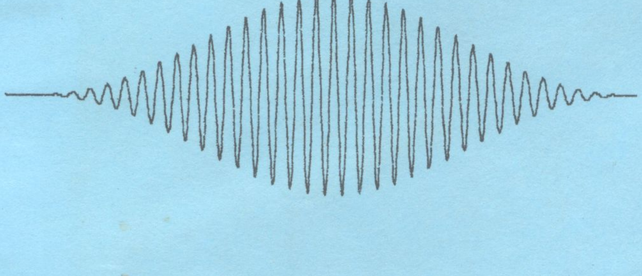
О.І.Жмурко

Класична та квантова механіка



Міністерство освіти та науки України

Вінницький державний технічний університет

О.І. Жмурко

КЛАСИЧНА ТА КВАНТОВА МЕХАНІКА

Затверджено Вченою радою Вінницького державного технічного університету як навчальний посібник з квантової механіки для студентів радіотехнічних спеціальностей. Протокол № 8 від 29 березня 2001 р.

Вінниця ВДТУ 2001

УДК 531(075)

Ж 77

Рецензенти:

П.М. Зюзяк, доктор фізико-математичних наук, професор

С.Г. Авдєєв, кандидат фізико-математичних наук, доцент

А.В. Ющенко, кандидат фізико-математичних наук, доцент

Рекомендовано до видання Вченою радою Вінницького державного технічного університету Міністерства освіти і науки України

Жмурко О.І.

Ж 77 Класична та квантова механіка. Навчальний посібник. — Вінниця ВДТУ, 2001. — 84 с.

В посібнику даються основи класичної механіки для вивчення курсів квантової механіки та статистичної фізики. Показано різницю, спільне та взаємозв'язок класичної та квантової фізики.

Розраховано на студентів радіотехнічних спеціальностей всіх форм навчання.

УДК 531(075)

ЗМІСТ

1 Класична механіка

1.1. Основи описання. Рівняння руху

1.1.1 Координати, змінні

Класична механіка базується на понятті матеріальної точки — тіла, розмірами якого нехтують при описі руху. Стан матеріальної точки в просторі визначається її радіус-вектором $\bar{r}$. Похідна $\bar{r}$ за часом t

$$\bar{v} = \frac{d\bar{r}}{dt}$$

носить назву швидкості, а друга похідна

$$\bar{a} = \frac{d^2\bar{r}}{dt^2}$$

— прискорення тіла. Досить часто похідна за часом позначається крапкою над літерою: $\bar{v} = \dot{\bar{r}}$.

Для визначення положення системи N матеріальних точок в просторі необхідно задати N радіус-векторів ($\bar{r}_i$, i=1,2,...,N), тобто 3N координат. Таке число незалежних величин, що визначають положення системи, називають числом ступенів свободи. Для згаданої системи це число $k=3N$. Ці величини можуть бути декартовими (x, y, z), циліндричними (r, φ, z) або сферичними (r, θ, φ) координатами. Будь-які з цих координат, що повністю визначають положення системи, називають **узагальненими координатами**. Розмірність цих координат м або рад. Використаємо позначення для них $q_1, q_2, ..., q_{3N}$ (скорочено q_i). Похідні $\dot{q}_i$ носять назву **узагальнених швидкостей**, які можна поділити на лінійні та кутові (розмірності м/с та рад/с). **Узагальненими прискореннями** називають другу похідну $\ddot{q}_i$ (лінійні та кутові прискорення з розмірностями м/с^2 та рад/с^2).

Як підтверджується експериментально, стан системи повністю визначається заданням всіх узагальнених координат q_i та швидкостей $\dot{q}_i$, тобто прискорення $\ddot{q}_i$ в деякий момент часу визначається заданням q_i та $\dot{q}_i$. Таке співвідношення є рівнянням руху. Щодо функцій *q(t)*, то рівняння руху — диференціальні рівняння другого порядку, інтегрування яких дозволяє отримати *q(t)*, тобто траєкторію руху механічної системи.

1.1.2 Принцип найменшої дії

Кожна механічна система характеризується деякою функцією $L(q_1,q_2,\ldots,q_k,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\ldots,\dot{q}_k,t)$ або $L(q,\dot{q},t)$, що називається **функцією Лагранжа**. Те, що вона залежить тільки від q та $\dot{q}$ і не залежить від вищих похідних $(\ddot{q},\dddot{q},\ldots)$, пов'язано з однозначним визначенням стану механічної системи заданням координат та швидкостей (лапласів детермінізм).

Дією (механічною дією) називають

$$S = \int L(q,\dot{q},t)dt .$$

Найбільш загальним формулюванням закону руху механічної системи є принцип найменшої дії. Згідно з ним, якщо ми знаємо положення системи $q^{(1)}$ та $q^{(2)}$ в момент часу t_1 та t_2, то між цими положеннями система рухається так, що дія

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)dt$$

приймає найменше значення.

1.1.3 Рівняння Лагранжа

Нехай $q=q(t)$ і є функція, для якої дія S є мінімальною. Тоді S зростає при заміні q на будь-яку функцію $q(t)+\delta q(t)$, де $\delta q(t)$ — варіація координати, тобто мала (безмежно мала) величина, така, що $\delta q(t_1)=\delta q(t_2)=0$.

Зміна (варіація) дії S при заміні траєкторії з q на $q+\delta q$ дається:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)dt = \int_{t_1}^{t_2} L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t)dt - \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)dt .$$

Розкладемо цю різницю інтегралів за ступенями малості δq та $\delta\dot{q}$. Необхідною умовою мінімуму дії S є рівність нулю сукупності членів пов'язаних з першим ступенем вказаних змінних:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q} \right) dt = 0 .$$

Враховуючи, що $\delta\dot{q} = \frac{d}{dt}\delta t$, проінтегруємо по частинах другий член і отримаємо

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\delta q dt = 0.$$

За означенням варіації координати перший член в цьому виразі дорівнює нулю. Інтеграл, що залишається, обертається на нуль при довільній зміні траєкторії (δq) тільки при нульовому підінтегральному виразі. Отож отримуємо

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0.$$

Для декількох ступенів свободи необхідно незалежно змінювати (варіювати) різні координати $q_i(t)$. Тоді отримаємо систему рівнянь

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \ \text{(i=1,2,…,k)}.$$

Ці диференціальні рівняння носять назву **рівнянь руху Лагранжа**.

1.1.3.1 Функція Лагранжа

Функція Лагранжа є адитивною, тобто якщо деякі частини системи незалежні (не взаємодіють одна з однією), то функція Лагранжа системи дорівнює сумі функцій Лагранжа цих підсистем. Це випливає з того, що рівняння Лагранжа для однієї частини системи не містять величин, що відносяться до інших частин системи.

Функцію Лагранжа можна помножити на довільну сталу і це не відіб'ється на рівняннях руху. Така властивість дозволяє довільним чином вибрати одиниці вимірювання.

Є деяка неоднозначність у визначенні функції Лагранжа. Так, функція Лагранжа $L(q,\dot{q},t)$ та $L(q,\dot{q},t)+\frac{d}{dt}f(q,t)$, де $f(q,t)$ — довільна функція координат та часу, мають одну і ту ж варіацію дії

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)dt \text{ та } \delta S_1=\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(L(q,\dot{q},t)+\frac{d}{dt}f(q,t)\right)dt=$$

$$=\delta\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)dt+\delta\left(f\left(q(t_2),t_2\right)-f\left(q(t_1),t_1\right)\right)=\delta\int_{t_1}^{t_2}L(q,\dot{q},t)dt=\delta S.$$

Таким чином заміна першої функції Лагранжа другою не змінює рівняння руху. Отже функція Лагранжа визначається з точністю до будь-якої повної похідної за часом довільної функції координат та часу.

Під симетрією законів фізики розуміють, що вони не змінюються при деяких перетвореннях. Симетрія фізичних законів відносно зсуву (переносу) простору підрозуміває еквівалентність всіх точок простору, відсутність виділених точок та носить назву однорідності простору. Під ізотропією простору розуміють симетрію фізичних законів відносно повороту системи як цілої у просторі, що значить еквівалентність всіх напрямків простору. Симетрія законів відносно зсуву в часі, тобто незмінність законів фізики в часі називається однорідністю часу.

Для вільної частинки в інерціальній системі відліку однорідність простору та часу означає незалежність функції Лагранжа від координат x,

y, z та від часу t. Отже, функція Лагранжа залежить тільки від швидкості $\bar{v}$. Ізотропність простору вимагає незалежності функції Лагранжа від напрямку вектора $\bar{v}$, отож функція Лагранжа може залежати від $(\bar{v}\bar{v}) = v^2$: $L(\bar{r},\bar{v},t) = L(v^2)$. Враховуємо тепер, що

$$\frac{\partial L}{\partial r} = 0$$

і маємо рівняння Лагранжа

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial v} = 0, \text{ або } \frac{\partial L}{\partial v} = const,$$

що відповідає $v = const$, тобто закону інерції.

Перейдемо до системи відліку, що рухається з безмежно малою швидкістю $\bar{\varepsilon}$ по відношенню до початкової. Швидкість частинки в цій системі буде $\bar{v}' = \bar{v} + \bar{\varepsilon}$. Рівняння руху в обидвох системах повинні мати однаковий вигляд, отже функції Лагранжа повинні відповідати одна одній.

$$L(\bar{v}') = L(v^2 + 2\bar{v}\bar{\varepsilon} + \varepsilon^2) = L(v^2) + \frac{\partial L}{\partial v^2} 2\bar{v}\bar{\varepsilon}.$$

В останньому виразі ми знехтували малими другого та вищих порядків. Закони руху не змінюються, якщо $L(\bar{v}')$ та $L(v^2)$ різняться тільки повною похідною деякої функції. Це вимагає

$$\frac{\partial L}{\partial v^2} = const.$$

Назвемо константу $\frac{m}{2}$ і маємо $L = \frac{m}{2}v^2$. Величина m зветься масою частинки.

Функція Лагранжа не змінюється не тільки для безмежно малого перетворення швидкостей $(\bar{\varepsilon})$, але і скінченного *(V)*:

$$L' = L(v'^2) = \frac{m}{2}\left(\bar{v} + \bar{V}\right)^2 = \frac{m}{2}v^2 + m\bar{v}\bar{V} + \frac{m}{2}V^2 = L + \frac{d}{dt}\left(m\bar{r}\bar{V} + \frac{m}{2}V^2 t\right).$$

Другий член є повною похідною за часом і його можна випустити.

Корисно підкреслити, що маса може бути тільки додатною, бо в іншому разі дія $S = \int \frac{mv^2}{2} dt$ не зможе мати мінімуму.

Для системи невзаємодіючих частинок в силу адитивності L маємо

$$L = \sum_i \frac{m_i V_i^2}{2} \text{ або } L = \frac{1}{2}\sum_{i,j} a_{ij}(q)\dot{q}_i\dot{q}_j \ ,$$

де коефіцієнти $a_{ij}(q)$ визначають інерційні властивості (маса, момент інерції). Ці приведені тут суми мають назви кінетичної енергії E_k. Якщо в замкненій системі є взаємодія, то функція Лагранжа змінюється на величину взаємодії. Що виглядає як $-U$:

$$L = E_k - U(q) = \sum \frac{m_i V_i^2}{2} - U(r) = \frac{1}{2}\sum a_{ij}(q)\dot{q}_i\dot{q}_j - U(q).$$

Величину $U(q)$, що залежить від координат всіх частинок, називають потенціальною енергією. Одиниця виміру як енергії, так і функції Лагранжа — Дж (джоуль).

З рівняння Лагранжа

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \bar{V}_i} = \frac{\partial L}{\partial \bar{r}_i}$$

маємо

$$m_i \frac{d\overline{V}_i}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial \overline{r}_i}.$$

Враховуючи, що

$$\overline{F}_i = -\frac{\partial U}{\partial \overline{r}_i}$$

зветься силою (що діє на i частинку), остаточно отримуємо **рівняння Ньютона**

$$m_i \frac{d\overline{V}_i}{dt} = \overline{F}_i.$$

Якщо мова іде про незамкнені системи, то функція Лагранжа частинки

$$L = \frac{mV^2}{2} - U(\overline{r}, t)$$

характеризується потенціальною енергією взаємодії з зовнішнім полем, що утворено зовнішніми тілами.

1.1.4 Закони збереження

З математичної точки зору рівняння руху Лагранжа — диференціальні рівняння другого порядку, отже загальний розв'язок має довільних сталих вдвічі більше ступенів свободи (2k). До числа цих постійних входить відлік часу на незалежні функції (2k-1) координат та швидкостей, що носять назви інтегралів руху. Частина інтегралів руху має в фізиці першочергове значення, оскільки вони пов'язані з симетрією простору та часу.

1.1.4.1 Однорідність часу

Незалежність законів фізики від часу для замкненої системи тіл значить, що функція Лагранжа не залежить явно від часу: $L\big(q(t),\dot{q}(t),t\big)=L\big(q(t),\dot{q}(t)\big)$. Тоді похідна за часом має вигляд

$$\frac{dL}{dt}=\sum_i\frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i+\sum_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\ddot{q}_i.$$

Зробимо заміну в першій сумі, користуючись рівнянням Лагранжа:

$$\frac{dL}{dt}=\sum_i\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right)\dot{q}_i+\sum_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\ddot{q}_i=\sum_i\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\dot{q}_i\right).$$

Звідси отримуємо

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\dot{q}_i-L\right)=0.$$

Тепер можемо зробити висновок, що при русі системи залишається незмінною величина

$$E=\sum_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\dot{q}_i-L,$$

що носить назву (повної механічної) **енергії** системи. Якщо врахувати, що в замкненій системі $L=E_k(q,\dot{q})-U(q)$, можна представити $E=E_k(q,\dot{q})+U(q)$.

1.1.4.2 Однорідність простору

В силу однорідності простору функція Лагранжа замкненої системи є незмінною при паралельному зсуві системи координат. Розглянемо перенесення на безмежно малий відрізок $\bar{\varepsilon}$ (радіус-вектори частинок

$\bar{r}_i' = \bar{r}_i + \bar{\varepsilon}$). В результаті такого зсуву швидкості лишаться незмінними, а функція Лагранжа зміниться на

$$\delta L = \sum \frac{\partial L}{\partial \bar{r}_i} \delta \bar{r}_i = \bar{\varepsilon} \sum \frac{\partial L}{\partial \bar{r}_i}.$$

Для довільного $\bar{\varepsilon}$ незмінність L або $\delta L = 0$ відповідає

$$\sum \frac{\partial L}{\partial \bar{r}_i} = 0,$$

що можна розглядати з двох точок зору. По-перше

$$\frac{\partial L}{\partial \bar{r}_i} = -\frac{\partial U}{\partial \bar{r}_i} = \bar{F}_i.$$

Отож отримана вимога є ні що інше як $\sum \bar{F}_i = 0$ — сума всіх сил в замкненій системі дорівнює нулю (рівність дії та протидії). З другого боку, використавши рівняння Лагранжа, маємо

$$\sum \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \bar{V}_i} = \frac{d}{dt} \sum \frac{\partial L}{\partial \bar{V}_i} = 0,$$

з чого випливає незмінність в часі (при русі) величини

$$\bar{P} = \sum \frac{\partial L}{\partial \bar{V}_i},$$

що зветься імпульсом системи. Окремі компоненти

$$\bar{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \bar{V}_i}$$

відповідають імпульсам окремих частинок. Враховуючи вигляд функції Лагранжа, знайдемо зв'язок імпульсу зі швидкістю $\bar{p}_i = m_i \bar{V}_i$.

1.1.4.3 Ізотропність простору

При безмежно малому повороті системи координат ізотропія значить незмінність функції Лагранжа.

Позначимо вектор безмежно малого повороту $\delta\overline{\varphi}$, розуміючи під його модулем кут повороту, а напрямком — вісь обертання за правим гвинтом. Тоді радіус-вектор кожної точки зміниться на величину $\delta\overline{r} = [\delta\overline{\varphi} \times \overline{r}]$. Одночасно зміняться напрями швидкостей при незмінних модулях: $\delta\overline{V} = [\delta\overline{\varphi} \times \overline{V}]$.

