Ecuațiile care au schimbat lumea

62 - De la Mecanica Clasică la Mecanica Cuantica și Câmpuri cuantice

M. Penția

IFIN-HH, Departament Fizică Nucleară,
P.O.Box MG-6, 077125, București-Măgurele, ROMANIA.
e-mail: pentia@nipne.ro

June 18, 2022

Partea LXII

De la Mecanica Clasică la Mecanica Cuantica și Câmpuri cuantice

Ecuații Newton - Lagrange - Hamilton

- Descrierile Newton - Lagrange - Hamilton sunt echivalente.

  - Descriu aceeași fizică și conduc la același rezultat.
  - Diferențe în evidențierea de simetrii și invarianțe, precum și
  - Flexibilitate la transformările de coordonate.

- Cele trei descrieri echivalente:

  - Ecuațiile Newton depind explicit de coordonatele x, y, z
  - Ecuațiile Euler-Lagrange identice pentru orice coordonate generalizate
  - Principiul Hamilton nu vizează coordonate. Toată fizica se află în integrala acțiunii.

- Formalismul Hamilton permite dezvoltări:

  - Teoria Hamilton-Jacobi
  - Teoria perturbațiilor
  - Mecanica cuantică
  - Mecanica statistică.

Ecuații Newton - Lagrange - Hamilton

- Descrierile Newton - Lagrange - Hamilton sunt echivalente.

  - Descriu aceeași fizică și conduc la același rezultat.
  - Diferențe în evidențierea de simetrii și invarianțe, precum și
  - Flexibilitate la transformările de coordonate.

- Cele trei descrieri echivalente:

  - Ecuațiile Newton depind explicit de coordonatele x, y, z
  - Ecuațiile Euler-Lagrange identice pentru orice coordonate generalizate
  - Principiul Hamilton nu vizează coordonate. Toată fizica se află în integrala acțiunii.

- Formalismul Hamilton permite dezvoltări:

  - Teoria Hamilton-Jacobi
  - Teoria perturbațiilor
  - Mecanica cuantică
  - Mecanica statistică.

Ecuații Newton - Lagrange - Hamilton

- Descrierile Newton - Lagrange - Hamilton sunt echivalente.

  - Descriu aceeași fizică și conduc la același rezultat.
  - Diferențe în evidențierea de simetrii și invarianțe, precum și
  - Flexibilitate la transformările de coordonate.

- Cele trei descrieri echivalente:

  - Ecuațiile Newton depind explicit de coordonatele x, y, z
  - Ecuațiile Euler-Lagrange identice pentru orice coordonate generalizate
  - Principiul Hamilton nu vizează coordonate. Toată fizica se află în integrala acțiunii.

- Formalismul Hamilton permite dezvoltări:

  - Teoria Hamilton-Jacobi
  - Teoria perturbațiilor
  - Mecanica cuantică
  - Mecanica statistică.

Ecuații Newton - Lagrange - Hamilton

- Descrierile Newton - Lagrange - Hamilton sunt echivalente.

  - Descriu aceeași fizică și conduc la același rezultat.
  - Diferențe în evidențierea de simetrii și invarianțe, precum și
  - Flexibilitate la transformările de coordonate.

- Cele trei descrieri echivalente:

  - Ecuațiile Newton depind explicit de coordonatele x, y, z
  - Ecuațiile Euler-Lagrange identice pentru orice coordonate generalizate
  - Principiul Hamilton nu vizează coordonate. Toată fizica se află în integrala acțiunii.

- Formalismul Hamilton permite dezvoltări:

  - Teoria Hamilton-Jacobi
  - Teoria perturbațiilor
  - Mecanica cuantică
  - Mecanica statistică.

Ecuații Newton - Lagrange - Hamilton

- Descrierile Newton - Lagrange - Hamilton sunt echivalente.

  - Descriu aceeași fizică și conduc la același rezultat.
  - Diferențe în evidențierea de simetrii și invarianțe, precum și
  - Flexibilitate la transformările de coordonate.

- Cele trei descrieri echivalente:

  - Ecuațiile Newton depind explicit de coordonatele x, y, z
  - Ecuațiile Euler-Lagrange identice pentru orice coordonate generalizate
  - Principiul Hamilton nu vizează coordonate. Toată fizica se află în integrala acțiunii.

- Formalismul Hamilton permite dezvoltări:

  - Teoria Hamilton-Jacobi
  - Teoria perturbațiilor
  - Mecanica cuantică
  - Mecanica statistică.

