазовото пространство, които индуцират преход от едни канонични координати към други нонични координати,

$$(q,p) \overset{F}{\longmapsto} (q',p'),$$

се наричат канонични трансформации или още симплектични изображения.

Друг основен факт е, че във всички канонични координати скобката на Поасон се дава с едни и същи израз:

ако $f(q,p) = f'(q',p')$ и $g(q,p) = g'(q',p')$, то

$$\{f,g\} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial f'}{\partial p'_j} \frac{\partial g'}{\partial q'_j} - \frac{\partial f'}{\partial q'_j} \frac{\partial g'}{\partial p'_j} \right).$$

По такъв начин каноничните трансформации F се явяват автоморфизми на класическите каноничнични съотношения (classical - CCR) и фактически, индуцират автоморфизми на класическата алгебра на Поасон по формулата:

$$f \longmapsto f \circ F \quad (\text{или, } f \longmapsto f \circ F^{-1} \text{ при ляво действие}).$$

Така, каноничните трансформации се явяват класическия аналог (класическата граница) на квантовите трансформации.

В частност, доказва се, че еволюцията, която се поражда от уравненията на Хамилтон,

$$(q(t), p(t)) = F_t(p,q), \quad F_{t_1} \circ F_{t_2} = F_{t_1+t_2}, \quad F_0 = id,$$

се задава от едно-параметрична фамилия от канонични трансформации.

5. Канонично квантуване

5.1. Канонични комутационни съотношения

При квантуване на класическите канонични съотношения (classical-CCR) ние заменяме q_j и p_j $(j=1,\dots,n)$ със самоспрегнати оператори $\hat{q}_j, \hat{p}_j$ в Хилбертово пространство $\mathcal{H}$ така, че квантовите скобки на Поасон да отговарят на класическите:

$$\{\hat{q}_j, \hat{q}_k\} = 0 = \{\hat{p}_j, \hat{p}_k\}, \quad \{\hat{p}_j, \hat{q}_k\} = \delta_{j,k} \cdot \hat{1},$$

където припомняме: $\{A, B\} := \frac{i}{\hbar}[A, B] \equiv \frac{i}{\hbar}(A \cdot B - B \cdot A)$.

Следователно,

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{q}_j, \hat{q}_k] = 0 = [\hat{p}_j, \hat{p}_k], \\ &[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\, \delta_{j,k} \cdot \hat{1} \qquad (j,k = 1,\dots,n) \end{aligned}\right\} \quad (\text{CCR})$$

(където в последното съотношение сме преминали $[\hat{p}_k, \hat{q}_j] = -[\hat{q}_j, \hat{p}_k]$). Съотношенията (CCR) се наричат (квантови) канонични комутационни съотношения (и в този случай, те са комутационни съотношения във буквалния смисъл).

Първо наблюдение: $[q_k, p_k] \neq 0$. $\Rightarrow$ q_k и p_j при $j=k$ не са едновременно измерими! По детайлно следствие за невъзможността за едновременна измеримост на q_k и p_k се съдържа в така наречените съотношения за неопределеност на Хайзенберг (Heisenberg's uncertainty relations), на които няма да се спираме тук (въпреки "култовото" им значение в цялата квантова физика).

<u>Твърдение.</u> Хилбертовото пространство $\mathcal{H}$ на състоянията, в което се реализират каноничните комутационни съотношения е безкрайно-мерно.

<u>Доказателство.</u> Да допуснем, че каноничните комутационни съотношения дори само за една двойка координата и импулс, $\hat{q}$ и $\hat{p}$, имат реализация като $N \times N$ комплексни матрици:

$$\hat{q} = (q_{j,k})_{N\times N}, \quad \hat{p} = (p_{j,k})_{N\times N}, \quad \hat{q}\cdot\hat{p} - \hat{p}\cdot\hat{q} = i\hbar\cdot\hat{1}.$$

$$\hat{1} = (\delta_{j,k})_{N\times N} \implies \sum_{l=1}^{N}\left(q_{j,l}\,p_{l,k} - p_{j,l}\,q_{l,k}\right) = i\hbar\cdot\delta_{j,k}.$$

Полагайки $j=k$ и сумирайки по $k=1,\dots,N$:

$$\underbrace{\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(q_{k,l}\,p_{l,k} - p_{k,l}\,q_{l,k}\right)}_{0 \text{ - сумите се съкращават}} = \sum_{j=1}^{N} i\hbar\cdot\underbrace{\delta_{j,j}}_{1} = i\hbar\cdot N$$

- противоречие: $0 = N > 0$. $\Rightarrow N = \infty$. $\square$

<u>Забележка.</u> 1) По друг начин формулирано, ние взехме следата, $(\mathrm{Tr}\,A = \sum_j A_{j,j})$ от двете страни на $\hat{q}\cdot\hat{p} - \hat{p}\cdot\hat{q} = i\hbar\cdot\hat{1}$ и използвахме цикличното свойство $\mathrm{Tr}(A\cdot B) = \mathrm{Tr}(B\cdot A)$.

2.) Ако знакът в каноничните комутационни съотношения беше "+", например $A\cdot B + B\cdot A = \hat{1}$, то такива съотношения се наричат Клифордови (Clifford) или още канонични антикомутационни съотношения. Те вече имат крайно-мерна реализация.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A\cdot B + B\cdot A = \hat{1}, \quad A\cdot A = 0 = B\cdot B.$$

Подобни примери се дават още и от матриците на Паули (Pauli) и Дирак (Dirac).

5.2. Операторна реализация.

