מכניקה קוונטית 2 ־ תרגול

מתרגל: עמרי בהט

26 ביוני 2009

מחברת זו נכתבה משמיעה בהרצאות של עמרי בהט. המחברת עלולה להכיל חוסרים וטעויות. **אין הטכניון או מי מטעמו ־ ובפרט, הפקולטה לפיזיקה, על מרציה ומתרגליה, אחראים לתוכנו של מסמך זה.**
הערות והארות, אתם מוזמנים לשלוח ל־ronen@tx.tehcnion.ac.il

תוכן עניינים

1 טרנספורם פורייה

אופרטור התנע ־ $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. מצבים עצמיים של אופרטור התנע, בסימון דיראק ־

$$\hat{p}\left|\psi_p\right\rangle = p\left|\psi_p\right\rangle$$
$$\langle x|\psi_p\rangle = \psi_p(x)$$
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_P(x) = p\psi_p(x)$$

זוהי משוואה דיפרנציאלית שהפתרון שלה הוא

$$\psi_p(x) = e^{-i\frac{px}{\hbar}}$$

אלו הם המצבים העצמיים של H בפוטנציאל חופשי. ואלו הפונקציות העצמיות של אופרטור התנע בהצגת המקום.

$$\tilde{f}(p) = \mathcal{F}\left[f(x)\right] \equiv \int dx e^{-ipx/k} f(x)$$

כלומר, סכום על היטלים של f על כל הגלים המישוריים. יש מצבים שבהם אפשר להחליף את האינטגרל בסכום דיסקרטי.
מה המשמעות של $\tilde{f}(p)$?

- נבנה את הפונקציה $\tilde{f}(p)$ על ידי סכום של גלים מישוריים. בבניה מחדש (או שחזור) של $f(x)$ על ידי גלים מישוריים,

$$f(x) = \int dp e^{ipx/\hbar} \tilde{f}(p)$$

כאשר $\tilde{f}(p)$ הם המקדמים של כל גל מישורי. אם הגלים המישוריים היו יכולים לקבל תנעים רק מתוך קבוצה מסויימת, ניתן היה לרשום

$$= \sum_j e^{ip_j x/\hbar} a_j \tag{1}$$

כדי לבנות פונקציה ספציפית, צריך לבחור קומבינציה לינארית של a_j, שיוצרת את f. משוואה (1) היא טרנספורם פורייה דיסקרטי.

1.1 תרגיל

חלקיק מתואר על ידי פונקצית הגל $\psi(x)$. מה ההסתברות למדוד את החלקיק ב־x_0?
אחרי המדידה, צריכים להמצא במצב עצמי של אופרטור המקום. ההסתברות תינתן על ידי הטלה של המצב ההתחלתי על המצב העצמי שערכו העצמי x_0

$$P = \left|\langle \text{final}|\psi\rangle\right|^2$$

המצב $\langle\text{final}|$ הוא מצב עצמי של האופרטור אותו "מודדים" (מודדים גודל פיזיקלי שאותו האופרטור מתאר). במקרה שלנו, נרצה מצב עצמי של אופרטור המקום סביב x_0.

$$\psi_{final}(x_0) = \delta\left(x - x_0\right)$$

זה הפתרון של משוואת הערכים העצמיים

$$\hat{x}\left|\psi_{x_0}\right\rangle = x_0\left|\psi_{x_0}\right\rangle$$

כלומר,

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{final}|\psi\rangle &= \int \delta(x-x_0)\psi_x dx \\
&= \psi(x_0) \\
P\left(x = x_0\right) &= \left|\psi(x_0)\right|^2
\end{aligned}$$

הדברים הגרועים בתשובה:

- לא בהכרח $1 \geq$

- אין התאמה של יחידות - לפונקציה גל יש יחידות של $\frac{1}{\sqrt{x}}$, ולהסתברות אין יחידות - היחידות בשתי האגפים לא מתאימות
- אין משמעות למדוד חלקיק בנקודה מסויימת
- התייחסנו למצב העצמי של אופרטור המקום כאילו הוא פונקצית גל - והוא לא, $\delta\left(x-x_0\right)$ לא שייכת למרחב של פונקציות הגל הכשרות - האינטגרביליות בריבוע. (L^2)

הערה 1.1 גם המצבים העצמיים של אופרטור התנע, לא שייכים ל-L^2.

הערה 1.2 "הפיזיקה" נמצאת רק בגלים ב-L^2. בדרך משתמשים בגלים מישוריים, דלתאות, וגלים לא פיזיקליים אחרים

1.2 עוד שאלה

מה ההתסברות למדוד תנע ששיך לקטע $\sigma=\left[p_0-\delta,p_0+\delta\right]$?

$$\tilde{\psi}(p)=\int\psi(x)e^{-ipx/k}\mathrm{d}x$$

כאשר $\tilde{\psi}(x)$ הם המקדמים של הגלים המישוריים שמרכיבים את $\psi(x)$.

$$P\left(p\in\sigma\right)=\int_{p_0-\delta}^{p_0+\delta}\frac{dp}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi(x)\mathrm{d}x$$

1.3 התמרת פורייה דו מימדית

$$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}\cdot$$

$$\begin{aligned}&e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\\ &\vec{p}=(p_x,p_y)\\ &\vec{r}=(x,y)\\ \mathcal{F}\left(f(x,y)\right)&=\int e^{-i(p_x x+p_y y)}f(x,y)dxdy\end{aligned}$$

1.4 התפתחון בזמן (במרחב חופשי)

$$\psi(x,0)\to\psi(x,t)$$

אנחנו יודעים לקדם בזמן רק מצבים עצמיים של ההמילטוניאן -

$$\begin{aligned}&H\left|n\right\rangle=E_n\left|n\right\rangle\\ &\left|n(t)\right\rangle=e^{-iHt/\hbar}\left|n\right\rangle=e^{-i\omega_n t}\left|n(0)\right\rangle\end{aligned}$$

גלים מישוריים הם מצבים עצמיים של ההמילטוניאן - נרשום את $\psi(x,0)$ כסכום של גלים מישוריים - טרנספום פוריה

$$\psi(x,0)=\int\frac{dp}{2\pi}\underbrace{e^{-ipx/\hbar}}_{eigentstates\,of\,H}\tilde{\psi}(p)$$
$$\psi(x,t)=\int\frac{dp}{2\pi}e^{-ipx/\hbar}\tilde{\psi}(p)\cdot e^{-i\omega_p t}$$

כאשר $\omega_p=\frac{p^2}{2m\hbar}$. הביטוי הכללי ל־

$$\psi(x,t)=\int\frac{dp}{2\pi}\tilde{\psi}(p)e^{ipx/\hbar-\frac{ip^2}{2m\hbar}t}$$

זהו הקידום בזמן של כל פונקצית גל שנרצה.

2 תרגול שני ־ חסר

3 תרגול שלישי

3.1 מטריצות צפיפות במערת שני גופים

$$\tilde{S}_{1z}=\begin{pmatrix}S_z & \\ & S_z\end{pmatrix}$$
$$\tilde{S}_{2z}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}I_{2\times2} & \\ & I_{2\times2}\end{pmatrix}$$

נקח מצב טהור $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle=\alpha\,|{+}{+}\rangle+\beta\,|{-}{+}\rangle+\gamma\,|{+}{-}\rangle+\delta\,|{-}{-}\rangle$$

אופרטור הצפיפות. במצב טהור, הוא שווה זהותית לאופרטור ההטלה

$$\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|=|\alpha|^2\,|{+}{+}\rangle\langle{+}{+}|+\alpha\beta^\star\,|{+}{+}\rangle\langle{-}{+}|+\dots$$

אם נרצה לכתוב הצגה מטריצית, בבסיס $(--,+-,-+,++)$ אזי

$$\rho_{11}=\langle{+}{+}\,|\,\hat{\rho}\,|\,{+}{+}\rangle=|\alpha|^2$$
$$\rho_{12}=\langle{+}+|\hat{\rho}|-+\rangle=\langle{+}{+}|\dots+\alpha\beta^\star\,|{+}{+}\rangle\langle{-}{+}|+\dots|{-}{+}\rangle=\alpha\beta^\star$$

ולכן מטריצת הצפיפות תהיה

$$\rho=\begin{pmatrix}|\alpha|^2 & \alpha\beta^\star & \alpha\gamma^\star & \alpha\delta^\star\\ & |\beta|^2 & \beta\gamma^\star & \beta\delta^\star\\ & & |\gamma|^2 & \gamma\delta^\star\\ & & & |\delta|^2\end{pmatrix}$$

נחשב

$$\left\langle \tilde{S}_{1z} \right\rangle = \text{trace}\left(\rho \tilde{S}_{1z}\right)$$
$$= \frac{\hbar}{2}\left[\text{trace}\begin{pmatrix} \alpha^2 & & & \\ & \beta^2 & & \\ & & \gamma^2 & \\ & & & \delta^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}\right]$$
$$= \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 - |\beta|^2 + |\gamma|^2 - |\delta|^2\right)$$
$$\left\langle \tilde{S}_{2z} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}\text{trace}\begin{pmatrix} \alpha^2 & & & \\ & \beta^2 & & \\ & & -\gamma^2 & \\ & & & -\delta^2 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - |\gamma|^2 - |\delta|^2\right)$$

3.2 תרגיל

נקח מערכת של שני חלקיקים. מסיבה כלשהי, נתעלם לחלוטין מאחת מדרגות החופש (מאחד מהחלקיקים). נבנה מטריצת צפיפות אפקטיבית שמתארת רק את המצב של החלקיק השני, ולמרות שהתחלנו ממצב טהור, נסיים עם מצב שהוא לא טהור עבור אחד מהחלקיקים. נראה זאת על ידי דוגמה.