Descrieri echivalente: Newton → Lagrange → Hamilton → Poisson

Variabile Spațiu vectorial

Mecanica Clasică: particule fizice

x ; $\dot{x}$; p ; E

Sp.Euclid: set ortonormat complet $\vec{u}_k$

$$\vec{v} = \sum_{k=1}^{3} v_k \vec{u}_k$$

Mecanica Cuantică: particule fizice - asociere amplitudini de undă cuantificate

Cuantificarea I: $x \to \hat{x}$; $p \to \hat{p}$

$$\begin{cases} H(x,p) \to \hat{H}(\hat{x},\hat{p}) \\ \{x,p\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{x},\hat{p}] \end{cases}$$

Spațiu Hilbert: $\psi(x,t) = \sum_k \alpha_k(t) u_k(x)$

Câmpuri Clasice: câmpuri fizice

$x \to \psi$; $\dot{x} \to \dot{\psi}$; $p \to \pi$ $\quad L(x,\dot{x}) \to \mathcal{L}(\psi,\dot{\psi})$

Orice câmp se dezv.cu set ortonorm. complet u_k

$$\psi(x,t) = \int \alpha(k,t)\, u(k,x) dk$$

Câmpuri Cuantice: câmpuri fizice - asociere de particule

Cuantificarea II:

$\psi \to \hat{\psi}$; $\pi \to \hat{\pi}$

$\psi^* \to \hat{\psi}^\dagger$; $\pi^* \to \hat{\pi}^\dagger$

$$\begin{cases} \mathcal{H}(\psi,\pi) \to \hat{\mathcal{H}}(\hat{\psi},\hat{\pi}) \\ \{\psi,\pi\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{\psi},\hat{\pi}] \end{cases}$$

cuantificare câmpuri → operatori

Ecuații de mișcare

Lagrangian:

$L(x,\dot{x}) = T(\dot{x}) - V(x)$ cu $p = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}$

Acțiunea: $S = \int L(x,\dot{x}) dt$

Princ. minimei actiuni[a] $\delta S = 0 \Longrightarrow$

Ec. mișcare ≡ Euler-Lagrange $\boxed{\dfrac{\partial L}{\partial x} - \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = 0}$

$$\Longrightarrow \frac{\partial L}{\partial x} = \dot{p}$$

Legătura undă - observabile corpuscul

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad ; \quad E = h\nu = h\frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

$\left\{\begin{array}{l} \text{Stări cuantice} \\ \text{(func. de undă)} \end{array}\right\|$ $\begin{array}{l} \psi(x,t) = Ne^{-i(\omega t - kx)} \\ \psi(x,t) = Ne^{-i(Et - px)/\hbar} \end{array}$

Observabile → operatori

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\psi \quad ; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p\psi$$

$$x \to \hat{x} = x;\ p \to \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x};\ E \to \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$L(\psi, \partial_\mu\psi, t) = \int d^3x\, \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu\psi, t)\,;\ \pi(x,t) = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{\psi}}$$

$$S = \int dt\, L(\psi, \partial_\mu\psi, t) = \int dx^4 \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu\psi, t)$$

$\delta S = 0 \Rightarrow$ Ec. Euler-Lagrange de câmp clasic

$\boxed{\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \partial_\mu\left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\psi)}\right) = 0}$ sau

$\boxed{\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \dfrac{\partial}{\partial t}\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} - \nabla\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\psi)} = 0}$ se caută soluții reale

Ec. de evoluție op. de câmp cuantic este data de ec. Heisenberg, exprimată prin Hamiltonian: $\hat{\mathcal{H}}(\hat{\psi}^i, \hat{\pi}_i) = \hat{\pi}_i\dot{\hat{\psi}}^i - \hat{\mathcal{L}}$

Ec. Hamilton pt. câmpuri cuantice $\boxed{\dot{\hat{\psi}}^i = \dfrac{\delta\hat{\mathcal{H}}}{\delta\hat{\pi}_i} = \dfrac{1}{i\hbar}\left[\hat{\psi}^i, \hat{\mathcal{H}}\right]}$; $\boxed{\dot{\hat{\pi}}_i = -\dfrac{\delta\hat{\mathcal{H}}}{\hat{\delta}\psi^i} = \dfrac{1}{i\hbar}\left[\hat{\pi}^i, \hat{\mathcal{H}}\right]}$

Aplicații

[a]Ec. Euler-Lagrange din $\delta S = 0$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2}\sum_i\left(\frac{\partial L}{\partial x^i}\delta x^i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\delta\dot{x}^i(t)\right)dt = 0$$

Cu $\delta \leftrightarrow \frac{d}{dt}$ și integrarea prin părți $\int u\,dv = u\,v - \int v\,du$ a termenului doi

$$\int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\delta\dot{x}^i\,dt = \int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\frac{d\delta x^i(t)}{dt}dt =$$

$$= \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\delta x^i\Big|_{t_1}^{t_2}}_{\delta x^i(t_1) = \delta x^i(t_2) = 0} - \int_{t_1}^{t_2}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\right)\delta x^i dt$$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2}\sum_i\left[\frac{\partial L}{\partial x^i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\right)\right]\delta x^i dt = 0$$

$$\Longrightarrow \boxed{\frac{\partial L}{\partial x^i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}\right) = 0} \text{ (i=1,...,n)}$$