В тази точка ще приведем операторна реализация на каноничните комутационни съотношения (CCR) в Хилбертово пространство. Такава реализация ще получим в подходящо векторно пространство от функции $\psi(q)$. Преди всичко забелязваме, че от правилото на Лайбниц имаме:

$$\frac{\partial}{\partial q_j}\left(q_k\,\psi(q)\right) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial q_j}(q_k)}_{\delta_{j,k}}\,\psi(q) + q_k\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q)$$

и следователно това може да запишем като операторно равенство

$$\left[\hat{q}_k , \frac{\partial}{\partial q_j}\right] \equiv \hat{q}_k \circ \frac{\partial}{\partial q_j} - \frac{\partial}{\partial q_j}\circ\hat{q}_k = -\delta_{j,k}\,,$$

където $\hat{q}_k$ означава операторът на умножение по q_k:

$$\hat{q}_k\psi(q) := q_k\psi(q) \qquad (k = 1,\ldots,n)$$

върху векторното пространство от функции $\psi(q)$. Така, ако положим

$$\hat{p}_j\,\psi(q) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q) \qquad (j=1,\ldots,n)\,,$$

то ще получим операторна реализация на (CCR), като начало във векторното пространсво на диференцируемите функции $\psi(q) \in C^1(\mathbb{R}^n)$.

На нас обаче ни е необходима реализация със самоспрегнати оператори в Хилбертово пространство. Ние ще построим реализация с ермитови оператори в пред-Хилбертово пространство:

$$\langle \phi | \hat{q}_k \psi \rangle = \langle \hat{q}_k \phi | \psi \rangle \text{ и } \langle \phi | \hat{p}_k \psi \rangle = \langle \hat{p}_k \phi | \psi \rangle$$

$(k = 1, \ldots, n)$. Това е векторното на гладки комплексни функции върху $\mathbb{R}^n$ с "компактен носител":

$$C_0^\infty(\mathbb{R}^n) := \{ \psi(q) \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \,|\, \psi(q) = 0 \text{ ако } |q| \gg 1 \}$$

(т.е., $\psi(q)$ става $= 0$ за достатъчно големи $q \in \mathbb{R}^n$).

Скаларното произведение се дава по формулата:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} d^n q \; \overline{\phi(q)} \; \psi(q).$$

От тук, равенствата $\langle \phi | \hat{q}_k \psi \rangle = \langle \hat{q}_k \phi | \psi \rangle$ следват непосредствено, а $\langle \phi | \hat{p}_k \psi \rangle = \langle \hat{p}_k \phi | \psi \rangle$ се получават с интегриране по части:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n q \; \overline{\phi(q)} \; \frac{\partial \psi}{\partial q_k}(q) = - \int_{\mathbb{R}^n} d^n q \; \overline{\frac{\partial \phi}{\partial q_k}(q)} \; \psi(q)$$

$$+ \underbrace{\left(\overline{\phi(q)} \; \psi(q) \right) \Big|_{q_k \to -\infty}^{q_k \to \infty}}_{0 \text{ – поради условието за "компактен носител".}}$$

Тук обаче следват редица уточнения от функционалния анализ, на които ние няма да държим в този курс, но за пълнота ще ги направим.

Математически уточнения. 1.) Хилбертовото пространство, което се поражда от описаното по-горе пред-Хилбертово пространство $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, с други думи, попълнението на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, е пространството $L^2(\mathbb{R}^n)$, на квадратично интегруемите (по Лебег / Lesbegue) комплексно-значни функции върху $\mathbb{R}^n$.

2.) Операторите $\hat{q}_k$ и $\hat{p}_k$ $(k=1,\dots,n)$ се оказват "съществено самоспрегнати" върху $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, т.е., след минимална естествена процедура по "затваряне" те стават самоспрегнати.

3.) При определени уточняващи условия построеното от нас операторно представяне на (CCR) се оказва единствено с точност до унитарен изоморфизъм. Това се съдържа в известната теорема на Фон Нойман (von Neumann) за каноничните комутационни съотношения. Важно предположение в тази теорема е, че числото n (броя на q_j и също на p_j, което нарекохме брой на степените на свобода) е крайно число. По правило, полевите системи, към които във бъдеще ще насочим нашето внимание, са системи с безкраен брой степени на свобода. В този случай теоремата на Фон Нойман за единствеността на представянето на каноничните комутационни съотношения не е вярна. Този математематически феномен е в основата на редица проблеми при построяването на математически модели на взаимодействащи квантови полета.

3.) Операторите $\hat{q}_k$ и $\hat{p}_k$ $(k=1,\dots,n)$ са задължително неограничени оператори, което затруднява формулировката на теоремата на Фон Нойман и нейните обобщения при $n=\infty$. Техническо упростяване се получава ако преминем към унитарните експоненти $\exp(i q_k \alpha)$, $\exp(i p_k \beta)$ $(\alpha, \beta \in \mathbb{R})$, които (са ограничени оператори) и изпълняват така наречените съотношения на Вайл (Weyl). Ние ще им направим обзор в отделно допълнение.

5.3. Канонично квантуване.

Каноничното квантуване е процедура, при която конструираме квантова динамична система изхождайки от класическа хамилтонова система с хамилтониан $H(q,p)$ и "заместваики" комутиращите променливи $q=(q_j)_{j=1}^{n}$ и $p=(p_j)_{j=1}^{n}$ с оператори $\hat{q}_j$ и $\hat{p}_j$, които изпълняват (CCR). Тук обаче срещаме две главни трудности.

<u>Трудност I</u>. В общия случай не съществува понятие за функция от некомутиращи опеатори.

<u>Частично решение 1.)</u> Възможно е $H(q,p)$ да е полиномиална функция на q и p и по такъв начин да се конструира от краен брой прилагания на основните аритметични операции:

- сума на две (или повече) наблюдаеми;
- произведение на наблюдаеми;
- умножение на наблюдаема по число.

За произведението на наблюдаеми можем да вземем например Жордановото произведение (от първата лекция):

$$A \bullet B := \frac{1}{2}\left(A \cdot B + B \cdot A\right).$$

То обаче не е асоциативно:

$$A \bullet (B \bullet C) = (A \bullet B) \bullet C + \frac{1}{4}\left[[A, C], B\right].$$

Проверка:

$$A \cdot (BC + CB) + (BC + CB) \cdot A = \begin{cases} (AB + \cancel{BA}) \cdot C + C \cdot (\cancel{AB} + BA) \\ + (AC - \cancel{CA}) \cdot B - B \cdot (\cancel{AC} - CA). \end{cases}$$

Този вторичен проблем носи понякога името "нееднозначност в операторната подредба".