יש מערכת של שני חלקיקים הנמצאת במצב טהור. נבנה "מטריצת צפיפות אפקטיבית", שמתארת רק את המצב של החלקיק הראשון, על ידי ,הוצאה מהמשחק" של חלקיק מספר 2. (Trac-Out)

התוצאה: מטריצת הצפיפות האפקטיבית היא של מצב מעורב.

המצב ההתחלתי

$$|\psi\rangle = \alpha\,|{+}{+}\rangle + \beta\,|{-}{-}\rangle$$

$$\hat{\rho}_4 = \left|\alpha^2\right| |{+}{+}\rangle\,\langle{+}{+}| + \alpha\beta^\star\,|{+}{+}\rangle\,\langle{-}{-}| + \alpha^\star\beta\,|{-}{-}\rangle\,\langle{+}{+}| + |\beta|^2\,|{-}{-}\rangle\,\langle{-}{-}|$$

נבנה מטריצת צפיפות אפקטיבית, שתתאר חלקיק מספר אחד (מטריצה ממימד 2):

$$\rho^{(1)}_{eff(2)} = P\,(2:+)\cdot(?) + P\,(2:-)\cdot(?)$$

אלו שני המצבים האפשריים היחידים. כאשר כל אחד מה־(?) הוא מטריצת צפיפות של חלקיק 1.

$$= \sum_j \langle j|\hat{\rho}_4|j\rangle = \text{trace}_\lambda\left(\hat{\rho}_4\right)$$

כאשר הסכימה על על כל המצבים האפשריים של חלקיק 2, והעקבה היא חלקית רק בתת המרחב של חלקיק 2.

במקרה שלנו ־ המצבים האפשריים הם $\langle 2:+|$ או $|2:-\rangle$.

$$\rho^{(1)}_{eff} = \langle 2:+|\rho_4|2:+\rangle + \langle 2:-1|\rho_4|2:-\rangle$$

נסתכל על האיבר של

$$\rho_{4-1,1} = |\alpha|^2\,\langle 2:+|\,(|1:+\rangle\,|2:+\rangle\,\langle 2:+|\,\langle 1:+|)\,|2:+\rangle$$

יש לנו 2 מכפלות שנותנות לנו 1 ־

$$= |\alpha|^2\,|1:+\rangle\,\langle 1:+|$$

$$\rho^{(1)}_{eff} = |\alpha|^2 \left|+\right\rangle \left\langle+\right| + |\beta|^2 \left|-\right\rangle \left\langle-\right|$$

ולכן

$$\rho^{(1)}_{eff} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \\ & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

נשים לב ש־

$$\left[\rho^{(1)}_{eff}\right]^2 \neq \rho^{(1)}_{eff}$$

כלומר ־ זהו מצב מעורב.

למה זה שימושי? כאשר יודעים מצב התחלתי של מערכת מורכבת עם הרבה דרגות חופש ־ הם הרבה פעמים לא רלוונטים. אם נרצה לפתור מצב עם הרבה חלקיקים והרבה דרגות חופש ־ שרק חלקם רלוונטים, נעשה Traced out , ונשאר עם החלקיקים הרלוונטים. את החלקיקים הללו לא נוכל ליצג בתור מצב טהור, ונצרך לייצג אותם בתור מטריצת צפיפות.

3.3 תמונת הייזנברג

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}A_H}{\mathrm{d}t} = [A,H]$$

כאשר ל־A אין תלות מפורשת בזמן, כלומר

$$\frac{\partial H_S}{\partial t} = 0$$

3.3.1 אוסצילטור הרמוני

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{x} &= [x,H] = \left[x,\frac{P^2}{2m}\right] = i\hbar\frac{p}{m} \\ \dot{x} &= \frac{p}{m} \end{aligned}$$

זה ביטוי הדומה למהירות במכניקה ניוטונית. אפשר להסתכל על זה בתור הכללה של משפט ארנפסט (שהיה עבור ערכי תצפית בלבד).

אפשר לחשב את השינוי של p :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{p} &= [P,H] = \left[P,\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right] = -i\hbar m\omega^2 x \\ \dot{p} &= -m\omega^2 k \end{aligned}$$

וקיבלנו את המשוואה הניוטונית עבור תנועה הרמונית.

הפתרון עבור

$$x(t) = \hat{x}\cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t$$

נניח והמערכת במצב

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle = |1\rangle\right)$$

מצב עצמי של אוסצילטור הרמוני.

$$\langle x\rangle(t)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t$$

(מקוונטית 1). נפתור את זה בצורה אחרת:

$$\langle x\rangle(t)=\cos\omega t\left\langle \psi_0|\hat{x}|\psi\right\rangle=\frac{\sin\omega t}{m\omega}\left\langle \psi_0|p|\psi_0\right\rangle$$

$\langle p\rangle=0$ בכל מצב קשור (כל מצה שמוגבל לסביבה במרחב), ואת $\langle x\rangle$ מחשבים באמצעות $a,a^{\dagger}$.

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t$$

4 (תרגול תיקון טעות. התרגול המקורי חסר)

4.1 ניסוי שני סדקים

מקור בנקודה A. נקודה B נמצאת על מסך. כיצד תראה צפיפות ההסתברות על המסך?

עניין שגוי מהותי: בתרגול נאמר שצפיפות ההסתברות ρ היא $|G|^2$, כאשר G הפרופגטור.

משמעות הפרופגטור: G - פונקצית גרין. מתעניינים בהתפתחות בזמן

$$\psi(x,0)\to\psi(x,t)$$

הפרופגטור, G, היא הפונקציה המתקבלת לאחר התפתחות בזמן כאשר המצב ההתחלתי הוא מצב עצמי של $\hat{x}$, כלומר,

$$\psi(x,0)=\delta(x-x_0)$$

(כאשר $\delta\notin L^2$, היא אינה ניתנת לנירמול). G יכולה לספר לנו משהו על פיזיקה של בעיה.

לפי פיינמן, כמו שיריב הוכיח בהרצאה, חלקיק בנקודה x_a מתפשט לנקודה x_b. לפי פיינמן, האמפלידטודה ל-x_b בזמן t_b נתונה על ידי

$$\psi(x_b,t_b)=\int G(x_b,t_b;x,t)\,\psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

כלומר, בהנתן הפרופגטור, ומיקום החלקיק בזמן מסויים, ניתן למצוא את האמפליטודה למיקום החלקיק בכל מקום ובכל זמן.

בגלל שהמרחק של שני הסדקים מהמקור שווים, בזמן מסויים האמפליטודה של החלקיק תהיה להמצא סביב אחד הסדקים. נקבע את הזמן שבו החלקיק עובר דרך אחד הסדקים כ-$t=0$.

- "האמפליטודה" שאנחנו מדברים עליה כרגע היא פונקצית הגל.