При повороті функція Лагранжа не змінюється:

$$\delta L = \sum \left(\frac{\partial L}{\partial \overline{r}_i} \delta\overline{r}_i + \frac{\partial L}{\partial \overline{V}_i} \delta\overline{V}_i \right) = 0 .$$

Враховуючи, що

$$\frac{\partial L}{\partial \overline{V}_i} = \overline{p}_i , \text{ та } \frac{\partial L}{\partial \overline{r}_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \overline{V}_i} = \dot{\overline{p}}_i$$

отримуємо $\sum \left(\dot{\overline{p}}_i [\delta\overline{\varphi} \times \overline{r}_i] + \overline{p}_i [\delta\overline{\varphi} \times \overline{V}_i] \right) = 0$. Користуючись властивостями мішаного добутку робимо циклічну перестановку множників:

$$\sum \left(\delta\overline{\varphi} [\overline{r}_i \times \dot{\overline{p}}_i] + \delta\overline{\varphi} [\overline{V}_i \times \overline{p}_i] \right) = \delta\overline{\varphi} \sum \left([\overline{r}_i \times \dot{\overline{p}}_i] + [\overline{V}_i \times \overline{p}_i] \right) = \delta\overline{\varphi} \frac{d}{dt} \sum [\overline{r}_i \times \overline{p}_i] = 0 .$$

З довільності $\delta\overline{\varphi}$ маємо

$$\frac{d}{dt} \sum [\overline{r}_i \times \overline{p}_i] = 0 ,$$

тобто зберігається величина

$$\overline{M} = \sum [\overline{r}_i \times \overline{p}_i] ,$$

що зветься моментом імпульсу системи. Величини

$$\bar{M}_i = [\bar{r}_i \times \bar{p}_i]$$

відповідають моментам імпульсу частинок. Проекція моменту на вісь може бути отримана як

$$M = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}},$$

де φ — кут повороту відносно цієї ж осі.

Узагальнюючи отримане маємо — **узагальнений імпульс** дорівнює

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

(імпульс чи момент імпульсу в залежності від q) та **узагальнені сили**

$$F_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

(сила та момент сили, з розмірностями Н та Н·м). В приведених позначеннях рівняння Лагранжа приймають вигляд $\dot{p}_i = F_i$, збігаючись з рівняннями Ньютона.

1.1.5 Канонічні рівняння Гамільтона

Крім використання узагальнених координат та узагальнених швидкостей стан механічної системи можна визначати узагальненими координатами та узагальненими імпульсами.

Для переходу до іншого незалежного набору змінних замкненої системи виконаємо перетворення (Лежандра):

$$dL = dL(q, \dot{q}) = \sum \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i .$$

Користуючись наведеними вище співвідношеннями та рівняннями Лагранжа перепишемо

$$dL = \sum \dot{p}_i dq_i + \sum p_i d\dot{q}_i = \sum \dot{p}_i dq_i + \left(d\left(\sum p_i \dot{q}_i\right) - \sum \dot{q}_i dp_i\right).$$

Звідси

$$d\left(\sum p_i \dot{q}_i - L\right) = -\sum \dot{p}_i dq_i + \sum \dot{q}_i dp_i.$$

Функція

$$\sum p_i \dot{q}_i - L,$$

що стоїть під диференціалом, як ми бачили вище, є енергією системи. Диференціал її залежить від диференціалів dq_i та dp_i, отже сама функція залежить від q_i і p_i (та часу). Енергія системи, виражена через координати та імпульси, зветься функцією Гамільтона:

$$H(q, p, t) = \sum p_i \dot{q}_i - L.$$

Зіставляючи

$$dH = \sum \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \text{ та } dH = -\sum \dot{p}_i dq_i + \sum \dot{q}_i dp_i,$$

робимо висновок, що

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Це система з 2k диференціальних рівнянь, що звуться (канонічними) рівняннями Гамільтона. Перші задають зв'язок імпульсу зі швидкістю, другі і є власне рівняннями руху в звичайному розумінні.

1.1.6 Інтеграли руху, дужка Пуассона

Якщо деяка функція $f(q,p,t)$ пов'язана з рухом системи частинок, то її похідна за часом

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\sum\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right).$$

Користуючись канонічними рівняннями перепишемо

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\{Hf\},$$

де позначено дужку Пуассона

$$\{Hf\}=\sum\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

функцій H та f.

Для інтегралів руху $\left(\frac{df}{dt}=0\right)$ виконується

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\{Hf\}=0.$$

Якщо ж інтеграл руху не залежить від часу явно, то повинно бути $\{Hf\}=0$.

Взявши за f функцію Гамільтона отримуємо

$$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial t}.$$

Коли функція Гамільтона явно не залежить від часу, то маємо

$$\frac{dH}{dt}=0,$$

інакше кажучи, закон збереження енергії.

Користуючись дужкою Пуассона маємо

$$\{Hq_i\} = \sum\left(\frac{\partial q_i}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial q_i}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \text{ також}$$

$$\{Hp_i\} = \sum\left(\frac{\partial p_i}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial p_i}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Перепишемо тепер канонічні рівняння Гамільтона

$$\dot{q}_i = \{Hq_i\};\ \dot{p}_i = \{Hp_i\}.$$

1.1.7 Рівняння Гамільтона-Якобі

Рівняння руху, наведені вище, спираються на функцію, що описує систему тіл. Серед цих функцій — функція Лагранжа, Гамільтона та дія. Остання також є придатною для формулювання законів руху.

Розглянемо зміну дії при переході на іншу траєкторію. Дія змінюється, як показано вище,

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\delta q dt.$$

Будемо розглядати рух вздовж істинних траєкторій, тоді, згідно з рівняннями Лагранжа, приведений інтеграл дорівнює нулю. Враховуючи, що $\delta q(t_1) = 0$, та вважаючи, що в момент часу t_2 положення на траєкторії не фіксоване, отримуємо

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q(t_2) = p\delta q(t_2) = p\delta q,$$

та в загальному випадку для довільного числа ступенів свободи

$$\delta S = \sum_i p_i \delta q_i.$$

Таким чином бачимо, що дія залежить тільки від координат та, можливо, часу: S=S(q,t). Це означає, що

$$\delta S = \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \delta q_i ,$$

тому

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i .$$

Для однієї частинки отриманий результат можна записати як $\overline{p} = \nabla S$.

Згідно з визначенням

$$\frac{dS}{dt} = L .$$

З другого боку

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum p_i \dot{q}_i .$$

Комбінуючи, отримуємо

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L - \sum p_i \dot{q}_i ,$$

та остаточно

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H$$

або

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$$

чи детальніше

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t \right) = 0 .$$

Це рівняння і носить назву рівняння Гамільтона-Якобі.

Для однієї частинки рівняння Гамільтона-Якобі має вигляд

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\nabla S)^2}{2m}+U=0.$$

1.1.8 Принцип Мопертюї

Для знаходження тільки траєкторії руху без розглядання руху в часі користуються принципом Мопертюї як спрощеним принципом найменшої дії (1740 р.).

З наведених вище співвідношень

$$S=S(q,t)\,;\ \frac{\partial S}{\partial q_i}=p_i\,;\ \frac{\partial S}{\partial t}=-H$$

маємо

$$dS=\sum p_i dq_i-Hdt.$$

Розглядаючи систему з явно незалежною від часу функцією Гамільтона, тобто коли енергія зберігається $H(q,p)=E=const$, отримуємо

$$S=\int\sum p_i dq-E(t-t_0)\ \text{або}\ \delta S=\delta\int\sum p_i dq-E\delta t$$

(тут t_0— початковий момент часу). З іншого боку, варіація дії при фіксованих початкових та кінцевих координатах залежить тільки від варіації часу δt — варіації моменту часу проходження кінцевої точки $\delta S=-H\delta t=-E\delta t$. Назвемо вкороченою дією

$$S_0=\int\sum p_i dq_i.$$

Тоді з приведених співвідношень маємо $\delta S_0=0$. Отже, вкорочена дія має мінімум на траєкторії, що проходить через дві точки в довільні моменти часу при виконанні закону збереження енергії.

Для однієї частинки вкорочену дію можна представити в вигляді

$$S_0 = \int\sqrt{2m(E-U)}dl$$

(dl — елемент траєкторії). Мінімум цієї дії визначає форму траєкторії.

1.2. Класичне рівняння неперервності

Розглянемо деякий об'єм V. Маса речовини в цьому об'ємі

$$m = \int\rho dV,$$

де ρ — густина речовини. Швидкість зменшення кількості речовини в об'ємі можна записати як

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int\rho dV.$$

Зміна кількості речовини пов'язана з переміщенням речовини через поверхню, що оточує розглядуваний об'єм. Позначимо через $d\bar{S}$ елемент поверхні, модуль цього вектора дорівнює площі елемента поверхні, а напрямок – по нормалі назовні. Через позначений елемент поверхні в одиницю часу протікає речовина масою $\rho\bar{v}d\bar{S}$ ($\bar{v}$ — швидкість руху). Ця кількість речовини додатна коли речовина витікає з об'єму, та від'ємна — коли речовина втікає. Загальна кількість речовини, що покидає об'єм, відповідно є $\oint\rho\bar{v}d\bar{S}$. Згідно з законом збереження маси прирівнюємо обидва отримані нами вирази:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int\rho dV = \oint\rho\bar{v}d\bar{S}.$$

Скористуємось теоремою

$$\oint\rho\bar{v}d\bar{S} = \int div(\rho\bar{v})dV$$

і отримуємо

$$\int\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+div(\rho\overline{v})\right)dV=0.$$

Оскільки об'єм був довільний, то необхідно, щоб виконувалась умова

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+div(\rho\overline{v})=0 \text{ або } \frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\overline{j}=0,$$

що носить назву рівняння неперервності (безперервності). Вектор $\overline{j}=\rho\overline{v}$ зветься густиною потоку речовини.

При розгляданні дискретної будови речовини розділимо рівняння на масу кожної частинки і матимемо рівняння неперервності в вигляді

$$\frac{\partial n}{\partial t}+div(n\overline{v})=0,$$

де n — концентрація частинок. В випадку квазічастинок рівняння неперервності матиме члени, пов'язані з утворенням (генерацією) та зникненням (рекомбінацією) квазічастинок.

Якщо кожна частинка переносить електричний заряд, то рівняння неперервності матиме вигляд

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\overline{j}=0,$$

де ρ — густина заряду, $\overline{j}$ — густина струму.

1.3. Класичний рух в електромагнітному полі

Електромагнітне поле характеризується скалярним потенціалом φ та векторним $\overline{A}$, які можна об'єднати в чотиривимірний вектор. Функція Лагранжа частинки з зарядом e має вигляд

$$L = \frac{mV^2}{2} + e\overline{A}\overline{V} - e\varphi .$$

Знайдемо узагальнений імпульс частинки

$$\overline{P} = \frac{\partial L}{\partial \overline{V}} = m\overline{V} + e\overline{A} = \overline{p} + e\overline{A} ,$$

де $\overline{p}$ — звичайний імпульс частинки. Звідси $\overline{p} = \overline{P} - e\overline{A}$. Функція Гамільтона матиме вигляд

$$H = \overline{V}\frac{\partial L}{\partial \overline{V}} - L = \frac{1}{2m}p^2 + e\varphi = \frac{1}{2m}\left(\overline{P} - e\overline{A}\right)^2 + e\varphi .$$

Рівняння Гамільтона-Якобі отримується з функції Гамільтона заміною узагальненого імпульсу $\overline{P}$ на

$$\frac{\partial S}{\partial \overline{r}} = \nabla S ,$$

та самої функції H на $-\frac{\partial S}{\partial t}$:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\nabla S - e\overline{A}\right) + e\varphi = 0 .$$

Рух частинки в електромагнітному полі визначається також рівнянням Лагранжа

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \overline{V}} = \frac{\partial L}{\partial \overline{r}} .$$

Розрахуємо

$$\frac{\partial L}{\partial \overline{r}} = \nabla L = e\nabla\left(\overline{A}\overline{V}\right) - e\nabla\varphi .$$

Користуючись для довільних векторів $\overline{a}$ та $\overline{b}$ формулою

$$\nabla\left(\overline{a}\overline{b}\right) = \left(\overline{a}\nabla\right)\overline{b} + \left(\overline{b}\nabla\right)\overline{a} + [\overline{a} \times \nabla \times \overline{b}] + [\overline{b} \times \nabla \times \overline{a}],$$

знаходимо

$$\frac{\partial L}{\partial \overline{r}} = e\left(\overline{V}\nabla\right)\overline{A} + e[\overline{V} \times \nabla \times \overline{A}] - e\nabla\varphi .$$

Враховуючи, що $\frac{\partial L}{\partial \bar{V}}$— узагальнений імпульс $(\bar{p}+e\bar{A})$ перепишемо рівняння Лагранжа

$$\frac{d}{dt}\left(\bar{p}+e\bar{A}\right)=e\left(\bar{V}\nabla\right)\bar{A}+e[\bar{V}\times\nabla\times\bar{A}]-e\nabla\varphi.$$

Векторний потенціал $\bar{A}$ залежить від часу та координат, тому

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\frac{\partial\bar{A}}{\partial t}+\frac{\left(d\bar{r}\nabla\right)\bar{A}}{dt}=\frac{\partial\bar{A}}{\partial t}+\left(\bar{V}\nabla\right)\bar{A}.$$

Використавши це, отримуємо з попереднього рівняння

$$\frac{d\bar{p}}{dt}=-e\frac{\partial\bar{A}}{\partial t}-e\nabla\varphi+e[\bar{V}\times\nabla\times\bar{A}],$$

що є рівнянням руху зарядженої частинки в електромагнітному полі. В лівій частині рівняння стоїть швидкість зміни імпульсу, відповідно, в правій частині повинна бути сила. Питомою характеристикою поля є сила, що діє на одиничний заряд. Напруженістю електричного поля називають:

$$\bar{E}=-\frac{\partial\bar{A}}{\partial t}-\nabla\varphi,$$

індукцією магнітного поля:

$$\bar{B}=[\nabla\times\bar{A}]=rot\bar{A}.$$

З врахуванням цього рівняння руху можна записати як

$$\frac{d\bar{p}}{dt}=e\bar{E}+e[\bar{V}\times\bar{B}].$$

Сила в правій частині рівняння зветься силою Лоренца.

2 Оптика

2.1 Принцип Ферма

П'єр Ферма в середині XVII століття (1662 р.) сформулював принцип, згідно з яким світло між двома точками розповсюджується за траєкторією, що потребує найменшого часу проходження. При цьому інтеграл

$$\int \frac{ds}{V},$$

де ds — елемент довжини траєкторії, V — фазова швидкість світла, має мінімальне значення. Оскільки при розповсюдженні світла частота його не змінюється, в інтегралі замість фазової швидкості можна поставити довжину хвилі, тобто, принципу Ферма відповідає мінімум інтеграла

$$\int \frac{ds}{\lambda}.$$

Отже, істинна траєкторія (істинний промінь) різниться від інших тим, що на ній між заданими точками вкладається найменше число довжин хвиль світла.

Принцип Мопертюї можна переформулювати. Для цього врахуємо, що $\sqrt{2m(E-U)} = p$. За з де Бройлем $\lambda = \frac{h}{p}$, тому принцип Мопертюї також вимагає мінімуму інтеграла

$$\int \frac{ds}{\lambda}.$$

2.2 Рівняння неперервності

Електромагнітне поле має деяку енергію. При розповсюдженні електромагнітної хвилі відбувається перенесення енергії поля у просторі. Врахуємо, що густина енергії електричного поля

$$\omega_e = \frac{1}{2}\varepsilon\varepsilon_0 E^2 = \frac{1}{2}\bar{E}\bar{D},$$

а магнітного поля

$$\omega_m = \frac{B^2}{2\mu\mu_0} = \frac{1}{2}\bar{H}\bar{B},$$

де $\bar{E}$ — напруженість електричного поля, $\bar{D}$ — його індукція; $\bar{H}$ — напруженість магнітного поля, $\bar{B}$ — його індукція. Загалом густина енергії електромагнітної хвилі

$$\omega = \omega_e + \omega_m = 2\omega_e = 2\omega_m = \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0\mu\mu_0}EH.$$

Зміна густини енергії електромагнітної хвилі

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\omega_e + \omega_m) = \dot{\omega}_e + \dot{\omega}_m = \varepsilon\varepsilon_0\bar{E}\dot{\bar{E}} + \frac{1}{\mu\mu_0}\bar{B}\dot{\bar{B}} = \bar{E}\dot{\bar{D}} + \bar{H}\dot{\bar{B}}.$$

Користуючись рівняннями Максвелла $\nabla\times\bar{H} = \dot{\bar{D}}$ та $\nabla\times\bar{E} = -\dot{\bar{B}}$, робимо підстановку:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} = \bar{E}\nabla\times\bar{H} - \bar{H}\nabla\times\bar{E}.$$

Використавши властивості оператора ∇: $\nabla[\bar{H}\times\bar{E}] = \bar{E}\nabla\times\bar{H} - \bar{H}\nabla\times\bar{E}$, маємо

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \nabla[\bar{H} \times \bar{E}] = -\nabla[\bar{E} \times \bar{H}].$$

Помноживши густину енергії поля на швидкість розповсюдження, отримаємо густину потоку енергії

$$S = \omega \cdot v = \left(\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0\mu\mu_0}EH\right)\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0\mu\mu_0}}\right) = EH.$$

Оскільки вектори $\bar{E}$, $\bar{H}$ та напрямок розповсюдження взаємно перпендикулярні та утворюють праву трійку векторів, то маємо вектор Умова-Пойтінга, або густину потоку електромагнітної енергії

$$\bar{S} = [\bar{E} \times \bar{H}].$$

В решті решт отримуємо

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla\bar{S} = 0,$$

що і є рівнянням неперервності для електромагнітної хвилі.

