

פיסיקה קוונטית 2

מרצה: יריב כפרי

28 בספטמבר 2009

מחברת זו נכתבה משמיעה בהרצאות של פרופ' יריב כפרי. 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

2	חזרה קצרה	1
3	1.0.1 האלגוריתם בפעולה	
5	מטריצת צפיפות	2
7	2.1 האלגוריתם בפעולה - דינמיקה	
8	2.2 התמונה של הייזנברג	
9	2.2.1 כאשר H תלוי בזמן	
9	אינטגרלי מסלול	3
9	3.0.2 למה?	
10	3.0.3 כדי למצוא את $U(x, t, x', t')$ נבצע את הפעולות הבאות:	
10	3.0.4 למה זה עובד?	
12	3.1 חישוב אינטגרל מסלול עבור חלקיק חופשי	
13	3.1.1 בחירת הקבוע A	
14	3.1.2 דרך פשוטה להבנת מסלול קלאסי	
14	3.2 זהות למשוואות שרדינגר	
15	4 סימטריות ותנע זוויתי	
15	4.1 תזכורת קלאסית	
16	4.2 הזזות במכניקה קוונטית	
17	4.2.1 דרך ראשונה	
17	4.2.2 דרך שניה - טרנספורמציה פסיבית	
17	4.2.3 אופרטור ההזזות	
18	4.2.4 סימטריה להזזות	
20	4.2.5 הזזות סופיות	
21	4.3 סימטריות להזזות בזמן	
22	4.4 סיבובים ותנע זוויתי	
22	4.4.1 הזזות כהקדמה	
23	4.4.2 סיבובים	
24	4.4.3 תזכורת על סיבובים (בשלושה מימדים)	
25	4.4.4 בניית אופרטור סיבוב	
27	4.4.5 המשמעות הפיזיקאלית	
29	4.4.6 הערות כלליות	
30	4.5 חיבור תנע זוויתי	
30	4.5.1 דוגמאת חימום - חיבור שני ספינים, ללא דרגות חופש אורביטליות.	
34	4.6 חיבור תנע זוויתי כללי	
34	4.6.1 אפשרות ראשונה:	
34	4.6.2 אפשרות שניה לבסיס:	
35	4.6.3 בניית מקדמי קלבש-ג'ורדן	

36	תכונות של מקדמי קלבש-ג'ורדן	4.6.4	
37	הפיצול הדק של אטום המימן	4.7	
38	נחשב את התיקון היחסותי, H_1	4.7.1	
39	נחשב את תיקון ספין מסילה, H_2	4.7.2	
40	סיכום התוצאות:	4.7.3	
41	תנועה של חלקיק טעון בשדה מגנטי	5	
41	חזרה על דינמיקה קלאסית	5.1	
42	הבעיה הקוואנטית	5.2	
43	פתרון משוואת שרדינגר בשדה מגנטי קבוע	5.3	
47	אפקט אהרונוב-בוהם	5.4	
49	פתרון באמצעות אינטגרלי מסלול	5.4.1	
50	ניסויי התאבכות איבוד קוהרנטיות (dephasing)	5.4.2	
51	בעיות תלויות בזמן	6	
51	פתרונות מדויקים - תהודה פרהמגנטית	6.1	
52	ספין בשדה מגנטי קבוע	6.1.1	
52	תהודה פרהמגנטית, שדה מגנטי משתנה בזמן	6.1.2	
54	שיטות קירוב	6.2	
54	קירוב (הפרעה) פיתאומית	6.3	
54	קירוב אדיאבטי	6.4	
55	כמה איטי צריך להיות?	6.4.1	
56	תורת הפרעות	6.5	
56	תזכורת: תורת הפרעות לא תלויה הזמן	6.5.1	
57	בעיות תלויות בזמן	6.5.2	
58	מקרה פשוט: $d_n(0) = \delta_{ni}$	6.5.3	
59	הפרעה מחזורית	6.5.4	
61	סדרים גבוהים	6.5.5	
65	אינטראקציה של אטום עם קרינה אלקטרומגנטית	6.5.6	
71	כללי ברירה, בקירוב הדיפול	6.5.7	
72	פיזור אלסטי	7	
72	פיזור ממדרגת פוטנציאל במימד אחד	7.1	
77	פיזור בשלושה מימדים	7.2	
79	קירוב בורן (בלתי תלוי בזמן)	7.3	
83	קירוב בורן	7.3.1	
83	דוגמה: פיזור מפוטנציאל יוקווה	7.3.2	
84	מתי קירוב בורן תקף?	7.3.3	
84	קירוב בורן מסדרים גבוהים	7.4	
86	חלקיקים זהים	8	
88	ומה עם כל היקום?	8.0.1	
89	צורת רישום קומפקטית לפונקציות גל אנטי-סימטריות	8.0.2	
89	מערכת של שני אלקטרונים	8.1	
90	הקירוב הסמי-קלאסי	9	
91	פיתוח פורמלי	9.1	
92	מתי הקירוב תקף?	9.1.1	
92	אפליקציות של הקירוב הסמי-קלאסי	9.2	
92	מנהור	9.2.1	
93	מצבים קשורים	9.2.2	
94	חלקיקים זהים ואינטגרלי מסלול	10	

1 חזרה קצרה¹

טבלת השוואה בין מכניקה קוונטית לקלאסית - בדרגת חופש אחת

קוונטית	קלאסית	
$ \psi(t)\rangle$ וקטור במרחב הילברט,	מצב של חלקיק בזמן נתון t על ידי שני משתנים - $x(t), p(t)$. עבור חלקיק אחד, נקודה במרחב דו מימדי	1
המשתנים x, p , שאינם תלויים קלאסית, מיוצגים על ידי אופרטורים הרמיטיים בעלי אלמנטי מטריצה בבסיס x -מלוכסן, שנתונים על ידי $\langle x X x' \rangle = x \delta(x - x')$, $\langle x P x' \rangle = -\hbar \delta'(x - x')$. האופרטור $\omega(x, p)$ מיוצג על ידי האופרטור הרמיטי $\Omega(X, P) = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$	כל משתנה דינמי, ω , הוא פונקציה של x, p ($\omega(x, p)$)	2
אם החלקיק במצב ψ , מדידה של Ω תיתן אחד מהערכים העצמיים של Ω, ω , עם הסתברות $P(\omega) \propto \langle \omega \psi \rangle ^2$. מצב המערכת משתנה מ- $ \psi\rangle \rightarrow \omega\rangle$	אם חלקיק במצב המתואר על ידי x, p , מדידה של ω תתן $\omega(x, p)$ והמצב של המערכת נשאר זהה.	3
ההתפתחות בזמן של $\psi(t)$ נתונה על ידי משוואת שרדינגר. $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t)\rangle = H \psi(t)\rangle$, $H(X, P) = \mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$,	המשתנים x, p משתנים בזמן על פי משוואות המילטון - $\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}$, $\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$	4

הערה 1.1 קלאסית - יש לנו שתי דגות חופש שמתארות את המערכת

- קוונטית - כללית, יש אינסוף דרגות חופש

1.0.1 האלגוריתם בפעולה

נניח חלקיק במצב $|\psi\rangle$, רוצים תוצאות עבור גודל דינמי - Ω .

1. מצא את הבסיס האורתונורמלי של Ω , $|\omega_i\rangle$ (בעל ערכים עצמיים ω_i)

2. פתחו

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle \langle \omega_i | \psi \rangle \quad (1.1)$$

3. ההסתברות לתוצאה ω

$$P(\omega) \propto |\langle \omega | \psi \rangle|^2 \quad (1.2)$$

או על ידי אופרטור ההיטל -

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\omega &= |\omega\rangle \langle \omega| \\ P(\omega) &\propto |\langle \omega | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \omega \rangle \langle \omega | \psi \rangle = \langle \psi | P_\omega | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbb{P}_\omega | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{P}_\omega \mathbb{P}_\omega | \psi \rangle = \langle \mathbb{P}_\omega \psi | \mathbb{P}_\omega \psi \rangle \end{aligned}$$

תוצאות

1. התאוריה נותנת הסתברויות.

2. הערכים האפשריים היחידים הם ערכים עצמיים של ω (הרמיטי וממשי)

3. $P(\omega_i) \propto |\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$, כלומר - צריך לנרמל:

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2}{\sum_j |\langle \omega_j | \psi \rangle|^2} = \frac{|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.3)$$

כלומר, הבחירה $|\psi'\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle^{1/2}}$, אז

$$P(\omega_i) = |\langle\omega_i|\psi'\rangle|^2 \quad (1.4)$$

• **שימו לב** - נוחות, ולא מגבלה פיזיקלית. (הוקטור הפיזיקלי לא חייב להיות מנורמל, זה פשוט עוזר לנו לחשב...)

- $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$ מנורמלים. הקומבינציה השרירותית $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ אינה מנורמלת.
 - ההסתברות שמתקבלת מ- $|\psi\rangle$ ו- $\alpha|\psi\rangle$, זהות. מצב פיזיקלי מוגד על ידי "כיוון" במרחב הילברט (קרן, Ray). אפילו תחת $\langle\psi|\psi\rangle$, קיים חופש של $e^{i\theta}|\psi\rangle$ (פאזה)
 - במידה ורוצים אינפורמציה על משתנה דינמי אחר, Λ , חוזרים על תהליך (ערכים עצמיים - λ) ו-

$$P(\lambda) \propto |\langle\lambda|\psi\rangle|^2$$

$$\langle\lambda|\psi\rangle = \sum_j \langle\lambda_i|\omega_j\rangle \langle\omega_j|\psi\rangle$$

זה מתקבל על ידי לכסון Λ בעל אלמנטי מטריצה -

$$\Lambda_{ij} = \langle\omega_i|\lambda|\omega_j\rangle \quad (1.5)$$

לפעמים האלגוריתם $\Omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ לא מוגדר טוב.