ψ_1 מתאר את התהליך מחריץ אחד לנקודה B ו-ψ_2 מתאר את את התהליך מהחריץ השני לנקודה B. אזי

$$\psi_{tot}=\psi_1+\psi_2$$

אזי, האמפליטודה באזור החריצים היא:

$$\psi_{a_1}\sim e^{-\left(x-x_{a_1}\right)^2/\sigma^2}$$
$$\psi_{a_2}\sim e^{-\left(x-x_{a_2}\right)^2/\sigma^2}$$

(הבחירה בגאוסיאן היא שרירותית. ניתן לבחור כל פונקציה אחרת שמרוכזת סביב הנקודות)

נניח הנחה, שאינה נכונה ואינה פיזיקאלית, אבל את האפקט החשוב - אפקט של התאבכות, נקבל. החישוב בגאוסיאינים הוא מסובך. נחליף את הגאוסיאנים בפונקצית דלתא:

$$\psi_{a_1}=\delta(x-x_{a_2})$$
$$\psi_{a_2}=\delta(x-x_{a_2})$$

($x=\vec{x}$, אפשר להכליל את כל הסיפור לעוד מימדים מבחינת נוטציה, $x_b-x_A\to|\vec{x}_b-\vec{x}_a|$)

נכתוב את הפרופגטור עבור חלקיק חופשי $(V=0)$

$$G=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_b-t_a\right)}}e^{\frac{im\left(x_b-x\right)^2}{2\hbar\left(2_b-t_a\right)}}$$

אזי, נסמן $x_b-x_{a_1}=L$, ו־$\Delta\ell$ ההפרש בית $x_b-x_{a_1}$ ל־$x_b-x_{a_2}$

$$\begin{aligned}\psi_1&=\int\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_b-t_a\right)}}\exp\left[\frac{im\left(x_b-x\right)^2}{2\hbar\left(2_b-t_a\right)}\right]\delta\left(x-x_{a_1}\right)\mathrm{d}x_{a_1}\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_b-t_a\right)}}\exp\left[\frac{im\left(x_b-x_a\right)^2}{2\hbar\left(2_b-t_a\right)}\right]\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t_b-t_a\right)}}\exp\left[\frac{im\left(L\right)^2}{2\hbar\left(T\right)}\right]\end{aligned}$$

ו־

$$\psi_2=\sqrt{}e^{\frac{im\left(L^2+2L\Delta\ell\right)}{2\hbar T}}$$

אזי

$$\begin{aligned}\rho&=\left|\psi_{tot}\right|^2=\left|\psi_1\right|^2+\left|\psi_2\right|^2+2\mathrm{Re}\left(\psi_1\psi_2^\star\right)\\&=2\left|\sqrt{}\right|^2+2\left|\sqrt{}\right|^2\cos\left[\frac{mL^2}{2\hbar T}-\frac{m\left(L^2+2L\Delta\ell\right)}{2\hbar T}\right]\\&=2\left|\sqrt{}\right|^2\left[1+\cos\left(\frac{mL\Delta\ell}{\hbar t}\right)\right]\end{aligned}$$

(חישוב קטן בצד $\frac{mL}{T}=p$, ומחולק ב־h זהו אורך גל דה־ברולי)

$$==\left|\sqrt{}\right|^2\cos^2\left(2\pi\frac{\Delta\ell}{2\lambda}\right)$$

כמה הערות

- התאבכות בונה (עוצמה מקסימלית): כאשר $\Delta\ell$ הוא כפולה שלמה של λ.

$$\Delta\ell=n\lambda\quad n\in\mathbb{Z}$$

- בזוויות קטנות, $\Delta\ell=d\sin\theta\sim\frac{\mathrm{d}x}{L}$. קיבלנו ש־

$$\rho\propto\cos^2\left(\#\cdot x\right)$$

(עבור # מקדם כלשהו). ביטוי זה אינו ניתן לנירמול:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\rho\mathrm{d}x\to\infty$$

זה לא מפתיע: כי התחלנו עם פונקצית דלתא שאינה ניתנת לנירמול. הפרופגציה היא אוניטרית, ולכן היא אינה משנה את הנורמה. אם היינו עושים את החשבון עם גאוסיאנים, לא היתה לנו את הבעיה הזו.

- למרות שהשתמשנו בפעולה "לא חוקית", קיבלנו את האפקט המרכזי שחיפשנו.

- הביטוי $\left|\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(T)}}\right|^2$ מכיל את התלות בזמן. את הביטוי הזה שכחנו בשבוע שעבר.

5 הפיצול העל־דק

Hyper fine splitting

בצורה קלאסית, גוף טעון עם תנע זוויתי, יוצר שדה מגנטי. לפרוטון באטום מימן, יש ספין ומטען.
לכן, הגרעין באטום המימן משפיע על אלקרונים גם באמצעות שדה מגנטי שהוא יוצר.
נסתכל על הגרעין כעל לולאת זרם עם מומנט מגנטי $\vec{\mu}_P$. על האלקטרון ניתן לחשוב גם כן כעל לולאת זרם, עם מומנט מגנטי $\vec{M}_e$. לכן, תהיה אינטראקציה מגנטית בין האלקטרון לפרוטון.
עבור שדה מגנטי $\vec{B}$ על האלקטרון, אנרגית האינטראקציה הקלאסית תהיה,

$$U = -\vec{M}_e \cdot \vec{B}$$

מומנט הדיפול של לולאת זרם קלאסית עם זרם I בשטח A, אז $\vec{\mu} = I \cdot A \cdot \hat{n}$.[1]
נגדיר את ההמילטוניאן של האינטראקציה,

$$\mathcal{H}_{int} == \gamma\left(r\right)\vec{S} \cdot \vec{I}$$

עבור מקדם כלשהו γ, כאשר I הוא אופרטור הספין של הפרוטון.
השאלה: איך $\mathcal{H}_{int}$ משנה את הספקטרום? נבצע את החישוב רק על מצבי S, כלומר, $\ell = 0$ ונקבל

$$\Delta E_{n,0,0}^{(1)} = \langle\psi|\mathcal{H}_{int}|\psi\rangle$$

5.1 החישוב המדויק

המומנט המגנטי של הפרוטון

$$\vec{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p c} \cdot \hat{I}$$

כאשר g_p הוא הפקטור הגירומגנטי, שנמצא מתוך ניסוי. עבור אלקטרון, והפרוטון,

$$g_e = 2.001$$
$$g_p = 5.56$$

כשנכתבה משוואת דיראק, חישבו את $g_e^{dirac} = 2.0$, ועבור פרוטון, $g_p^{dirac} = 2.0$. עבור האלקטרון, המשוואה מתאימה, ועבור הפרוטון, ממש לא.
כשכתבו את משוואת דיראק, הניחו שגם האלקטרון וגם הפרוטון הם חלקיקים נקודתיים. ההנחה הזו מתאימה עבור אלקטרון אבל לא מתאימה עבור פרוטון. זו היתה האינדיקציה הראשונה לכך שהאלקטרון אינו חלקיק יסודי.

נחשב את השדה המגנטי שיוצר הפרוטון הפוטנציאל המגנטי של דיפול:

$$\vec{A}\left(r\right) = \frac{1}{4\pi r^3}\vec{\mu} \times \vec{r} = \frac{1}{4\pi}\vec{\mu} \times \nabla\left(\frac{1}{r}\right)$$

נחליף את הסדר של המכפלה, ונקבל מינוס. את ההחלפה ניתן לעשות כי μ אינו תלוי בקוארדינטה, כי למומנט המגנטי של חלקיק שנובע מספין, אין תלות מרחבית. הספין אינו "חי" במרחב האמיתי, ולכן אין תלות כזו.

$$= \frac{1}{4\pi}\left(\vec{\nabla} \times \mu\right)\frac{1}{r}$$

[1] אסף נוי שאל את השאלה שהובילה לתשובה הזו

$$
\begin{aligned}
\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}&=\frac{1}{4\pi}\left(\nabla\times\nabla\times\vec{\mu}\right)\frac{1}{r}=\\
&=\frac{1}{4\pi}\left[\mathrm{grad}\left(\mathrm{div}\vec{\mu}\right)-\nabla^{2}\vec{\mu}\right]\frac{1}{r}\\
&=\frac{1}{4\pi}\left[\mathrm{grad}\left(\mathrm{div}\vec{\mu}\right)-\vec{\mu}\underbrace{\left(\nabla^{2}\frac{1}{r}\right)}_{-4\pi\delta(\vec{r})}\right]
\end{aligned}
$$

הערה 5.1 נציג סימון: במקום $\vec{A}=C\vec{B}$ נוכח לכתוב $A_x=CB_x$ או $i=1,2,3$ $\quad A_i=CB_i$. מכפלה סקאלרית בנוטציה הזו נרשום $\vec{A}\vec{B}=\sum_i A_iB_i$.

$$
B_i=\frac{1}{4\pi}\left[4\pi\delta\left(r\right)\mu_i+\partial_i\left(\partial_j\mu_j\right)\frac{1}{r}\right]
$$

כאשר על $\left(\partial_j\mu_j\right)$ יש סכימה לפי הסכם הסכימה של אינשטין.