Зауважимо також, що в середовищах з провідністю рівняння Максвелла має вигляд $\nabla \times \bar{H} = \dot{\bar{D}} + \bar{j}$ і, відповідно, рівняння неперервності втратить свій вигляд за рахунок того, що енергія буде втрачатись в середовищі.

3 Квантова механіка

Кожна частинка проявляє корпускулярні та хвильові властивості (корпускулярно-хвильовий дуалізм).

3.1 Хвильова функція

Для описання систем та частинок використовується комплексна функція, що носить назву хвильової та позначається ψ чи Ψ (псі-функція). Ця функція залежить від координат всіх частинок, що складають систему, та часу (для однієї частинки $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$). Представивши комплексну функцію як $\psi = Ae^{i\varphi}$, з дійсними функціями A та φ, трактуємо її як хвилю з амплітудою A та фазою φ. Для хвилі де Бройля амплітуда постійна, а фаза $\varphi = \frac{\overline{p}}{\hbar}\overline{r} - \omega t$, де $\hbar$ — стала Планка.

Фізичний зміст хвильової функції полягає в тому, що величина $|\Psi(x,y,z,t)|^2\, dV$ пропорційна інтенсивності хвильового процесу і пропорційна імовірності знайти частинку в об'ємі dV (вперше М.Борн). Відповідно до цього повна імовірність знайти частинку у всьому просторі є достовірність, тобто $\int |\Psi(x,y,z,t)|^2\, dV = 1$. Ця умова зветься умовою нормування хвильової функції. Зауважимо одразу, що для необмежених рухів умова нормування дещо різниться. Таким чином при наявності нормування імовірність знаходження частинки $dW = |\Psi(x,y,z,t)|^2\, dV$. Густина імовірності визначається як

$$\omega = \frac{dW}{dV}$$

і дорівнює $\omega = |\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$.

Безпосередньо фізичний зміст має густина імовірності, а не хвильова функція, тобто це те, що підлягає експериментальному вимірюванню. В зв'язку з цим хвильова функція завжди має деяку невизначеність: множення ψ-функції на $e^{i\alpha}$, де α — довільний постійний фазовий зсув, не змінює хвильову функцію, тобто хвильова описую той самий стан, не зважаючи на те що її вигляд змінився. Пов'язана така властивість з тим, що густина імовірності від вказаної дії не змінюється. вказана вище невизначеність принципово не усувається, але не відбивається на жодних фізичних результатах.

При накладанні хвильових процесів відбувається складання поточних зміщень, (напружень полів), а не інтенсивностей хвиль (для однакових хвиль отримуємо інтерференцію). Як і для хвилі, хвильова функція частинок в квантовій механіці підлягає принципу суперпозиції, тобто, якщо квантова система може знаходитись в станах, що характеризуються хвильовими функціями $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$, то лінійна комбінація (суперпозиція) цих хвильових функцій $\psi = \sum c_i \psi_i$ (тут c_i — сталі) також є хвильовою функцією системи, що описує один з можливих станів системи. В цьому випадку при вимірах реєструються з різними імовірностями стани 1,2,...,n.

Хвильова функція, як і описання хвилі, повинна бути неперервною, гладкою (неперервна перша похідна), нормованою. Останнє вимагає, щоб ψ-функція зростала поблизу особливої (сингулярної) точки не скоріше ніж r^{-2}, та на безмежності спадала не повільніше ніж r^{-2}. Для необмежених рухів остання вимога трансформується в обмеженість хвильової функції.

Класична механіка є граничним випадком квантової. Співвідношення між ними аналогічне як між хвильовою та геометричною оптикою. Нехай компонента поля в електромагнітній хвилі $E = Ae^{i\varphi}$ (дійсні A та φ). Граничний випадок — геометрична оптика відповідає малим довжинам хвиль або великій зміні фази φ на малих відстанях. З аналогії між принципом найменшої дії та принципом Ферма а також хвильовою та геометричною оптиками робимо висновок, що класичній механіці відповідає $\psi = Ae^{iS/\hbar}$, з великим значенням фази $S/\hbar$ та поволі змінною амплітудою A. Присутній тут коефіцієнт пропорційності $\hbar$ носить назву сталої Планка, яка за розмірністю є дією (мінімальною) і, відповідно, називається елементарним квантом дії. З формальної точки зору перехід квантова механіка — класична відповідає $\hbar \to 0$.

3.2 Квантово-механічні оператори

Кожній величині в квантовій механіці відповідає лінійний ермітовий оператор. Фізично вимірюваними величинами є середнє та власні значення оператора фізичної величини.

Середнім значенням оператора $\hat{A}$ є

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dq .$$

Одночасність виміру двох фізичних величин визначається комутацією їх операторів.

В граничному (квазікласичному) випадку дія оператора зводиться до множення на значення класичної величини.

3.2.1 Оператори координати та потенціальної енергії

Середнє значення координати

$$\langle x \rangle = \int x dW = \int x |\psi|^2 dx = \int \psi^* x \psi dx .$$

Зіставляючи з означенням середнього значення оператора робимо висновок, що $\hat{x} = x$, оператор координати є множенням на неї. Аналогічно виглядає будь-яка функція, що залежить тільки від координат (та, можливо, часу). Прикладом є потенціальна енергія, оператор якої є множенням на функцію потенціальної енергії.

3.2.2 Оператор Гамільтона

Розглянемо деякий лінійний оператор

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

Доведемо, що він є ермітовим. Закон збереження матерії відповідає незмінному в часі інтегралу

$$\int|\psi|^2\,dq = \int\psi^*\psi dq = 1.$$

Продиференціюємо його і отримаємо

$$\frac{d}{dt}\int\psi^*\psi dq = \int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi dq + \int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}dq = 0.$$

Звідси маємо

$$\int\psi^* i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi dq - \int\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)^*\psi dq = 0,\ \text{або}\ \int\psi^*\hat{H}\psi dq = \int\left(\hat{H}\psi\right)^*\psi dq,$$

тобто оператор $\hat{H}$ є ермітовим, що і треба було довести.

Для з'ясування якій фізичній величині може відповідати цей оператор подіємо ним на хвильову функцію в граничному (квазікласичному) випадку:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ae^{iS/\hbar}.$$

Нехтуючи похідною повільно змінної амплітуди A, отримуємо

$$\hat{H}\psi = -\frac{\partial S}{\partial t}Ae^{iS/\hbar} = -\frac{\partial S}{\partial t}\psi = H\psi,$$

де H — функція Гамільтона. Дія оператора в граничному випадку зводиться до множення на функцію Гамільтона, тому оператор $\hat{H}$ називається оператором Гамільтона (гамільтоніаном) і відповідає він повній енергії системи.

3.2.3 Дужка Пуассона

Похідна за часом будь-якого квантово-механічного оператора також є квантово-механічний оператор. Як і в класичній механіці середнє значення похідної оператора збігається з похідною його середнього значення:

$$\left\langle \frac{d}{dt}\overline{A} \right\rangle = \frac{d}{dt}\left\langle \overline{A} \right\rangle .$$

Виходячи з цього, маємо

$$\frac{d}{dt}\left\langle \overline{A} \right\rangle = \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi dq + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi dq + \int \psi^* \hat{A}\frac{\partial \psi}{\partial t}dq =$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi dq + \int \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi \right)^* \hat{A}\psi dq + \int \psi^* \hat{A}\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi \right) dq =$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi dq + \frac{i}{\hbar}\int \left(\hat{H}\psi \right)^* \hat{A}\psi dq - \frac{i}{\hbar}\int \psi^* \hat{A}\hat{H}\psi dq .$$

Користуючись ермітовістю оператора $\hat{H}$, переписуємо

$$\frac{d}{dt}\left\langle \overline{A} \right\rangle = \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi dq + \frac{i}{\hbar}\int \psi^* \hat{H}\hat{A}\psi dq - \frac{i}{\hbar}\int \psi^* \hat{A}\hat{H}\psi dq =$$

$$\int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} \right) \right)\psi dq = \left\langle \frac{d}{dt}\hat{A} \right\rangle .$$

Звідси маємо

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}] = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \{\hat{H}\hat{A}\},$$

де позначили дужку Пуассона

$$\{\hat{H}\hat{A}\} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} \right).$$

3.2.4 Оператор імпульсу

В замкненій системі частинок однорідність простору означає незмінність оператора Гамільтона при паралельному зсуві системи на довільну відстань. Розглянемо зсув на безмежно малу відстань $d\bar{r}$, тобто координати всіх точок зміняться з $\bar{r}_i$ на $\bar{r}_i + d\bar{r}$. Хвильова функція при цьому зсуві змінюється:

$$\psi(\bar{r}_i + d\bar{r}) = \psi(\bar{r}_i) + d\bar{r}\sum \nabla_i \psi = \left(1 + d\bar{r}\sum \nabla_i\right)\psi .$$

Тут ∇_i — диференціювання за координатами i-ї частинки. Оператор

$$\hat{T} = 1 + d\bar{r}\sum \nabla_i$$

є оператором безмежно малого зсуву на величину $d\bar{r}$. Незмінність гамільтоніана при такому перетворенні визначається незалежністю дії перетворення на функцію $\hat{H}\psi$ та дії гамільтоніана на перетворену функцію ψ. Іншими словами, $\hat{T}\left(\hat{H}\psi\right) = \hat{H}\left(\hat{T}\psi\right)$, або ж комутація операторів $\hat{T}$ та $\hat{H}$: $[\hat{T}\hat{H}] = 0$. В силу довільності $d\bar{r}$ повинна бути комутація $\hat{H}$ та $\sum \nabla_i$, тобто, фізична величина, що відповідає оператору $\sum \nabla_i$ або пропорційна йому, зберігається. Такою величиною є імпульс. Позначимо коефіцієнт пропорційності С, тоді маємо оператор імпульсу частинки $\hat{p} = C\nabla$. Для цього оператора в граничному (квазікласичному) випадку

$$\hat{p}\psi = C\nabla\psi = C\nabla A e^{iS/\hbar} = CAe^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\nabla S .$$

Враховуючи $\nabla S = p$, отримуємо $\hat{p}\psi = C\frac{i}{\hbar}p\psi$. Дія цього оператора в розглядуваному випадку повинна звестись до множення на класичний імпульс. Тому $C = -i\hbar$. Отже

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla,$$

або покомпонентно

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

3.2.5 Оператор моменту імпульсу

Ізотропність простору для замкненої системи означає незмінність оператора Гамільтона при повороті на довільний кут відносно довільної осі. Розглянемо поворот на безмежно малий кут $\delta\overline{\varphi}$. Радіус-вектори кожної частинки змінюються на $\delta\overline{r}_i = [\delta\overline{\varphi}\times\overline{r}_i]$. Хвильова функція змінюється при цьому повороті

$$\psi(\overline{r}_i + d\overline{r}_i) = \psi(\overline{r}_i) + d\overline{\varphi}\sum[\overline{r}_i\times\nabla_i]\psi(\overline{r}_i) = \left(1 + d\overline{\varphi}\sum[\overline{r}_i\times\nabla_i]\right)\psi.$$

Оператор $\hat{R} = 1 + d\overline{\varphi}\sum[\overline{r}_i\times\nabla_i]$ є оператором безмежно малого повороту. Як і в попередньому випадку приходимо до висновку, що оператору моменту імпульсу відповідає оператор, пропорційний $\sum[\overline{r}_i\times\nabla_i]$. Коефіцієнт пропорційності, як і раніше, можна знайти з граничного переходу, або, за аналогією з класичним зв'язком, імпульс—момент імпульсу $\overline{L} = [\overline{r}\times\overline{p}]$:

$$\hat{L} = [\overline{r}\times\hat{p}] = -i\hbar[\overline{r}\times\nabla].$$

Покомпонентно $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$; $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$; $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$.

3.3 Рівняння Шредінгера

В силу однакових властивостей простору зв'язок між операторами Гамільтона та імпульсу повинен бути такий самий, як і в класичній механіці:

$$\hat{H} = \sum \frac{\hat{p}^2}{2m} + U = -\frac{\hbar^2}{2} \sum \frac{1}{m} \nabla^2 + U .$$

Відповідно для однієї частинки

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U .$$

В одновимірному випадку

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) .$$

При обертанні навколо осі

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + U(\varphi,t)$$

(I — момент інерції, φ — кут повороту навколо цієї осі).

Враховуючи часовий вигляд оператора Гамільтона, маємо рівняння,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H} ,$$

де в правій частині стоїть вираз оператора через координати та імпульси. В повному вигляді

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

рівняння носить назву (нестаціонарного) рівняння Шредінгера. Так для однієї частинки маємо

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

При русі в електромагнітному полі за аналогією з класичною механікою маємо

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}-e\overline{A}\right)^2\psi+e\varphi\psi=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-e\overline{A}\right)^2\psi+e\varphi\psi.$$

3.4 Квантове рівняння неперервності

Розглянемо рівняння Шредінгера для однієї частинки:

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

Знайдемо комплексно спряжене до цього рівняння:

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

Помножимо перше з цих рівнянь на ψ^*, а друге — на ψ та віднімемо від першого друге:

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

Спростимо:

$$i\hbar\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right)\text{ або }\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right).$$

Врахуємо, що

$$\nabla\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)=\nabla\psi^*\nabla\psi+\psi^*\nabla^2\psi-\nabla\psi\nabla\psi^*-\psi\nabla^2\psi^*=\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*$$

Тоді перепишемо отримане рівняння в вигляді

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\nabla\bar{j}=0,$$

де $\omega=|\psi|^2$ — густина імовірності,

$$\bar{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right)$$

назвемо густиною потоку імовірності. Отримане рівняння і є квантовим рівнянням неперервності.

Порівнявши квантове з класичним рівнянням неперервності можемо зробити висновок, що квантова частинка (або набір однакових частинок) рухається як газ (рідина) з густиною ω (густина імовірності) та потоком, що є потоком імовірності.

Розглянемо густину потоку імовірності для хвиль де Бройля $\left(\psi=C\exp(i\bar{k}\bar{r})=Ce^{i\bar{k}\bar{r}}\right)$:

$$\bar{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\left(Ce^{i\bar{k}\bar{r}}\right)\left(C^*e^{-i\bar{k}\bar{r}}(-i\bar{k})\right)-\left(C^*e^{-i\bar{k}\bar{r}}\right)\left(Ce^{i\bar{k}\bar{r}}i\bar{k}\right)\right)=$$
$$=\frac{i\hbar}{2m}CC^*e^{i\bar{k}\bar{r}}e^{-i\bar{k}\bar{r}}(-2i\bar{k})=\frac{\hbar\bar{k}}{m}|C|^2.$$

Отже, це постійна величина, направлена за хвильовим вектором $\bar{k}$.

В одновимірному випадку хвильова функція хвиль де Бройля $\psi=Ce^{ikx}$, або $\psi=Ce^{-ikx}$, де k — хвильове число (додатна величина). Густина потоку імовірності відповідно буде

$$j = \pm \frac{\hbar k}{m} |C|^2,$$

де знак збігається зі знаком в показнику експоненти хвилі де Бройля, тобто "+" — потік направлено вздовж осі x, "-" —проти осі.

Довільну хвильову функцію можна надати в вигляді $\psi = Ae^{iS/\hbar}$, де A та S — деякі дійсні функції координат. В цьому випадку густина потоку імовірності матиме вигляд

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(Ae^{iS/\hbar}\left(Ae^{-iS/\hbar}\left(-\frac{i\nabla S}{\hbar} \right) \right) - Ae^{-iS/\hbar}\left(Ae^{iS/\hbar}\frac{i\nabla S}{\hbar} \right) \right) =$$

$$\frac{i\hbar}{2m} A^2 e^{iS/\hbar} e^{-iS/\hbar}\left(-2\frac{i\nabla S}{\hbar} \right) = A^2 \frac{\nabla S}{m} = |\psi|^2 \frac{\nabla S}{m} = \omega \frac{\nabla S}{m}.$$

Рівняння неперервності тепер можна записати в вигляді

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla\left(\omega \frac{\nabla S}{m} \right) = 0,$$

що більше нагадує класичне, врахувавши, що $\nabla S / m = p / m = V$.