Пример: $q^2 \bullet (\underbrace{p^2 \bullet p}_{p^3}) = (q^2 \bullet p^2) \bullet p - \hbar^2 p$,

понеже: $\frac{1}{4}[\underbrace{[q^2, p]}_{2i\hbar q}, p^2] = \frac{i\hbar}{2}[q, p^2] = (i\hbar)^2 p$.

Възникналият вторичен проблем на нееднозначност в операторната подредба се заобикаля по следния начин. Виждаме, че промяната в реда на произведенията в даден моном на хамилтониана рефлектира върху мономите от по-ниска степен. Ние обявяваме коефициентите пред тези мономи за произволни параметри, подлежащи на определяне след сравняване с експеримента. Тази процедура се нарича "ренормализация", а произволът свързан с нея – ренормализационен произвол. В К.Т.П. ренормализацията се съчетава по красив и нетривиален начин с процеса на отстраняване на разходимости.

Забележка. Изразът $A \cdot B + B \cdot A =: [A, B]_+$ носи името антикомутатор.

<u>Частично решение 2.)</u> В класическата механика често се случва ситуация на следното разбиване на хамилтониана:

$H(q,p) \equiv$ пълната енергия на системата

$=$ кинетична енергия $\leftarrow$ функция на импулсите $E_{kin}(p)$

$+$ потенциална енергия $\leftarrow$ функция на координатите $E_{pot}(q)$,

което ние можем да квантуваме като:

$$H(\hat{q}_1,\ldots,\hat{q}_n,\hat{p}_1,\ldots,\hat{p}_n) = E_{kin}(\hat{p}_1,\ldots,\hat{p}_n) + E_{pot}(\hat{q}_1,\ldots,\hat{q}_n)$$

сума на (некомутиращи) оператори, всеки от които обаче е построен като функция от комутиращи оператори. Когато

$$E_{kin} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\hat{p}_j^{\,2}}{2m_j} = \sum_{j=1}^{n} \frac{-\hbar^2}{2m_j}\left(\frac{\partial}{\partial q_j}\right)^2$$

(кинетична енергия на система от нерелативистични частици, където m_j – маси, които може да са частично или напълно равни), то получените оператори H носят общото име оператори на Шрьодингер. Спектралният анализ на подобни оператори е едно широко направление в съвременната математическа физика, което има приложение в атомната физика, квантовата химия и други.

Ще приведем два примера за оператори на Шрьодингер, които освен, че имат голямо "историческо" значение са забележителни и с това, че спектрите им могат да се изведат по чисто алгебричен път. Разбира се, преди тях е редно да споменем и за хамилтониана на свободна нерелативистична частица: това е случая когато $E_{pot} = 0$ и $H = E_{kin}(p)$. В този случай, след премащабиране на всяка координата хамилтонианът се свежда до оператор на Лаплас (Laplace):

$$H = -\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial}{\partial q_j}\right)^2 .$$

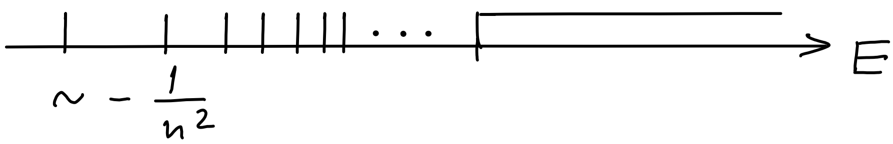
1.) Електрон (нерелативистичен) във водороден атом:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial}{\partial q_j}\right)^2 - \frac{k_e e^2}{\sqrt{\sum_{j=1}^{3} q_j^2}},$$

където m е масата на електрона, e е заряда на електрона а k_e е електростатичната константа.

Този оператор има два вида спектър: непрекъснат, в интервала $[0,\infty)$, което отговаря на незахванат от ядрото (т.е., несвързан) електрон. Дискретната част на спектъра възпроизвежда формулата на Бор:

$$E_n = -\underbrace{\frac{(k_e e^2)^2 m}{2\hbar^2}}_{\text{физична константа носеща името на Ридберг (Rydberg).}} \cdot \frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

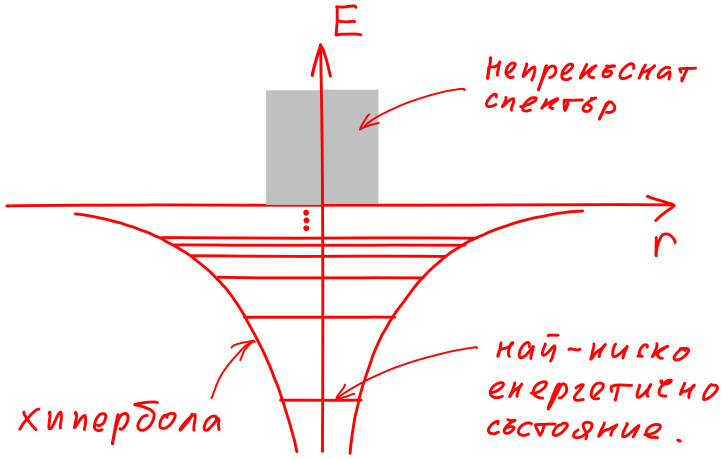


В този курс ние нома да извеждаме спектъра на водордния атом, но за историческа справка ще отбележим, че алгебричният извод на този спектър (който стартира от (CCR)) е от Паули (1926).