אזי

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_{int}&=-\vec{M}\cdot\vec{B}=-M_iB_i\\
&=-\frac{1}{4\pi}\left[4\pi\delta\left(r\right)\mu_iM_i+\partial_i\partial_j\mu_jM_i\frac{1}{r}\right]\\
&=-\delta\left(r\right)\overbrace{M_i\mu_i}^{\vec{M}\cdot\vec{\mu}}-\frac{1}{4\pi}M_i\mu_i\left(\partial_i\partial_j\frac{1}{r}\right)
\end{aligned}
$$

נחשב אלמנט מטריצה של מצב היסוד כאשר לוקחים בחשבון את הספינים של האלקטרון. עבור מצב היסוד, $\ell=0,m=0,n=1$, המצב המרחבי

$$
|g\rangle=\overbrace{|1,0,0\rangle}^{space-part}\otimes\overbrace{|i,m_I\rangle}^{proton}\otimes\overbrace{|s,m_s\rangle}^{electorn}
$$

כאשר $i\left(i+1\right)$ הוע ע"ע של I^2 ו־m_I הוא ערך עצמי של I_z.

ראשית, נוציא מהמשחק את דרגות החופש המרחביות, ואז נטפל בדרגות החופש הספיניות.

$$
\langle n,0,0|H_{int}|n,0,0\rangle=\int\mathrm{d}^3r\left|\phi_{n00}\left(r\right)\right|^2\left(-\delta\left(r\right)M_i\mu_i\right)+\int\mathrm{d}^3r\left|\phi_{n00}\right|^2\left(-M_i\mu_j\left[\partial_i\partial_j\frac{1}{2}\right]\right)
$$

האינטגרל הראשון הוא פשוט אינטגרל על פונקצית δ. השני יתר בעייתי...

$$
\int\mathrm{d}^3r\left|\phi\left(r\right)\right|^2\partial_i\partial_j\frac{1}{r}
$$

כאשר ל־$\phi\left(r\right)$ יש סימטריה ספרית, כמו גם ל־$\frac{1}{r}$, אבל ל־ $\partial_i\partial_j$ אין סימטריה ספרית. אינטגרל על אופרטור אי־זוגי, כפול פונקציה זוגית על תחום סימטרי, מתאפס.

$$
\int\mathrm{d}^2r\partial_x\frac{1}{r}=0
$$

והאינטגרל שלנו הוא בדיוק אותו דבר, בעוד מימד.. ולכן האינטגרל שלנו מתאפס. יש מקרים שבהם הוא אינו מתאפס, והם המקרים האלכסוניים ־ $i=j$ ולכן,

$$
\int\mathrm{d}^3r\left|\phi\left(r\right)\right|^2\partial_i\partial_j\frac{1}{r}\propto\delta_{ij}
$$

כאשר $i=j$, אז $\partial_i\partial_j=\partial_j^2$. $\nabla^2=\partial_{xx}+\partial_{yy}+\partial_{zz}$. בגלל שכל הכיוונים שווים, $\partial_{xx}=\frac{1}{3}\nabla^2$.
כלומר,

$$\int \mathrm{d}^3r\,|\phi(r)|^2\,\partial_i\partial_j\frac{1}{r}=\delta_{ij}\int|\phi|^2\,\frac{1}{3}\underbrace{\nabla^2\frac{1}{4}}_{-4\pi\delta}$$

ולכן,

$$\begin{aligned}\langle n,0,0|H_{int}|n,0,0\rangle&=-M_i\mu_i\int|\phi|^2\,\delta(r)\,\mathrm{d}^3r+M_i\mu_j\delta_{ij}\int\frac{1}{3}|\phi|^2\,\delta(r)\\&=M_i\mu_i\,|\phi_{n00}(0)|^2\left(-1+\frac{1}{3}\right)=-\frac{2}{3}\end{aligned}$$

כדי לקבל את

$$\Delta E_{n,0,0}\propto-\frac{2}{3}\,|\phi(0)|^2\,\langle i,m_i|\,\langle s,m_s|\,\vec{I}\cdot\vec{S}\,|s,m_s\rangle\,|i,m_i\rangle$$

כאשר את אלמנט המטריצה הזה יריב חישב ההרצאה (וחישבנו גם בשיעורי הבית).
נגדיר תנע זוויתו כולל

$$\vec{F}=\vec{I}+\vec{S}$$

אזי

$$\begin{aligned}\vec{F}^2&=\vec{I}^2+\vec{S}^2+2\vec{S}\cdot\vec{I}\\\Longrightarrow\vec{S}\cdot\vec{I}&=\frac{1}{2}\left(f^2-I^2-S^2\right)\end{aligned}$$

אזי הערכים האפשריים ל-$\vec{S}\vec{I}$ הם,

$$\left\langle F^2-I^2-S^2\right\rangle=f(f+1)-i(i+1)-s(s+1)$$

כדי למצוא את ההפרשים באנרגיה, לא באמת צריכים לעבור בסיס. הם הסכומים האפשריים של הערכים העצמיים האפשריים של i,s,f (כאשר $f=0,1$) ולכן

$$\langle SI\rangle=\begin{cases}\frac{1}{4} & f=1\\-\frac{3}{4} & f=0\end{cases}$$

6 אפקט זימן

איך משתנה הספקטרום בגלל שדה מגנטי חיצוני?

6.1 אפקט זימן הנורמלי

(ללא התיחסות לספין)

$$H_0=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}$$

המצבים העצמיים ש להמילטוניאן:

$$|n,\ell,m\rangle$$

ו־

$$E_{n,\ell,m} = \frac{E_0}{n^2}$$

יש ניוון גדול: רמות האנרגיה לא תלויות ב־ℓ, m. זו תוצעה של סימטריה גבוהה של ההמילטוניאן H_0.
עבור כל n, ניוו של $\sum_\ell (2\ell+1)$ מצבים. כאשר נוסיף שדה מגנטי, חלק מהניוון יוסר.
המילטוניאן האינטראקציה של המימן עם שדה מגנטי:

$$H_{int} = \gamma \vec{B} \cdot \vec{L}$$

עבור $B = B_0 \hat{z}$,

$$= \underbrace{\gamma B_0}_{\omega_L} \hat{L}_z$$

נחשב את המילטוניאן האינטראקציה באמצעות תורת ההפרעות המנוונת: צריך לכתוב את H_{int} בכל תת מרחב מנוון של H_0 , עבור n־נתון, וללכסן. כך נקבל את התיקונים לאנרגיה.

$$\langle n, \ell, m \,|\, H_{int} \,|\, n, \ell', m' \rangle \propto \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}$$

בבסיס הזה, L_z הוא מלוכסן,

$$\hbar m' \langle n, \ell, m | n, \ell', m' \rangle$$

כלומר, בגלל שההפרעה שלנו אלכסונית, לא צריך ללכסן. מספיק לחשב את אלמנטי המטריצה האלכסונית. אפשר להשתמש בתורה לא־מנוונת.

$$[H_{int}, H_0] = 0$$

$$\Delta E_{n,l,m} = \hbar \omega_L m$$

6.2 אפקט זימן האנומלי (קירוב שדה חזק[2])

נסתכל על הרמה $n = 2$. המצב הזה מנוון הרבה פעמים:

$$\ell = 1, m = \pm 1, 0$$
$$\ell = 0, m = 0$$

עם שדה מגנטי $B \neq 0$, יהיו לנו שלושה מצבים:

$$m = 1, m = -1$$

ופעמיים, $m = 0$. בלי השדה המגנטי היה לנו מעבר אחד (ל־$n = 1$) אבל בשדה, נראה פוטונים בשלושה תדירויות שונות, שעוברים מ־$n = 2$ ל־$n = 1$.
באפקט זימן האנומלי, לוקחים בחשבון ספין:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + A\vec{L} \cdot \vec{S} + Bp^4$$

כאשר A הוא מקדם קבוע לצימוד, התיקון $\vec{L} \cdot \vec{S}$ הוא תיקון הנובע מצימוד ספין־מסלול, והתיקון של Bp^4 , הוא תיקון יחסותי, הוא מאותו סדר גודל, ולכן צריך לקחת גם אותו בחשבון.

[2] זה שדה של הכח החזק, או שדה בעוצמה גבוהה של הכח האלקטרומגנטי?

המצבים שלנו, שבהם H_0 מלכוסן, הם $|n,\ell,s,j,m_j\rangle$.

$$H_{int}=\gamma\vec{B}\cdot\left(\vec{L}+\underbrace{\mathbf{2}}_{g_e}\vec{S}\right)$$

כאשר g_e מגיע ממשוואות דיראק. תהיה אנרגיה אופינית E_{LS}, ואנרגיה נוספת שתהיה קשורה לשדה E_B. אם נניח שדה מגנטי חזר, נקבל ש־$E_B \gg E_{LS}$.