1. למשל, עבור $\omega = xp$, האם זה הולך ל- XP או ל- PX ? במקרה זה - הרמיטיות דורשת

$$\Omega = \frac{1}{2}(XP + PX) \quad (1.6)$$

אבל $\omega = X^2P$ אינו מוגדר היטב. (יש מגוון בחירות הרמיטיות, ובודקים אותם מול ניסויים)

2. Ω מנוון -

$$P(\omega) = |\langle\omega, 1|\psi\rangle|^2 + \underbrace{|\langle\omega, 2|\psi\rangle|^2}_{\text{degeneration}} \quad (1.7)$$

3. ל- Ω ספקטרום רציף -

$$|\psi\rangle = \int |\omega\rangle \langle\omega|\psi\rangle d\omega \quad (1.8)$$

$\psi(\omega)$ אמפליטודת צפיפות ההסתברות. $|\langle\omega|\psi\rangle|^2$ - ההסתברות למצוא בין $\omega \rightarrow \omega + d\omega$

$$\int P(\omega) d\omega = \int |\langle\omega|\psi\rangle|^2 d\omega = \int \langle\psi|\omega\rangle \langle\omega|\psi\rangle d\omega$$

$$= \langle\psi|I|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

יש מקרים $\langle\psi|\psi\rangle = \delta(0) = \langle x|p\rangle = e^{ipx}$, פירוש משקל יחסי בין נקודות שונות ($x \rightarrow x' + dx, x' \rightarrow x' + dx$)

הערה 1.2 האופרטור x חייבים להיות מטריצות אינסופיות

$$\text{tr}[x, p] = \text{tr}(xp - px) = \text{tr}(xp) - \text{tr}(xp) = 0 \quad (1.9)$$

, הדרך היחידה שבה זה לא יכול להיות אפס, הוא במטריצות אינסופיות.

2 מטריצת צפיפות

הסתברות ← מדברת על צבר של מערכות (N מערכות זהות). עד כה, לכל המערכות יש אותו $|\psi\rangle$. בדרך כלל, N מערכות זהות מתחלפות ב- n_i מערכות כשכל אחת במצב $|\psi_i\rangle$ מסוים (לא אורתוגונליים!) דרך נוחה לתאר את האינפורמציה נקראת "מטריצת צפיפות" (אופרטור)

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_i \frac{n_i}{N} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \\ &\equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|\end{aligned}$$

כאשר $\{|\psi_i\rangle\}$ לא אורתוגונליים, אבל מנורמלים. עד כה, כל ה- p_i חוץ מ- i מסוים, מקיימים $p_i = 0$. מקרה זה נקרא "מצב טהור" (pure state). בצורה כללית, יש מצב מעורב (mixed state) נסתכל על ממוצע של Ω - זהו ממוצע קוונטי בנוסף למומצא על מערכות שונות, $\langle \Omega \rangle$ (כאשר ה- \cdot ממצע על מערכות שונות וה- $\langle \cdot \rangle$ הוא ממוצע קוונטי).

$$\begin{aligned}\overline{\langle \Omega \rangle} &= \sum_i p_i \langle \psi_i | \Omega | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i p_i \langle \psi_i | \overbrace{\sum_m^I |m\rangle \langle m|}^{\Omega} \sum_n |n\rangle \langle n| \psi \rangle \\ &= \sum_{i,m,n} p_i \underbrace{\langle \psi_i | m \rangle \langle n | \psi_i \rangle}_{\text{Orthonormal set}} \langle m | \Omega | n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle n | \rho | m \rangle \langle m | \Omega | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \rho \Omega | n \rangle = \text{trace}(\rho \Omega)\end{aligned}$$

כלומר,

$$\boxed{\overline{\langle \Omega \rangle} = \text{trace}(\rho \Omega)} \quad (2.1)$$

בצורה כללית, $\rho(t)$ (פונקציה של הזמן).

$$\rho(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| \quad (2.2)$$

כאשר ה- $\{|\psi_i\rangle\}$ השונים לא "מתערבבים" - כי מדובר בניסיונות שונים.

הערה 2.1 המטריצה ρ היא מטריצה במרחב הילברט שמתאר את "הבעיה".

תכונות

1. ברור כי רק במצב טהור, $\rho^2 = \rho$

$$\rho^2 = \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) \quad (2.3)$$

עבור מצב טהור הם מנורמלים, ולכן ה- $\langle \psi_i | \psi_i \rangle$ שבאמצע שווה ל-1, ומקבלים $\rho^2 = \rho$

2. נרמול:

$$\begin{aligned} \text{trace}(\rho) = 1 &= \sum_n \langle n | \rho | n \rangle = \sum_{i,n} p_i m \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\ &= \sum_{n,i} p_i |\langle n | \psi_i \rangle|^2 = \sum_i p_i = 1 \end{aligned}$$

3. הרמיטיות -

$$\begin{aligned} \langle m | \rho | n \rangle &= \sum_i p_i \langle m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\ \langle m | \rho | m \rangle^* &= \sum_i p_i \langle n | \psi_i \rangle^* \langle \psi_i | m \rangle^* \end{aligned}$$

4. חיוביות: לכל $|\Phi\rangle$ מתקיים-

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \rho | \Phi \rangle &= \sum_i p_i \langle \Phi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \Phi \rangle \\ &= \sum_i p_i |\langle \Phi | \psi_i \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

5. התקדמות בזמן - $i\hbar \partial_t |\psi_i\rangle = H |\psi_i\rangle$,

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t &= i\hbar \sum_i p_i \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_i(t)\rangle \right) \langle \psi_i(t) | + |\psi_i(t)\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_i(t) | \right) \right] \\ &= \sum_i p_i [H |\psi_i\rangle \langle \psi_i | - |\psi_i\rangle \langle \psi_i | H] \end{aligned}$$

וקיבלנו -

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = - [\rho, H]} \quad (2.4)$$

(זה מאוד דומה למשפט ליוביל עבור מערכות קלאסית, זה האקוויולנט הקוונטי שלו)

הערה 2.2 אם ρ פונקציה של ההמילטוניאן, מטריצת הצפיפות לא מתפתחת הזמן.

מטריצת צפיפות היא אינפורמציה סטטיסטית על צבר מערכות.

דוגמה 1.2 במצב טהור, נניח שרוצים הסתברות לערך עצמי ω , של אופרטור Ω , $\langle P(\omega) \rangle$, במצב טהור -

$$P(\omega) = |\langle \omega | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \omega \rangle \langle \omega | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{P}_\omega | \psi \rangle = \langle \mathbb{P}_\omega \rangle \quad (2.5)$$

בצורה כללית, עבור צבר של מערכות, רוצים הסתברות ל- ω מסוים -

$$\langle P(\omega) \rangle = \text{trace}(\rho \mathbb{P}(\omega)) \quad (2.6)$$

הרחבה להרבה זרקות חופש² עד כה, דנו בדרגת חופש אחת. ניתן לדבר, למשל, על קואורדינטות קרטזיות, x_1, \dots, x_n , המתאימים ל- n אופרטורים, X_1, \dots, X_n , ובסיס $|x_1, \dots, x_n\rangle$ והבסיס מנורמל על ידי

$$\langle x'_1, \dots, x'_n | x_1, \dots, x_n \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \cdots \delta(x_n - x'_n) \quad (2.7)$$

2.1 האלגוריתם בפעולה - דינמיקה

נניח בהתחלה, H בלתי תלוי בזמן. משוואת שרדינגר, נתונה על ידי

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (2.8)$$

איך $|\psi\rangle$ מתקדם בזמן? איזה אופרטור $U(t)$ מקדם את $|\psi\rangle$ בזמן (פרופגטור, Propagator). משוואת שרדינגר היא משוואה מסדר ראשון בזמן, ולכן מספיק תנאי שפה אחד, $|\psi(t=0)\rangle$. נניח שפתרנו את הבעיה $H|E\rangle = E|E\rangle$ (מצאנו את הערכים העצמיים של H , עבור משוואת שרדינגר הלא-תלויה בזמן - לכסנו את ההמילטוניאן), אזי

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum |E\rangle \langle E | \psi(t)\rangle \\ &= \sum a_E(t) |E\rangle \end{aligned}$$

נפעיל על המשוואה את $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H$ ונקבל

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\psi\rangle &= 0 \\ &= \sum (i\hbar \dot{a}_E - E a_E) |E\rangle \end{aligned}$$

נפתור את המשוואה ונקבל

$$i\hbar \dot{a}_E = E a_E$$

$$\boxed{a_E(t) = a_E(0) e^{-iEt/\hbar}} \quad (2.9)$$

או:

$$\begin{aligned} \langle E | \psi(t)\rangle &= \langle E | \psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} \\ |\psi(t)\rangle &= \sum |E\rangle \langle E | \psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} \\ U(t) &= \sum |E\rangle \langle E | e^{-iEt/\hbar} \end{aligned}$$

כך ש-

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle} \quad (2.10)$$

זהירות

- במקרה ויש ניוון בספקטרום:

$$U(t) = \sum_{\alpha} \sum_E |E, \alpha\rangle \langle E, \alpha | e^{-iEt/\hbar} \quad (2.11)$$

- במידה והספקטרום רציף, צריך אינטגרלים.

הגדרה 2.3 מצבים $|E(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$ נקראים **מצבים סטציונריים**. הפאזה שלהם מתפתחת בזמן, אבל

$$P(\omega, t) = |\langle \omega | \psi(t)\rangle|^2 \quad (2.12)$$

ועבור מצב סטציונרי

$$\begin{aligned} &= |\langle \omega | E(t)\rangle|^2 = \left| \langle \omega | E\rangle e^{-iEt/\hbar} \right|^2 \\ &= |\langle \omega | E\rangle|^2 = P(\omega, t=0) \end{aligned}$$

כלומר, עבור מצב סטציונרי, ערך התצפית אינו מתפתח בזמן.

אפשר לרשום את $U(t)$ בצורה

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (2.13)$$

התנאי לרישום זה הוא הטור של האופרטור מתכנס.

H הרמיטי $\Leftarrow U$ אוניטרי. אופרטור אוניטרי שומר על גודל של וקטור -

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

התקדמות בזמן היא סיבוב וקטור במרחב הילברט. ניתן לחשוב על סיבוב כל הוקטורים במרחב הילברט.

$$|v\rangle \rightarrow U|v\rangle \quad (2.14)$$

אז אחרי הסיבוב, אלמנט המטריצה של אופרטור כללי, Ω יהיה:

$$\langle v' | \Omega | v \rangle \rightarrow \langle Uv' | \Omega | Uv \rangle = \langle v' | U^\dagger \Omega U | v \rangle \quad (2.15)$$

ברור שסיבוב כל הוקטורים נותן אותה תוצאה כמו השארת הוקטורים במקום, ושינוי האופרטורים.

$$\Omega \rightarrow U^\dagger \Omega U \quad (2.16)$$

• טרנספורמציה אקטיבית משנה את הוקטורים, והאופרטורים נשארים זהים.