На фона на графиката на потенциалната енергия в зависимост от разстоянието

$$r = \sqrt{\sum_{j=1}^{3} q_j^2}$$

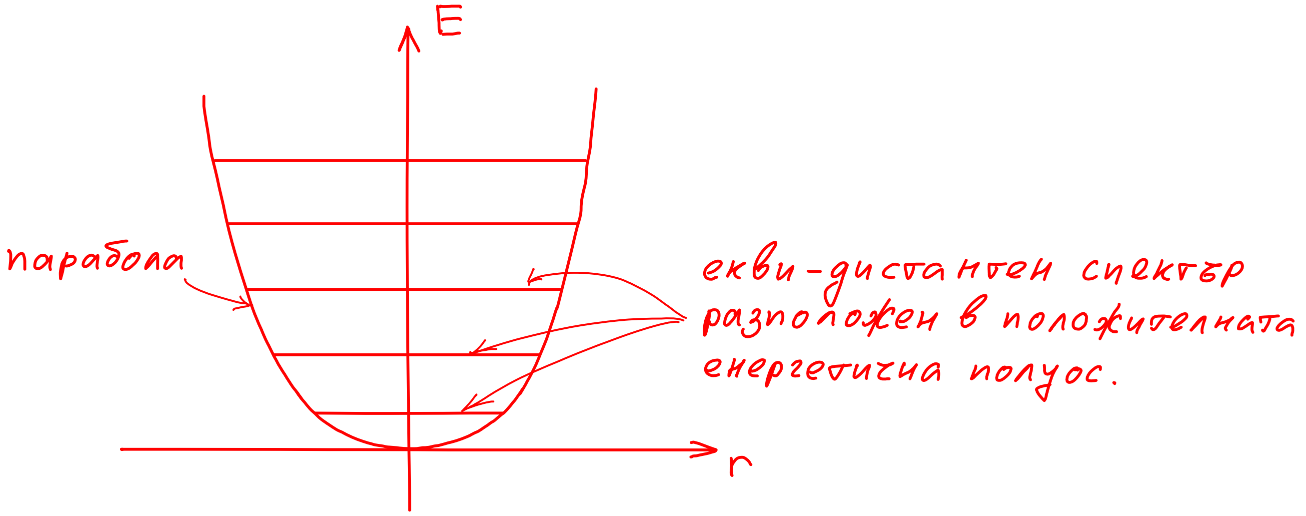
спектърът изглежда така:



2.) Хармоничен осцилатор (тримерен).

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial}{\partial q_j}\right)^2 + \frac{1}{2}k\sum_{j=1}^{3} q_j^2 ,$$

където m е масата на частицата, а k е константа, която се нарича "коефициент на еластичност". Наша непосредствена цел ще бъде да изведем по чисто алгебричен път спектъра на този оператор. За момента ще отбележим следната качествена картина:



В началото на настоящата точка 5.3. споменахме, че има и втора главна трудност при реализирането на програмата по канонично квантуване. Тази трудност е до известна степен свързана с предходната.

<u>Трудност II</u>. Процедурата по канонично квантуване дори и да се определи по някакъв начин, тя би зависела от избора на каноничните координати, в които се провежда.

По-конкретно, ако
$$\begin{cases} q'_j = q'_j(q,p), \\ p'_j = p'_j(q,p) \quad (j=1,\dots,n), \end{cases}$$
е смяна към нови канонични координати (т.е. канонична трансформация), а изразите на хамилтониана в двете канонични координатни системи са:
$$H(q_1,\dots,q_n,p_1,\dots,p_n) = H'(q'_1,\dots,q'_n,p'_1,\dots,p'_n),$$
то след квантуване
$$H(\hat{q}_1,\dots,\hat{q}_n,\hat{p}_1,\dots,\hat{p}_n) \neq H'(\hat{q}'_1,\dots,\hat{q}'_n,\hat{p}'_1,\dots,\hat{p}'_n).$$

Разбира се, този проблем е точно толкова зле дефиниран, колкото и самото канонично квантуване, тъй като се базира на неколкократно вземане на функции от некомутиращи оператори.

Частично решение 1.) В повечето физически примери ние имаме отделени канонични координати. Например, разбиването по-горе
$$H(q,p) = E_{kin}(p) + E_{pot}(q)$$
не става в произволни, но в отделни канонични координати.

Частично решение 2.) Малко по-общ аргумент, който отделя специален клас от канонични координатни системи е свързан с линеаризация около стабилна точка. Ние ще разгледаме това в следващата точка.

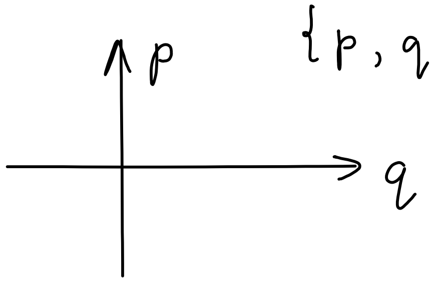
С това ние изчерпахме нашия увод в квантовата механика. Той по никакъв начин не може да замени обаче един курс по квантова механика.

6. Осцилаторни системи и линеаризация

6.1. Концептуално значение на осцилаторните системи

Нека за простота първоначално да разгледаме класическа динамична система с една степен на свобода. Фазовото пространство на такава система се описва с една двойка канонични координати, q и p:

$$\{p, q\} = 1$$



Нека да развием хамилтониана на системата $H(q,p)$ в околност на една точка, която след евентуална транслация на координатите можем да считаме, че е точката $(q,p) = (0,0)$ (началото на координатната система):

$$H(q,p) = h + \lambda q + \mu p + a q^2 + b p^2 + 2c\, qp + \cdots$$

За ураненията на Хамилтон (уравненията за движение) имаме:

$$\left|\begin{array}{l} \dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p} = \mu + 2cq + 2bp + \cdots \\[2ex] \dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} = -\lambda - 2aq - 2cp + \cdots \end{array}\right.$$

В частност, избраната точка $(0,0)$ около която развиваме, ще бъде равновесна точка (т.е., при еволюция няма да се движи) тогава и само тогава когато

$$\frac{\partial H}{\partial p}(0,0) = \mu = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial H}{\partial q}(0,0) = \lambda = 0 .$$

Нека отчетем също и факта, че водещата константа h в хамилтониана не дава никакъв принос в уравненията за движение: физиците казват "енергията е определена с точност до адитивна константа".

Итака, около равновесна точка $(0,0)$ хамилтонианът започва по същество с квадратична част:

$$H(q,p) = H_{(2)}(q,p) + \cdots ,$$

където $H_{(2)}(q,p) = (q,p)\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$

– записан като квадратична форма.