לכן, בשדה חזק, אפשר להזניח את $L\cdot S$ ואת p^2. לכן, נקבל

$$\tilde{H}_0=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}$$

ו־$\left[\tilde{H}_0,H_{int}\right]=0$, לכן החישוב של אלמנטי המטריצה הוא פשוט למדי.

$$\langle n,\ell,s,m_\ell,m_s|L_z+2S_z|n,\ell,s,m_\ell,m_s\rangle=\hbar m_\ell+2\hbar m_s$$

אז התקיקון הוא

$$\Delta E=\hbar\omega\left(m\ell+2m_s\right)$$

6.3 בשדה חלש

$E_B \ll E_{L\cdot S}$. אזי נכניס את E_{LS} ל־H_0, ו־E_B יהיה ההפרעה.

$$[H_0,H_{int}]\neq 0$$

מאחר ו־ $\left[\vec{L}\cdot\vec{S},J_z+S_Z\right]\neq 0$. לכן, חייבים לעבוד בתורה מנוונת.

$$H_{int}=\omega_L\left(J_z+S_z\right)$$

(נזניח את הפקטור הג'ירומגנטי) ההפרעה היא

$$L_z+gS_z$$

אם $g=1$, $L_z+S_z=J_z$. אבל עבור $g=2$, $L_z+2S_z=J_z+S_Z$.

$$\langle n,\ell,s,j,m_j|J_z+S_z|n,\ell,s,j,m_j\rangle=m_j\hbar+\langle j,m_j|s_z|j,m_j\rangle$$

נראה ש־ $\langle j,m_j|s_Z|j,m_j\rangle\propto\delta_{m_jm_{j'}}$ (תרגיל בית) בגלל שההפרעה אלכסונית בתת המרחב המנוון, אפשר בכל זאת להשתמש בתורה לא־מנוונת.

נדגים על מצב מסויים: $j=\frac{3}{2},m_j=-\frac{1}{2}$:

$$\left\langle\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\middle|S_z\middle|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

נעבור בסיס:

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,0\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}\left|1,-1\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

אז אלמנטי המטריצה יהיו

$$\left\langle\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\middle|S_z\middle|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{2}{3}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)+\frac{1}{3}\cdot\frac{\hbar}{2}$$

לכן,

$$\Delta E_{n,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\hbar\omega\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{6}\right)=-\frac{2}{3}\hbar\omega$$

7 חלקיק קוונטי בשדה מגנטי

בשדה מגנטי

$$B = \begin{cases} B_0 & r < a \\ 0 & r > 0 \end{cases}$$

במרחק גדול מהשדה, $R \gg a$, מסתובב חלקיק שמאולץ לנוע על טבעת. מסת החלקיק m.
נראה שהשתף המגנטי דרך הסליל שבמרכז המערכת $(r < a)$ בכל זאת משפיע על גדלים פיזיקליים, למרות שהחלקיק בעצמו אינו מרגיש שדה מגנטי.

נמצא את $\vec{A}$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0 \implies \vec{A} = \nabla \Lambda$$

יש לנו חופש כיול בבחירה של $\vec{A}$. נעבוד בכיול קולון (כיול קרינה)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

מהמשוואות הללו, נקבל כי

$$\nabla^2 \Lambda = 0$$

במקום לפתור משוואה וקטורית, אנחנו פותרים משוואה סקאלרית מסדר שני.
נרשום את המשוואה בקואורדינטות גליליות:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \Lambda}{\partial r}\right) + \frac{1}{z^2}\left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta^2}\right) + \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial z^2} = 0$$

הפתרון

$$\Lambda = c \cdot \theta$$

פותר את המשוואה. אזי,

$$\vec{A} = \nabla \Lambda = C\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}(\theta)\hat{\theta} = \frac{c\hat{\theta}}{r}$$

אנחנו נדרשים לקבוע את הקבוע C: נרצה להביע את הקבוע באמצעות הפרמטר הפיזיקלי ־ השטף דרך הטבעת/דרך הסליל.

$$\int \vec{A} \cdot \mathrm{d}\vec{\ell} = \iint \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right) \mathrm{d}\vec{s} = \Phi$$

נשים לב שהמשוואה $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0$ נכונה רק עבור $r \gg a$, לעומת זאת, באינטגרל המסלולי שלנו, מדובר על כל התחום **בתוך** הטבעת, ולכן האינטגרל הכולל אינו אפס, כי אם השתף, Φ. נחשב את האינטרגל על $\vec{A}\mathrm{d}\ell$, על המסלול הטבעתי ברדיוס R.

$$\mathrm{d}\vec{\ell} = R \cdot \mathrm{d}\theta\hat{\theta}$$

אז האינטגרל,

$$\Phi = \int A\mathrm{d}\ell = \int_0^{2\pi}\left(\frac{c}{R}\hat{\theta}\right)R\mathrm{d}\theta\hat{\theta} = 2\pi c$$

ולכן,

$$C = \frac{\Phi}{2\pi}$$

בסופו שלדבר, מצאנו ש־

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}\hat{\theta}$$

איך Φ משפיע על L_z? בגלל שהטבעת במישור $x-y$, $L_y = L_x = 0$, הם אינם גדלים רלוונטים לבעיה. ממכניקה אנליטית, נזכר שבנוכחות שדה מגנטי,

$$\vec{p} \to \underbrace{\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}}_{\vec{p}_{mec}}$$

כאשר $\vec{p}$ מקיים $[p,x] = i\hbar$ ואילו $\vec{p}_{mec} = mv$. אי,

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}_{mec} = \vec{r} \times \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{r} \times \vec{A}$$

נחשב את רכיב $\hat{z}$ של התנע הזוויתי:

$$L_z = \underbrace{(\vec{r} \times \vec{p})_z}_{-\frac{i\hbar\partial}{\partial\theta}} - \underbrace{\frac{q}{c} r\hat{r} \times \frac{\Phi}{2\pi} \cdot \hat{\theta}}_{\frac{q\Phi}{2\pi c}}$$

מצאנו את האופרטור החדש של התנע הזוויתי, ועכשיו..

נמצא את הערכים העצמיים של L_z נפתור את המשוואה הדיפרנציאלית

$$L_z\psi = \lambda\psi$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{q\Phi}{2\pi c}\right)\psi(\theta) = \lambda\psi(\theta)$$

שפתרונה ,

$$\psi(\theta) = e^{im\theta}$$

בגלל שהפונקציה צריכה לקיים תנאי שפה מחזוריים, m הוא שלם. אזי הפונקציות העצמיות אינן משתנות. נציב את הפונקציות העצמיות לתוך המשוואה, ונמצא את הערכים העצמיים:

$$\lambda = m\hbar - \frac{q\Phi}{2\pi c} = \hbar\left(m - \frac{q\Phi}{hc}\right)$$

עבור אלקטרון, $q = e$, ואז מגדירים $\phi_0 = \frac{hc}{e}$, גודל המכונה Magnetic flux quanta.

איך ישתנו רמות האנרגיה?

$$H = \frac{L_z^2}{2I}$$

כאשר $\frac{L^2}{2I}$ היא האנרגיה קינטית של גוף מסתובב, ולענייננו, רק בכיוון z. עבור חלקיק נקודתי ברדיוס R, $I = mR^2$ לכן

$$E_m = \left[\hbar\left(m - \frac{q\Phi}{hc}\right)\right]^2 \frac{1}{2I} = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(m - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2$$

$E_n \propto \Phi^2$, לכן, לכל m , קיימת פרבולה שהמינימה שלה הוא ב־$(m,0)$.

- עבור $\frac{\Phi}{\Phi_0} = 0$, מצב היסוד מתאים ל־$m = 0$.
- עבור $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{3}{4}$, מצב יסדור מתאים ל־$m = 1$ (והאנרגיה שלו אינה אפס)
- מה קורה עבור $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{2}$? יושבים על נקודת החיתוך בין שתי פרבולות. אז יש שני מצבים, $m = 0, m = 1$, ולכן, לכאורה, יש ניוון של האנרגיה.

הערה 7.1 למשפט (7.5) מקוונטית 1: **ללא נוכחות שדה מגנטי**, כל המצבים הקשורים יכולים לבהחר כפונקציה ממשית.