• טרנספורמציה פסיבית משנה את האופרטורים ומשאירה וקטורים זהים.

עד עכשיו, דיברנו בעיקר על טרנספורמציות אקטיביות - משוואת שרדינגר. אפשר לנסח את התורה על ידי טרנספורמציות פסיביות, זהו הניסוח של היזנברג. נגזור את ההצגה של היזנברג.

2.2 התמונה של היזנברג

משוואת שרדינגר:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (2.17)$$

וכמו שראינו, את הפתרון ניתן לרשום בצורה

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{iHt/\hbar} \quad (2.18)$$

נניח אופרטור B , לא תלוי בזמן.

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_t &= \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle \\ &= \left\langle \psi(0) \left| e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \right| \psi(0) \right\rangle \\ &= \langle \psi(0) | B(t) | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

ועברנו להצגה של היזנברג, אופרטור $B(t)$ המתפתח בזמן. כלומר, לפי ההגדרה של היזנברג

$$\begin{aligned} B(t) &= e^{iHt/\hbar} B_{sch} e^{-iHt/\hbar} \\ \frac{d}{dt} B(t) &= \frac{i}{\hbar} H e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{-iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} H \\ &= \frac{i}{\hbar} [HB(t) - B(t)H] \\ &= \frac{i}{\hbar} [H, B(t)] \end{aligned}$$

וקיבלנו

$$\boxed{\frac{d}{dt}B(t) = \frac{i}{\hbar} [H, B(t)]} \quad (2.19)$$

2.2.1 כאשר H תלוי בזמן

עבור $H = H(t)$, עם תלות מפורשת בזמן. לדוגמה, במהלך הקורס נטפל בהמילטוניאנים מהצורה $H(t) = H^0 + H^1(t)$.

נחלק את הזמן $t \rightarrow 0$ לפרוסות, בגודל Δ , $\Delta = \frac{t}{N}$, כאשר N מספר הפרוסות. ברור כי $\Delta \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$. את משוואת שרדינגר, $i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$, נפעיל על טור טיילור מפותח לסדר ראשון:

$$\begin{aligned} |\psi(\Delta)\rangle &= |\psi(0)\rangle + \Delta \left. \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} \right|_0 \\ &= |\psi(0)\rangle + \frac{i\Delta}{\hbar} H(0) |\psi(0)\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i\Delta}{\hbar} H(0) \right] |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

קיבלנו ש-

$$\boxed{|\psi(\Delta)\rangle = e^{-i\Delta H(0)/\hbar} |\psi(0)\rangle} \quad (2.20)$$

בזמן כללי,

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta H(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ \xrightarrow{N \rightarrow \infty} U(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt'} \end{aligned}$$

בצורה כללית, $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$.

כדי להזכיר, רושמים $\mathcal{T} \left\{ e^{-i/\hbar H(t') dt'} \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i/\hbar H(n\Delta)\Delta}$

תרגילי בית:

• להראות: $U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$

• $U^\dagger(t_2, t_1) = U^{-1}(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$

3 אינטגרלי מסלול

פיינמן בשנות הארבעים, דיראק זהו ניסוח של מכניקה קוונטית על ידי לגרנזיאן.

3.0.2 למה?

1. יפה.

2. יש בעיות שנהיות מאוד קלות, עם אינטגרלי מסלול (לא נראה אותן בקורס הזה)

3. הקשר לדינמיקה קלאסית מאוד ברור.

בעיה קוונטית פתורה כשיודעים את $U(t)$, הפרופגטור. באופן יותר ספציפי, $\langle x|U(t)|x' \rangle$ - כלומר, התחלנו בזמן $t = 0$ ב- x' , קידמנו את המצב בזמן. מה הסיכוי למצוא את החלקיק במצב x .

$$\langle x|\psi(t) \rangle = \int dx' \langle x|U(t)|x' \rangle \langle x'|\psi(t=0) \rangle$$

$$\psi(x, t) = \int U(x, t, x', 0)\psi(x', t=0)$$

כלומר, בהינתן מצב $|\psi(t=0)\rangle$, נרצה לקדם אותו בזמן. אזי

$$|\psi(t=0)\rangle = \int |x'\rangle \langle x'|\psi(t=0)\rangle dx' \quad (3.1)$$

כדי לקדם בזמן - נכפיל ב- $U(t)$ ונקבל את הביטוי:

$$U(t)|\psi(t=0)\rangle = \int U(t)|x'\rangle \langle x'|\psi(t=0)\rangle dx' \quad (3.2)$$

לכן, בהינתן הפרופגטור - נוכל למצוא את $|\psi(x, t)\rangle$ בכל זמן t .
נרצה אלגוריתם שבהינתן $|\psi\rangle$, יתן לנו את $U(t)$.

$$\psi(x, t) = \int dx' \underbrace{\langle x|U(t-t')|x' \rangle}_{U(x, t, x', t')} \langle x'|\psi(t') \rangle \quad (3.3)$$

נסביר את הרישום - $U(x, t, x', t')$ - זהו ההתפתחות בזמן מזמן x, t לזמן x', t' .
נזכר בעקרון הלגרנזיאני ממכניקה אנליטית - בהינתן נקודת התחלה ונקודת סיום - המערכת בוחרת, באמצעות הפעולה, את המסלול עם הפעולה המינימלית על הלגרנזיאן. נציג ניסוח דומה לדינמיקה במכניקה קוונטית.

3.0.3 כדי למצוא את $U(x, t, x', t')$ נבצע את הפעולות הבאות:³

- ציירו את כל המסלולים במרחב $x - t$ שמחברים את (x, t) ל- (x', t') .
- מצאו את הפעולה, $S[x(t)]$, עבור כל מסלול.
- $U(x, t, x', t') = A \sum_{\{x(t)\}} e^{i/\hbar S[x(t)]}$, כלומר, סוכמים על כל המסלולים $x(t)$.

הערה 3.1 כל מסלול, כולל המסלול הקלאסי, מקבל אותו משקל (מספר, $|e^{iS/\hbar}| = 1$).

- אין העדפה למסלול קלאסי.

3.0.4 למה זה עובד?

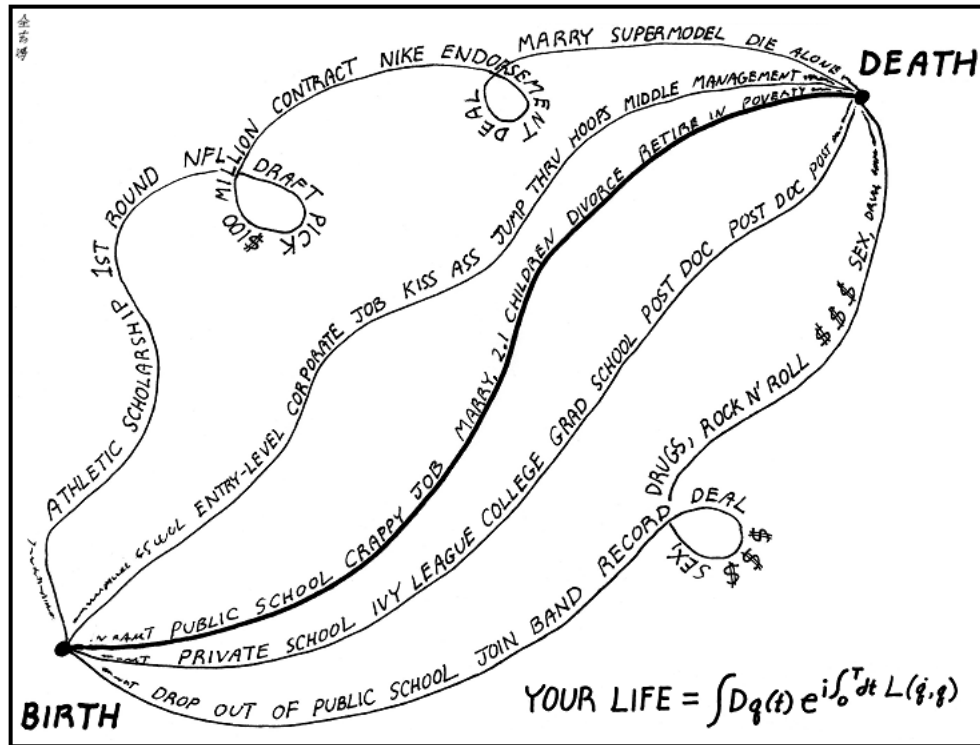
- נסתכל על מספר קטן של מסלולים. כל אחד תורם $z_a = e^{i\frac{S[x_a(t)]}{\hbar}}$. z_a הוא "וקטור יחידה" במישור המרוכב. $U = \sum_a z_a$

- לפי עקרון "הפעולה המינימלית" עבור המסלול הקלאסי - יהיו הרבה מסלולים בסביבות המסלול הקלאסי, שיתרמו לפאזה בגודל משמעותי בצורה קוהרנטית.

- במסלולים רחוקים מהמסלול הקלאסי - יהיו מסלולים מפוזרים אקראית שבממוצע יאפסו זה את זה.