В кристалах хвильова функція електронів в силу періодичності потенціалу матиме вигляд хвилі Блоха $\psi = e^{ikr} u_k(r)$, де $u_k(r)$ — періодична функція. Густина потоку імовірності таких частинок дорівнює

$$j = \frac{\hbar}{m} k |u_k|^2 + \frac{i\hbar}{2m}\left(u_k \nabla u_k^* - u_k^* \nabla u_k \right),$$

що є періодичною в просторі в силу періодичності u_k.

Оскільки кожен електрон переносить заряд, то потік електронів створює електричний струм. Густина цього струму

$$j_e = -ej = e\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right).$$

Тут знак мінус пов'язаний з напрямком струму, що є протилежним до напрямку руху електронів.

3.5 Квантові рівняння Гамільтона та Ньютона

Як показано вище, похідна за часом від будь-якого оператора дорівнює частинній похідній цього оператора плюс дужка Пуассона оператора Гамільтона та оператора, що розглядається. Якщо оператор явно не залежить від часу, то частинна похідна дорівнює нулю. Тоді похідна за часом дорівнює дужці Пуассона:

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \{\hat{H}\hat{f}\}.$$

Виберемо в якості довільного оператора оператори координат та імпульсу:

$$\frac{d\bar{r}}{dt} = \{\hat{H}\bar{r}\},\ \frac{d\hat{p}}{dt} = \{\hat{H}\hat{p}\},$$

$$\text{або } \frac{dx}{dt} = \{\hat{H}x\},\ \frac{dy}{dt} = \{\hat{H}y\},\ \frac{dz}{dt} = \{\hat{H}z\},\ \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \{\hat{H}\hat{p}_x\},\ \frac{d\hat{p}_y}{dt} = \{\hat{H}\hat{p}_y\},$$

$$\frac{d\hat{p}_z}{dt} = \{\hat{H}\hat{p}_z\},$$

що і є квантовими рівняннями Гамільтона. В класичній механіці перша група рівнянь встановлює зв'язок між швидкістю та імпульсом, друга — закон зміни імпульсу з часом (закон руху). Таке ж значення мають і квантові їх аналоги. Так, для гамільтоніана однієї частинки

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^{\,2} + \hat{p}_y^{\,2} + \hat{p}_z^{\,2}\right) + U$$

отримуємо з перших рівнянь:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}, \; \frac{dy}{dt} = \frac{\hat{p}_y}{m}, \; \frac{dz}{dt} = \frac{\hat{p}_z}{m}.$$

Таким чином оператор швидкості

$$\hat{\vec{V}} = \frac{d\vec{r}}{dt},$$

що стоїть в лівій частині виразів, дорівнює оператору імпульсу, поділеному на масу частинки, як це характерно для фізичних величин в класичній механіці.

З другої групи рівнянь Гамільтона отримуємо з використанням описаного вище гамільтоніана:

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}, \; \frac{d\hat{p}_y}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial y}, \; \frac{d\hat{p}_z}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial z}.$$

В цих рівняннях праві частини представляють собою оператори проекції сили на відповідні координати. Самі рівняння є рівняннями Ньютона в операторній формі. Їх також можна представити як

$$m\dot{\hat{\vec{V}}} = -\nabla U = \hat{F}.$$

4 Граничний перехід від квантової до класичної механіки

4.1 Теореми Еренфеста

Співвідношення в операторній формі, наведені вище, справедливі і для відповідних середніх значень величин, що реально підлягають виміру.

Так маємо:

$$\left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{p}_x\rangle, \quad \left\langle \frac{d\hat{p}_x}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_x\rangle = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle = \langle \hat{F}_x\rangle.$$

Запишемо в розгорнутому вигляді:

$$\frac{d}{dt}\int \psi^* x\psi dx = \frac{1}{m}\int \psi^* \hat{p}_x \psi dx, \quad \frac{d}{dt}\int \psi^* \hat{p}_x \psi dx = -\int \psi^* \frac{\partial U}{\partial x}\psi dx.$$

Ці рівності називають теоремами Еренфеста.

З квантового можна отримати класичне рівняння Ньютона в вигляді

$$m\frac{\partial^2 \langle x\rangle}{\partial t^2} = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle = \langle F_x\rangle.$$

4.2 Рівняння Гамільтона-Якобі з рівняння Шредінгера

Розглянемо рух невзаємодіючих частинок, що описуються рівнянням Шредінгера для однієї частинки,

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

Хвильову функцію надамо в вигляді $\psi = Ae^{iS/\hbar}$, де A та S — деякі дійсні функції координат та часу.

Позначходимо похідні:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial(Ae^{iS/\hbar})}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial} e^{iS/\hbar} + Ae^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t},$$

$$\nabla\psi = \nabla(Ae^{iS/\hbar}) = \nabla A\cdot e^{iS/\hbar} + Ae^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\nabla S.$$

$$\nabla^2\psi = \nabla(\nabla\psi) = \left(\nabla^2 A\cdot e^{iS/\hbar} + \nabla A\cdot e^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\nabla S\right) +$$

$$+\left(\nabla A\cdot e^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\nabla S + Ae^{iS/\hbar}\left(\frac{i}{\hbar}\nabla S\right)^2 + A\cdot e^{iS/\hbar}\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\right) =$$

$$= e^{iS/\hbar}\left(\nabla^2 A + 2\nabla A\frac{i}{\hbar}\nabla S - \frac{A}{\hbar^2}(\nabla S)^2 + A\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\right).$$

Підставимо це тепер в рівняння Шредінгера та скоротимо на $e^{iS/\hbar}$, що не дорівнює нулю:

$$i\hbar\left(\frac{\partial A}{\partial t} + A\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{dt}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2 A + 2\nabla A\frac{i}{\hbar}\nabla S - \frac{A}{\hbar^2}(\nabla S)^2 + A\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\right) + U\cdot A.$$

В силу того, що функції A, S та всі їх похідні дійсні, комплексне рівняння Шредінгера розпадається на дійсну та уявну складові:

$$\begin{cases} -A\dfrac{\partial S}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 A + \dfrac{A}{2m}(\nabla S)^2 + U\cdot A \\ \hbar\dfrac{\partial A}{\partial t} = -\dfrac{\hbar}{m}\nabla A\nabla S - \dfrac{\hbar}{2m}A\nabla^2 S \end{cases}.$$

Розглянемо спочатку друге з цих рівнянь (уявні складові). Помножимо його на $\frac{2A}{\hbar}$:

$$2A\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{2A\nabla A}{m}\nabla S - \frac{A^2}{m}\nabla^2 S.$$

Зробимо перетворення:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t}+\nabla\frac{A^2\nabla S}{m}=0.$$

Врахувавши, що $A^2=|\psi|^2=\omega$, бачимо, що ми отримали рівняння неперервності

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\nabla\frac{\omega\nabla S}{m}=0.$$

Вернемося тепер до першого рівняння в системі:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+U=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A}.$$

Перехід до класичного випадку відповідає $\hbar\to 0$, тобто, ми нехтуємо членом в правій частині рівняння порівняно з будь-яким членом в лівій частині рівняння. Тоді отримуємо

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+U=0,$$

що є рівнянням Гамільтона-Якобі класичної механіки.

Таким чином газ окремих невзаємодіючих квантових частинок (що описується рівнянням для однієї частинки) рухається як класичний.

З наведеного розгляду отримуємо і оптичну аналогію. Зіставимо квантове та класичне рівняння неперервності:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t}+\nabla\frac{A^2\nabla S}{m}=0\,;\ \frac{\partial\rho}{\partial t}+div(\rho\bar{v})=0.$$

Бачимо, що швидкість можна записати в вигляді $\bar{v}=\frac{\nabla S}{m}$, тобто швидкість пропорційна градієнту S. З цього випливає, що траєкторії частинок перпендикулярні до поверхонь рівних фаз S=*const*. В оптиці такими поверхнями є хвильові поверхні, тобто траєкторії частинок збігаються з оптичними променями.

5 Додаток

Функція Лагранжа: в декартових координатах

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) - U(x, y, z),$$

в циліндричних координатах $L = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2\right) - U(r, \varphi, z)$,

в сферичних координатах $L = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2\right) - U(r, \theta, \varphi)$.

В декартовій системі координат для однієї частинки функція Гамільтона $H = \frac{1}{2m}\left({p_x}^2 + {p_y}^2 + {p_z}^2\right) + U(x, y, z)$,

в циліндричних координатах $H = \frac{1}{2m}\left({p_r}^2 + \frac{{p_\varphi}^2}{r^2} + {p_z}^2\right) + U(r, \varphi, z)$,

а в сферичних координатах $H = \frac{1}{2m}\left({p_r}^2 + \frac{{p_\theta}^2}{r^2} + \frac{{p_\varphi}^2}{r^2\sin^2\theta}\right) + U(r, \theta, \varphi)$

Формули та властивості

Означення сум та добутків.

Для цілих $m \geq n$ ***сума*** це: $\sum_{j=n}^{m} a_j = a_n + a_{n+1} + \ldots + a_{m-1} + a_m$; де m-n+1 доданків. Тут $\sum$ — знак суми, j — індекс підсумування, n — початковий номер (значення індексу підсумовування), m — кінцевий номер.

В деяких випадках вказують лише індекс підсумування (k), підрозуміваючи, що він змінюється в дозволених межах: $\sum_k a_k$; часом зовсім опускають індекс підсумування: $\sum a_k$.

Добуток чисел — $\prod_{j=n}^{m} a_j = a_n a_{n+1} \ldots a_{m-1} a_m$

Тут $\prod$ — знак добутку, j — індекс, n та m — межі зміни індексу.

Властивості:

$$\sum_{j=n}^{k} \sum_{i=l}^{m} a_{ij} = \sum_{i=l}^{m} \sum_{j=n}^{k} a_{ij} \; ; \; \sum_{j=n}^{m} a_j = \sum_{k=n}^{m} a_k;$$

$$\prod_{j=n}^{m} \prod_{i=l}^{k} a_{ij} = \prod_{i=l}^{k} \prod_{j=n}^{m} a_{ij}$$

Для скорочення запису знак суми $\sum$ не ставлять в виразах, де двічі зустрічається той самий індекс:

$$\sum_k a_k b_k = a_k b_k .$$

Змішаний (мішаний, векторно-скалярний) добуток векторів $\bar{a}$, $\bar{b}$, $\bar{c}$.

$$(\bar{a} \cdot [\bar{b} \times \bar{c}]) = [\bar{a}\,\bar{b}\,\bar{c}] = [\bar{b}\,\bar{c}\,\bar{a}] = [\bar{c}\,\bar{a}\,\bar{b}] = -[\bar{b}\,\bar{a}\,\bar{c}] = -[\bar{c}\,\bar{b}\,\bar{a}] = -[\bar{a}\,\bar{c}\,\bar{b}]$$

Змішаний добуток дає об'єм паралелепіпеда, утвореного векторами $\bar{a}$, $\bar{b}$, $\bar{c}$.

В декартовій системі координат

$$(\bar{a} \cdot [\bar{b} \times \bar{c}]) = \begin{vmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{vmatrix}$$

Градієнт, дивергенція, ротор

Градієнт скалярної функції *f (r)* є векторною функцією:

$$grad \quad f = \lim_{V \to 0} \frac{1}{V} \oint f \quad d\overline{S},$$

де V — область навколо даної точки, S-замкнута поверхня, що охоплює цей об'єм, $d\overline{S}$ -вектор, нормальний до поверхні, направлений назовні.

Дивергенція векторної функції $\overline{F}(r)$ є скалярною функцією:

$$div \quad \overline{F} = \lim_{V \to 0} \frac{1}{V} \oint \overline{F} d\overline{S}.$$

Ротор векторної функції є векторною функцією:

$$rot \quad \overline{F} = \lim_{v \to 0} \frac{1}{v} \oint d\overline{S} \times \overline{F} = \lim_{s \to 0} \frac{1}{s} \oint \overline{F} d\overline{l},$$

тут l-замкнутий контур, що охоплює поверхню S.

Теорема Остроградського–Гаусса, Стокса

Теорема Гаусса (Остроградського-Гаусса):

$$\int div \quad \overline{F} \quad dV = \int \nabla \quad \overline{F} \quad dV = \oint \overline{F} d\overline{S}.$$

Потік вектора $\overline{F}$ це $\oint \overline{F} \, d\overline{S}$. Цей інтеграл береться по замкненій поверхні, що охоплює об'єм, по якому береться інтеграл $\int div \quad \overline{F} \, dV$.

Теорема про градієнт:

$$\int grad \quad f \cdot dV = \int \nabla f \quad dV = \oint f \quad d\overline{S}.$$

Теорема Стокса:

$$\int rot \overline{F} d\overline{S} = \int \nabla \times \overline{F} d\overline{S} = \oint \overline{F} d\overline{l}.$$

Циркуляція вектора $\bar{F}$ — $\oint \bar{F}d\bar{l}$. Цей інтеграл береться за замкненим контуром, що огинає поверхню, по якій береться інтеграл $\int rot\bar{F}d\bar{S}$.

Оператор ∇(набла) $\nabla = \frac{\partial}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial}{\partial q}$. В прямокутних декартових координатах:

$$\nabla = \bar{i}\frac{\partial}{\partial x} + \bar{j}\frac{\partial}{\partial y} + \bar{k}\frac{\partial}{\partial z}.$$

Дія на скалярну функцію φ аналогічна множенню вектора ∇ на скаляр φ:

$$\nabla\varphi = \mathrm{grad}\,\varphi = \bar{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \bar{j}\frac{\partial\varphi}{\partial y} + \bar{k}\frac{\partial\varphi}{\partial z}.$$

Дія на векторну функцію $\bar{F}$-скалярний добуток ∇ і функції $\bar{F}$

$$\nabla\cdot\bar{F} = \mathrm{div}\,\bar{F} = \frac{\partial F_X}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}.$$

Векторний добуток ∇ і функції $\bar{F}$:

$$\nabla\times\bar{F} = \mathrm{rot}\,\bar{F} = \begin{vmatrix} \bar{i} & \bar{j} & \bar{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix} = \bar{i}\left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z}\right) + \bar{j}\left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x}\right) + \bar{k}\left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y}\right).$$

Дії з оператором ∇:

$$\nabla(\varphi+\psi) = \nabla\varphi + \nabla\psi;\ \nabla(\alpha\varphi) = \alpha\nabla\varphi\ \ (\alpha = const);$$

$$\nabla(\bar{A}+\bar{B}) = \nabla\bar{A} + \nabla\bar{B};\ \nabla(\alpha\bar{A}) = \alpha\nabla\bar{A};$$

$$\nabla\times(\bar{A}+\bar{B}) = \nabla\times\bar{A} + \nabla\times\bar{B};\ \nabla\times(\alpha\bar{B}) = \alpha\nabla\times\bar{B};$$

$$\nabla(\varphi\psi) = \psi\nabla\varphi + \varphi\nabla\psi;$$

$$\nabla(\bar{A}\bar{B}) = (\bar{A}\nabla)\bar{B} + (\bar{B}\nabla)\bar{A} + \bar{A}\times(\nabla\times\bar{B}) + \bar{B}\times(\nabla\times\bar{A});$$

$$\nabla(\varphi\bar{A}) = \varphi\nabla\bar{A} + (\nabla\varphi)\bar{A};\qquad \nabla(\bar{A}\times\bar{B}) = \bar{B}\nabla\times\bar{A} - \bar{A}\nabla\times\bar{B}.$$

Повний диференціал скалярної функції

$$d\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial x}dx + \frac{\partial\varphi}{\partial y}dy + \frac{\partial\varphi}{\partial z}dz = d\bar{r}\cdot \operatorname{grad}\varphi = \left(d\bar{r}\nabla\right)\varphi;$$

векторної функції $d\bar{F} = \left(d\bar{r}\nabla\right)\bar{F} = \bar{i}\left(d\bar{r}\nabla\right)F_x + \bar{j}\left(d\bar{r}\nabla\right)F_y + \bar{k}\left(d\bar{r}\nabla\right)F_z$.