זרם בנוכחות שדה מגנטי

$$I = \frac{q}{T}, T = \frac{2\pi R}{\langle v \rangle}$$

ולכן,

$$I = \frac{q \langle v \rangle}{2\pi R}$$
$$\langle L_z \rangle = m \langle v \rangle R \implies I = \frac{q \langle L_z \rangle}{2\pi m R^2}$$

במצב היסוד, עבור $\left|\frac{\Phi}{\Phi_0}\right| < \frac{1}{2}$ ($n = 0$)

$$\boxed{I = \frac{q}{2\pi m R^2} \frac{\hbar \Phi}{\Phi_0}}$$

כלומר, במצב היסוד, יש זרם קבוע בזמן, שמושפע מהשדה המגנטי!

מקרה אמיתי יותר אנחנו תיארנו את האלקטרונים בתוך הטבעת כחלקיקים חופשיים. דה־פקטו, אלקטרון בתוך מתכת לא זז כל כך חלק.

נסתכל על השפעת פוטנציאל "מפריע" על הספקטרום.

נסתכל על איזור החיתוך בין הפרבולה של $n = 1$ ל־$n = 0$, באזור $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{2}$. יש שני מצבים מנוונים:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$
$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\theta}$$

אזי מטריצת ההפרעה תהיה

$$H_{in} = \begin{pmatrix} \langle 0|V|0\rangle & \langle 0|V|1\rangle \\ \langle 1|V|0\rangle & \langle 1|V|1\rangle \end{pmatrix}$$

איננו יודעים דבר על הפוטנציאל V, אז אנחנו לא יודעים לחשב א תכל אלמנטי המטריצה אבל

$$\langle 0|V|1\rangle = \langle 1|V|1\rangle$$

כי המצבים שונים רק עד כדי פאזה. אזי

$$H_{int} = \begin{pmatrix} A & C \\ C^\star & A \end{pmatrix}$$

ולכן

$$\lambda_\pm = A \pm |C|$$

האנרגיה של מצב אחד עלתה, ושל השני ירדה. לכן, יהיו טווחי אנרגיה בהם, ללא תלות בשתף, לא תמצא המערכת.

8 תורת ההפרעות תלויה הזמן

בזמן $t = 0$, המערכת נמצאת במצב $|i\rangle$ של המילטוניאן H_0.

נשאל שתי שאלות:

1. מהי ההסתברות למצוא את המערכת במצב $|f\rangle$ בזמן t כלשהו, מאוחר יותר.

2. מהי ההסתברות שהמערכת ביצעה מעבר למצב $\left|f\right\rangle$ עד לזמן t?

היום נתעסק בשאלה השניה.

לפני שתחיל לפתור בעיה קונקרטית נרשום ביטוי לאמפליטודה למצוא את המערכת במצב $\left|f\right\rangle$, עד זמן t:

$$\boxed{c_f\left(t\right)=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\left\langle f|V|i\right\rangle \mathrm{d}te^{-i\left(E_f-E_i\right)t'/\hbar}} \qquad (\star)$$

8.1 מלכודת אופטית לאטומים קרים

הקיטוב של אטום הוא $\vec{p}_{at}=\alpha\cdot\vec{E}$. באופן קלאסי,

$$U\sim-\vec{p}_{at}\cdot\vec{E}\sim-\alpha E^2\sim-\alpha I$$

כאשר I היא עוצת האור, וה-$\vec{E}$ הוא של האור.

כאשר פותרים בעיה קוונטית, מדברים על המילטוניאן אינטראקציה,

$$h_{int}\sim-\alpha I\left(x,y,z\right)$$

(עבור לייזר משתנה במרחב).

בגלל הצורה המרחבית של הליזר, זה ישמש כמו בור פוטנציאל.

העוצה של הלייזר במישור הניצב לכיוון ההתקדמות היא גאוסיאן סביב מרכז האלומה, לכן הפוטנציאל, $V\left(x\right)$ יהיה גאוסיאן־הפוך (בור פוטנציאל) (כי $V=-\alpha I$)

ניתן לקרב את הפוטנציאל, שנראה כמו גאוסיאן, לאוסצילטור הרמוני. הקרוב הזה טוב עבור רמות האנרגיה הנמוכות.

נשנה את הרוחב, σ, של הלייזר. אז מקבלים

$$v\simeq\frac{1}{2}m\omega^2\left(t\right)x^2$$

נרשום את

$$\omega\left(t\right)=\omega_0+\delta\omega\left(t\right)=\omega_0+\delta\omega\cos\Omega t$$

כאשר $\delta\omega\ll\omega_0$

שאלה: מה הסתברות המעבר מרמת היסוד לרמות גבוהות יותר?

ראשית, נרשום את המילטוניאן ההפרעה:

$$v_q\left(t\right)=-\vec{\rho}\cdot\vec{E}\left(t\right)=0$$

מאחר ואטומים הם נייטרלים.

אזי הפוטנציאל שלנו יהיה

$$v_{at}\left(t\right)\sim\frac{1}{2}m\omega^2\left(t\right)x^2\sim\frac{1}{2}m\left(\omega_0^2+2\omega_0\delta\omega\cos\Omega t\right)x^2$$

לאחר הזנחת ערכים מסדר גודל של $\delta\omega^2$ אזי

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2$$
$$v'\left(t\right)=m\omega_0\delta\omega\cos\Omega t$$

אם המצב ההתחלתי הוא מצב היסוד, אז נחשב את אלמנט המטריצה עבור $(\star)$

$$\left\langle f|v\left(t\right)|i\right\rangle \sim\left\langle f|x^2|0\right\rangle \cos\omega t$$

עבור $f>2$, נקבל שאלמנט המטריצה מתאפס, ו־$\left\langle 0|x^2|0\right\rangle$ גם לא ממש מעניין. אזי $\left\langle 2|x^2|0\right\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega_0}}$ ו־

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

- בדו מימד, צריך להיות $E_n = \hbar\omega\left(n_x+n_y+1\right)$.

נותר לנו לחשב את האינטגרל ב־ $(\star)$

$$\begin{aligned} c_{f=2}(t) &= \frac{\delta\omega}{\sqrt{2}i}\int_0^t \mathrm{d}t'\, e^{2i\omega_0 t'}\cos\omega t'\,\mathrm{d}t \\ &= \frac{\delta\omega}{2\sqrt{2}i}\left[e^{i\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)t}\frac{\sin t\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)}{\omega_0-\Omega/2}+(\Omega\to-\Omega)\right] \end{aligned}$$

קיבלנו אמפליטודה שתלויה בזמן.

היא תלויה בפרמטר Ω, זהו הקצב בו משנים את רחוב העדשה)

נחשב את ההסתברות: $P_{f=2}(t)$, נקבל שלושה איברים. האיבר הראשון, יהיה

$$\frac{\delta\omega^2}{8}\frac{\sin^2\left[t\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)\right]}{\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)^2}$$

כפונקציה של Ω, האיבר נראה כמו $sinc$ סביב $2\omega_0$. כאשר $\Omega=2\omega_0$, הסתברות המעבר תהיה מקסימלית. לכן, האיבר הראשון תורם בעיקר כאשר $\Omega\sim 2\omega_0$.

יהיה לנו איבר זהה לגמרי, עד כדי $-\Omega$, שמרוכז סביב $\Omega=-2\omega_0$ ואיבר שלישי, שיראה כמו

$$\cos\Omega t\frac{\sin\left[\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)t\right]\sin\left[\left(\omega_0+\frac{\Omega}{2}\right)t\right]}{\left(\omega_0-\frac{\Omega}{2}\right)\left(\omega_0+\frac{\Omega}{2}\right)}$$

יש לנו מכפלה שי איבר שמרוכז סביב $2\omega_0$ באיבר שמרוכז סביב $-2\omega_0$. לכן, האיבר הזה לא ממש תורם בסביבות ה"פיקים".

לסיכום, אם עובדים סביב $\Omega\approx 2\omega_0$, רק האיבר הראשון תורם באופן משמעותי.

8.2 סיפור נחמד

בעיית פיזור במימד אחד: מדרגת פוטנציאל אינסופית, עם חלקיק שמגיע מ־$-\infty$. מדרגת הפוטנציאל היא בגובה V_0 ולחלקיק יהיה אנרגיה E.

כאשר $E<V_0$, הסתברות החזרה תהיה 1.

אם חוזרים על אותו תרגיל עם חלקיקים יחסותיים (עם ספין $\frac{1}{2}$) לדוגמה, אלקטרונים, אז המשוואה שמתארת את הדינמיקה של החלקיקים אינה משוואת שרדינגר, כי אם משוואת דיראק. ברגע שחוזרים על אותו תרגיל בדיוק (אפילו עבור $V_0=\infty$) מקבלים שהסתברות ההחזרה שונה מ־1 והסתברות המעבר שונה מ־0 .