כמה רחוק מהמסלול הקלאסי ניתן ללכת, בלי שההתאבכות ההורסת תשחק תפקיד?

$$\Leftarrow \text{כאשר הפאזה שונה מהפאזה הקלאסית, } S[x_{cl}(t)] = S_{cl}/\hbar, \text{ בערך ב- } \pi$$



The Path Integral Formulation of Your Life

איור 1: "Life Path Integral" from abstrusegoose.com

דוגמה 1.3 חלקיק חופשי, עוזב את הראשית ב- $t = 0$, ומגיע ל- $x = 1\text{cm}$ ב- $t = 1\text{sec}$. מסלול קלאסי: $x = t$. מסלול לא קלאסי: $x = t^2$.

$$S_{cl} = \int_0^{t_f} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt = \int_0^{t_f} \frac{1}{2} m dt = \frac{1}{2} m [\text{erg} \cdot \text{sec}]$$

$$S_{non-cl} = \int_0^{t_f} \frac{1}{2} m (2t)^2 dt = \frac{2}{3} m [\text{erg} \cdot \text{sec}]$$

חלקיק של 1 גרם, $\hbar = 1 \cdot 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{sec}$, אז

$$S_{cl} = \frac{1}{2} \cdot 10^{27} \hbar$$

$$S_{non-cl} = \frac{2}{3} \cdot 10^{27} \hbar$$

$$\delta S = |S_{cl} - S_{non-cl}| = 10^{26} \hbar$$

$$\frac{\delta S}{\hbar} \gg \pi$$

כלומר, עבור חלקיק ששוקל גרם אחד, מסלול שונה מהמסלול הקלאסי הוא מאוד לא סביר. עבור אלקטרון, $m = 10^{-27} \text{gr}$, אז $\delta S = \frac{\hbar}{6}$, $\delta S / \hbar < \pi$, לכן עבור אלקטרון - המסלול הזה תורם תרומה משמעותית לפרופגטור. כלומר, $\hbar \rightarrow 0$, הוא הגבול הקלאסי.

3.1 חישוב אינטגרל מסלול עבור חלקיק חופשי

רוצים למצוא את הפרופגטור, $U(x_N, t_N, x_0, t_0) = \sum_{x(t)} e^{iS[x(t)]/\hbar}$, דרך פורמלית לרשום:

$$\int_{x_0}^{x_N} e^{iS[x(t)]/\hbar} \mathcal{D}[x(t)] \quad (3.4)$$

כאשר $\int_{x_0}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)]$ היא אינטגרציה על כל המסלולים שמחברים את x_0 ב- x_N . כדי לתאר מסלול, צריכים אינסוף מספרים, $x(t_0), \dots, x(t), \dots, x(t_N)$, ולעבור על כל המסלולים - כל אחד ברשימה מקבל כל ערך, חוץ מ- $x(t_N)$, שהם קבועים. נחלק את הזמן לפרוסות באורך $\varepsilon, t_0, t_1, \dots, t_N$, וקבענו את המיקום של החלקיק ב- t_0, t_N . מסלול יהיה סדרה של נקודות $x_j(t) = (t_n, x_j(t_n))$, כאשר

$$t_n = t_0 + n\varepsilon \quad (3.5)$$

כאשר $\varepsilon = \frac{t_N - t_0}{N}$, ובסוף נדרוש, $N \rightarrow \infty$, ברוח זו,

$$S = \int_{t_0}^{t_N} \mathcal{L}(t) dt = \int_{t_0}^{t_N} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt$$

$$\rightarrow \sum_{i=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)^2 \varepsilon$$

כאשר $x_i = x(t_i)$, ולכן הפרופגטור יהיה:

$$U(x_N, t_N; x_0, t_0) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} A \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\varepsilon}} \quad (3.6)$$

נשתמש בסימון המקוצר:

$$\equiv A \int_{x_0}^{x_N} e^{iS[x(t)]/\hbar} \mathcal{D}[x(t)] \quad (3.7)$$

נגדיר: $y_i = \left(\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} x_i$ ואז

$$U = \lim_{N \rightarrow \infty} A' \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dy_{N-1} e^{-\frac{1}{i} \sum_{i=0}^{N-1} (y_{i+1} - y_i)^2} \quad (3.8)$$

כאשר $A' = A \left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}}$. נסתכל על

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{i} [(y_2 - y_1)^2 + (y_1 - y_0)^2]} dy_1 \quad (3.9)$$

ונפתור באמצעות השלמה לריבוע:

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{-\frac{1}{i} [y_2^2 + y_0^2 + 2y_1^2 - 2y_1(y_2 + y_0)]}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{-\frac{1}{i} \left[y_2^2 + y_0^2 + 2y_1 \left(y_1 - \frac{(y_2 + y_0)}{2} \right) - \frac{1}{2} (y_2 + y_0)^2 \right]}$$

נבצע אינטגרל גיאוסיאני על y_1 , ונקבל

$$= \left(\frac{i\pi}{2}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{i} (y_2^2/2 - y_2 y_0 + y_0^2/2)}$$

$$= \left(\frac{i\pi}{2}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2i} (y_2 - y_0)^2}$$

עכשיו, ממשיכים אינטגרציה על y_2

$$\begin{aligned} \left(\frac{i\pi}{2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy_2 e^{-(y_3-y_2)^2/i-(y_2-y_0)^2/2i} &= \left(\frac{i\pi}{2}\right)^{1/2} e^{-\frac{(2y_2^2+y_0^2)}{2i}} \left(\frac{2\pi i}{3}\right)^{1/2} e^{(y_0+2y_3)^2/6i} \\ &= \left(\frac{(i\pi)^2}{3}\right)^{1/2} e^{-(y_3-y_0)^2/3i} \end{aligned}$$

ומכאן באינדוקציה - בצורה כללית,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dy_{N-1} e^{-\frac{1}{i} \sum_{i=0}^{N-1} (y_{i+1}-y_i)^2} &= \frac{(i\pi)^{\frac{N-1}{2}}}{N^{1/2}} e^{-(y_N-y_0)^2/Ni} \\ &= \frac{(i\pi)^{\frac{N-1}{2}}}{N^{1/2}} e^{-\frac{m(x_N-x_0)^2}{2\hbar\varepsilon N\varepsilon}} \end{aligned}$$

ואז הפרופגטור -

$$U = A \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}\right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i N\varepsilon}\right)^{1/2} e^{\frac{im(x_N-x_0)^2}{2\hbar N\varepsilon}} \quad (3.10)$$

נשתמש ב- $N\varepsilon = t_N - t_0$ ו- $\varepsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$, ונבחר $A = \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}\right)^{N-N/2}$ וקיבלנו את הפרופגטור עבור חלקיק חופשי, בממד אחד:

$$U = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i (t_N - t_0)}\right)^{1/2} e^{\frac{im(x_N-x_0)^2}{2\hbar(t_N-t_0)}} \quad (3.11)$$

3.1.1 בחירת הקבוע A

A נבחר כך שבגבול $t_N - t_0 \rightarrow 0, U \rightarrow \delta(x - x')$, ואכן,

$$\delta(x - x') = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x')^2}{\Delta^2}} \quad (3.12)$$

בגלל זה, נח להגדיר $A = \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}\right)^{N-N/2} = B^{-N}$ ואז להגדיר את

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}[x(t)] &= \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{B} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_{N-1}}{B} \\ B &= \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}\right)^{1/2} \end{aligned}$$

ו-

$$U(x, t; x', 0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t}\right)^{1/2} e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar t}} \quad (3.13)$$

במשוואת שרדינגר,

$$\langle x|U(t)|x' \rangle = \int \langle x|U(t)|k \rangle \langle k|x' \rangle dk \quad (3.14)$$

3.1.2 דרך פשוטה להבנת מסלול קלאסי

מסלול קלאסי בין t' ל- t'' (נקודה באמצע)

$$x_{cl}(t'') = x' + \frac{x - x'}{t - t'}(t'' - t')$$

$$S_{cl} = \int_{t'}^t \mathcal{L} dt'' = \int_{t'}^t \frac{m\dot{x}^2}{2} dt'' = \frac{1}{2}m \frac{(x - x')^2}{t - t'}$$

שזה מה שמקבלים ב- U , עד כדי \hbar .

3.2 זהות למשוואות שרדינגר⁴

משוואת שרדינגר:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (3.15)$$

נרשום את משוואת שרדינגר עבור פרוסת זמן

$$|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} H |\psi(0)\rangle \quad (3.16)$$

בבסיס x , המשוואה מקבלת את הצורה

$$\psi(x, \varepsilon) - \psi(x, 0) = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0) \quad (3.17)$$

ננסה לקבל את הביטוי האחרון מתוך אינטגרלי מסלול. נשתמש באינטגרלי מסלול כדי לקבל פרופגטור ב- ε

$$\psi(x, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x, \varepsilon; x') \psi(x', 0) dx' \quad (3.18)$$

נשים לב, שבגלל שהתקדמנו ב- ε , לא עושים אינטגרציה על אף מסלול (מסתכלים על "נקודה" אחת בזמן)

$$U(x, \varepsilon; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{1/2} e^{i \left[\frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V\left(\frac{x+x'}{2}, 0\right) \right] / \hbar} \quad (3.19)$$

(הבחירה בנקודה $\frac{x+x'}{2}$ היא שרירותית, ואינה משפיעה על הפתרון הסופי)

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar}} e^{-i\varepsilon V\left(\frac{x+x'}{2}, 0\right) / \hbar} \psi(x', 0) dx' \quad (3.20)$$

הביטוי $\frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar} \rightarrow \infty$ לכל $x \neq x_0$, כלומר - לכל x ימים מרוחקים, ולו במעט, הפאזה "תשתגע". האזור שתורם לאינטגרל $\eta = x - x'$,

$$\frac{m\eta^2}{2\varepsilon\hbar} \leq \pi \Rightarrow |\eta| \leq \left(\frac{2\varepsilon\hbar\pi}{m} \right)^{1/2} \quad (3.21)$$

ואם נעבור ל- η

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{im\eta^2}{2\varepsilon\hbar} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(x+\frac{\eta}{2}, 0\right)} \psi(x + \eta, 0) d\eta \quad (3.22)$$

⁴הרצאה רביעית, 29.03.09

נפתח לטור טיילור לפי η , עד לסדר שני, ו- ε לסדר ראשון (כדי לקיים: $\frac{\eta^2}{\varepsilon} \rightarrow 1$). נפתח את כל האיברים מלבד $e^{i\frac{m(x-x_0)^2}{2\varepsilon\hbar}}$, שפשוט "מסנן" את כל האיברים שבהם הפאזה מתבדרת.

$$\begin{aligned}\psi(x+\eta, 0) &= \psi(x, 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \dots \\ e^{i/\hbar \varepsilon V(x+\frac{\eta}{2}, 0)} &\cong 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}, 0\right) + \dots \\ &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, 0) + \dots\end{aligned}$$

נציב את הטורים באינטגרל:

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}} \left[\psi(x, 0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, 0) \psi(x, 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta$$

זהו אינטגרל גיאוסיאני. נחשב את האינטגרל, ונקבל.