Aplicație: Ecuație oscilator armonic

Pt. o forță elastică $F(x) = -kx$,

Lagrangian-ul de oscilator armonic:

$L(x,\dot{x}) = T - V = \dfrac{m}{2}\dot{x}^2 - \dfrac{k}{2}x^2$ atunci

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -kx \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

Ec. Euler-Lagrange → Ec. Newton:

$\boxed{-k\,x = m\ddot{x}} \to F = m\ddot{x}$

cu soluția reală:

$x(t) = x_0[e^{i\,\omega\,t} + e^{-i\,\omega\,t}]$; $\omega = \sqrt{k/m}$

Aplicație - cuantificare energie.

Ecuația Schrödinger staționară: $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$

$$\hat{H}\psi_n \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_n = E_n\psi_n \quad ; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2} = E_n\psi_n$$

$$\psi_n(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = C\cos kx + D\sin kx$$

pt. cutie (V finit) $\left\{\begin{array}{l} \text{condiții } \psi_n(0) = 0 \Rightarrow C = 0 \\ \text{margine } \psi_n(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \end{array}\right\} \psi_n(x) = D\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = n^2 E_1$$

Ecuația Schrödinger: $\hat{E}\psi_S = \hat{H}\psi_S$; $\hat{E}\psi_S = \left(\dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V\right)\psi_S$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi_S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_S}{\partial x^2} + V\psi_S}$$

sol. de undă plană, reale (în NRQM): $\psi_S(x,t) = \mathcal{A}e^{-i(\omega t - kx)}$

Ecuația Klein-Gordon: $\hat{E}^2\varphi = \hat{H}^2\varphi$; $\hat{E}^2\varphi = \left(\hat{p}^2c^2 + m^2c^4\right)\varphi$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\varphi = \left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 c^2 + m^2c^4\right]\varphi = 0 \quad \Big|: \hbar^2c^2$$

$$\boxed{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\varphi = 0}$$

soluțiile generale discrete (pe volum V finit) de undă plană sunt:

$$\begin{cases} \varphi(t,\vec{x}) = \sum_{\vec{k}}\dfrac{1}{\sqrt{2V\omega_{\vec{k}}}}\left(a_{\vec{k}}\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{x})} + b^*_{\vec{k}}\,e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}\right) \\ \varphi^*(t,\vec{x}) = \sum_{\vec{k}}\dfrac{1}{\sqrt{2V\omega_{\vec{k}}}}\left(a^*_{\vec{k}}\,e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{x})} + b_{\vec{k}}\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}\right) \end{cases}$$

soluțiile gen. continui (fără constrângeri de V) prin $\sum_{\vec{k}} \to \int d^3\vec{k}$

$$\begin{cases} \varphi(t,\vec{x}) = \int\dfrac{d^3\vec{k}}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega_{\vec{k}}}}\left(a_{\vec{k}}\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})} + b^*_{\vec{k}}\,e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}\right) \\ \varphi^*(t,\vec{x}) = \int\dfrac{d^3\vec{k}}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega_{\vec{k}}}}\left(a^*_{\vec{k}}\,e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})} + b_{\vec{k}}\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}\right) \end{cases}$$

- termenii cu $e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$ sunt soluții de energie pozitivă ($E > 0$)

într-adevăr: $\hat{E}\varphi_+ = E\varphi_+ \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}\right) = \underbrace{\hbar\omega}_{E>0}\varphi_+$

- termenii cu $e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$ sunt soluții de energie negativă ($E < 0$)

într-adevăr: $\hat{E}\varphi_- = E\varphi_- \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^* e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}\right) = \underbrace{-\hbar\omega}_{E<0}\varphi_-$

Obs: matematic există și sol. $e^{\pm i(\omega t + \vec{k}\cdot\vec{x})}$, dar nu au sens fizic.

Ecuațiile de câmp electromagnetic (de inclus)

Ecuațiile de câmp Schrödinger clasic

Lagrangian Schrödinger: $\mathcal{L} = i\hbar\psi^*\dot{\psi} - \dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - V\,\psi^*\psi$

$$\delta\psi^* \to \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^*} = i\hbar\dot{\psi} - V\psi\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}^*} = 0\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\psi^*)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi$$

$$\delta\psi \to \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi} = -V\psi^*\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} = i\hbar\psi^*\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\psi)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*$$

ec. de câmp Schröd. real ψ

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi}$$

sol.reală: $\psi(x,t) = \alpha e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

ec. de câmp Schröd. complex ψ^*

$$\boxed{-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*}$$

sol.imag. $\psi^*(x,t) = \alpha^* e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