תוצאה שהיא עוד יותר מפתיעה, מתקבלת כאשר החלקיקים חסרי מסה: עבור פרמיונים חסרי מסה, נקבל שהסתברות המעבר שווה ל־1.

זוהי בעיית Klein tunneling. (אותו קליין עם הבקבוק)

9 כללי ברירה למעברים אטומיים

לתוך מיכל עם גז דליל (למשל, מימן) מכניסים אור לבן.

האור נפלט לכל הכיוונים, משום שלפיזור של האור מתוך הגז אין כיוון מועדף. את האור העבירו דרך מנסרה, וכל אורך גל יצא מזווית אחרת.

על מסח שמעבר למנסרה, ניתן לראות שכל אורך גל נקלט בנקודה אחרת על המסך.

כשעושים את הניסוי יש רצף דיסקרטי של קווי פליטה. העוצמה של כל אחד מהקווים הספקטרליים היתה שונה.

ננסה להסביר מדוע קווים ספקרליים מסויימים חזקים יותר מאחרים.

קצב המעברים,

$$T_{|i\rangle\to|f\rangle}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle f\left|\hat{V}\left(t\right)\right|i\right\rangle\right|^{2}\rho\left(E\right)$$

נתעניין מתי אלמנט המטריצה $\langle i|V|f\rangle$ מתאפס. כיוון שאז קצב המעברים (עוצמת הקו הספקטרלי) קטן (מאוד).
שולחים גל עם וקטור $\hat{k}=\frac{2\pi}{\lambda}\hat{y}$. $\lambda\sim1\mu$.
גל מישורי שמתקדם בכיוון y , הקיטוב (הכיוון של השדה החשמלי) ניצב לכיוון ההתקדמות, כלומר, על מישור $x-y$.

$$\vec{A}=\vec{A}e^{i(ky-\omega t)}$$

על ידי בחירת כיול, $\phi=0$, נקבל

$$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}\sim\vec{k}\times\vec{A}$$
$$\vec{E}=-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\sim-i\omega\vec{A}$$

נכתוב את ההמילטוניאן ונראה איזה איבר בהפרעה שלנו הכי חשוב.

$$H=\frac{\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^{2}}{2a}+\underbrace{V\left(r\right)}_{\text{Columb potential}}+\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}$$

$$=\frac{p^{2}}{2m}+V\left(r\right)-\frac{2}{2m}\left(\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p}+\cancel{q^{2}A^{2}}\right)+\gamma S\cdot B$$

האיבר q^2A^2 הוא מאוד מאוד קטן ומאוד מאוד קשה לראות אותו ניסונית.

$$\vec{A}=\vec{A}\left(r\right)$$

אבל הסקלה שעליו A משתנה היא $\lambda\sim\mu$, והסקלת האורך האטומית היא a_0 ו־$a_0\ll\lambda$. לכן, הנגזרות של a לפי הקוארדינטה מאוד מאוד קטנות, ו־p,A מתחלפים.

$$H_{0}=\frac{p^{2}}{2m}+V\left(r\right)$$
$$H=H_{0}+W_{pA}+W_{SB}$$

נשאל את עצמנו איזה איבר הוא הגורם הדומיננטי למעברים בין הרמות?
נבצע הערכה כללית של האנרגיה שאופיינית לשני האופרטורים הללו.

$$\frac{W_{SB}}{W_{pA}}\sim\frac{\frac{q}{m}\hbar kA_{0}}{\frac{q}{m}\frac{\hbar}{a_{0}}A_{0}}=\frac{a_{0}}{\lambda}\ll1$$

סדר הגודל של תנע בתוך אטום הוא $\frac{\hbar}{a_0}$ שיקול אפשרי הוא אי־ודאות.
לכן, האיבר הדומיננטי שישרה מעברים אטומיים הוא W_{pA}. נסתכל מתי האיבר הזה לא משרה מעברים: לכן אמרנו שהמעברים החלשים לא יהיו לגמרי אפס, כי האיבר הנוסף יכול ליצור תיקונים מסדרים גבוהים יותר.

$$\psi_{n,l,m}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{n\ell}\left(x\right)Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)\overbrace{|\xi\rangle}^{\text{spin}}$$

אז אנחנו מתעניינים ב־

$$\left\langle n\ell m|\vec{p}\cdot\vec{A}|n\ell m\right\rangle\overset{?}{=}0$$

הערה 9.1 יריב הראה לנו בהרצאה שהאופרטורים $\vec{p}\cdot\vec{A}$ ו־$\vec{r}\cdot\vec{E}$, שקולים עד כדי טרנספורמציית כיול (עד כדי קבועים). האופרטור $\vec{p}\cdot\vec{A}$ לא אינווריניטי לכיול, ואילו $\vec{r}\cdot\vec{E}$, כן. אם נחשב את אלמנטי המטריצה בלי לעשות טרנספורמצית כיול מתאימה לפונקצית הגל, כדי לבטל את התלות של האופרטור.
אם נחשב את אלמנטי המטריצה עם $\vec{r}\cdot\vec{E}$. לכן, תמיד כדאי להשתמש באופרטור הזה.

$$E\left(r\right)\sim E_{0}e^{iky}\cong E_{0}\left(1+iky+\ldots\right)$$

נקח רק את הסדר המוביל של האופרטור, $\vec{E}$, והקירוב נקרא קירוב הדיפול החשמלי.
אזי

$$\vec{r}\cdot\vec{E}_{0}=\left[E_{x}\underbrace{\sin\theta\cos\varphi}_{\hat{x}}+E_{y}\underbrace{\sin\theta\sin\varphi}_{\hat{y}}+E_{z}\underbrace{\cos\theta}_{\hat{z}}\right]r$$

נשים לב שביטוי הזה הוא, עד כדי קבועים, קומבינציה לינארית של Y_{lm}ים, ולכן

$$=r\left[\left(E_{x}-iE_{y}\right)Y_{1,-1}+\left(-E_{x}+iE_{y}\right)y_{11}+y_{10}E_{z}\right]$$

נחשב את אלמנטי המטריצה:

נתחיל עם גל מקוטב ב־$\hat{z}$:

$$E_{x},E_{y}=0$$

$$\left\langle \vec{r}\vec{E}\right\rangle =\int R_{nl}^{\star}R_{n'l'}r^{3}\mathrm{d}r\int\mathrm{d}\Omega y_{\ell'm'}^{\star}y_{10}y_{\ell m}$$

החלק הרדיאלי לא מאפס את האינטגרל אף פעם. ($E_{x},E_{y}=0$), ולכן לא צריך את הצירופים בינהם..) יש נוסחא כללית לחשב ביטוי כזה, ומתקבל

$$\sim\left[A\delta_{\ell',\ell+1}+B\delta_{\ell',\ell-1}\right]\delta_{m',m}$$

מ־$\delta_{m',m}$, לכן $\boxed{\Delta m=0}$ $=m'-m$. נסתכל על שתי הדלתאות אחרות: $\boxed{\Delta\ell=\pm1}$
כלומר, אלקטרון שנמצא ב־$|n=2,\ell=0,m=0\rangle$, **לא יכול לרדת**, לרמת היסוד $|1,0,0\rangle$ כי $\Delta\ell\neq0$.
למעשה, המעבר היחיד שמותר מ־$n=2$ ל־$n=1$ הוא מ־$|2,1,0\rangle$!

גל מקוטב ב־X

$$\int\mathrm{d}\Omega y_{\ell'm'}\left(y_{1,-1}-y_{1,1}\right)y_{\ell m}\sim\left[A\delta_{\ell',\ell+1}+B\delta_{\ell',\ell-1}\right]\delta_{m',m\pm1}$$

לכן, $\Delta m=\pm1$ ו־$\Delta\ell=\pm1$. הקיטוב קובע איזה מעברים מותרים ואיזה אסורים.
המעברים הללו אסורים אך ורק בקירוב דיפול!

10 תורת הפיזור ־ קירוב בורן

חתך הפעולה הדיפרנציילי, $\sigma\left(\theta,\varphi\right)$, אפשר לסמן גם ב־$\mathrm{d}\sigma\left(\theta,\varphi\right)$ (חתך הפעולה הכולל הוא פשוט σ)
$\sigma\left(\theta,\varphi\right)$ הוא מספר החלקיקים שהתפזרו לזווית $\mathrm{d}\Omega$ ליחידת זמן, חלקי שטף החלקיקים הנכנס.
חתך הפעולה הכולל,

$$\sigma_{tot}=\int\sigma\left(\theta,\varphi\right)\mathrm{d}\Omega$$

אם יש לנו פוטנציאל מפזר, אנחנו מתעניינים בפונקציית הגל רחוק מהמטרה. אם לפוטנציאל יש אורך אופייני a, אנחנו מתעניינים ב־$r\gg a$. כלומר, בצורה האסימפטוטית של פונקציית הגל.

$$\psi(x) = e^{i\vec{p}\vec{r}} + f(\theta,\varphi)\cdot\frac{e^{ikr}}{r}$$

כאשר $f(\theta,\varphi)$ היא אמפליטודת הפיזור.