Частта от уравненията за движение (т.е. уравненията на Хамилтон) отговаряща на $H_{(2)}$ е линейна:

$$\begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} c & b \\ -a & -c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} .$$

Оттук, и еволюцията, която тази система от линейни обикновени диференциални уравнения индуцира, се задава с линейни трансформации.

<u>Забележка</u>. Нека отбележим следните общи принципни положения:

- Линеен хамилтониан е еквивалентен на еволюция задавана с афинни транслации на каноничните координати (в които хамилтониана е линеен).
- Квадратичен (хомогенен) хамилтониан е еквивалентен на еволюция, която се задава с линейни трансформации на каноничните координати (в които хамилтониана е квадратичен).

Нека сега се опитаме да приведем уравненията за движение, които поражда $H_{(2)}$ в "по-канонична" форма, като за целта диагонализираме $H_{(2)}$ като квадратична форма. Нека трансформацията

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

диагонализира симетричната матрица $\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$ посредством ортогонална матрица $\begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}$. Тогава

$$H_{(2)} = (q' \; p') \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \alpha q'^2 + \beta p'^2.$$

Да отбележим, че q' и p' са отново канонични координати:

$$\{q', p'\} = \{\tau_{11} q + \tau_{12} p, \tau_{21} q + \tau_{22} p\}$$
$$= (\tau_{11}\tau_{22} - \tau_{12}\tau_{21}) \{q, p\} = \{q, p\}$$

понеже

$$\tau_{11}\tau_{22} - \tau_{12}\tau_{21} = \det \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} = 1,$$

което от своя страна следва от това, че $\begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}$ е ортогонална матрица.

В случаите, когато α или $\beta = 0$ казваме, че имаме изроден хамилтониан. Когато $\alpha \neq 0$ и $\beta \neq 0$ имаме два случая:

- елиптичен : $\alpha\beta > 0$;
- хиперболичен : $\alpha\beta < 0$.

В допълнение, изродения случай може да се нарече "параболичен".

В последните два случая може да се направи допълнителна канонична трансформация на координатите

$$(q', p') \longmapsto (q'', p'')$$

така, че хамилтонианът да приеме вида

$$H_{(2)} = \frac{\omega}{2}\left(q''^2 \pm p''^2\right), \qquad \omega > 0 \, ,$$

където (+) съответства на елиптичния случай, а (−) на хиперболичния. Наистина, q'' и p'' можем да потърсим във вида

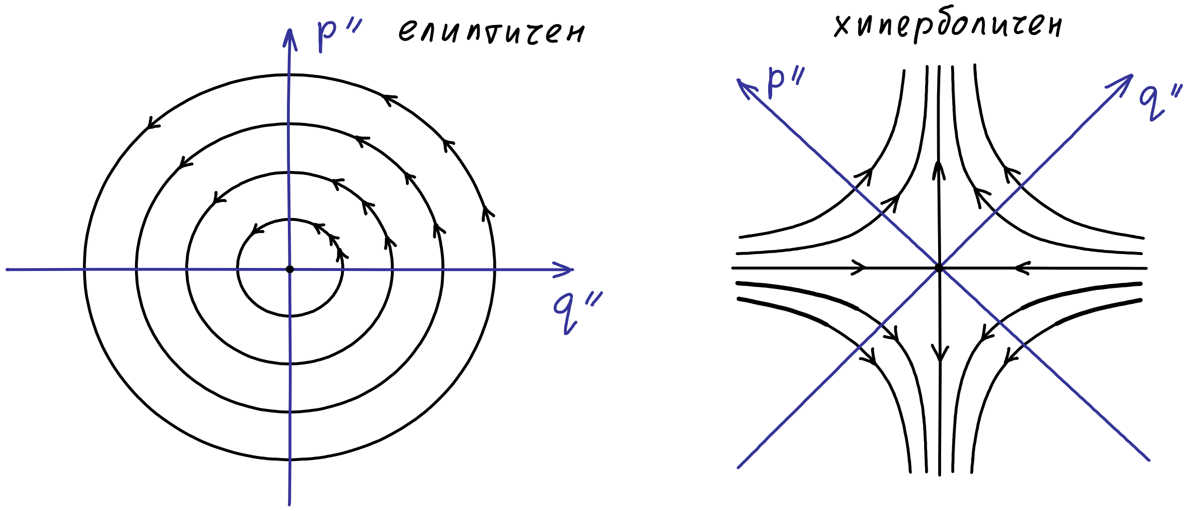
$q'' = \varkappa q'$, $p'' = \frac{1}{\varkappa} p'$, така че да осигурим

$$\{q'', p''\} = \{q', p'\} .$$

$\Longrightarrow$ $\alpha \varkappa = \frac{\omega}{2}$, $\frac{\beta}{\varkappa} = \pm \frac{\omega}{2}$, и в частност, получаваме

$$\omega^2 = 2\sqrt{|\alpha\beta|} .$$

Нека начертаем така наречените фазови портрети съответстващи на хамилтониана $H_{(2)}$:



На горната фигура с черен цвят са нарисувани траекториите на движение във фазовото пространство и със стрелки върху тях е указана посоката на движение; разположението на координатните оси е нарисувано в син цвят.

В частност, в елиптичния случай траекториите са концентрични окръжности и движението върху тях е равномерно, с постоянна кръгова честота ω. Малко по-късно ние явно ще напишем този закон за движение. Така забелязваме едно много важно и характерно свойство на елиптичния случай. В този случай централната равновесна точка е стабилна.

По определение, една равновесна точка се нарича стабилна, ако съществува нейна околност такава, че всяка траектория, която започва от тази околност е ограничено множество.

И така, линейните хамилтонови динамики в двумерно фазово пространство, които имат стабилна равновесна точка се пораждат от квадратични хамилтониани, които могат да се приведат в каноничния вид $\frac{\omega}{2}\left(q^2+p^2\right)$.