Ecuațiile de câmp Klein-Gordon real ($\hbar = c = 1$)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[\dot{\varphi}^2 - (\nabla\varphi)^2 - m^2\varphi^2\right] \equiv \frac{1}{2}\left(\partial_\mu\varphi\,\partial^\mu\varphi - m^2\varphi^2\right)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} = -m^2\varphi \quad ; \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} = \dot{\varphi} \quad ; \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi)} = -\nabla\varphi$$

$$\begin{cases} \delta\varphi \to \boxed{\left(\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2\right)\varphi = 0} \boxed{\left(\partial_\mu\partial^\mu + m^2\right)\varphi = 0} \\ \text{sol. generală (cu } k\cdot x = \omega t - \vec{k}\cdot\vec{x}\text{), este} \\ \varphi(x) = \int\dfrac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3\,2\omega}}\left(\alpha_k e^{-ik\cdot x} + \alpha_k^* e^{ik\cdot x}\right) \end{cases}$$

Ecuațiile de câmp Klein-Gordon complex ($\hbar = c = 1$)

$$\mathcal{L} = \dot{\varphi}^*\dot{\varphi} - \nabla\varphi^*\cdot\nabla\varphi - m^2\varphi^*\varphi \equiv \partial_\mu\varphi^*\partial^\mu\varphi - m^2\varphi^*\varphi$$

$$\mathcal{H} = \pi_r\dot{\varphi}^r - \mathcal{L} = \underbrace{\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{\varphi}}}_{\dot{\varphi}^*}\dot{\varphi} + \underbrace{\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{\varphi}^*}}_{\dot{\varphi}}\dot{\varphi}^* - \left(\dot{\varphi}^*\dot{\varphi} - \nabla\varphi^*\cdot\nabla\varphi - m^2\varphi^*\varphi\right) = \dot{\varphi}\,\dot{\varphi}^* + \nabla\varphi^*\cdot\nabla\varphi + m^2\varphi^*\varphi$$

φ și φ^* ($\pi = \delta\mathcal{L}/\delta\dot{\varphi}$ și $\pi^* = \delta\mathcal{L}/\delta\dot{\varphi}^*$) sunt câmpuri separate în sumarea după r. Inlocuind în Ec. E-L pt. cele 2 câmpuri:

$$\boxed{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^r} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^r} - \nabla\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^r)} = 0}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} = -m^2\varphi^*\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} = \dot{\varphi}^*\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi)} = -\nabla\varphi^* \Rightarrow \boxed{\left(\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2\right)\varphi^* = 0}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^*} = -m^2\varphi\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^*} = \dot{\varphi}\,;\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^*)} = -\nabla\varphi \Rightarrow \boxed{\left(\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2\right)\varphi = 0}$$

Ecuațiile de câmp Schrödinger cuantic (exprim. prin ec. Hamilton)

Cu operator $\hat{H}_{Sch}$ pt. câmp Schrödinger $\hat{H}_{Sch} = \int\left(\dfrac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}\hat{\psi}^\dagger\cdot\hat{\nabla}\hat{\psi} + V\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\right)d^3\vec{x}$

și rel. de comutare pt. $\hat{\psi}$ și $\hat{\psi}^\dagger$ la același timp t_0 $\left\{\begin{array}{l} \left[\hat{\psi}(\vec{x},t_0), \hat{\psi}(\vec{x'},t_0)\right] = \left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{x},t_0), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x'},t_0)\right] = 0 \\ \left[\hat{\psi}(\vec{x},t_0), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x'},t_0)\right] = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x'}) \end{array}\right.$

⇒Ec. de mișcare pt. op. de câmp $\hat{\psi}(\vec{x},t)$, $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x},t)$ $\left\{\begin{array}{l} i\hbar\,d\hat{\psi}(x)/dt = \left[\hat{\psi}(x), \hat{H}_{Sch}\right] \\ -i\hbar\,d\hat{\psi}^\dagger(x)/dt = \left[\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{H}_{Sch}\right] \end{array}\right.$

adică ec. pt. op. câmp Schröd. $\hat{\psi}$

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{\psi}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2\hat{\psi} + V\hat{\psi}}$$

op.real: $\hat{\psi}(\vec{x},t) = \hat{a}\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

și ec. pt. op. câmp Schröd. $\hat{\psi}^\dagger$

$$\boxed{-i\hbar\frac{d\hat{\psi}^\dagger}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2\hat{\psi}^\dagger + V\hat{\psi}^\dagger}$$

op.compl: $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x},t) = \hat{a}^\dagger e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

Ecuațiile de câmp Klein-Gordon cuantic (exprim. prin ec. Hamilton)

Cu operator $\hat{H}_{KG}$ pt. câmp Klein-Gordon $\hat{H}_{KG} = \int\dfrac{1}{2}\left(\hat{\pi}^2(x) + \left(\hat{\nabla}\hat{\varphi}(x)\right)^2 + m^2\hat{\varphi}^2(x)\right)d^3\vec{x}$