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \varepsilon}\right)^{1/2} \left[\psi(x, 0) \cdot \left(\frac{2\pi \hbar i \varepsilon}{m}\right) - \frac{\hbar \varepsilon}{2im} \left(\frac{2\pi \hbar i \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{2\pi \hbar i \varepsilon}{m}\right) V(x, 0) \psi(x, 0) \right] \quad (3.23)$$

וקיבלנו את משוואת שרדינגר:

$$\psi(x, \varepsilon) - \psi(x, 0) = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0) \quad (3.24)$$

4 סימטריות ותנע זוויתי

4.1 תזכורת קלאסית

סימטריה סימטריה של גוף היא אינוריאנטיות תחת טרנספורמציה מסוימת. סימטריות מחולקות לסימטריות בדידות (לדוגמה, הסימטריות של ריבוע - יחסית לסיבוב, או הסימטריה של מבנה מחזורי - יחסית להזזה), או סימטריות רציפות - כמו סימטריות הסיבובים של עיגול, או הזזה ביחס לישר אינסופי.

סימטריות רציפות ניתנות לתיאור על ידי טרנספורמציה אינפיניטסימלית.

- טרנספורמציית היחידה - טרנספורמציה שלא עושה כלום (כמו למשל, סיבוב ב- 0°)
- טרנספורמציות אינפיניטסימליות - קרובות ל- 0 (כמו סיבוב ב- ε)

טרנספורמציות אינפיניטסימליות לא משמרות סימטריות של ריבוע. ברור שסימטריה תחת טרנספורמציה אינפיניטסימלית תגרוור סימטריה לשינויים סופיים.

סימטריות של פונקציות שינוי המשתנים בצורה מסוימת ישמור על הערך של הפונקציה.

$$f(x, y) = x^2 + y^2 \quad \text{דוגמה 1.4}$$

$$\begin{aligned}x &\rightarrow \bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y &\rightarrow \bar{y} = x \sin \theta + y \cos \theta\end{aligned}$$

זה גורר ש-

$$f(\bar{x}, \bar{y}) = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 = x^2 + y^2 \quad (4.1)$$

כלומר, ערך הפונקציה לא משתנה לכל טרנספורמציה מהצורה שתוארה. זוהי טרנספורמציה סיבוב, המסובבת נקודה סביב ציר z לפי חוק יד ימין. הטרנספורמציה הנ"ל כמובן רציפה - ניתן לקחת $\theta = \varepsilon$.

$$\begin{aligned} x \rightarrow \bar{x} &= x \cos \varepsilon - y \sin \varepsilon \approx x - y\varepsilon \\ y \rightarrow \bar{y} &= x \sin \varepsilon + y \cos \varepsilon \approx x\varepsilon + y \end{aligned}$$

(לאחר פיתוח לסדר ראשון) כדי לגזור את הסימטריה הכללית, נשתמש במשוואה הדיפרנציאלית

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\varepsilon} &= -y \\ \frac{dy}{d\varepsilon} &= x \end{aligned}$$

במכניקה קלאסית, יש פונקציה מיוחדת - ההמילטוניאן, $\mathcal{H}(p, q)$. שתי תוצאות חשובות שנגררות מסימטריה של \mathcal{H} תחת טרנספורמציות קנוניות (רגילות, שאינן משנות את טווח המשתנים).

1. אם \mathcal{H} אינווריאנטי תחת הטרנספורמציה הקנונית האינפיניטיסימלית

$$\begin{aligned} q_i \rightarrow \bar{q}_i &= q_i + \varepsilon \frac{\partial g}{\partial p_i} \equiv q_i + \delta q_i \\ p_i \rightarrow \bar{p}_i &= p_i - \varepsilon \frac{\partial g}{\partial q_i} \equiv p_i + \delta p_i \end{aligned}$$

כש- $g(p, q)$ איזה משתנה דינמי, אזי g הוא קבוע תנועה. g הוא היוצר של הטרנספורמציה.

2. אם \mathcal{H} סימטרי תחת הטרנספורמציה הקנונית (הרגילה) אבל הלא אינפיניטיסימלית $(\bar{q}, \bar{p}) \rightarrow (q, p)$ ואם פתרון של משוואות התנועה $(q(t), p(t))$ גם $(\bar{q}(t), \bar{p}(t))$ פתרון של משוואות התנועה.

דוגמה 2.4 חלקיק בממד אחד, $g = p$, אז $\delta x = \varepsilon \frac{\partial p}{\partial x} = \varepsilon$ ו- $\delta p = -\varepsilon \frac{\partial p}{\partial x} = 0$, אז p יוצר של הזאות במרחב,

$$\left\{ \begin{aligned} x &\rightarrow x + \varepsilon \\ p &\rightarrow p \end{aligned} \right. \quad \text{אם } \mathcal{H} \text{ אינווריאנטי תחת הטרנספורמציה, אז התנע נשמר (לדוגמה - } \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} \text{)}$$

אז, $g = \ell_z = xp_y - yp_x$

$$\begin{aligned} \delta x &= -y\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial \ell_z}{\partial p_x} \right) \\ \delta y &= x\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial \ell_z}{\partial p_y} \right) \\ \delta p_x &= -p_y\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial \ell_z}{\partial x} \right) \\ \delta p_y &= p_x\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial \ell_z}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

אז התנע הוא היוצר של הזאות (אינפיניטיסימליות) והתנע הזוויתי יוצר של סיבובים (אינפיניטיסמלים).

נרחיב לגבי נקודה (2) - נקח שני חלקיקים ש- \mathcal{H} שלהם סימטרי תחת הזה של כל המערכת. לדוגמה, אטום מימן בעולם "חופשי".

אם מכינים מערכת ב- $(x_1^0, x_2^0, p_1^0, p_2^0)$ שמתפתחת בזמן לפי $(x_1(t), x_2(t), p_1(t), p_2(t))$ עד ל- $(x_1^t, x_2^t, p_1^t, p_2^t)$, אז הסימטריה גוררת שכל מסלול שקשור לתוצאה בהיזה ב- z , הוא גם תוצאה של הניסוי.

4.2 הזאות במכניקה קוונטית

לפחות רוצים שערכי התוחלת יתנהגו בצורה דומה לצורה הקלאסית.

$$\left\{ \begin{aligned} x &\rightarrow x + \varepsilon \\ p &\rightarrow p \end{aligned} \right. \quad \text{אם במכניקה הקלאסית, הטרנספורמציה היא}$$

ש- $\dot{p} = 0$

אז במכניקה הקוונטית, נרצה ש- $\langle x \rangle \rightarrow \langle x \rangle + \varepsilon$, $\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$ ו- $\langle H \rangle \rightarrow \langle H \rangle$, $\langle \dot{p} \rangle = 0$.

4.2.1 דרך ראשונה

נזיז את $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_\varepsilon\rangle \quad (4.2)$$

כאשר $|\psi_\varepsilon\rangle$ מצב מוזז. הזזה במרחב משרה הזזה במרחב הילברט. נבחר את ψ_ε כך ש-

$$\begin{aligned} \langle \psi_\varepsilon | x | \psi_\varepsilon \rangle &= \langle \psi | x | \psi \rangle + \varepsilon \\ \langle \psi_\varepsilon | p | \psi_\varepsilon \rangle &= \langle \psi | p | \psi \rangle \end{aligned}$$

ובמונחים של אופרטור הזזות $T(\varepsilon)$,

$$T(\varepsilon) |\psi\rangle = |\psi_\varepsilon\rangle \quad (4.3)$$

ו-

$$\begin{aligned} \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon \\ \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | P | \psi \rangle \end{aligned}$$

זו טרנספורמציה אקטיבית - הזזנו את פונקציית הגל

4.2.2 דרך שניה - טרנספורמציה פסיבית

הוקטורים לא משתנים, אלא X ו- P :

$$\begin{aligned} X &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) \\ P &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) \end{aligned}$$

כך ש-

$$\begin{aligned} X &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) \\ P &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) \end{aligned}$$

כך ש-

$$\begin{aligned} T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) &= X + \varepsilon I \\ T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) &= P \end{aligned}$$

הזזנו את הסביבה (מערכת הצירים, שדות חיצוניים וכו')

4.2.3 אופרטור ההזזות

נבחר את הבסיס $|x\rangle$, ונדרוש ש-

$$T(\varepsilon) |x\rangle = |x + \varepsilon\rangle \quad (4.4)$$

זהו אופרטור אוניטרי - הוא שומר על הגודל של הוקטור. הוא עובד על הבסיס $|x\rangle$, $-\infty < x < \infty$ ונותן בסיס $|x + \varepsilon\rangle$, $-\infty < x + \varepsilon < \infty$.