В прямокутній декартовій системі координат оператор Лапласа

$$\Delta = \nabla^2 = \nabla\cdot\nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Властивості: $\Delta(\alpha\varphi + \beta\varphi) = \alpha\Delta\varphi + \beta\Delta\psi;\ (\alpha, \beta = const)$

$$\Delta(\varphi\psi) = \psi\Delta\varphi + \varphi\Delta\psi + 2\nabla\varphi\nabla\psi.$$

Операції другого порядку $\operatorname{div}\operatorname{grad}\varphi = \nabla\left(\nabla\varphi\right) = \nabla^2\varphi = \Delta\varphi$;

$$\operatorname{grad}\operatorname{div}\bar{F} = \nabla\left(\bar{F}\right) = \nabla^2\bar{F} + \nabla\times\left(\nabla\times\bar{F}\right);$$

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\bar{F} = \nabla\times\left(\nabla\times\bar{F}\right) = \nabla\left(\nabla\bar{F}\right) - \nabla^2\bar{F};$$

$$\operatorname{div}\operatorname{rot}\bar{F} = \nabla\left(\nabla\times\bar{F}\right) = 0;$$

$$\operatorname{rot}\operatorname{grad}\varphi = \nabla\times\left(\nabla\varphi\right) = 0.$$

Сферична система координат

Кожна точка характеризується радіусом r – відстанню від центра O (змінюється від 0 до ∞), полярним кутом θ (відраховується від осі z до напрямку на дану точку, міняється від 0 до π), та азимутальним кутом φ (відраховується в площині xy від осі x проти годинникової стрілки, змінюється від 0 до 2π).

В сферичній системі координат $\nabla = \vec{i}_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec{i}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{i}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$.

Вчені

Блох Фелікс	Bloch F. (1905)
Бор Нільс Хендрік Давид	Bohr N. (1885-1962)
Борн Макс	Born M. (1882-1970)
де Бройль Луі	de Broglie L. (1892)
Гамільтон Вільям Роуан	Hamilton W.R. (1805-1865)
Гаусс	Carl Friedrich Gauss (1777-1855)
Гейзенберг Вернер	Heisenberg W. (1901-1976)
Дірак Поль Адрієн Моріс	Dirac P.A.M. (1902)
Еренфест Пауль	Ehrenfest P. (1880-1933)
Ерміт Шарль	Hermite (1822-1901)
Лагранж	Joseph Louis de Lagrange (1736-1813)
	Ландау Лев Давыдович (1908-1968)
Лаплас П'єр Симон	Laplace P. (1749-1827)
Лежандр Адрієн Марі	Legendre A.-M. (1752-1833)
Лоренць Хендрік Антон	Lorentz (1853-1928)
Максвелл Джеймс Клерк	Maxwell J (1831-1879)
Мопертюї П'єр Луї Моро де	Maupertuis (1698-1759)
Ньютон Ісаак	Newton I. (1643-1727)
	Остроградський Михайло Васильович (1801-1862)
Планк Макс Карл Ернст Людвіг	Planck M. (1858-1947)
Пойтінг Джон Генрі	Poynting J. (1852-1914)

Пуассон Симеон Дені	Poisson S.D. (1781-1840)
Ферма П'єр	Fermat P. (1601-1665)
Фермі Енріко	Fermi E. (1901-1954)
Шредінгер Ервін	Schrödinger E. (1887-1961)
	Умов Николай Алексеевич (1846-1915)
Якобі	Karl Gustov Jacob Jacobi (1804-1851)

Нільс Хендрік Давид Бор (7.10.1885-18.11.1962) — видатний датський фізик-теоретик, один із творців сучасної фізики, член Датського королівського товариства (1917), президент із 1939. Народився в Копенгагені. Закінчив Копенгагенський університет (1908). У 1911-12 працював в Кембриджу у Дж. Дж. Томсона, у 1912—13 у Манчестері в Е. Резерфорда. З 1916 — професор Копенгагенського університету і з 1920 — директор створеного ним Інституту теоретичної фізики, що став міжнародним центром фізиків-теоретиків і зіграв велику роль у міжнародному спілкуванні вчених (Інститут Нільса Бора).

Як вчений Бор формувався в дуже гострий для фізики період, коли вона впритул підійшла до вивчення світу атомних процесів та пов'язаних з ними полів. Роботи М. Планка, А. Ейнштейна, аналіз спектрів випромінювання атомів вже показали незвичайність закономірностей мікросвіту. Був накопичений величезний експериментальний матеріал, дуже суперечливий в світлі раніше відомих законів. Потрібний був принципово новий підхід для створення фізичної картини атомних процесів. Важлива заслуга. Бора і полягала в тому, що він знайшов такий підхід. Він орієнтував фізиків на дослідження суперечливих сторін фізичної реальності мікросвіту, сформулював ідею про дискретність енергетичних станів атомів, у світлі нових ідей побудував атомну модель, відкривши умови стійкості атомів, і пояснив велике коло явищ.

У 1913, виходячи з ідеї М. Планка про квантування енергії, Бор на основі моделі атому Резерфорда створив свою теорію водневоподібного атому, засновану на двох постулатах, що прямо суперечили класичним уявленням і законам. Це була перша квантова модель атома, що поклала початок новій ері в атомній теорії. Відповідно до цієї теорії планетарна структура атома і властивості його спектра випромінювання легко розуміються, якщо припустити, що рух електрона в атомі підкоряється деяким обмеженням, які Бор сформулював у вигляді двох постулатів. Бор установив наявність в атомі стаціонарних дозволених орбіт, рухаючись по яким електрон, всупереч законам електродинаміки, не випромінює енергію, однак може стрибком перейти на більш близьку до ядра також дозволену орбіту, випустивши при цьому квант енергії, рівний різниці енергій атома в стаціонарних станах. Теорія Бора дозволила пояснити цілий ряд складних питань будови атома і фактів, чого не в змозі була зробити класична фізика. Зокрема Бор знайшов основні закони спектральних ліній і електронних оболонок атомів, пояснив (1923) особливості періодичної системи хімічних елементів, запропонувавши свій варіант зображення періодичної системи елементів, і в тому ж році прийшов до представлення про оболонкову структуру атома, засновану на класифікації електронних орбіт за головним і азимутальним квантовими числами. За створення квантової теорії планетарного атома в 1922 відзначений Нобелівською премією.

У 1918 сформулював важливий для нової атомної теорії принцип відповідності, що показує, коли саме істотні квантові обмеження, а коли досить і класичної фізики.

Багато чого зробив Бор для становлення й інтерпретації квантової механіки, що виникла в 20-х роках нашого століття. Зусиллями Бора і його співробітників і учнів була створена струнка система фізичних ідей квантової механіки. У 1927 сформулював важливий для її розуміння принцип додатковості, що привело до його відомих дискусій з А. Ейнштейном про детермінізм. Критика з боку Ейнштейна, за визнанням самого Бора, сприяла більш глибокому розумінню ним квантової механіки.

В інтерпретації нових ідей і фактів, в теорії пізнання Бор іноді висловлював помилкові філософські твердження, а окремі його формулювання були приводом для тлумачення його висловлень у позитивістському дусі. Однак, як пише В. А. Фок, «загальне враження від усіх робіт Бора, починаючи з найперших, — їхня глибока діалектичність. Бора не хвилюють протиріччя, що виникають тоді, коли до істотно нових явищ природи підходять з точки зору старих понять і старих поглядів, він шукає вирішення протиріч у нових ідеях». Радянські фізики і філософи багато чого зробили для матеріалістичного осмислення позитивного внеску Бора у фізику. Вони проводили таку лінію, щоб виключити будь-яку можливість для позитивістів використовувати цей внесок.

Бор багато зробив і для розвитку ядерної фізики. Він — автор теорії складного ядра (1936), один із творців краплинної моделі ядра (1936) і теорії ділення атомного ядра (1939). Разом із Дж. Уілером (незалежно від Я. І. Френкеля) дав кількісну інтерпретацію ділення ядра, ввівши так званий параметр ділення, передбачив спонтанне ділення урану.

У 1912 сформулював важливу теорему статистичної механіки, перевідкриту в 1919 Ж. Ван Левеном (теорема Бор-Ван Левена).

Створив велику інтернаціональну школу фізиків (Ф. Блох, О. Бор, В. Вайскопф, Х. Казимір, О. Клейн, Х. Крамере, Л. Д. Ландау, К. Меллер, У. Нішіна, А. Пайс, Л. Розенфельд, С. Росселанд, Дж. Уілер і ін.).

Почесний член більше 20 академій наук світу, в т.ч. іноземний член АН СРСР (1929).

Макс Борн (11.12.1882—5.1.1970) — німецький фізик-теоретик, один з піонерів нової фізики. Народився у Бреслау (нині Вроцлав). Закінчив Геттінгенський університет (1907). У 1915-20-професор Берлінського і Франкфуртського університетів, у 1921—33 — Геттінгенського. В 1933 емігрував у Англію, де працював до 1936 у Кембриджу. Протягом 1936—53 очолював кафедру теоретичної фізики в Единбурзькому університеті (Шотландія). З 1954 жив у Геттінгені (ФРН).

Основні роботи присвячені динаміці кристалічних ґраток, термодинаміці кристалів, квантовій теорії, кінетичній теорії конденсованих газів і рідин, теорії відносності, атомній фізиці. Один із творців квантової (матричної) механіки, разом з В. Гейзенбергом і П. Йорданом розробив формалізм матричної механіки (1926). Дав (1926) статистичну інтерпретацію хвильової функції, показавши, що інтенсивність шредінгерівських хвиль треба розуміти як міру імовірності перебування частинки у відповідному місці (Нобелівська премія, 1954). Борн і його школа відразу ж застосували нову квантову механіку до різних проблем будови атома, молекулярної фізики, фізики твердого тіла. Запропонував спосіб розрахунку електронних оболонок атома, розробив у 1926 метод розв'язування квантово-механічних задач про зіткнення частинок, заснований на теорії збурень (борнівське наближення). Разом з Н. Вінером ввів (1926) у квантову механіку поняття оператора. Разом з Р. Оппенгеймером розробив у 1927 теорію будови двоатомних молекул, з Л. Інфельдом у 1934 — феноменологічну модель класичної електродинаміки, що усуває нескінченність енергії точкового заряду (теорія Борна—Інфельда). Є одним із творців сучасної теорії рідин.

Борн завжди бачив зв'язок фізики з принциповими філософськими проблемами, багато займався аналізом внеску фізики в теорію пізнання, прагнув філософськи осмислити новий етап розвитку фізичної науки. Усе це зробило Борна піонером нової фізики й одним з її творців. Створив геттінгензьку фізичну школу (В. Гейзенберг, В. Паулі, В. Гайтлер, Ф. Хунд, П. Йордан, М. Гепперт-Майєр, Г. Герцдерг, В. Ельзассер, Е. Хюккель, М. Дельбрюк, Л. Нордгейм, Ю. Вігнер і ін.).

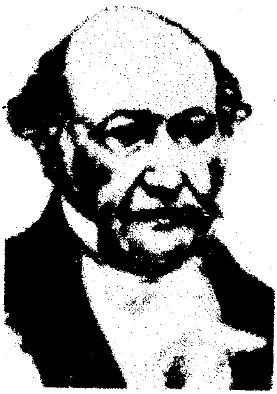
Почесний член багатьох академій наук і наукових установ, в т.ч. іноземний член АН СРСР (1934).

Луї де Бройль (15.VII 1892) — французький фізик-теоретик, один із творців квантової механіки, член Паризької АН (1933), її незмінний секретар у 1942—75. Народився у Дьепе. Закінчив Паризький університет (1913), де в 1928—62 був професором.

Роботи в області класичної і квантової механіки, теорії поля, квантової електродинаміки, історії і методології фізики. У 1923 поширив ідею А. Ейнштейна про двоїсту природу світла на речовину, припустивши, що потік матеріальних часток повинен мати і хвильові властивості, однозначно пов'язані з масою й енергією. Іншими словами, рух частки де Бройль зіставив з поширенням хвилі. Це зіставлення незабаром (1927) одержало блискуче підтвердження в експериментах з дифракції електронів у кристалах. Ідея про хвильові властивості матерії (хвилі де Бройля) була розвинута ним у ряді статей в 1924 і особливо в докторській дисертації (1924).

Цю ідею про загальність корпускулярно-хвильового дуалізму Э. Шредінгер використовував при створенні своєї хвильової механіки. За відкриття хвильової природи електрона де Бройль у 1929 визнаний гідним Нобелівської премії. З метою інтерпретації квантової механіки висунув у 1927 концепцію хвилі-пілота.

Член ряду академій наук, іноземний член АН СРСР (1958).



Вільям Роуан Гамільтон (4.8.1805—2.9.1865) — ірландський математик і фізик, член Ірландської АН (1832), президент у 1837—45. Народився у Дубліні. Закінчив Триніті коледж Дублінського університету (1827). З 1827 професор Дублінського університету і директор астрономічної обсерваторії. Фізичні дослідження в області оптики і механіки. Розробив теорію оптичних явищ («математичну оптику»). Встановив (1834) аналогію між класичною механікою і геометричною оптикою. Іншими словами, показав, що математичний апарат, розроблений ним для рішення задач геометричної оптики, заснованої на застосуванні так званої характеристичної функції (функції Гамільтона), можна тлумачити і мовою хвильової теорії. Передбачив у 1828 явище конічної рефракції в кристалі, що було незабаром доведене експериментально і зіграло значну роль в утвердженні хвильової гіпотези світла. Аналогія між корпускулярною і хвильовою оптикою, розвинута Гамільтоном, довгий час була майже зовсім забута, і тільки через 100 років її використав Е. Шредінгер при розробці своєї хвильової механіки.

Гамільтон поширив свою теорію оптичних явищ на механіку, розробивши її нові загальні принципи, зокрема варіаційний принцип. Механічний принцип Гамільтона аналогічний оптичному принципу Ферма. Аналітичний апарат механіки, відкритий Гамільтоном на основі синтезу проблем оптики і механіки, одержав подальший розвиток у роботах німецького математика К. Якобі і М. В. Остроградського. Матричний апарат Гамільтона використовується при розв'язуванні задач квантової механіки. У 1839 ввів поняття групової швидкості (довгий час цей факт приписувався Дж. Стоксу і Дж. Релєю).

Побудував своєрідну систему чисел — кватерніонів.

Член ряду академій наук, в т.ч. Петербурзької АН (1837). Королівська медаль (1836).

Карл Фрідріх Гаусс (30.4.1777-23.2. 1855) — німецький математик, астроном і фізик. Народився в Брауншвейзі. Вчився в 1795—98 у Геттінгенському університеті, з 1807 — професор цього університету і директор астрономічної обсерваторії.

Дослідження присвячені багатьом розділам фізики. У 1832 створив абсолютну систему одиниць, ввівши три основних одиниці: одиницю часу — 1 с, одиницю довжини — 1 мм, одиницю маси— 1 мг, і в 1833 разом з В. Вечером побудував перший у Німеччині електромагнітний телеграф. У 1839 у творі «Загальна теорія сил притягування і відштовхування, що діють назад пропорційно квадрату відстані» виклав основи теорії потенціалу, зокрема ряд положень і теорем, наприклад основну теорему електростатики (теорема Гаусса—Остроградского). У 1840 в роботі «Діоптричні дослідження» розробив теорію побудови зображень у складних оптичних системах. Ще в 1845 прийшов до думки про кінцеву швидкість поширення електромагнітних взаємодій. Вивчав земний магнетизм, винайшов у 1837 уніполярний магнітометр, у 1838 — біфілярний. У 1829 сформулював принцип найменшого примусу (принцип Гаусса). Одним з перших висловив у 1818 припущення про можливість існування неевклідової геометрії.

Член Лондонського королівського товариства (1804), Паризької АН (1820) і Петербурзької АН (1824).

Вернер Карл Гейзенберг (5.XII 1901-1.11 1976) — німецький фізик-теоретик, один із творців квантової механіки. Народився у Вюрцбурзі. Закінчив Мюнхенський (1923) і Геттінгенський (1924) університети. У 1927—41 — професор теоретичної фізики Лейпцигського університету, у 1941 —45 — директор Інституту фізики кайзера Вільгельма і професор Берлінського університету. У 1946—58 — директор Фізичного інституту і професор Геттінгенського університету. З 1958 — директор Інституту фізики та астрофізики і професор Мюнхенського університету.

Роботи відносяться до квантової механіки, квантової електродинаміки, релятивістської квантової теорії поля, теорії ядра, магнетизму, фізики космічних променів, теорії елементарних частинок, філософії природознавства. В 1925 розробив матричну механіку — перший варіант квантової механіки (Нобелівська премія, 1932). У 1926 пояснив відмінність двох систем термів для пара- і ортогелію: паратерми відповідають симетричним, а ортотерми — антисиметричним розв'язкам хвильового рівняння. В 1927 сформулював принцип невизначеності, що обмежує застосування до мікрооб'єктів класичних понять і уявлень.