și rel. de comutare pt. $\hat{\varphi}$ și $\hat{\pi}$ la același timp t_0 $\left\{\begin{array}{l} \left[\hat{\varphi}(\vec{x},t_0), \hat{\varphi}'(\vec{x'},t_0)\right] = \left[\hat{\pi}(\vec{x},t_0), \hat{\pi}'(\vec{x'},t_0)\right] = 0 \\ \left[\hat{\varphi}(\vec{x},t_0), \hat{\pi}'(\vec{x'},t_0)\right] = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x'}) \end{array}\right.$

⇒Ec. de mișcare pt. op. de câmp $\hat{\varphi}(\vec{x},t)$, $\hat{\pi}(\vec{x},t)$ $\left\{\begin{array}{l} i\hbar\,d\hat{\varphi}/dt = \left[\hat{\varphi}, \hat{H}_{KG}\right] = i\hbar\hat{\pi} \\ i\hbar\,d\hat{\pi}/dt = \left[\hat{\pi}, \hat{H}_{KG}\right] = i\hbar\left(\hat{\nabla}^2 - m^2\right)\hat{\varphi} \end{array}\right.$

adică ec. pt. op. câmp KG $\hat{\varphi}$

$$\boxed{\frac{d\hat{\varphi}(x)}{dt} = \hat{\pi}(x)}$$

și ec. pt. op. câmp KG $\hat{\pi}$

$$\boxed{\frac{d\hat{\pi}(x)}{dt} = \left(\hat{\nabla}^2 - m^2\right)\hat{\varphi}(x)}$$

Soluțiile de *câmp cuantic K-G*: $\begin{cases} \hat{\varphi}_k(\vec{x},t) = \hat{a}_k\,e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})} \\ \hat{\varphi}_k^\dagger(\vec{x},t) = \hat{a}_k^\dagger e^{i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})} \end{cases}$

Soluția generală este o superpoziție de $\hat{\varphi}$ și $\hat{\varphi}^\dagger$, iar $\hat{\pi}(\vec{x}) = \dot{\hat{\varphi}}(\vec{x})$.

$$\begin{cases} \hat{\varphi}(\vec{x}) = \int\dfrac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3\,2\omega_k}}\left(\hat{a}_k\,e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{x}} + \hat{a}_k^\dagger\,e^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{x}}\right) \\ \hat{\pi}(\vec{x}) = \int\dfrac{d^3\vec{k}\,(-i\omega_k)}{\sqrt{(2\pi)^3\,2\omega_k}}\left(\hat{a}_k\,e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{x}} - \hat{a}_k^\dagger\,e^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{x}}\right) \end{cases}$$

Cuantificare energie câmp scalar K-G

Hamiltonian de câmp K-G $\Big\}$ $\hat{H} = \dfrac{1}{2}\int d^3\vec{x}\left[\hat{\pi}^2 + (\nabla\hat{\varphi})^2 + m^2\hat{\varphi}^2\right]$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\int d^3\vec{k}\,\hbar\omega_k\left(\hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k\right) = \int d^3\vec{k}\,\hbar\omega_k\left(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \frac{1}{2}\right)$$

Asemănător cu cazul oscilatorului armonic.