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$$

אפשר לקבל משוואה אינטגרלית שנותנת ממש את הביטוי ל־ψ, ומשם אפשר לחשב את f.

$$\psi(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + A\int \underbrace{\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}}_{\text{green function for free schredinger eq}} \cdot V(r')\cdot\psi(r')\,\mathrm{d}^3r'$$

כלומר, עוברים על כל הנקודות של הפוטנציאל המפזר, וכופל את כל הנקודות בפונקציית הגרין ובפוטנציאל. זהו ביטוי לפונקצית הגל.

המשוואה הזו לא ממש עוברת. זוהי משוואה סתומה לא כל כך פתירה..

נבצע את קירוב בורן. אנחנו יודעים ש־$r' \ll r$, כי $a \gg r$ ו־r' חסום על ידי a. זה יפשט את הביטוי אבל עדין ישאיר את ψ בשני האגפים:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \simeq \frac{1}{r}$$

במונה נצרך להיות יותר עדינים, כי שינויים בפאזה הם רגישים יותר, ולכן,

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = r - \vec{r}'\cdot\hat{r}$$

לכן, נקבל,

$$\psi(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + A\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{i\vec{q}\cdot\hat{r}'}V(r')\,\psi(r')\,\mathrm{d}^3r$$

כאשר $\vec{q} = \vec{k}_i - k_f\hat{r}$.

קירוב בורן: נניח שעיקר החלקיקים לא מתפזרים: הם מתפזרים במסלול המקורי: הגל המישורי שמכניסים למערכת. לכן, פונקציית הגל מסדר אפס היא

$$\psi^0 = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

פונקציית הגל המתוקנת, מסדר ראשון, תהיה

$$\psi^{(1)} = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \int e^{i\vec{q}\vec{r}}V(r)\overbrace{\psi^0}^{e^{i\vec{k}\vec{r}}}$$

($\psi^{(n)}$ היא הפונקציה המתוקנת מסדר n, ולא רק ה"תיקון") אחר כך, מציבים איטרטיבית.

לכן,

$$\boxed{f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(r)\,\mathrm{d}^3r}$$

זו בסך הכל התמרת פורייה תלת מימדית של הפוטנציאל!

דרך אחרת להסתכל עליו: אלמנט המטריצה $\langle k_i|V|k_f\rangle$.

10.1 תרגיל

גוף המורכב מ־3 כדורים בניצב לציר z . שלושת מרכזי הפיזור מופרדים במרחק D אחד מהשני.
הפוטנציאל המתאים לכל אחד ממרכזי הפיזור הוא

$$u(r) = gr^2 e^{-\alpha r^2}$$

זה דומה למולקולה עם שלושה אטומים זהים. נרצה לראות איך נראה חתך הפעולה.

- נראה שאמפליטודת הפיזור ניתנת לכתיבה כאמפליטודה של מפזר יחיד כפול איבר התאבכות האמפלטודה,

$$f(\theta,\varphi) = \mathcal{F}(V(r)) = \mathcal{F}\left[u\left(\vec{r}-\vec{D}\right) + u(\vec{r}) + u\left(\vec{r}+\vec{D}\right)\right]$$

נשתמש ב־

$$\mathcal{F}\left(u\left(\vec{r}-\vec{D}\right)\right) = e^{i\vec{q}\vec{D}}\mathcal{F}[u(\vec{r})]$$

לכן,

$$f(\theta,\varphi) = \left(e^{i\vec{q}\vec{D}} + 1 + e^{-i\vec{q}\vec{D}}\right)\mathcal{F}[u(r)]$$

$\mathcal{F}[u(r)]$ הוא מפזר יחיד ו־$\left(e^{i\vec{q}\vec{D}} + 1 + e^{-i\vec{q}\vec{D}}\right)$ הוא איבר ההתאבכות.
ו־

$$\left(e^{i\vec{q}\vec{D}} + 1 + e^{-i\vec{q}\vec{D}}\right) = \frac{\sin\left(\frac{3}{2}\vec{q}\vec{D}\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\vec{q}\vec{D}\right)}$$

- נחשב את אמפליטודת הפיזור של מפזר יחיד, $\mathcal{F}[u(r)]$

$$f(\theta,\varphi) \propto \int r^2 e^{-\alpha r^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \mathrm{d}^3 r$$

נשים לב ש־$\vec{q}\cdot\vec{r} \neq qr$, $\vec{q}\cdot\vec{r} = qr\cos\theta$.

$$= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r^2} r^2 \mathrm{d}r \int_0^\pi \sin\theta \mathrm{d}\theta\, e^{iqr\cos\theta}$$

נחליף משתנים: $\cos\theta = x$ ו־$\sin\theta\mathrm{d}\theta = -\mathrm{d}x$ ולכן, מהאינטגרציה הזוויתית, נקבל

$$\frac{\sin qr}{iqr}$$

והאינטגרל הכולל יהיה

$$= \int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r^2} r^{\cancel{2}} \mathrm{d}r \left(\frac{\sin(qr)}{iq\cancel{r}}\right)$$

נשים לב שהפיתוח עד כה נכון לכל פוטנציאל רדיאלי. **תמיד**, האינטגרל יהיה $\int V r \mathrm{d}r \left(\frac{\sin qr}{iq}\right)$. במקום r^2,
נגזור את $e^{-\alpha r^2}$ לפי α.

$$\propto \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r\, \sin(qr)\, \mathrm{d}r$$

הפונקציה היא פונקציה זוגית, ולכן ניתן להחליף את האינטגרציה ל־$\int_{-\infty}^{\infty}$ ולהוסיף פקטור $\frac{1}{2}$. $e^{-iqr} =$ $i\left(\cos qr - i\sin qr\right)$, נוכל להחליף את הקוסינוס ב־e^{-iqr} , בגלל שהאינטגרל על ה־$\cos$ יתאפס, ולכן,

$$\propto \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha r^2} r e^{-iqr}$$

נחזור על הטריק ונחליף את ה־r הבודד ב ־ $i\frac{\partial}{\partial q}$, ונקבל,

$$\propto \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)\left(i\frac{\partial}{\partial q}\right)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha r^2 - iqr}\mathrm{d}r$$

והאינטגרל הוא התמרת פורייה חד מימדית של גאוסיאן, שהולכת כמו $\sqrt{\frac{\pi}{2}}e^{-\frac{q^2}{4\alpha}}$
ולאחר שגוזרים ומכניסים את הקבועים, מקבלים,

$$= -\frac{3gm\sqrt{\pi}}{2\hbar^2}\alpha^{-\frac{5}{\alpha}}\left(1 - \frac{q^2}{6\alpha}\right)$$

($\vec{q} = \vec{p_i} - \vec{p_f}$ ולכן הוא כולל את הזוויות θ, φ, עבור פיזור אלסטי, $|p_i| = |p_f|$, נקבל $q^2 = 4\left|p\right|^2 \sin^2\frac{\theta}{2}$.)
עבור זוויות מסויימות, הביטוי יתאפס. כאשר $q^2 = 6\alpha$, $\sigma\left(\theta\right) = 0$.
זה דבר מאוד בולט בפלט פיזור: נראה שבזוויות מסויימות, לא נקבל חלקיקים כלל.
כשמסתכלים על חתף פעולה כללית, יש אפסים שנובעים בגלל אמפלטודה של מפזה יחיד ואפסים שנובעים מאיבר ההתאבכות.

- מהו התנאי לאפסים בגלל איבר ההתאבכות?

כאשר המונה של הביטוי $\frac{\sin\left(\frac{3}{2}\vec{q}\vec{D}\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\vec{q}\vec{D}\right)}$ מתאפס, והמכנה לא. כלומר, כאשר

$$\frac{3}{2}\vec{q}\vec{D} = n\pi \wedge \neg\left[\frac{1}{2}\vec{q}\vec{D} = n\pi\right]$$

כאשר המכנה מתאפס, גם המונה מתאפס, ולכן הגבול שלהם הוא סופי. כאשר המכנה מתאפס, נקבל מקסימה של חתך העולה.
המקסימות יתקבלו כאשר

$$\frac{1}{2}\vec{q}\cdot\vec{D} = n\pi$$

נקבל מספר חסום של מקסימות, בגלל ש־ $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \leq 1$