Разом з П. Діраком висунув у 1928 ідею обмінної взаємодії, ввівши обмінні сили, і незалежно від Я. І. Френкеля розробив першу квантово-механічну теорію феромагнетизму, засновану на обмінній взаємодії електронів (модель локалізованих спінів). У 1929 разом з В. Паулі зробив спробу дати формулювання квантової електродинаміки, ввівши загальну схему квантування полів. Розвинув (1934—36) теорію дірок Дірака. Слідом за ним постулював (1934) існування ефекту поляризації вакууму.

Слідом за Д. Д. Іваненко прийшов до протонно-нейтронної моделі ядра (1932). В 1932 ввів поняття ізотопічного спіну, показав, що ядерні сили насичуються. Побудував теорію ядерних сил, розвивши ідею обмінної взаємодії Іваненко — Тамма. В 1943 у квантовій теорії поля ввів матрицю розсіювання (S-матрицю), що є важливим інструментом для опису взаємодії. В останні роки зусилля Гейзенберга були спрямовані на створення єдиної теорії поля. У 1958 проквантував нелінійне спінорне рівняння Іваненко (рівняння Іваненко — Гейзенберга). Чимало його робіт присвячено філософським проблемам фізики, зокрема теорії пізнання, де він переважно стоїть на позиціях ідеалізму.

Почесний член багатьох академій наук і наукових установ. Медалі К. Маттеучі, М. Планка та ін.

Поль Адріен Моріс Дірак (р. 8.VIII 1902) — англійський фізик-теоретик, один із творців квантової механіки, член Лондонського королівського товариства (1930). Народився у Брістолі. Закінчив Брістольський (1921) та Кембриджський (1926) університети. У 1932-68- професор Кембриджського університету.

Роботи відносяться до квантової механіки, квантової електродинаміки, квантової теорії поля, теорії елементарних частинок, теорії гравітації. Розробив (1926—27) математичний апарат квантової механіки — теорію перетворень, запропонував (1927) метод вторинного квантування. У 1927 застосував принципи квантової теорії до електромагнітного поля і одержав першу модель квантованого поля, поклавши початок квантовій електродинаміці. Передбачив тотожність квантів вимушеного і спонтанного випромінень, що лежить в основі квантової електроніки (1927). Разом з В. Гейзенбергом у 1928 відкрив обмінну взаємодію, ввівши обмінні сили.

Побудував у 1928 релятивістську теорію руху електрона, запропонувавши хвильове рівняння, що описує рух електрона і задовольняє релятивістську інваріантність (релятивістська квантова механіка). В теорії Дірака гармонічно поєднуються теорія відносності, кванти і спін, що до цього здавались поняттями незалежними. З теорії Дірака випливав важливий висновок, що електрон може мати негативні значення енергії. Виходячи з цього, припустив існування позитивно зарядженого електрона, чи позитрона, що був відкритий у 1932. Побудував теорію дірок (1930), у 1931 передбачив існування античастинок, народження та анігіляцію електронно-позитронних пар. У 1931 висунув гіпотезу про існування елементарного магнітного заряду (монополь Дірака), у 1933 — антиречовини. Постулював ефект поляризації вакууму (1933). За створення квантової механіки разом з Е. Шредінгером у 1933 був нагороджений Нобелівською премією.

Незалежно від Е. Фермі розробив у 1926 статистику частинок з напівцілим спіном (статистика Фермі — Дірака). У 1931 обґрунтував можливість існування симетричної квантової електродинаміки, заснованої на елементарних магнітних зарядах. У 1932 разом з В. А. Фоком і Б. Подільським запропонував багаточасовий формалізм — прямий попередник сучасної квантової електродинаміки. У 1936 побудував загальну теорію класичних полів, головним чином для вільних частинок.

Висловив (1937) гіпотезу зміни гравітації з часом. У 1942 ввів поняття індефінітної метрики з метою усунення нескінченності власної енергії електрона. У 1962 розробив теорію мюона, у якій мюон описується як коливальний стан електрона. Останнім часом працює над проблемою гамільтонового формулювання теорії гравітації з метою подальшого квантування гравітаційного поля.

Почесний член ряду академій наук і наукових установ, іноземний член АН СРСР (1931). Королівська медаль (1939), медаль Коплі (1952), премія Р. Оппенгеймера та інших.

Пауль Еренфест (18.І 1880-25.ІХ 1933) — фізик-теоретик. Народився у Відні. Закінчив Віденський університет (1904). У 1907 переїхав у Петербург, де викладав у Політехнічному інституті та вів організований вдома теоретичний семінар. З 1912 — професор Лейденського університету. Основні роботи присвячені термодинаміці, статистичній механіці, ядерній фізиці, теорії відносності, квантової теорії. У 1911 разом з Т. А. Афанасьєвою виконав логічний аналіз статистичної механіки, запропонував квазіергодичну гіпотезу. У 1933 ввів поняття фазових переходів ІІ роду.

В області квантової статистики сформулював так звану адіабатичну гіпотезу. У 1931 разом з Р. Оппенгеймером показав, що ядра з непарним атомним номером підкоряються статистиці Фермі-Дірака, а з парним — статистиці Бозе-Ейнштейна (теорема Еренфеста-Оппенгеймера), і відзначив в зв'язку з цим, що прийнята на той час протонно-електронна гіпотеза будови ядер стосовно ядра азоту-14 приводить до ряду протиріч з відомими властивостями азоту.

Створив школу фізиків (С. Гаудсміт, Х. Крамерс, Д. Багаття, Дж. Уленбек, И. Бюргерс, В. Г. Бурсіан, Г. М. Вейхард, Ю. А. Прутків, В. К. Фредерікс та ін.). Іноземний член АН СРСР (1924), член Нідерландської АН.

Р.Декарт

Дж. Лагранж

Дж. Максвелл

І. Ньютон

М. Остроградський

М. Планк

П. Ферма

Е. Фермі

К. Якобі

П. Лаплас

Ф. Блох

ПЕРЕДІСТОРІЯ ФІЗИКИ (від найдавніших часів до XVII в.)
Епоха Античності (VI в. до н.е. - V в. н.е.).
Середні віки (VI-XIV ст.).
Епоха Відродження (XV—XVI ст.).
ПЕРІОД СТАНОВЛЕННЯ ФІЗИКИ ЯК НАУКИ (початок XVII ст. — 80-і рр. XVII ст.)
ПЕРІОД КЛАСИЧНОЇ ФІЗИКИ (кінець XVII ст. — початок XX ст.)
Перший етап (кінець XVII ст.—60-і рр. XIX ст.).
Другий етап (60-і рр. XIX в.- 1894 р.).
Третій етап (1895 р. — 1904 р.).
ПЕРІОДИ СУЧАСНОЇ ФІЗИКИ (з 1905 р.)
Перший етап (1905 р. — 1931 р.).
Другий етап (1932 р. — 1954 р.).
Третій етап (з 1955 р.).

Період від найдавніших часів до початку XVII ст. — це передісторія фізики, період нагромадження фізичних знань про окремі явища природи, виникнення окремих вчень. Відповідно до етапів розвитку суспільства в ньому виділяють епоху Античності, середні століття, епоху Відродження.

Фізика як наука бере початок від Г. Галілея — основоположника точного природознавства. Період від Г. Галілея до І. Ньютона представляє початкову фазу фізики, період її становлення.

Наступний період починається І. Ньютоном, що заклав основи тієї сукупності законів природи, що дає можливість зрозуміти закономірності великого кола явищ. І. Ньютон побудував першу фізичну картину світу (механічну картину природи) як завершену систему механіки. Зведена І. Ньютоном і його послідовниками, Л. Ейлером, Ж. Даламбером, Ж. Лагранжем, П. Лапласом і іншими, грандіозна система класичної фізики проіснувала без змін два століття і тільки наприкінці XIX ст. почала валитися під напором нових фактів, що не вкладались в її рамки. Правда, перший відчутний удар по фізиці Ньютона нанесла ще в 60-х роках XIX ст. теорія електромагнітного поля Максвелла - друга після ньютонівської механіки велика фізична теорія, подальший розвиток якої поглибив її протиріччя з класичною механікою і привів до революційних змін у фізиці. Тому період класичної фізики в прийнятій схемі поділяється на три етапи: від І. Ньютона до Дж. Максвелла (1687—1859), від Дж. Максвелла до В. Рентгена (1860-1894) і від В. Рентгена до А. Ейнштейна (1895-1904).

Перший етап проходить під знаком повного панування механіки Ньютона, його механічна картина світу удосконалюється й уточнюється, фізика представляється вже цілісною наукою. Другий етап починається зі створення в 1860—1865 р. Дж. Максвеллом загальної строгої теорії електромагнітних процесів. Використовуючи концепцію поля М. Фарадея, він дав точні просторово-часові закони електромагнітних явищ у вигляді системи відомих рівнянь — рівнянь Максвелла для електромагнітного поля. Теорія Максвелла одержала подальший розвиток у працях Г. Герца і X. Лоренца, у результаті чого була створена електродинамічна картина світу.

Етап з 1895 по 1904 р. є періодом революційних відкриттів і змін у фізиці, коли остання переживала процес свого перетворення, відновлення, періодом переходу до нової, сучасної фізики, фундамент якої заклали спеціальна теорія відносності і квантова теорія. Початок його доцільно віднести до 1905 р.— року створення А. Ейнштейном спеціальної теорії відносності і перетворення ідеї кванта М. Планка в теорію квантів світла, що яскраво продемонстрували відхід від класичних уявлень і понять і поклали початок створенню нової фізичної картини світу — квантово-релятивістської.

У періоді сучасної фізики доцільно виділити три етапи: перший етап (1905—1931), що характеризується широким використанням ідей релятивізму і квантів і завершується створенням і становленням квантової механіки — четвертої після І. Ньютона фундаментальної фізичної теорії; другий етап — етап субатомної фізики (1932—1954), коли фізики проникли на новий рівень матерії, у світ атомного ядра, і, нарешті, третій етап — етап суб'ядерної фізики і фізики космосу, відмінною рисою якого є вивчення явищ у нових просторово-часових масштабах. При цьому за початок відліку умовно можна взяти 1955 р., коли фізики почали досліджувати структуру нуклона, що знаменувало проникнення в нову область просторово-часових масштабів, на суб'ядерний рівень.

Закони випромінення

Наприкінці XVII в. Ісаак Ньютон за допомогою тригранної скляної призми розклав біле світло в спектр на сім кольорів . Цей ефектний експеримент поклав початок дослідженням світла, що два сторіччя по тому привели до важливих наслідків у фізиці. Завдяки удосконаленню оптичних приладів на початку XIX в. були отримані досить гарні спектри світла різних джерел. Поступово накопичені дані були узагальнені в 1859 р. Густавом Робертом Кірхгофом і Робертом Вільгельмом Бунзеном, що висунули гіпотезу про наявність зв'язку між спектрами і властивостями атомів.

У 1868 р. Ейльхард Мічерлих висловив припущення, що спектри несуть інформацію про процеси, які відбуваються в самому атомі. Надалі виявлені в спектрах закономірності усе більш переконували фізиків у справедливості цього припущення. У 1885 р. Йоган Бальмер встановив просту залежність між довжинами хвиль ліній видимої частини спектра атома водню, що він виразив математичною формулою (формула Бальмера). Пізніше, у 1890 р., Йоганес Роберт Рідберг ввів у спектроскопію свою добре відому константу R (стала Рідберга), що виражає взаємозв'язок між різними серіями спектральних ліній елемента.

Класична фізика не могла пояснити ці закономірності, тому що вченим не була ясна природа випромінювання. Наприкінці минулого століття ці процеси розглядалися з позицій термодинаміки. Спочатку, у 1879 р., Йозеф Стефан експериментально встановив, що енергія, випромінювана нагрітим тілом, пропорційна четвертому ступеню його абсолютної температури. Цей закон теоретично вивів у 1884 р. Людвіг Больцман. Над проблемою випромінювання почав працювати і німецький фізик Вільгельм Він, з 1890 р. асистент Германа Гельмгольца у Фізико-технічному інституті в Берліні. У 1893 р. Він опублікував результати своїх досліджень спектрального розподілу випромінювання нагрітого тіла. Він математично описує загальновідомий факт, що зі збільшенням температури світіння тіла змінюється від червоного до синювато-білого (тобто максимум випромінювання зміщується в область коротких хвиль). Ця закономірність одержала в науці назву «закон зсуву Віна». У 1896 р., виходячи з класичних уявлень, вчений вивів закон розподілу енергії в спектрі абсолютно чорного тіла (закон випромінювання Віна).

Ці відкриті експериментально закономірності були вершиною досягнень класичної фізики в теорії випромінювання нагрітого тіла. Дослідження німецького вченого підготували ґрунт для революційних змін, що настали в галузі фізики на початку XX ст., і в знак визнання його заслуг у 1911 р. Вільгельмові Віну була вручена Нобелівська премія з фізики - за відкриття закону теплового випромінювання.

Законами випромінювання наприкінці минулого століття займався й інший відомий учений — Джон Вільям Стрет (лорд Релєй), що у 1900 р. опублікував результати своїх досліджень розподілу енергії в спектрі випромінювання. Його дані, однак, не узгоджувались з висновками Віна, зробленими для іншої (короткохвильової) частини спектра. У науці заговорили про так звану «ультрафіолетову катастрофу», тому що саме в цьому діапазоні спектра відзначалася невідповідність між результатами Віна і Релєя. Це було однією з тих невеликих хмарин, що наприкінці XIX ст. з'явилися на чистому обрії класичної фізики.

Щоб якось погодити суперечливі висновки, великий німецький фізик-теоретик того часу Макс Планк висловив сміливе припущення. У 1900 р., після 6 років роботи над проблемою випромінювання абсолютно чорного тіла, він припустив, що атоми випромінюють енергію певними порціями, квантами, причому енергія кожного кванта пропорційна частоті хвилі, тобто кольору випромінюваного світла. Це ознаменувало народження квантової теорії. Завдяки цьому припущенню Планк теоретично вивів закон розподілу енергії в спектрі абсолютно чорного тіла.

Експериментатори відразу ж прийняли нову теорію і незабаром знайшли їй численні підтвердження. Для теоретиків, однак, це було великим ударом. Починаючи ще з робіт Ньютона і Лейбніца, творців диференціального числення, що оперує з нескінченно малими величинами, фізики були твердо переконані в безмежній «подільності» предметів і явищ. І раптом виявилося, що випромінювання носить атомістичний характер і не може відбуватися довільно. Навіть сам Планк стримано приймав своє відкриття, сприймаючи його скоріше як необхідність.

Наступний крок на шляху утвердження ідеї квантів був зроблений у 1905 р. Альбертом Ейнштейном. У той час як Планк приймав, що випромінювання відбувається порціями, Ейнштейн показав, що і світло має квантову структуру і являє собою потік світлових квантів (фотонів). Це, власне кажучи, було відродженням старої корпускулярної теорії світла Ньютона. Спираючись на ці ідеї, Ейнштейн зумів пояснити ряд явищ, у тому числі і фотоелектричний ефект.

Фотоефект (явище взаємодії між світлом і речовиною, що виражається в звільненні електронів з речовини під дією електромагнітного випромінювання) був відкритий у 1887 р. Генріхом Герцом. Незабаром на основі експериментів був даний його опис російським фізиком Олександром Столєтовим. Ці два вчені, власне кажучи, спостерігали так званий зовнішній фотоефект, при якому фотони вибивають електрони з речовини. Поряд з цим існує ще і внутрішній фотоефект (відкритий у 1873 р. американським фізиком У. Смітом), при якому вибиті з атомів електрони залишаються всередині речовини і реєструються за підвищенням електропровідності.

Уявлення Ейнштейна про світло як про потік часток дозволило пояснити фотоефект передачею енергії фотонів електронам атома. Пройшло, однак, чимало часу, перш ніж нові погляди затвердилися в науці. Планк став лауреатом Нобелівської премії тільки в 1918 р., тобто майже два десятиліття після того, як вивів свій знаменитий закон випромінювання і запропонував гіпотезу квантів. Альберт Ейнштейн одержав Нобелівську премію з фізики в 1921 р. У той час він був уже всесвітньо відомим фізиком, автором знаменитої теорії відносності, і тому в мотивації нагородження поряд з відкриттям законів фотоефекта згадується і про його заслуги в теоретичній фізиці.

Пояснення, дане Ейнштейном фотоефекту, не відразу одержало визнання фізиків. Лише в 1910-1914 р. американський фізик Роберт Ендрус Міллікен провів у Чиказькому університеті перші досліди, що підтвердили нові уявлення про світло. Міллікен створив оригінальний прилад, що дозволяв вимірювати кількість електронів (і їхню енергію), вибитих з металів при освітленні їх світлом різної довжини хвилі. Цей цікавий прилад дав можливість насамперед визначити так звану сталу Планка, що встановлює зв'язок між енергією і частотою кванта. Крім того, Міллікен експериментально перевірив рівняння Ейнштейна для фотоефекту у видимій і ультрафіолетовій областях спектра.