	Mecanica Clasică: particule fizice	Mecanica Cuantică: particule fizice - asociere amplitudini de undă cuantificate	Câmpuri Clasice: câmpuri fizice	Câmpuri Cuantice: câmpuri fizice - asociere de particule
	x ; $\dot x$; p ; E	$x\to\hat x$; $p\to\hat p$; $E\to\hat E$	$x\to\psi$; $\dot x\to\dot\psi$; $p\to\pi$; $H(x,p)\to\mathcal{H}(\psi,\pi)$	$\psi\to\hat\psi$; $\psi^*\to\hat\psi^\dagger$; $\pi(x,t)\to\hat\pi(x,t)$
Hamiltonian Ec. Hamilton	Hamilton: $H=T+V=T+(T-L)=p\dot x-L$ $dH=\cancel{p d\dot x}+\dot x dp-\frac{\partial L}{\partial x}dx-\cancel{\frac{\partial L}{\partial \dot x}d\dot x}=\dot x dp-\dot p dx$ Ec. canonice Hamilton $\boxed{\dot x=\frac{\partial H}{\partial p}}$; $\boxed{\dot p=-\frac{\partial H}{\partial x}}$	Hamiltonianul cuantic se obține prin trecerea la operatori: $\hat H=\hat p\hat{\dot x}-\hat L$. Atunci, Ec. canonice Hamilton $\boxed{\hat{\dot x}=\frac{\partial\hat H}{\partial\hat p}}$; $\boxed{\hat{\dot p}=-\frac{\partial \hat H}{\partial\hat x}}$	Hamiltonian (densitate): $\mathcal H(\psi^i,\pi_i)=\pi_i\dot\psi^i-\mathcal L$ $\delta\mathcal H=\cancel{\pi\delta\dot\psi}+\dot\psi\delta\pi-\frac{\delta\mathcal L}{\delta\psi}\delta\psi-\cancel{\frac{\delta\mathcal L}{\delta\dot\psi}\delta\dot\psi}=\dot\psi\delta\pi-\dot\pi\delta\psi$ Ec. canonice Hamilton[b)] (exprimate cu derivata funcțională) $\boxed{\dot\psi^i=\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi_i}}$; $\boxed{\dot\pi_i=-\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi^i}}$	Hamiltonian (densitate): $\hat{\mathcal H}(\hat\psi^i,\hat\pi_i)=\hat\pi_i\hat{\dot\psi}^i-\hat{\mathcal L}$ Ec. canonice Hamilton de câmp cuantic $\boxed{\hat{\dot\psi}^i=\frac{\delta\hat{\mathcal H}}{\delta\hat\pi_i}}$; $\boxed{\hat{\dot\pi}_i=-\frac{\delta\hat{\mathcal H}}{\delta\hat\psi^i}}$
Paranteze Poisson Comutatori	Parantezele Poisson pt. două funcții (mărimi fizice): $u(x^i,p_i,t)$ și $v(x^i,p_i,t)$ $\{u,v\}=\sum_i\left(\frac{\partial u}{\partial x^i}\frac{\partial v}{\partial p_i}-\frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial x^i}\right)$ pentru $u=x^i$ și $v=p_j$, avem: $\{x^i,p_j\}=\frac{\partial x^i}{\partial x^i}\frac{\partial p_j}{\partial p_i}-\frac{\partial x^i}{\partial p_i}\frac{\partial p_j}{\partial x^i}=\delta^i_j$ $\{x^i,x^j\}=\{p_i,p_j\}=0$	Comutatorul pt. operatorii: $\hat u$ și $\hat v$ $\boxed{[\hat u,\hat v]=\hat u\hat v-\hat v\hat u}$ pt. $\hat u=\hat x$ și $\hat v=\hat p$ avem Relația de nedeterminare: $[\hat x,\hat p]=i\hbar$ $[\hat x,\hat p]\psi\equiv(\hat x\hat p_x-\hat p_x\hat x)\psi=\left(-i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi$ $=-i\hbar\cancel{x}\frac{\partial\psi}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial x}{\partial x}\psi+i\hbar\cancel{x}\frac{\partial\psi}{\partial x}=i\hbar\psi$ In general $[\hat x^i,\hat p_j]=i\hbar\delta^i_j$; $[\hat x^i,\hat x^j]=[\hat p_i,\hat p_j]=0$	Parantezele Poisson pentru două funcționale de câmp clasic: $u(\psi^i,\pi_i,t)$ și $v(\psi^i,\pi_i,t)$ $\{u,v\}=\sum_i\left(\frac{\delta u}{\delta\psi^i}\frac{\delta v}{\delta\pi_i}-\frac{\delta u}{\delta\pi_i}\frac{\delta v}{\delta\psi^i}\right)\delta(\vec x-\vec y)$ pentru $u=\psi^i$ și $v=\pi_j$, avem: $\{\psi^i,\pi_j\}=\frac{\delta\psi^i}{\delta\psi^i}\frac{\delta\pi_j}{\delta\pi_i}-\frac{\delta\psi^i}{\delta\pi_i}\frac{\delta\pi_j}{\delta\psi^i}=\delta^i_j\delta(\vec x-\vec y)$ $\{\psi^i,\psi^j\}=\{\pi_i,\pi_j\}=0$	Comutatorul pentru operatorii de câmp cuantic: $\hat u(\hat\psi^i,\hat\pi_i,t)$ și $\hat v(\hat\psi^i,\hat\pi_i,t)$ $\boxed{[\hat u,\hat v]=\hat u\hat v-\hat v\hat u}$ pt. $\hat u=\hat\psi^i$ și $\hat v=\hat\pi_j$ avem Relația de nedeterminare pt. câmpuri cuantice $[\hat\psi^i,\hat\pi_j]=i\hbar\delta^i_j\,\delta(\vec x-\vec y)$ $[\hat\psi^i,\hat\psi^j]=[\hat\pi_i,\hat\pi_j]=0$