В случая на повече от една на брой степени на свобода общата класификация на линейните хамилтонови динамични системи е по-сложна. Случая обаче на стабилна равновесна точка остава аналогичен:

Теорема. (без доказателство)
Нека $H_{(2)}(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$ е квадратичен (хомогенен) хамилтониан такъв, че $(q, p) = 0$ е стабилна равновесна точка. Тогава съществува линейна канонична трансформация на координатите

$$\left| \begin{array}{l} q'_j = \sum_{k=1}^{n} \left(\alpha_{j,k} q_k + \beta_{j,k} p_k \right) \\ p'_j = \sum_{k=1}^{n} \left(\gamma_{j,k} q_k + \mu_{j,k} p_k \right) \end{array} \right.$$

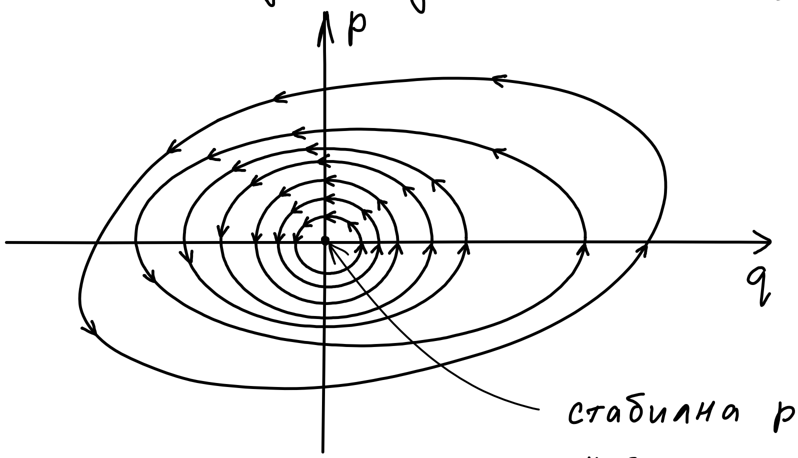
такава, че в новите канонични координати хамилтонианът приема вида

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\omega_j}{2} \left({q'_j}^2 + {p'_j}^2 \right).$$

Обратното, хамилтониани от горния вид определят линейна динамика за която нулата е стабилна равновесна точка. $\square$

Класическа динамична система задавана от хамилтониан от вида $\sum_{j=1}^{n} \frac{\omega_j}{2} \left(q_j^2 + p_j^2 \right)$ ще наричаме система от (хармонични) осцилатори. Параметрите $\omega_1, \dots, \omega_n$ се наричат собствени честоти на системата.

Нека се върнем на общия случай на хамилтониан в околност на равновесна точка и да предположим, че тази точка е стабилна:



Тогава стигаме до следната качествена картина: близо до стабилната равновесна точка еволюцията на системата се линеаризира (т.е., представя се от линейни трансформации). В тази област доминира квадратичната част на хамилтониана

$$H(q, p) = H_{(2)}(q, p) + \cdots$$

Тази квадратична част, поради стабилността на равновесната точка ще бъде изоморфна на система от хармонични осцилатори. Така ние получаваме и една естествена канонична координатна система: това са каноничните координати в които $H_{(2)}$ приема вида на система от осцилатори, $\sum_{j=1}^{n} \frac{\omega_j^2}{2} \left(q_j^2 + p_j^2 \right)$. В тази именно координатна система и извършваме каноничното квантуване.

Остава да се "преборим" с допълнителнителната част в хамилтониана. Тя е виновна за нелинейните отклонения от динамиката далеч от стабилната равновесна точка.

В общия случай, задачата за квантуване и в последствие изучаване на спектъра на пълния хамилтониан, е математически много сложна задача и затова тя се атакува обикновено в така наречената теория на пертурбациите. Това се основава на разбиването

$$H = H_0 + I ,$$

където

$$H_0 := H_{(2)}$$

е именно квадратичната част на хамилтониана. Добавката I се счита за "малка", или еквивалентно, ние искаме да изучаваме "квантови трептения" на системата във близост до стабилната равновесна точка, която отговаря на "вакуумното състояние".

По-нататък, това разбиване на H също съответства на нашата представа за "свободна" или още "кинетична" част на хамилтониана – това е квадратичната част $H_0 = H_{(2)}$ – и от друга страна, добавката I, отговорна за взаимодействието. Наистина, ключово характерно свойство на свободните динамики е тяхната линейност, а за това, както вече отбелязахме необходимо и достатъчно условие е квадратичност на съответстващите хамилтониани. Така, взаимодействието пък е свързано с нелинейност и съответно добавки в хамилтониана от по-висока от втора степен по координатите. С това ние правим също връзка с постановката от теория на разсейването от миналата лекция.

В конкретните модели обикновено се въвежда един или повече параметри в частта I на хамилтониана, например,

$$I = \alpha \cdot I_0 ,$$

като именно този параметър α се счита за "малък", т.е., по него се развиват във формален степенен ред всички величини на теорията. Такива параметри се наричат константи на връзката (coupling constant). В квантовата електродинамика α е числов (т.е. безразмерен) параметър имащ стойността:

$$\alpha \approx \frac{1}{137}$$

(константата на фината структура, която споменахме в първата лекция).

6.2. Канонично квантуване на осцилатор

Една осцилаторна система приведена в каноничен вид се задава от хамилтониан, който е сума от независими едномерни осцилатори. Ето защо, в основата на задачата за квантуване на такива динамични системи стои задачата за един осцилатор.

Класическият хамилтониан е: $H = \frac{\omega}{2}(q^2 + p^2)$.