Експериментатору Робертові Міллікену належить ще одне велике досягнення. Використовуючи оригінальну апаратуру і розроблений їм метод крапель, він провів величезну кількість дослідів, що дозволили йому точно виміряти електричний заряд електрона («атома» електрики). За це відкриття, а також за дослідження фотоефекту Міллікен одержав у 1923 р. Нобелівську премію з фізики.

У 60-і роки XIX ст. у фізиці відбулася велика подія: англійський фізик Джеймс Клерк Максвелл об'єднав явища електрики, магнетизму і світла, створивши теорію електромагнітного поля. Так виник новий розділ фізики, що одержав назву електродинаміки. Ідеї Максвелла були розвинуті далі і поставлені на нову основу нідерландським фізиком-теоретиком Хендриком Антоном Лоренцем. Об'єднавши електромагнітну теорію Максвелла з уявленнями про атомістичний характер електрики, він створив класичну електронну теорію. Електричні, магнітні й оптичні явища теорія Лоренца пояснювала як рух дискретних електричних зарядів.

Основи електронної теорії Лоренц заклав у 1880 р., а остаточно вона оформилася до 1909 р., після того як був відкритий електрон. Відповідно до цієї теорії, атоми складаються з електронів і позитивно заряджених часток, що їх нейтралізують. При русі цих зарядів виникають електричні і магнітні поля. Виходячи з цих уявлень, Лоренц пояснив ряд електричних і оптичних явищ і навіть прогнозував явища, що тоді не спостерігалися. Зокрема, він вказав, що спектральні лінії випромінювання (яке обумовлене рухом електронів) повинні розщеплюватися під дією електричних і магнітних полів, оскільки поля впливають на рух електронів. Пророкування Лоренца було підтверджено в серпні 1896 р. його співвітчизником, молодим нідерландським фізиком Пітером Зееманом.

У своєму експерименті Зееман помістив полум'я газового пальника між полюсами електромагніта. При додаванні звичайної кухонної солі полум'я забарвлюється в жовтий колір — спектральна лінія випромінювання натрію. При включенні магнітного поля спектральні лінії розширювалися в повній відповідності з теорією Лоренца. У цей же час Томсон досліджував катодні промені і дані, отримані їм у дослідах, ніяк не зв'язаних з експериментами Зеемана, послужили переконливим свідченням на користь реального існування електронів.

Ідеї Лоренца і відкриття Зеемана були великим кроком вперед у вивченні теорії випромінювання. Вже в 1902 р. їхні роботи одержали визнання Нобелівського комітету, що прийняв рішення про присудження двом нідерландським ученим премії з фізики.

Відповідно до теорії Лоренца, електричне поле повинно також впливати на світло. Експериментальне доведення цього висновку значно затрималося з чисто технічних причинах.

Вплив електричного поля на спектральні лінії натрієвого полум'я не можна було вивчати, помістивши полум'я між двома електродами. Оскільки полум'я проводить струм, електричне поле при цьому взагалі зникає. Лише в 1913 р. Йоханес Штарк, щоб обійти ці труднощі, створив іншу експериментальну установку, використовуючи властивості так званих каналових променів. Це свого роду антипод катодних променів. Якщо в катоді електронно-променевої трубки пробити отвори, то через них проходять частки, що є позитивними іонами, які випромінюють світло. Направляючи каналові промені в електричне поле, Штарк знайшов, що при цьому відбувається розщеплення спектральних ліній випромінювання, як і пророкувала теорія Лоренца. За аналогією з уже відомим «ефектом Зеємана» це явище одержало назву «ефект Штарка». У 1919 р. Йоханес Штарк одержав за своє відкриття Нобелівську премію з фізики.

Дослідження законів випромінювання дали дуже цінну інформацію про внутрішню будову атома і привели до створення різних його моделей. Але щоб зробити правильний вибір між цими моделями, були потрібні й інші експериментальні методи, що стали можливі тільки на початку нинішнього сторіччя.

Моделі атома

Концепція атома виникла вперше в древній Греції. Демокріт і інші давньогрецькі філософи висловлювали думку, що всі тіла в навколишньому нас світі складаються з дрібних часток, що далі не можуть поділятися і є основними «цеглинками» речовини. Звідси і назва «атом», що значить по-грецьки «неподільний».

Наука відкрила атом лише на початку XIX в. Перша сучасна теорія про те, що речовина складається з обмеженого числа часток, була створена в 1803 р. англійським ученим Джоном Дальтоном. Потім, слідом за філософами атомом зайнялися хіміки. Пройшло ще 100 років, перш ніж фізики змогли показати, що ця «неподільна» частка є складною системою, що таїть у собі чимало загадок природи. Дослідження ряду вчених наприкінці XIX і початку XX ст. показали, що електрика і світло мають дискретний характер, тобто, складаються з часток. Ці уявлення лягли в основу різних моделей атома, що все більш точно відтворювали його справжню структуру.

Насамперед у 1903 р. Дж . Дж. Томсон запропонував свою модель атома у виді «пудингу з ізюмом», відповідно до якої атом являє собою позитивно заряджену сферу з вкрапленими в неї електронами. Сумарний негативний заряд електронів дорівнює позитивному заряду сфери; тому в цілому атом електрично нейтральний. Модель атома Томсона деякою мірою дозволяла пояснити процеси випромінювання, розсіювання і поглинання світла, і протягом ряду років вона була дуже популярна . Це приклад того, як модель, що не має нічого спільного з дійсністю, проте «працює» — дає можливість пояснити деякі явища, що реально спостерігаються.

Приблизно в той же час французький учений Жан Батист Перрен запропонував планетарну модель атома. У цій моделі властивості атомів, що спостерігаються, пояснювалися орбітальним рухом електронів. Подібну модель запропонував у 1904 р. і японський фізик Хантаро Нагаока. Це так звана «модель Сатурна», у якій електрони утворять кільце, що обертається навколо центрального позитивно зарядженого ядра, подібно тому як кільця обертаються навколо планети Сатурн. Ці перші моделі атома були дуже спекулятивними і не «протрималися» довго. Тільки після появи нових експериментальних даних стало можливим установити справжню структуру атома.

У 1906 р. англійський учений Ернест Резерфорд досліджував взаємодію між альфа-частинками і речовиною. З цією метою проводилися досліди, у яких тонкі пластинки з золота й інших металів «обстрілювались» альфа-частинками. Експерименти були доручені новозеландському фізику Ернесту Марсдену, що працював у Резерфорда в Манчестерському університеті. У 1909 р. Марсден разом з Хансом Гейгером, іншим асистентом Резерфорда, знайшов, що зрідка (приблизно в одному випадку з 8000) альфа-частинки розсіювалися при зіткненні з мішенню на дуже великий кут, немов зіштовхувалися з масивною перешкодою. Результати були настільки несподіваними, що Марсден довго не зважувався повідомити про них Резерфорду, вважаючи, що тут прихована якась помилка. Резерфорд дійсно був дуже здивований і потім часто згадував, що це виглядало настільки ж неймовірним, як якби снаряд, що летить, відскочив від листка паперу.

До 1911 р. було накопичено вже досить подібних експериментальних даних, що дозволило Резерфорду запропонувати його добре відому «планетарну модель» атома, засновану вже на прямих результатах спостережень. Вперше були зроблені оцінки розмірів атома в центрі якого є невелике позитивно заряджене ядро, на якому, власне, і розсіювалися альфа-частинки. Модель атома Резерфорда була така: навколо ядра, розміром приблизно в 100 тисяч разів менше самого атома, обертаються, як планети навколо Сонця, негативно заряджені електрони. Але «планетарна модель» Резерфорда також пояснювала далеко не все, тому що вона ґрунтувалася на уявленнях класичної фізики. Відповідно до останніх уявлень електрон, що обертається повинен був би безупинно випромінювати енергію і, досить швидко витративши її, впасти на ядро. Модель Резерфорда знаходилася лише в одному кроці від істини — і цей крок був зроблений датським фізиком Нільсом Бором.

У 1913 р. Бор, об'єднавши ідеї квантування енергії, висунуті Планком і Ейнштейном, з моделлю атома Резерфорда, висунув гіпотезу, що електрони рухаються навколо ядра тільки по таких орбітах, на яких вони не випромінюють і не поглинають енергію. Далі він показав, що випромінювання і поглинання відбуваються тільки квантами в момент переходу електрона з однієї орбіти на іншу. Теорія Бора дозволяла легко вивести сталу Рідберга й успішно пояснювала інші результати, отримані в експериментальній спектроскопії. Уже на наступний рік були проведені спектральні виміри в ультрафіолетовій області, що підтвердили справедливість нової моделі атома.

Модель Бора була першою квантовою моделлю атома. Вона поклала початок нової епохи в розвитку атомної теорії, об'єднавши в собі результати, отримані при дослідженнях радіоактивності, оптичних і електромагнітних явищ. Нова модель атома відразу ж знайшла своє використання у спектроскопії і теорії хімічного зв'язку. Вона ознаменувала собою відхід від класичних уявлень і початок широкого впровадження квантових ідей у сучасну науку. За створення квантової теорії атома Нільс Бор був визнаний гідним у 1922 р. Нобелівської премії з фізики.

Кванти в дії

У період 1913—1917 р. був проведений ряд експериментів, що підтверджують гіпотезу Макса Планка про квантування енергії і квантову модель атома Нільса Бора. Вони були здійснені німецькими фізиками Джеймсом Франком і Густавом Герцом.

Ці вчені досліджували взаємодію електронів з атомами, що, зокрема, відбувається при зіткненні електрона, який рухається з певною швидкістю, з атомом речовини. В експериментальній установці Франка і Герца пучок електронів проходив через газ. Газ починав світитися, випускаючи світло певної довжини хвилі. Експеримент дозволяв проводити точний вимір швидкості електронів, а отже, і їхньої енергії. Досліджуючи кількісні результати, вчені показали, що, для того щоб викликати випромінювання атома при зіткненні, електрон повинен мати мінімальну енергію. Вони визначили, що ця енергія дорівнює добутку сталої Планка на частоту світлового випромінювання. Визначення цієї сталої новим і незалежним способом є ще одним доказом дискретності рівнів енергії атомів і підтвердило теорію атома Бора. За це відкриття Густав Герц і Джеймс Франк були визнані гідними в 1925 р. Нобелівської премії з фізики.

Дослідження випромінювання абсолютно чорного тіла привело Планка до ідеї квантування. Теорія фотоефекта, запропонована Ейнштейном, поглибила це уявлення, показавши, що квантами в сутності є фотони (частки світла). Фотони виявляють себе при різних ефектах, один із яких був відкритий американським фізиком Артуром Холлі Комптоном у 1923 р.

При фотоефекті фотон взаємодіє з електроном речовини, віддаючи йому свою енергію, що приводить до вивільнення електрона з атома. При ефекті Комптона фотон взаємодіє з вільним чи слабозв'язаним електроном, передаючи йому тільки частина своєї енергії. У результаті такої взаємодії відбувається перерозподіл енергії між фотоном і електроном, що змінює траєкторію часток. Ефект Комптона спостерігається тоді, коли енергія фотона досить велика в порівнянні з енергією електрона в атомі, тому що в цьому випадку електрон може вважатися вільною частинкою. Настільки високу енергію мають фотони рентгенівського випромінення. У своїх дослідах Комптон установив, що при взаємодії рентгенівського випромінення з речовиною відбувається пружне розсіювання його на вільних електронах речовини, яке супроводжується збільшенням довжини хвилі (ефект Комптона), і побудував теорію цього явища.

Відкриття Комптона стало новим переконливим доказом реальності квантів. За це досягнення він став у 1927 р. одним з лауреатів Нобелівської премії з фізики.

У той час як фотоефект і ефект Комптона - це явища, що спостерігаються лише в спеціальних умовах, так зване комбінаційне розсіювання світла зустрічається значно частіше. У 1928р. індійські фізики Чандрасекхара Венката Раман і Каріаманіккам Крішнан з Калькутського університету досліджували спектри світла після проходження його через різні рідини. Вони встановили, що поряд з основними спектральними лініями спостерігаються і нові лінії, зміщені в червону і синю сторони. Незалежно від індійських вчених і навіть трохи раніш аналогічні дослідження провели з кристалами радянські фізики Л. І. Мандельштам і Г. С. Ландсберг. Радянські вчені опублікували свої результати після тривалих експериментів, тоді як Раман відразу ж послав коротке повідомлення в англійський журнал *Nature*. Це забезпечило йому пріоритет, і сьогодні комбінаційне розсіювання світла часто називають «ефектом Рамана».

Суть цього явища така. Кванти оптичного діапазону поглинаються молекулами речовини, викликаючи їхнє збурення. Збуджена молекула випромінює квант із меншою енергією, тобто виникає вторинне випромінювання, зміщене в червону область спектра. Якщо інший фотон попадає в ту ж саму молекулу в момент, коли вона ще знаходиться в збудженому стані, то вторинне випромінювання буде мати більшу енергію. Це вторинне випромінювання зміщене в синю область спектра.

Комбінаційне розсіювання світла пояснює багато явищ природи; цей ефект виявився важливим методом для вивчення будови молекул. Сьогодні спектроскопія розсіяного світла широко застосовується в хімії і молекулярній біології для якісного і кількісного аналізів. За своє відкриття Раман одержав у 1930 р. Нобелівську премію з фізики.

Розвиток квантових уявлень

У 1921 р. американський фізик Клінтон Джозеф Девіссон знайшов цікаве явище, що спостерігалося при відбитті електронів від поверхні нікелевої пластинки. Результати досліджень показали, що електрони розсіюються під певним кутом. Це явище вдалося пояснити лише через кілька років, коли ідеї квантової фізики одержали новий, більш глибокий розвиток.

На початку 20-х років теоретики стали розуміти, що квантова теорія, створена на початку століття, дуже обмежена в своєму змісті і застосуванні. Був потрібний її подальший розвиток на основі нових принципів. У 1923 р. французький фізик Луї де Бройль у своїй докторській дисертації «Дослідження теорії квантів» висунув ідею про хвильові властивості матерії, що лягла в основу сучасної квантової механіки. Розвивши глибше уявлення Ейнштейна про подвійну природу світла, він поширив їх і на речовину, об'єднавши формулу Планка (відповідно до якої енергія пропорційна частоті випромінювання) з формулою Ейнштейна, що зв'язує енергію і масу ($E=mc^2$), одержав співвідношення, що показує, що будь-якій матеріальній частинці певної маси і швидкості можна приписати відповідну довжину хвилі.

Луї де Бройль захистив докторську дисертацію в листопаді 1924 р., виклавши тим часом свої ідеї в ряді статей. На наступний рік молодий німецький фізик Вальтер Ельзассер висловив припущення, що теоретичні розробки де Бройля можуть бути доведені при дослідженні відбиття електронів від кристала. Але такий дослід був здійснений Девіссоном ще в 1921 р. Американський учений також стежив за публікаціями де Бройля, і на початку 1925 р. він приступив до досліджень кутового розподілу розсіяних електронів. Нарешті, 6 січня 1927 р., Девіссон разом з Лестером Джермером одержав чітку картину розсіювання електронів, що добре узгоджувалась з теорією.

У той же самий час професор Абердинського університету Джордж Паджет Томсон, син відомого Джозефа Джона Томсона, незалежно від групи Девіссона відкрив явище дифракції електронів. Лише через місяць після своїх американських колег він також одержав переконливі докази хвильового характеру цих часток. Картини розсіювання електронів, отримані Девіссоном і Томсоном, були дуже схожі на зображення, одержувані при дифракції рентгенівського випромінювання, причому експерименти в цих двох дослідженнях ставилися по-різному. У той час як Девіссон вивчав відбиття повільних електронів від кристалів нікелю, Томсон досліджував проходження швидких електронів через металеву фольгу. По дифракційних картинах можна було обчислити довжину хвилі, що відповідає електронам, які рухаються.

Ідеї Луї де Бройля розкрили нові властивості речовини, про які раніше навіть і не підозрювали вчені. У 1929 р., через шість років після перших публікацій, де Бройль одержав Нобелівську премію з фізики за відкриття хвильової природи електронів.

Девіссон і д. П. Томсон поділили в 1937 р. Нобелівську премію з фізики за експериментальне відкриття інтерференційних явищ у кристалах, що опромінюються електронами. Поряд з великим теоретичним значенням ці відкриття мали практичну цінність. Досить згадати електронну оптику, зокрема електронний мікроскоп.