אנחנו יודעים את הפעולה על בסיס אחד, ולכן אנחנו יודעים את הפעולה כל כל בסיס

$$\begin{aligned} |\psi_\varepsilon\rangle &= T(\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x + \varepsilon\rangle \langle x | \psi \rangle dx \\ (x' = x + \varepsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle x' + \varepsilon | \psi \rangle dx' \end{aligned}$$

כאשר $\langle x|T(\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(x - \varepsilon)$, $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$
 מה לגבי $\langle \psi_\varepsilon|P|\psi_\varepsilon\rangle$?

$$\begin{aligned} \langle \psi_\varepsilon|P|\psi_\varepsilon\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\varepsilon^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_\varepsilon(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x - \varepsilon) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x - \varepsilon) dx \\ (x' = x - \varepsilon) \quad &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{d}{dx'}\right) \psi(x') dx' \\ &= \langle \psi|P|\psi\rangle \end{aligned}$$

הערה 4.1 ⁵ בעקרון, היה לנו חופש לבחור

$$T(\varepsilon) = e^{i\varepsilon g(x)} |x + \varepsilon\rangle \quad (4.5)$$

כאשר $\varepsilon \rightarrow 0$ אז

$$T(\varepsilon) |x\rangle \rightarrow |x\rangle \quad (4.6)$$

אפשר להראות שהבחירה $g(x) = 0$ נותנת את התכונה

$$\langle \psi_\varepsilon|P|\psi_\varepsilon\rangle = \langle \psi|P|\psi\rangle \quad (4.7)$$

תרגיל 4.2 (בית) הראו שבמקרה הכללי,

$$\begin{aligned} \langle x\rangle &\rightarrow \langle x\rangle + \varepsilon \\ \langle p\rangle &= \langle p\rangle + \varepsilon \langle f(x)\rangle \quad f = g' \end{aligned}$$

4.2.4 סימטריה להזזות

אם H סימטרי להזזות, אז נדרוש ש-

$$\langle \psi_\varepsilon|H|\psi_\varepsilon\rangle = \langle \psi|H|\psi\rangle \quad (4.8)$$

כדי לחקור, נבנה את האופרטור $T(\varepsilon)$.
 היות וב- $\varepsilon = 0$ אין הזזה, אז בפיתוח לסדר ε

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G \quad (4.9)$$

כאשר $T(\varepsilon)$ אוניטרי, ולכן G הרמיטי. נדרוש של $TT^\dagger = I$

$$TT^\dagger = \left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar} G^\dagger\right) \left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar} G\right) = I - \frac{\varepsilon}{\hbar} (G - G^\dagger) \quad (4.10)$$

וכדי לקבל G, I הרמיטי.
 זכרו:

$$\langle x|T(\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(x - \varepsilon) \quad (4.11)$$

נשווה, ונקבל:

$$\langle x|I|\psi\rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle x|G|\psi\rangle = \psi(x) - \varepsilon \frac{d\psi}{dx} \quad (4.12)$$

נזהה -

$$\langle x|G|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} = \langle x|P|\psi\rangle \quad (4.13)$$

כלומר,

$$\boxed{G = P} \quad (4.14)$$

$$\boxed{T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P} \quad (4.15)$$

הערה 4.3 התנע של פונונים⁶ נובע מסימטריות של הזזות בגביש. זה אינו תנע כללי.

למעשה, יש עוד בדיקה שצריך לעשות: ההזזות הן חילופיות, כי

$$T(a\hat{x})T(b\hat{y}) = T(a\hat{x} + b\hat{y}) = T(b\hat{y})T(a\hat{x}) \quad (4.16)$$

התנאי הזה כופה את יחסי החילוף בין התנעים (מכאן יוצאת הדרישה לכך ש- P_x, P_y מתחלפים). נחזור לדרישה שלנו לסימטריה:

$$\begin{aligned} \langle \psi|H|\psi\rangle &= \langle \psi_\varepsilon|H|\psi_\varepsilon\rangle \\ &= \langle T(\varepsilon)\psi|H|T(\varepsilon)\psi\rangle \\ &= \langle \psi|T^\dagger(\varepsilon)HT(\varepsilon)|\psi\rangle \\ &= \left\langle \psi \left| \left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) H \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) \right| \psi \right\rangle \\ &= \langle \psi|H|\psi\rangle + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle \psi|[P, H]|\psi\rangle + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

כלומר, הסימטריה מתקבלת אם $\langle \psi|[P, H]|\psi\rangle = 0$ ואז, לפי משפט ארנפסט, $\langle \dot{p} \rangle = 0$. בצורה דומה, ניתן לגזור את $T(\varepsilon)$ עבור טרנספורמציות פסיביות.

$$T^\dagger(\varepsilon)XT(\varepsilon) = X + \varepsilon I$$

$$T^\dagger(\varepsilon)XT(\varepsilon) = P$$

תרגיל בית: לבדוק $T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P$. נגדיר סימטריה להזזות על ידי

$$\boxed{T^\dagger(\varepsilon)HT(\varepsilon) = H} \quad (4.17)$$

שימור תנע מתקיים היות ו-

$$\begin{aligned} 0 &= T^\dagger HT - H \\ &= \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) H \left(I - \frac{\varepsilon}{\hbar} P \right) - H \\ &= -\frac{i\varepsilon}{\hbar} [H, P] \end{aligned}$$

⁶ראו פיסיקה סטטיסטית ותרמית

הערה 4.4 אם $H(X, P)$ ניתן לפיתוח לטור חזקות, אז תחת הטרנספורמציה (U - אוניטרית) אז

$$U^\dagger H(X, P) U = H(U^\dagger X U, U^\dagger P U) \quad (4.18)$$

למשל על,

$$\begin{aligned} P X^2 P &= U^\dagger P U U^\dagger X U U^\dagger X U U^\dagger P U \\ &= U^\dagger P X^2 P U \end{aligned}$$

נשתמש ב- $T(\varepsilon)$

$$T^\dagger(\varepsilon) H T(\varepsilon) = H(x + \varepsilon I, P) = H(X, P) \quad (4.19)$$

לכן, אם האופרטור הקלאסי סימטרי להזזות, אז גם הקוונטי סימטרי להזזות.

4.2.5 הזזות סופיות

נבדוק את האופרטור $T(a)$, עם הזזה סופית a . נחלק את a ל- N חלקים בגודל $\frac{a}{N}$, ונקח את $N \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned} T(a/N) &= I - \frac{ia}{\hbar N} P \\ T(a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{ia}{\hbar N} P \right)^N = e^{-iaP/\hbar} \\ &= e^{-a\partial_x} \end{aligned}$$

$$\langle X | T(a) | \psi \rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} a + \frac{d^2\psi}{dx^2} \frac{a^2}{2!} + \dots \quad (4.20)$$

כל התהליך דורש בדיקת קוונטיסטנטיות (חוסר תלות במסלול, אבליות). הזזה ב- a ואחר כך ב- b זהה להזזה ב- $a+b$ (או ב- b ואחר כך ב- a)

$$\begin{aligned} T(a) T(b) &= e^{-iaP/\hbar} e^{-ibP/\hbar} = e^{-i(ab)P/\hbar} \\ &= T(a+b) = T(b) T(a) \end{aligned}$$

קל להרחיב לעוד מימדים

$$\begin{aligned} p &\rightarrow \mathbf{p} \\ a &\rightarrow \mathbf{a} \\ b &\rightarrow \mathbf{b} \end{aligned}$$

והכח עובר חלק כי $[P_i, P_j] = 0$.

בנקודת מבט אחרת איזה תנאים נדרוש מאופרטור להזזות?

1. **קוונטיסטנטיות** - לכל הזזה, a ו- b מתקיים

$$T(a) T(b) = T(a+b) (= T(b) T(a)) \quad (4.21)$$

הסדר של הזזות לא משנה. (סגירות)

2. עבור $a=0$, $T(a) = I$ (קיום אופרטור יחידה), כך ש- $\forall b$ $T(b) T(0) = T(0) T(b) = T(b)$

3. כל הזזה, $T(a)$ ניתנת לביטול על ידי $T(-a)$. או, לכל אופרטור $T(a)$ קיים הופכי $T^{-1}(a)$ כך ש-

$$T^{-1}(a)T(a) = T(-a)T(a) = I = T(a)T(-a) \quad (4.22)$$

4. אסוציאטיביות - $T(a)(T(b)T(c)) = (T(a)T(b))T(c)$ - פורמלית, אלו דרישות מתורת החבורות.⁷

הגדרה 4.5 חבורה קבוצה של אלמנטים $G = \{A, B, C, \dots\}$ שמקיימים

1. לכל הפעלה (בסדר מסויים) של זוג אלמנטים $A, B \in G$ (באופן כללי, $AB \neq BA$), קיים אלמנט בחבורה, לדוגמא, $AB = C \in G$

2. קיים אלמנט יחידה, e , כל $eA = Ae = A$ לכל $A \in G$

3. לכל איבר בחבורה קיים הופכי בחבורה. $AA^{-1} = A^{-1}A = e$.

4. אסוציאטיביות:

$$A(BC) = (AB)C \quad (4.23)$$

חבורה המקיימת $AB = BA$ לכל $A, B \in G$ נקראת חבורה אבליית.

4.3 סימטריות להזזות בזמן

ניסיונות בזמנים שונים יתנו אותן תוצאות. ניקח מערכת קוונטית במצב $|\psi_0\rangle$ בזמן t_1 , ונקדם אותה בזמן, $t_1 + \varepsilon$.

$$|\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_1) \right] \underbrace{|\psi(t_1)\rangle}_{=|\psi_0\rangle} \quad (4.24)$$

כלומר, ההמילטוניאן הוא היוצר של הזזות בזמן (פיתוח של U , הפרופגטור, לסדר ראשון). נחזור על הניסוי בזמן t_2

$$|\psi(t_2 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_2) \right] \underbrace{|\psi(t_2)\rangle}_{=|\psi_0\rangle} \quad (4.25)$$

התוצאה של הניסוי זהה אם מתקיים

$$0 = |\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle - |\psi(t_2 - \varepsilon)\rangle = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} (H(t_2) - H(t_1)) |\psi_0\rangle \quad (4.26)$$

היות ו- $|\psi_0\rangle$ שרירותית,

$$H(t_2) = H(t_1) \quad (4.27)$$

או,

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (4.28)$$

ומה לגבי חוק השימור? משפט ארנספט, עבור Ω ללא תלות בזמן,

$$i\hbar \langle \dot{\Omega} \rangle = \langle [\Omega, H] \rangle \quad (4.29)$$

ועבור H ,

$$\langle \dot{H} \rangle = 0 \quad (4.30)$$

וזהו חוק שימור האנרגיה.⁸

⁷ראו רשימות מהרצאה במבוא לתורת החבורות. אם כי הם מאוד מאוד חלקיות לקרוא, בספר של פיינמן את הפרק על שימור אנרגיה. סיפור נחמד על קוביות.⁸

4.4 סיבובים ותנע זוויתי

4.4.1 הזזות כהקדמה⁹

עבור הזזות, דרשנו

$$\begin{aligned}\langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon \\ \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | P | \psi \rangle\end{aligned}$$

ומהרבה הזזות קטנות, קיבלנו

$$T(a) = e^{-iaP/\hbar} \quad (4.31)$$

הכל ביחסי החילוף: דרשנו,

$$1. \lim_{a \rightarrow 0} T(a) = I$$

$$2. T(-a)T(a) = I \text{ , קיימת הזזה הופכית,}$$

$$3. T(a)T(b) = T(a+b) = T(b)T(a) \text{ (סגירות וחילופיות)}$$

נפתח שוב את אופרטור ההזזות:

• עבור \mathbf{a} קטן:

$$T(\mathbf{a}) = I - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a} \quad (4.32)$$

זה אקוויולנטי לתזוזה סביב תנאי (1) - עבור \mathbf{a} קטן, התזוזה קרובה לאי-תזוזה. האופרטור $T(\mathbf{a})$ הוא יוניטרי.