Уравненията за движение са: $\left| \begin{array}{l} \dot{q} = \omega p \\ \dot{p} = -\omega q \end{array} \right.$

$\Rightarrow \ \ddot{q} = -\omega^2 q$. Както за всяко линейно хомогенно обикновено диференциално уравнение, общото решение е сума на кои да е линейно независими частни решения, толкова на брой, колкото е редът на системата – в случая две. Такива частни решения за уравнението $\ddot{q} = -\omega^2 q$ са

$$e^{i\omega t} \quad \text{и} \quad e^{-i\omega t}.$$

И така, общото решение на $\ddot{q}(t) = -\omega^2 q(t)$ е:

$$q(t) = \frac{a^*}{\sqrt{2}} e^{i\omega t} + \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t}.$$

Тук, знаменателят $\sqrt{2}$ е избран за удобство, а константите a и a^* са комплексни числа, които се оказват и комплексно спрегнати, поради условието за реалност на решението:

$$\overline{q(t)} = q(t) \quad (\forall t) \quad \Longrightarrow \quad \bar{a} = a^*.$$

Нека изразим a и a^* от началните условия:

$$\left|\begin{aligned} q_0 &= q(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^*) \\ p_0 &= p(0) = \frac{1}{\omega}\dot{q}(0) = \\ &= \frac{1}{\omega}\frac{d}{dt}\left(\frac{a^*}{\sqrt{2}}e^{i\omega t} + \frac{a}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}\right)\Bigg|_{t=0}\end{aligned}\right.$$

$$\Longrightarrow \left|\begin{aligned} q_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^*) \\ p_0 &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^* - a)\end{aligned}\right.$$

$$\Longrightarrow \left|\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_0 + i p_0) \\ a^* &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_0 - i p_0)\end{aligned}\right.$$

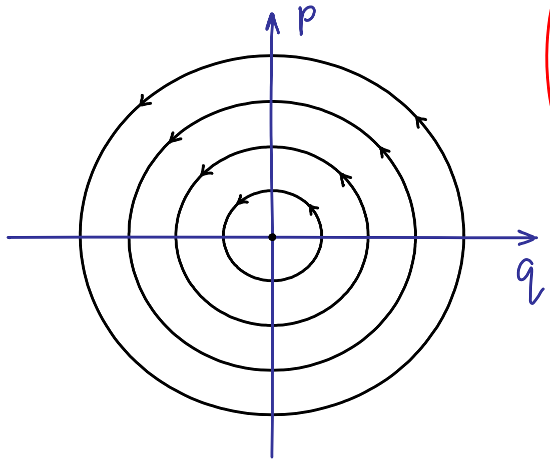
Общото решение придобива вида:

$$q(t) = q_0 \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} + p_0 \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$$

$$= q_0 \cos\omega t + p_0 \sin\omega t .$$

$$p(t) = \frac{1}{\omega}\dot{q}(t) = -q_0 \sin\omega t + p_0 \cos\omega t$$

Така, възпроизведохме заявената вече картина на фазов портрет:



$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t \\ -\sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}$$

Движението е периодично, с период $T = \frac{2\pi}{\omega}$.

Честотата е $\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi}$. Заради допълнителния множител от 2π, параметърът $\omega = 2\pi\nu$ е прието да се нарича кръгова честота.

Нека вземем връзката $(a, a^*) \longleftrightarrow (q_0, p_0)$ изведена по-горе и да я разгледаме като една комплексна линейна смяна на координатите:

$$\left| \begin{aligned} q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^*) \\ p &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^* - a) \end{aligned} \right. \quad \Longleftrightarrow \quad \left| \begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \\ a^* &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \end{aligned} \right.$$

Да пресметнем хамилтониана в новите координати. За да са валидни пресмятанията ни и в квантовия случай няма да променяме реда при произведения:

$$H = \frac{\omega}{2}\left(q^2 + p^2\right)$$
$$= \frac{\omega}{2}\left(\frac{1}{2}(a+a^*)^2 - \frac{1}{2}(a^*-a)^2\right)$$
$$= \frac{1}{4}\omega\left(\cancel{a^2} + \cancel{(a^*)^2} + a a^* + a^* a - \cancel{a^2} - \cancel{(a^*)^2} + a a^* + a^* a\right).$$

$$\Longrightarrow \qquad H = \omega\,\frac{a a^* + a^* a}{2}.$$

Продължаваме с материал от следваща лекция за тези, които ще закъснеят.

Нека пресметнем скобките на Поасон на новите координати:

$$\{a, a^*\} = \frac{1}{2}\{q + ip, q - ip\} = i\{p, q\} = i,$$

т.е. $\frac{1}{i}\{a, a^*\} = 1$.

И разбира се, $\{a, a\} = 0 = \{a^*, a^*\}$: поради антисиметрията на скобката на Поасон:

$$\{f, f\} = -\{f, f\} = 0$$

за всяка функция f.

Скобки на Поасон с хамилтониана:

$$\{a, H\} = \frac{\omega}{2}\{a, aa^* + a^*a\} =$$

$$= \frac{\omega}{2}\left(\cancel{\{a,a\}}a^* + a\{a,a^*\} + a^*\cancel{\{a,a\}} + \{a,a^*\}a\right)$$

$$= i\omega a .$$

И така, $\frac{1}{i}\{a, H\} = +\omega a$, $\frac{1}{i}\{a^*, H\} = -\omega a^*$ (второто се получава аналогично).

Да преминем към квантуване:

$$\frac{\hbar}{i}\underbrace{\{A, B\}}_{} \longmapsto [\hat{A}, \hat{B}]$$

скобката на Поасон преминава в комутатор

Както по-внимателния читател е забелязал от точка 5.3 насам ние отново престанахме да следим размерности и да пишем систематично константата на Планк $\hbar$. За удобство можем да считаме, че отново сме преминали в система от единици в която $\hbar = 1$ (виж лекция 1). Това ще бъде основната система за работа в нашия курс (и фактически е традиционен стил на работа в цялата К.Т.П.). В известни случаи обаче ние ще "реабилитираме" константата на Планк $\hbar$.