Ecuații de mișcare variabile conjugate (Ecuații Hamilton)	Ecuațiile Hamilton prin paranteze Poisson $\{x^i,H\}=\frac{\partial x^i}{\partial x^i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial x^i}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x^i}=\frac{\partial H}{\partial p_i}=\dot x^i$ $\{p_j,H\}=\frac{\partial p_j}{\partial x^i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial p_j}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x^i}=-\delta^i_j\frac{\partial H}{\partial x^i}=\dot p_j$	Ecuațiile Hamilton prin comutatori: Din ec. Heisenberg[a)] cu: $\hat A_H=\hat x^i$ și $\hat A_H=\hat p_i$ $\hat{\dot x}^i=\frac{1}{i\hbar}[\hat x^i,\hat H]=\frac{\partial\hat H}{\partial\hat p_i}$ deoarece $\hat x^i=i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat p_i}$ $\hat{\dot p}_i=\frac{1}{i\hbar}[\hat p_i,\hat H]=-\frac{\partial\hat H}{\partial\hat x^i}$ deoarece $\hat p_i=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x^i}$	Ecuațiile Hamilton prin paranteze Poisson pentru $u=\psi^i$; $v=\mathcal H$ apoi pt. $u=\pi_i$; $v=\mathcal H$ $\{\psi^i,\mathcal H\}=\frac{\delta\psi^i}{\delta\psi^i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi_i}-\frac{\delta\psi^i}{\delta\pi_i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi^i}=\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi_i}=\dot\psi^i$ $\{\pi_i,\mathcal H\}=\frac{\delta\pi_i}{\delta\psi^i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi_i}-\frac{\delta\pi_i}{\delta\pi_i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi^i}=-\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi^i}=\dot\pi_i$	Ecuațiile Hamilton prin comutatori (Similar Ec.Hamilton din Mecanica Cuantică) $\hat{\dot\psi}^i=\frac{1}{i\hbar}[\hat\psi^i,\hat{\mathcal H}]=\frac{\delta\hat{\mathcal H}}{\delta\hat\pi_i}$ deoarece $\hat\psi^i=i\hbar\frac{\delta}{\delta\hat\pi_i}$ $\hat{\dot\pi}_i=\frac{1}{i\hbar}[\hat\pi_i,\hat{\mathcal H}]=-\frac{\delta\hat{\mathcal H}}{\delta\hat\psi^i}$ deoarece $\hat\pi_i=-i\hbar\frac{\delta}{\delta\hat\psi^i}$
Ecuații de mișcare variabile dinamice	Ec. de mișcare pt. o funcție $u(x^i,p_i,t)$ $\frac{du}{dt}=\frac{\partial u}{\partial t}+\sum_i\frac{\partial u}{\partial x^i}\dot x^i+\frac{\partial u}{\partial p_i}\dot p_i=$ $=\frac{\partial u}{\partial t}+\underbrace{\sum_i\left(\frac{\partial u}{\partial x^i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x^i}\right)}_{=\{u,H\}}=$ $=\frac{\partial u}{\partial t}+\{u,H\}$	$\Longrightarrow$ Cuantificarea I $\{x,p\}\longrightarrow\frac{1}{i\hbar}[\hat x,\hat p]$ Ec. de mișcare pt. un operator $\hat u(\hat x^i,\hat p_i,t)$ $\frac{d\hat u}{dt}=\frac{\partial\hat u}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat u,\hat H]$	Ecuația de mișcare pt. o funcțională $u(\psi^i,\pi_i,t)$ $\frac{du}{dt}=\frac{\partial u}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\delta u}{\delta\psi^i}\dot\psi^i+\frac{\delta u}{\delta\pi_i}\dot\pi_i\right)\delta(\vec x-\vec y)=$ $=\frac{\partial u}{\partial t}+\underbrace{\sum_i\left(\frac{\delta u}{\delta\psi^i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi_i}-\frac{\delta u}{\delta\pi_i}\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi^i}\right)\delta(\vec x-\vec y)}_{=\{u,\mathcal H\}}$ $=\frac{\partial u}{\partial t}+\{u,\mathcal H\}$	$\Longrightarrow$ Cuantificarea II $\{\psi,\pi\}\longrightarrow\frac{1}{i\hbar}[\hat\psi,\hat\pi]$ Ec. de mișcare pt. un operator $\hat u(\hat\psi^i,\hat\pi_i,t)$ $\frac{d\hat u}{dt}=\frac{\partial\hat u}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat u,\hat{\mathcal H}]$