•

$$\begin{aligned}T^\dagger(\mathbf{a})T(\mathbf{a}) &= (I + i\mathbf{k}^\dagger \cdot \mathbf{a})(I - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \\ &= I - i\mathbf{a}(\mathbf{k}^\dagger - \mathbf{k}) + O(a^2) \implies \mathbf{k}^\dagger = \mathbf{k}\end{aligned}$$

• נדרוש סגירות ואבליות:

$$T(\mathbf{a})T(\mathbf{b}) = T(\mathbf{b})T(\mathbf{a}) = T(\mathbf{a} + \mathbf{b})$$

שוב, עבור \mathbf{a}, \mathbf{b} קטנים:

$$\begin{aligned}T(\mathbf{a})T(\mathbf{b}) &= (I - i\mathbf{k}\mathbf{a})(I - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\ &= I - i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \\ T(\mathbf{b})T(\mathbf{a}) &= I - i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \mathbf{b})\end{aligned}$$

- אם לא היינו דורשים קומטטיביות, גם אם הדרישה היא: $T(\mathbf{a})T(\mathbf{b}) \neq T(\mathbf{b})T(\mathbf{a})$, אזי לסדר ראשון יתקיים בכל מקרה $T(\mathbf{a})T(\mathbf{b}) = T(\mathbf{b})T(\mathbf{a})$, כלומר - לסדר ראשון, כל חבורה תהיה אבלית.

⁹07.04.09, אתי עזיזי ביקש שאני אנציח את השם שלו

איור 2: "Matrix Transform" from xkcd.com

– נסתכל על סדר שני: נדרוש לסדר שני, נסתכל על התנועה: $a\hat{x} + b\hat{y}$ (או $b\hat{y} + a\hat{x}$). נדרוש שיתקיים

$$0 = [T(b\hat{y}), T(a\hat{x})] = \left[\left(\mathbb{I} - \frac{iP_y b}{\hbar} + \dots \right), \left(\mathbb{I} - \frac{iP_x a}{\hbar} + \dots \right) \right]$$

$$\cong -\frac{ab}{\hbar} [P_y, P_x]$$

כלומר, כדי שהזאות יהיו חילופיות, צריך להתקיים

$$[P_y, P_x] = 0 \tag{4.33}$$

תכונה מוכרת עבור תנעים על צירים שונים. כלומר, הדרישה הפיזיקלית מהזאות, דורשת את יחסי החילוף מהתנע.

* לא נוכיח: מספיק לדעת על סדר שני. סדר שלישי לא עושה "בעיות"¹⁰.
 * למה סדר שני? זכרו שבאמת רוצים $T(a)T(b) = T(b)T(a) = T(a+b)$, להזאות סופיות. במקרה הפשוט של התנע, דרשנו

$$[P_i, P_j] = 0 \tag{4.34}$$

לעומת זאת, אופרטור להזאות סופיות הוא מהצורה

$$e^A e^B = e^{A+B} = e^B e^A \tag{4.35}$$

אם ורק אם $[A, B] = 0$.

– כדי למצוא את ההצגה של יוצר ההזאות, נמצא את יחס החילוף, $[T(a), x]$ (עבור a קטן)

$$\begin{aligned} T(a) X |x\rangle - XT(a) |x\rangle &= T(a) x |x\rangle - X |x+a\rangle \\ &= x |x+a\rangle - (x+a) |x+1\rangle \\ &= -a |x+a\rangle \\ &\cong -a |x\rangle \end{aligned}$$

(הקירוב נעשה בגלל ש- a אינפיניטיסימלי) אזי, יחס החילוף הוא

$$[T(a), x] = -a \tag{4.36}$$

(בבית: להראות כי אלו יחסי החילוף בין אופרטור המיקום לאופרטור התנע)

4.4.2 סיבובים

- סיבובים בשני מימדים – קל. סיבוב בזווית θ_1 ואחרי זה בזווית θ_2 , זהה לחלוטין לסיבוב ב- θ_2 ולאחר מכן ב- θ_1 – בשני מימדים, סדר של סיבובים לא משנה.
- בשלושה מימדים יותר קשה: אם מסובבים גוף ב- 90° , קודם סביב \hat{z} ולאחר מכן סביב \hat{x} , התוצאה שונה מסיבוב סביב ציר \hat{x} ולאחר מכן סביב ציר \hat{z} .

¹⁰איזשהי אפליקציה של חבורות לי. **לביצוע:** ללמוד חבורות לי.

4.4.3 תזכורת על סיבובים (בשלושה מימדים)

נניח וקטור $\mathbf{v} = v_x \hat{x} + v_y \hat{y} + v_z \hat{z}$. סיבוב יגרום לוקטור להפוך לוקטור אחר.

$$\mathbf{v}' = v'_x \hat{x} + v'_y \hat{y} + v'_z \hat{z} \quad (4.37)$$

$$\begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

כאשר המטריצה היא מטריצה אורתוגונלית (חבורת הסיבובים היא $SO(3)$, Spatial Orthogonal (Of dim , אזי (3)

$$RR^T = R^T R = \mathbb{I} \quad (4.39)$$

זה שומר על גודל הוקטור -

$$\|v'\| = \|v\| \quad (4.40)$$

למטריצות יש הצגות: למשל, סיבוב סביב ציר z בזווית ϕ :

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

כמו בתזוזות, נסתכל על סיבובים קטנים, $\phi = \varepsilon$.

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \varepsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

ובצורה דומה:

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \varepsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

כאשר ההבדל בניהם הוא פרמוטציה ציקלית:

$$x \rightarrow y, \quad y \rightarrow z, \quad z \rightarrow x \quad (4.43)$$

נסתכל על סיבוב סביב y , ואחר כך x , ונשווה עם סיבוב סביב x ואחר כך y : (נחשב את המכפלה עד סדר ε^2)

$$R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & \varepsilon^2 & \varepsilon \\ 0 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

נחסר בניהם:

$$R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

אנחנו רואים שהסדר חשוב רק בסדר ε^2 (מסדר ε , הכל מתבטל).

$$= R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{I} \quad (4.45)$$

או בצורה כללית:

$$\boxed{R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - R_{any}(0)} \quad (4.46)$$

כאשר 1 הוא סיבוב ב-0 מעלות סביב ציר כלשהו) ניתן להמשיך לגזור כך יחסי חילוף בין סיבובים סביב צירים שונים.

4.4.4 בניית אופרטור סיבוב

בחזרה לקוונטים: $|\psi\rangle_R$ (מסובב) שונה מ- $|\psi\rangle$ מקורי לפני סיבוב.

$$|\psi\rangle_R = \mathcal{D}(R)|\psi\rangle \quad (4.47)$$

לסדר ראשון בזוויות קטנות, האופרטור $\mathcal{D}(R)$ מקיים:

1. $\mathcal{D}(R) = \mathbb{I} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \mathbf{J}$, כאשר J יהיה יוצר של סיבובים אינפיניטסימלים. $\mathcal{D} \Leftarrow$ אוניטרי ו- \mathbf{J} הרמיטי.

$$\mathbf{J} = J_x \hat{x} + J_y \hat{y} + J_z \hat{z} \quad (4.48)$$

מפורשות, עבור ציר סיבוב \hat{n} בזווית $d\phi$, אופרטור הסיבוב נראה:

$$\mathcal{D}(\hat{n}, d\phi) = 1 - i \left(\frac{\mathbf{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) d\phi \quad (4.49)$$

שינו לב: לא אמרנו בשום מקום $\mathbf{J} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$, J הוא "פשוט" יוצר הסיבובים. סיבוב סופי (סביב ציר z)

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\mathbb{I} - i \left(\frac{J_z}{\hbar} \right) \left(\frac{\phi}{N} \right) \right]^N = e^{-\frac{iJ_z}{\hbar} \phi} \quad (4.50)$$

$$\mathcal{D}_z(\phi) \cong 1 - \frac{iJ_z}{\hbar} \varepsilon - \frac{J_z^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} + \dots \quad (4.51)$$

1 ו- \mathbb{I} זה אותו הדבר

תכונות סיבוב? ניקח את הקשר (4.46):

$$R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - R_{any}(0) \quad (4.52)$$

ונציב במקום R את \mathcal{D} :

$$\mathcal{D}_x(\varepsilon) \mathcal{D}_y(\varepsilon) - \mathcal{D}_y(\varepsilon) \mathcal{D}_x(\varepsilon) = \mathcal{D}_z(\varepsilon^2) - \mathcal{D}_{any}(0) \quad (4.53)$$

לסדר שני, נקבל:

$$\left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right) \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right) - \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right) \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right) = 1 - \frac{iJ_z}{\hbar} \varepsilon^2 - 1 \quad (4.54)$$

סדר ε נופל, ונשארו עם סדר ε^2 :

$$\frac{-J_x J_y}{\hbar} \varepsilon^2 - \frac{J_x^2}{2\hbar^2} \varepsilon^2 - \frac{J_y^2}{\hbar^2} \varepsilon^2 + \frac{J_y J_x}{\hbar^2} + \frac{J_x^2}{2\hbar^2} + \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} = -\frac{iJ_z \varepsilon^2}{\hbar} \quad (4.55)$$

ולאחר שאיברים יתאפסו, נקבל

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad (4.56)$$

כללית,

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad (4.57)$$

בסמסטר הקודם, גזרנו הצגות של אופרטורים¹¹. נוח לעבוד בבסיס שמתווייג על ידי

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

קל להראות ש-

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \quad (4.58)$$

(הבחירה ב- J_z היא שרירותית. בצורה זהה ניתן לבחור גם את J_y, J_x)
 התיוג מגדיר בסיס $|j, m\rangle$ (למעשה הבסיס הוא $|\alpha, j, m\rangle$ כאשר α מייצגת את שאר דרגות החופש, אבל נתאלם ממנה בנתיים)

$$j = \frac{n}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

$$\langle j', m' | J_x | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\delta_{jj'} \delta_{m, m+1} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} + \delta_{jj'} \delta_{m, m-1} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \right)$$

$$\langle j', m' | J_y | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left(\delta_{jj'} \delta_{m, m+1} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} - \delta_{jj'} \delta_{m, m-1} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \right)$$