Роботи Луї де Бройля привернули увагу австрійського фізика-теоретика Ервіна Шредінгера. Протягом року (з кінця 1925 до кінця 1926 р.) він опублікував кілька робіт, у яких була розвинута теорія, що одержала назву «хвильова механіка». Висновки Шредінгера, і особливо відоме рівняння його імені, грають у вивченні атомних процесів таку ж фундаментальну роль, як закони Ньютона в класичній механіці.

Якщо провести аналогію між оптикою і механікою, то можна вказати: класична оптика приймає, що світлові промені поширюються прямолінійно, і тільки при дослідженні деяких явищ, таких як дифракція чи інтерференція, проявляється хвильова природа світла; точно так само класична механіка, заснована на законах Ньютона, добре описує явища макросвіту, але при дослідженні мікрооб'єктів проявляються вже хвильові властивості матерії. Крім цієї оптико-механічної аналогії Шредінгер установив зв'язок між створеною ним хвильовою механікою і матричною механікою, розробленою в той же період Вернером Гейзенбергом, Максом Борном, Паскуалем Йорданом і Полем Діраком.

Молодий німецький фізик Вернер Гейзенберг у 1925 р., у віці всього лише 24 років, запропонував так звану матричну механіку, в основу якої був покладений дуже зручний математичний апарат. Однак велику популярність Гейзенбергу приніс його знаменитий принцип невизначеності, сформульований у 1927 р., коли вчений став професором теоретичної фізики Лейпцизького університету. Цей принцип, що є фундаментальним положенням квантової теорії, говорить, що інформація, яку ми можемо отримати щодо мікрооб'єктів, обмежена самими методами спостереження. Якщо ми вирішимо, наприклад, визначити положення (координати) частинки, то для цього нам доведеться опромінити її фотонами. Але внаслідок взаємодії з фотонами частинка змінить своє положення, так що отриманий результат буде «неточним». Принцип невизначеності Гейзенберга затверджував незастосовність законів класичної механіки в квантовій теорії. У новій, хвильовій квантовій механіці необхідні були інші поняття, ніж у класичній механіці. Так, в моделі атома замість електронних орбіт (що фігурують у класичній моделі атома Бора) були введені так звані електронні хмари, у межах яких електрон знаходиться з певним ступенем імовірності.

Подальший розвиток квантова теорія одержала у дослідженнях англійського фізика Поля Дірака. У 1928 р. він створив релятивістську теорію руху електрона, застосувавши в квантовій механіці співвідношення теорії відносності. Дірак зумів об'єднати релятивістські уявлення з уявленнями про кванти і спін (власний момент імпульсу мікрочастинки). З теорії Дірака випливав цікавий висновок про можливість існування позитивно зарядженого «електрона» - і дуже незабаром, усього лише через 4 роки, був відкритий позитрон.

Творцями квантової механіки були молоді талановиті дослідники. Вони внесли у фізику нові оригінальні ідеї, так що їхня наукова діяльність цілком відповідала критеріям Нобелівського фонду. І не дивно, що більшість з них незабаром стали лауреатами Нобелівської премії. В 1933 р. Нобелівська премія з фізики була присуджена Вернерові Гейзенбергу за створення квантової механіки і відкриття в зв'язку з цим алотропних форм водню, а також Ервінові Шредінгеру і Полю Діракові - за створення нових плідних варіантів квантової теорії.

Коли Шредінгер вперше опублікував своє рівняння, німецький фізик Макс Борн дав статистичну інтерпретацію вхідної в нього хвильової функції, показавши, що інтенсивність шредінгерівських хвиль варто розглядати як міру імовірності того, що частка знаходиться в певному місці. Інша заслуга Борна полягає в тому, що він разом з П. Йорданом створив математичний апарат нової квантової теорії (матричної механіки). За фундаментальний внесок у квантову механіку, а також за статистичну інтерпретацію хвильової функції Макс Борн у 1954 р. (через багато років після своїх відкриттів!) став лауреатом Нобелівської премії з фізики, розділивши її з Вальтером Боті. Поряд з іншими результатами Борна не можна не згадати про розроблені ним методи обчислення деформації електронних оболонок атома. Для Борна і його школи було характерним широке використання квантової механіки в різних областях фізики атома і твердого тіла.

З теоретичним дослідженням електронів в атомі пов'язані і роботи відомого швейцарського фізика-теоретика Вольфганга Паулі. У 1924 р. цей талановитий молодий учений сформулював один з найважливіших принципів теоретичної фізики - так званий принцип Паулі. Це були часи, коли ще панувала стара квантова теорії, відповідно до якої електрони в атомі обертаються навколо ядра по визначених траєкторіях. Принцип Паулі стверджував, що на одній орбіті не може одночасно знаходитися більш двох електронів, та й то тільки в тому випадку, якщо їхні спіни протилежно спрямовані. У сучасному формулюванні цей принцип звучить так: дві тотожні частинки не можуть знаходитися в одному квантовому стані.

З принципу Паулі випливає, що в будь-якому шарі електронної оболонки атома може знаходитися тільки певне число електронів. Цей принцип дозволив строго пояснити розташування хімічних елементів у таблиці Менделєєва. Принцип Паулі має велике значення для ядерної фізики і фізики елементарних частинок, де з його допомогою вдалося пояснити складний характер ядер і елементарних частинок. За своє велике відкриття Вольфганг Паулі в 1945 р. одержав Нобелівську премію з фізики.

Позначення в тексті

$\bar{A}$ — векторний потенціал електромагнітного поля; A — амплітудна функція, константа; $\hat{A}$ — деякий оператор; $\bar{a}$ — прискорення; $\hat{a}$ — оператор прискорення;

$\bar{B}$ — індукція магнітного поля;

c — швидкість світла, константа; C — константа;

$\bar{D}$ — індукція електричного поля;

E — енергія, напруженість електричного поля; $\bar{E}$ — напруженість електричного поля; e — заряд електрона, основа ln;

$F, \bar{F}$ — сила; $\hat{F}$ — оператор сили; $\hat{f}$ — оператор довільної фізичної величини; f — функція;

H — функція Гамільтона (гамільтоніан), напруженість магнітного поля; $\bar{H}$ — напруженість магнітного поля; $h, \hbar$ — стала Планка;

i — уявна одиниця, індекс підсумування, номер частинки;

$\bar{j}$ — густина потоку (речовини), густина потоку енергії, густина потоку імовірності, густина струму; j — індекс;

k — число ступенів свободи, хвильове число; $\bar{k}$ — хвильовий вектор;

L — функція Лагранжа; $\hat{L}$ — оператор моменту імпульсу;

$\bar{M}$ — момент імпульсу; m — маса;

N — число частинок;

$p, \bar{p}, p_i$ — імпульс, узагальнений імпульс; $\hat{p}$ — оператор імпульсу;

q, q_i — узагальнені координати; $\dot{q}, \dot{q}_i$ — узагальнені швидкості; $\ddot{q}, \ddot{q}_i$ — узагальнені прискорення;

$\bar{r}$ — радіус-вектор;

S — дія, довжина шляху, довжина траєкторії; $\bar{S}$ — вектор поверхні, густина потоку енергії;

t — час;

U — потенціальна енергія; u_k — амплітудна функція хвилі Блоха;

V — об'єм, $\bar{v}, \bar{V}$ — швидкість, $\hat{v}, \hat{V}$ — оператор швидкості;

W — імовірність;

x,y,z — декартові координати;

α — кут;

δ — варіація;

ε — відносна діелектрична проникність; ε_0 — електрична стала;

μ — відносна магнітна проникність; μ_0 — магнітна стала;

θ — полярний кут;

λ — довжина хвилі;

ρ — густина (речовини); густина заряду;

φ — азимутальний кут, скалярний потенціал електромагнітного поля, фаза;

ψ, Ψ — хвильова функція;

ω — частота, густина енергії, густина імовірності;

^ — позначення оператора;

˙ — похідна за часом;

$\frac{d}{dt}$ — похідна; $\frac{\partial}{\partial t}$ — частинна похідна;

∇ — оператор набла;

( ) — дужки, скалярний добуток;

[ ] — комутатор, векторний добуток;

{ } — дужка Пуассона;

$\langle\ \rangle$ — середнє значення;

Позначення введені

∞ — нескінченність Дж.Валліс 1655

e — основа ln Л.Уйлер 1736

π — У.Джонс 1706 / Л.Ейлер 1736

i — уявна одиниця Л.Ейлер 1777 (в друці 1794)

$\bar{i}, \bar{j}, \bar{k}$ — орти У.Гамільтон 1853

x, y, z — змінні Р.Декарт 1637

$\bar{r}$ — вектор О.Коші 1853

$+$ $-$ — додати (скласти), відняти Я.Відман 1489

$\times$ — помножити У.Оутред 1631

$\cdot$ — помножити Г.Лейбніц 1698

a^2, a^3, a^n — степені Р.Декарт 1637 / І.Ньютон 1673-83 (в друці 1707)

dx, d^2x, d^3x — диференціал Г.Лейбніц 1675 (в друці 1684)

$\frac{d}{dx}$ — похідна Г.Лейбніц 1675

$f'(x), f''(x), y', f'x$ — похідна Ж.Лагранж 1770, 1779

Δx — різниця, приріст Л.Ейлер 1755

$\frac{\partial}{\partial x}$ — частинна похідна А.Лежандр 1786

$\int ydx$ — Г.Лейбніц 1675 (в друці 1686)

$\int_a^b ydx$ — Ж.Фур'є 1819-1822

$\sum$ — сума Л.Ейлер 1755

$|x|$ — модуль К.Вейєрштрасс 1841

Δ — оператор Лапласа Р.Мерфі 1833

∇ — набла (оператор Гамільтона) У.Гамільтон 1853

$f(x)$ — функція Л.Ейлер 1734

$=$ — дорівнює Р.Рекорд 1557

Предметний покажчик

6 Література.

1. Глауберман А.Ю., Манакін Л.О. Фізика атома та квантова механіка. - К.:Вища шк., 1972. – 292 с.
2. Ахиезер А.И. Атомная физика. - К.:Наукова думка, 1988. – 264 с.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. - М.:Наука, 1983. – 664 с.
4. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. - М.:Наука, 1988. – 328 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.I. Механика. - М.:Наука, 1988. — 216 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.II. Теория поля. - М.:Наука, 1988. — 512 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. - М.:Наука, 1988. — 768 с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.IV. Гидродинамика. - М.:Наука, 1988. – 736 с.
9. Чолаков В. Нобелевские премии. Ученые и открытия. - М.:Мир, 1987. — 368 с.
10. Храмов Ю.А. Биография физики. - К.:Техніка, 1983. — 344 с.
11. Храмов Ю.А. Физики. - М.:Наука, 1983. — 399 с.
12. Боголюбов А.Н. Математики. Механики. - К.:Наукова думка, 1983. — 639 с.

КЛАСИЧНА МЕХАНІКА

частинки

Принцип найменшої дії S—min ($\delta S = 0$), принцип Мопертюї

		по компонентах
Узагальнені координати	q	q_i
Узагальнена швидкість	$\dot{q}$	$\dot{q}_i$
Узагальнене прискорення	$\ddot{q}$	$\ddot{q}_i$
Узагальнений імпульс	$p = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \dfrac{\partial S}{\partial q} = \nabla S$;	$p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \dfrac{\partial S}{\partial q_i}$;
Узагальнена сила	$F = \dfrac{\partial L}{\partial q}$; (сила $F = -\nabla U$);	$F_i = \dfrac{\partial L}{\partial q_i}$
Функція Лагранжа	$L = L(q, \dot{q}, t) = \dfrac{dS}{dt}$;	$L(q_i, \dot{q}_i, t) = \dfrac{1}{2} a_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - U(q, t)$;
Дія	$S = \int L dt$	
Функція Гамільтона	$H = \sum p\dot{q} - L = -\dfrac{\partial S}{\partial t}$;	$H = p_i \dot{q}_i - L$;
Похідна функції за часом	$\dfrac{df}{dt} = \dfrac{\partial f}{\partial t} + \{Hf\}$.	
Дужка Пуассона	$\{Hf\} = \sum \left(\dfrac{\partial H}{\partial p} \dfrac{\partial f}{\partial q} - \dfrac{\partial H}{\partial q} \dfrac{\partial f}{\partial p} \right)$;	$\{Hf\} = \dfrac{\partial H}{\partial p_i} \dfrac{\partial f}{\partial q_i} - \dfrac{\partial H}{\partial q_i} \dfrac{\partial f}{\partial p_i}$.

Закони руху

Закони Ньютона	$ma = F$; $\dfrac{dp}{dt} = F$;	$ma_i = F_i$
Рівняння Лагранжа	$\dfrac{\partial L}{\partial q} - \dfrac{d}{dt} \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$	$\dfrac{\partial L}{\partial q_i} - \dfrac{d}{dt} \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0$
Канонічні рівняння Гамільтона	$\dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p}$; $\dot{p} = \dfrac{\partial H}{\partial q}$;	$\dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}$; $\dot{p}_i = \dfrac{\partial H}{\partial q_i}$;
	$\dot{q} = \{Hq\}$; $\dot{p} = \{Hp\}$	
Рівняння Гамільтона-Якобі	$\dfrac{\partial S}{\partial t} + \dfrac{(\nabla S)^2}{2m} + U = 0$	
Зв'язок швидкість—імпульс	$m\overline{V} = \overline{p}$ $\quad m\overline{V} = \overline{P} - e\overline{A}$	
Рівняння неперервності	$\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \overline{j} = 0$	
Густина потоку	$\overline{j} = \rho \overline{V}$	

Рух вздовж градієнта дії, нормально до поверхні постійної дії.

Принцип Ферма $l_{опт}$ — min

Оператори координат $\hat{r} = \bar{r}$; $\hat{x}_i = x_i$;

$\hat{x} = x$; $\hat{y} = y$; $\hat{z} = z$.

Оператор швидкості $\hat{\bar{V}} = \dfrac{d\bar{r}}{dt}$;

$$\hat{V}_x = \frac{dx}{dt};\ \hat{V}_y = \frac{dy}{dt};\ \hat{V}_z = \frac{dz}{dt}.$$

Оператор прискорення $\hat{a} = \dfrac{d\hat{V}}{dt}$

Оператор імпульсу $\hat{p} = -i\hbar\nabla$;

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x};\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y};\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Оператор сили $\hat{F} = -\nabla U$;

$$\hat{F}_x = -\frac{\partial U}{\partial x};\ \hat{F}_y = -\frac{\partial U}{\partial y};\ \hat{F}_z = -\frac{\partial U}{\partial z}.$$

Дія (для обмеженого руху) квантується.
Квант дії — стала Планка $\hbar$.

Похідна оператора за часом $\dfrac{d\hat{f}}{dt} = \dfrac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \{\hat{H}\hat{f}\}$

Квантова дужка Пуассона $\{\hat{H}\hat{f}\} = \dfrac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{f}] = \dfrac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}\right)$

Рівняння стану (закони руху).

Рівняння Шредінгера $i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ нестаціонарне

$\hat{H}\psi = E\psi$ стаціонарне

Рівняння Ньютона $\dfrac{d\hat{p}}{dt} = \hat{F}$

Квантові рівняння Гамільтона $\dot{\hat{r}} = \{\hat{H}r\}$; $\dot{\hat{p}} = \{\hat{H}\hat{p}\}$.

Зв'язок швидкість—імпульс $m\hat{V} = \hat{p}$, $m\hat{V} = \hat{p} - e\bar{A}$.

Рівняння неперервності $\dfrac{\partial\omega}{\partial t} + \nabla\bar{j} = 0$. $\dfrac{\partial\omega}{\partial t} + \nabla\bar{S} = 0$

Густина потоку імовірності $\bar{j} = \dfrac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)$. $\bar{S} = [\bar{E}\times\bar{H}]$

густина потоку енергії

Рух вздовж оптичного променя, нормально до хвильового фронту.

Навчальне видання

Жмурко О.І.

КЛАСИЧНА ТА КВАНТОВА МЕХАНІКА

Навчальний посібник

Оригінал-макет підготовлено автором

Редактор В.О. Дружиніна

Підписано до друку 12.07.2001р.

Формат 29,7x42¼ Гарнітура Times New Roman

Друк різографічний Ум. друк. арк. 5.73

Тираж 75 прим

Зам. № 2001-149

Віддруковано в комп'ютерному інформаційно-видавничому центрі

Вінницького державного технічного університету

21021, м. Вінниця, Хмельницьке шосе, 95, ВДТУ, ГНК, 9-й поверх

тел. (0432) 44-01-59