И така, в система от единици, в която $\hbar = 1$ рецептата за квантуване изглежда така

$$\frac{1}{i}\{A, B\} \longmapsto [\hat{A}, \hat{B}]$$

Следователно, класическите съотношения, които изведохме до тук се трансформират в:

$$[\hat{q}, \hat{p}] \equiv \hat{q}\cdot\hat{p} - \hat{p}\cdot\hat{q} = i,$$

$$\hat{H} = \frac{\omega}{2}\left(\hat{q}^2 + \hat{p}^2\right),$$

$$\left|\begin{array}{l} \hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^*) \\ \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^* - \hat{a}) \end{array}\right. \iff \left|\begin{array}{l} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p}) \\ \hat{a}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\hat{p}) \end{array}\right.$$

$$\hat{H} = \omega\,\frac{\hat{a}\hat{a}^* + \hat{a}^*\hat{a}}{2},$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^*] \equiv \hat{a}\hat{a}^* - \hat{a}^*\hat{a} = 1,$$

$$[\hat{a}, \hat{H}] \equiv \hat{a}\hat{H} - \hat{H}\hat{a} = +\omega\hat{a},$$

$$[\hat{a}^*, \hat{H}] \equiv \hat{a}^*\hat{H} - \hat{H}\hat{a}^* = -\omega\hat{a}^*.$$

Нещо повече, обръщаме внимание, че горните формули са съгласувани помежду си: ние ги извеждахме в класическия случай, като използвахме само алгебрични правила валидни и в квантовия случай!

Обръщаме внимание, че

$$\hat{q}^* = \hat{q} \quad \text{и} \quad \hat{p}^* = \hat{p}$$

- самоспрегнати оператори, като представящи наблюдаеми и също $\hat{a}^*$ е ермитово спрегнатия оператор на $\hat{a}$.

Така, $\hat{H} = \frac{\omega}{2}\left(\hat{q}^2 + \hat{p}^2\right)$ е явно неотрицателен оператор и следователно, неговия спектър ще се съдържа в интервала $[0, \infty)$. Сега ще направим едно предположение, което по-късно ще обосновем: в Хилбертовото пространство на състоянията $\mathcal{H}$ съществува вектор (на състояние) $\Omega \in \mathcal{H}$, който е собствен за $\hat{H}$ с най-малка собствена стойност.

На основа на това предположение, ние ще изведем следната:

<u>Теорема</u>. Нека $\Omega_n := (\hat{a}^*)^n \Omega \in \mathcal{H}$, за $n = 1, 2, \ldots$

$\Omega_0 := \Omega$.

Тогава $\|\Omega_n\| = \sqrt{n!} > 0$ и:

$$\hat{H}\,\Omega_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega \cdot \Omega_n,$$

$$\hat{a}\,\Omega_n = n\,\Omega_{n-1} \quad \text{за } n = 1, 2, \ldots,$$

$$\hat{a}\,\Omega_0 = 0.$$

С други думи, Ω_n са собствени вектори на $\hat{H}$ със собствени стойности $\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega$.

Лема. Ако B е **линеен** оператор в $\mathcal{H}$, ϕ е собствен вектор на B,

$$B\phi = b\cdot\phi$$

и A е друг линеен оператор в $\mathcal{H}$ такъв, че

$$[A,B] = \beta\cdot A\,,$$

то векторът $\phi' = A\phi$ ще изпълнява равенството

$$B\phi' = b'\cdot\phi \quad \text{за} \quad b' = b-\beta\,.$$

В частност, ако $\phi' \neq 0$, то ϕ' е отново собствен вектор на B.

Доказателство.

$$\begin{aligned} B(A\phi) &= AB\phi - [A,B]\phi \\ &= Ab\phi - \beta\cdot A\phi = (b-\beta)(A\phi)\,. \quad \square \end{aligned}$$

Забележка. Такива оператори A често се конструират в теория на представянията (на алгебри на Ли) и носят името повишаващи / понижаващи оператори, в зависимост от това дали $\beta < 0$ / $\beta > 0$. Причината за това е, че "обхождат" спектъра на B.

Доказателство на теоремата.

a) Защо $\hat{a}\Omega = 0$? Ако $\hat{H}\Omega = \varepsilon_0\Omega$, то според лемата (понеже $[\hat{a},\hat{H}] = \hat{a}$) $\hat{a}\Omega$ би бил собствен вектор със собствена стойност $\varepsilon_0 - 1$, което противоречи на минималността при избора на Ω. $\Rightarrow$ $\hat{a}\Omega = 0$.

б) Защо $\hat{H}\Omega = \frac{\omega}{2}\Omega$? $\hat{H}\Omega = \frac{1}{2}\omega\left(\hat{a}\hat{a}^* + \hat{a}^*\hat{a}\right)\Omega$

$$= \frac{1}{2}\omega\Big(\underbrace{(\hat{a}\hat{a}^* - \hat{a}^*\hat{a})}_{1} + 2\hat{a}^*\hat{a}\Big)\Omega$$

$$= \frac{1}{2}\omega\cdot\Omega + \hat{a}^*\underbrace{\hat{a}\Omega}_{0} = \frac{1}{2}\omega\cdot\Omega.$$

в) Равеството $\hat{H}\Omega_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\cdot\Omega_n$ следва с индукция по n от лемата и формулите:

$$\Omega_n = \hat{a}^*\Omega_{n-1} \quad \text{и} \quad [\hat{a}^*, \hat{H}] = -\omega\hat{a}^*.$$

г) В сила са формулите:

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^*\cdot\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\omega,$$

$$\hat{H} = \left(\hat{a}\cdot\hat{a}^* - \frac{1}{2}\right)\omega,$$

$$\left(\hat{a}^*\hat{a}\right)\Omega_n = n\omega\cdot\Omega_n,$$

$$\left(\hat{a}\cdot\hat{a}^*\right)\Omega_n = (n+1)\omega\cdot\Omega_n.$$

Наистина, първите две се извеждат, както в а), а вторите две следват от първите и точка в).

д) Защо $\|\Omega_n\| = \sqrt{n!}$?

$\|\Omega_n\|^2 = \langle \Omega_n | \Omega_n \rangle =$

$= \langle \hat{a}^* \Omega_{n-1} | \hat{a}^* \Omega_{n-1} \rangle = \langle \Omega_{n-1} | (\hat{a} \hat{a}^*) \Omega_{n-1} \rangle$

$= n \langle \Omega_{n-1} | \Omega_{n-1} \rangle = n(n-1)! = n!$

– с индукция по n.

е) Равенството $\hat{a} \Omega_n = n \Omega_{n-1}$?

$$\hat{a} \Omega_n = \hat{a} \hat{a}^* \Omega_{n-1} = n \Omega_{n-1}. \qquad \square$$