Exemple și deduceri	Hamiltonian-ul de oscilator armonic: $H(x,p)=T+V=\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}x^2$ Ecuațiile Hamilton: $\dot x=\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{p}{m}$; $\dot p=-\frac{\partial H}{\partial x}=-kx$ Ec. Hamilton → Ec. Newton: $\dot x=\frac{p}{m}$; $\dot p=-kx\to\boxed{-k\,x=\dot p=m\ddot x}$ In Mec. Cuantică (cu operatori) $\hat H=\frac{\hat p^2}{2m}+\frac{k}{2}\hat x^2$ cu $(\hat x,\hat p)\to(\hat a,\hat a^\dagger)$ Operatori anihilare $\hat a$ și creare $\hat a^\dagger$ $\hat a=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\left(\sqrt k\,\hat x+i\frac{\hat p}{\sqrt m}\right)$; $\hat a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\left(\sqrt k\,\hat x-i\frac{\hat p}{\sqrt m}\right)$ Relația de comutare: $[\hat x,\hat p]=i\hbar\to[\hat a,\hat a^\dagger]=1$ $\hat H=\hbar\omega\left(\hat a\hat a^\dagger-\frac12\right)$; $\hat H=\hbar\omega\left(\hat a^\dagger\hat a+\frac12\right)$ sau $\hat H=\frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat a\hat a^\dagger+\hat a^\dagger\hat a\right)$	a) Transfer evoluție: *stare Schröd.*→ *op.Heisenberg* Ec. Sch. exprimă evoluția ψ_S în t $i\hbar\frac{\partial\psi_S(x,t)}{\partial t}=\hat H\psi_S(x,t)$ $\psi_S(x,t)=e^{-i\hat H(t-t_0)/\hbar}\psi_S(x,t_0)$ Stări Heisenberg: $\psi_H(x)=\psi_S(x,t_0)$ Observabile $\hat A\to$ valori medii $\to$ variație în t $\langle\hat A(t)\rangle=\int\psi_S^*(x,t)\,\hat A\,\psi_S(x,t)\,dx$ $\frac{d\langle\hat A\rangle}{dt}=\int\left(\frac{\partial\psi_S^*}{\partial t}\hat A\psi_S+\psi_S^*\frac{\partial\hat A}{\partial t}\psi_S+\psi_S^*\hat A\frac{\partial\psi_S}{\partial t}\right)dx=$ $=\langle\frac{\partial\hat A}{\partial t}\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int\psi_S^*\left(\hat A\hat H-\hat H\hat A\right)\psi_S dx=\langle\frac{\partial\hat A}{\partial t}\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat A,\hat H]\rangle$ Pt. obs. Heisenberg $\hat A_H=\langle\hat A\rangle$ și $\frac{\partial\hat A_H}{\partial t}=0$ ⇒ Ecuația Heisenberg: (evoluția $\hat A_H$ în t) $\boxed{i\hbar\frac{d\hat A_H}{dt}=\left[\hat A_H,\hat H\right]}$	b) Verif. Ec. Hamilton pt. **Câmpuri Clasice** Cu $\mathcal L$ pt. câmp Schrödinger $\pi=\frac{\delta\mathcal L}{\delta\dot\psi}=i\hbar\psi^*\Rightarrow\psi^*=\frac{\pi}{i\hbar}$ atunci $\mathcal H=\pi\dot\psi-\mathcal L=$ $=\cancel{i\hbar\psi^*\dot\psi}-\cancel{i\hbar\psi^*\dot\psi}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+V\psi^*\psi=\boxed{-\frac{i\hbar}{2m}\nabla\pi\cdot\nabla\psi+\frac{V}{i\hbar}\pi\psi}$ Folosind derivata funcțională $\dot\psi=\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi}=\frac{\partial\mathcal H}{\partial\pi}-\nabla\left(\frac{\partial\mathcal H}{\partial(\nabla\pi)}\right)=\frac{V}{i\hbar}\psi+\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi$ $\dot\pi=-\frac{\delta\mathcal H}{\delta\psi}=-\frac{\partial\mathcal H}{\partial\psi}+\nabla\left(\frac{\partial\mathcal H}{\partial(\nabla\psi)}\right)=-\frac{V}{i\hbar}\pi-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\pi$ In a II-a ec. folosim: $\pi=i\hbar\psi^*$ și $\dot\pi=i\hbar\,\partial\psi^*/\partial t$, atunci regăsim ecuația Schrödinger reală: $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=V\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$ ecuația Schrödinger complexă: $-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=V\psi^*-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*$ Cu $\mathcal L$ pt. câmp Klein-Gordon $\pi=\frac{\delta\mathcal L}{\delta\dot\varphi}=\dot\varphi$ atunci $\mathcal H=\pi\dot\varphi-\mathcal L=$ $=\dot\varphi^2-\frac12\left(\dot\varphi^2-(\nabla\varphi)^2-m^2\varphi^2\right)=\boxed{\frac12\left(\pi^2+(\nabla\varphi)^2+m^2\varphi^2\right)}$ $\dot\varphi=\frac{\delta\mathcal H}{\delta\pi}=\frac{\partial\mathcal H}{\partial\pi}=\pi$; $\dot\pi=-\frac{\delta\mathcal H}{\delta\varphi}=-\frac{\partial\mathcal H}{\partial\varphi}+\nabla\left(\frac{\partial\mathcal H}{\partial(\nabla\varphi)}\right)=-m^2\varphi+\nabla^2\varphi$ Cu $\pi=\dot\varphi$ și $\dot\pi=\ddot\varphi\Longrightarrow$ ec. Klein-Gordon: $\ddot\varphi-\nabla^2\varphi+m^2\varphi=0$	