הערה 4.6 המטריצה היא במרחב j, m , מרובה מימדים. הסיבובים הם בשלושה מימדים המטריצות המייצגות של J^2 :

$$j' m' \setminus j m \quad (0, 0) \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \quad (1, 1) \quad (1, 0) \quad (1, -1)$$

$$\begin{pmatrix} (0, 0) & (0) & & & & \\ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & & \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix} & & & \\ \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) & & & & & \\ (1, 1) & & & \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix} & & \\ (1, 0) & & & & & \\ (1, -1) & & & & & \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

המטריצה היא בלוק-אלכסונית, **יחסי החילוף**, לדוגמה, $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ יתקיימו גם בתוך הבלוקים. כלומר, נסמן את הבלוק בגודל $(2j+1) \times (2j+1)$ ב- $J^{(j)}$ המתאים ל- j מזויים אזי עבור

$$[J_x^{(j)}, J_y^{(j)}] = i\hbar J_z^{(j)} \quad (4.60)$$

עכשיו ניתן לבנות אופרטור סיבוב כללי: רוצים את $\mathcal{D}(R)$, כאשר סיבוב הוא

$$e^{-i \frac{\mathbf{J} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}} \quad (4.61)$$

זה לא "נורא" היות ו- \mathbf{J} היא בלוק דיאגונלית, ולכן גם בלוק דיאגונלית. אזי כל מטריצת סיבוב תיוצג על ידי מבנה בלוק-אלכסוני. אלמנטי המטריצה יהיו

$$\mathcal{D}_{m'm}^j(R) = \langle j, m' | e^{-i\mathbf{J}\cdot\hat{n}\phi/\hbar} | j, m \rangle \quad (4.62)$$

ה- j זהים בגלל המבנה הבלוק-אלכסוני. המטריצה \mathcal{D} נקראת מטריצת ויגנר. היות ו- \mathbf{J}^2 מתחלף עם הכל,

$$[\mathcal{D}(R), \mathbf{J}^2] = 0 \quad (4.63)$$

כלומר, סיבוב לא משנה את הערך של j . בספרים, המטריצות $(2j+1) \times (2j+1)$ הנוצרות על ידי $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ נקראות הצגות בלתי-פריקות של האופרטור $\mathcal{D}(R)$.

פירוש כל מטריצת סיבוב, (שבצורה כללית כוללת כמה ערכים של j) ניתנת לפירוק למבנה בלוק-אלכסוני. (עם בלוק לכל j)

הערה 4.7 מטריצות הסיבוב $(2j+1) \times (2j+1)$ "יוצרות" חבורה בעצמן.

1. $\phi = 0$ הוא אופרטור היחידה

2. סיבוב ב- $-\phi$ מגדיר הופכי.

3.

$$\sum_{m'} \mathcal{D}_{m''m'}^j(R_1) \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_2) = \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_1 R_2) \quad (4.64)$$

לסיכום

$$\mathcal{D}(R) \rightarrow \begin{bmatrix} \mathcal{D}^{(0)} & & & \\ & \mathcal{D}_{2 \times 2}^{(\frac{1}{2})} & & \\ & & \mathcal{D}_{3 \times 3}^{(1)} & \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

4.4.5 המשמעות הפיזיקאלית

נתחיל במצב $|j, m\rangle$ ונסובב אותו.

$$|j, m\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R) |j, m\rangle \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \mathcal{D}(R) |j, m\rangle \\ &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) \end{aligned}$$

כאשר $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ היא האמפליטודה עבור המצב המסובב להיות ב- $|j, m'\rangle$ (כאשר המצב המקורי $|j, m\rangle$). כלומר, הערכים של m "מתערבבים" ומטריצת ויגנר מגדירה איך הם מתערבבים.

דוגמה 3.4 נתחיל במצב $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, ונסובב את פונקציית הגל במרחב. כאשר נסובב את הפונקציה במרחב, פונקציית הגל לא תצביע בכיוון z . אחרי הסיבוב, נקבל צירוף לינארי בזווית כללית של $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$.

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \rightarrow \alpha |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \beta |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (4.67)$$

הרבה פעמים נווח להציג סיבוב כללי על ידי זוויות אוילר.

דוגמה 4.4 בזווית α סביב ציר z , בזווית β סביב ציר y' (ציר y המסובב) וב- γ סביב ציר z' , אפשר להראות שזה זהה לפעולה¹²:

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}_z(\alpha) \mathcal{D}_y(\beta) \mathcal{D}_z(\gamma) \quad (4.68)$$

דוגמה 5.4 אופרטור סיבוב עבור ספין $\frac{1}{2}$ (סביב ציר \hat{z}) נתחיל ב- $|\alpha\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \alpha\rangle$. רוצים מצב מסובב

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}_z(\phi) |\alpha\rangle \quad (4.69)$$

כאשר

$$\mathcal{D}_z(\alpha) = e^{-iS_z \hat{n} \phi / \hbar} \quad (4.70)$$

נראה תוצאה של סיבוב על $\langle S_x \rangle$.

$$\langle S_x \rangle \implies \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | \mathcal{D}_z^\dagger(\phi) S_x \mathcal{D}_z(\phi) | \alpha \rangle \quad (4.71)$$

צריך לחשב את

$$e^{iS_z \phi / \hbar} S_x e^{-iS_z \phi / \hbar} \quad (4.72)$$

נזכר כי

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) \\ S_y &= -\frac{i\hbar}{2} (-|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) \\ S_z &= \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle \langle \uparrow| - |\downarrow\rangle \langle \downarrow|) \end{aligned}$$

כאשר $|\uparrow\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\downarrow\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, הרישום הזה הוא רישום לא-מטריצי של מטריצות פאולי) אזי

$$\begin{aligned} e^{iS_z \phi / \hbar} S_x e^{-iS_z \phi / \hbar} &= \frac{\hbar}{2} e^{S_z \phi / \hbar} (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) e^{-iS_z \phi / \hbar} \\ &= \frac{\hbar}{2} (e^{i\phi/2} |\uparrow\rangle \langle \downarrow| e^{i\phi/2} + e^{-i\phi/2} |\downarrow\rangle \langle \uparrow| e^{-i\phi/2}) \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos \phi (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|) + i \sin \phi (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| - |\downarrow\rangle \langle \uparrow|)) \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \end{aligned}$$

כלומר,

$$\langle \alpha | S_x | \alpha \rangle = \langle S_x \rangle \cos \phi - \langle S_y \rangle \sin \phi \quad (4.73)$$

שזה בדיוק מה שהיינו מצפים מסיבוב קלאסי. בבית, לבדוק:

$$\begin{aligned} \langle S_y \rangle &\rightarrow \langle S_y \rangle \cos \phi + \langle S_x \rangle \sin \phi \\ \langle S_z \rangle &\rightarrow \langle S_z \rangle \end{aligned}$$

¹²אפשר להראות ש- $\mathcal{D}_y, \mathcal{D}_z$ לא צריכים להיות y', z' הפיתוח המלא בסאקוראי

אבל בצורה כללית,

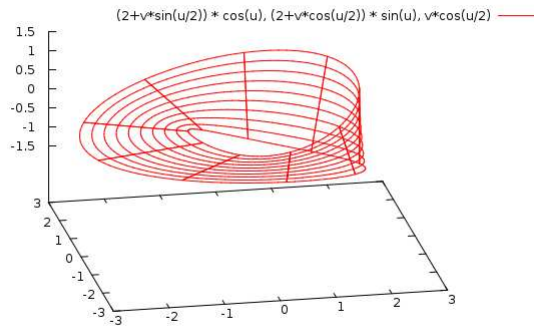
$$|\alpha\rangle = |\uparrow\rangle \langle\uparrow|\alpha\rangle + |\downarrow\rangle \langle\downarrow|\alpha\rangle \quad (4.74)$$

נסובב:

$$e^{iS_z\phi/\hbar} |\alpha\rangle = e^{-i\phi/2} |\uparrow\rangle \langle\uparrow|\alpha\rangle + e^{i\phi/2} |\downarrow\rangle \langle\downarrow|\alpha\rangle \quad (4.75)$$

סיבוב ב- 2π נותן סימן " - " כללי, כלומר,

$$|\alpha\rangle_{\mathbf{R}_z(2\pi)} \Rightarrow -|\alpha\rangle \quad (4.76)$$



(

דוגמה קלאסית: טבעת מוביוס רק סיבוב ב- 4π מחזיר את האמפליטודה.

תוצאות של הסימטריה לסיבובים אם H סימטרי לסיבובים, $\langle \dot{\mathbf{J}} \rangle = 0$ (\mathbf{J} נשמר)

4.4.6 הערות כלליות

- בשום מקום לא השתמשנו ב- $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$. \mathbf{L} אופרטור של תנ"ז מרחבי, \mathbf{J} הוא קצת יותר כללי. רק השתמשנו ביחסי החילוף

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad (4.77)$$

שאלו תכונות של סיבובים.

ואכן, קיבלנו יותר מ- \mathbf{L} , לדוגמה $j = \frac{\hbar}{2}$, שלא יתכן עבור $X \times P$.

- ההפועה של היוצרים "החדשים" קשורה לעובדה שבשום מקום לא דרשנו שפונקצית הגל תהיה סקאלרית. בעקרון היא יכולה להכיל יותר רכיבים, בצורה כללית, נגדיר ספינור $\begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}$.

– במכניקה קוונטית לא יחסותית של ספינים, יש פונקצית גל עבור ספין \uparrow ופונקצית גל עבור ספין \downarrow . ניתן לחשוב על זה בתור פונקציה עם שני רכיבים, אחת עבור \uparrow ואחד עבור \downarrow . לא דרשנו שפונקציה $\psi(x)$ יש ערך אחד בכל נקודה. זה אינו ספינור במרחב האמיתי, כי אם במרחב הילברט.

– יש מקרים בהם יש אינטואיציה פיזיקלית לכך שפונקצית הגל יש יותר מרכיב אחד לכל כיוון

דוגמה 6.4 (הדוגמה הזו אינה מסבירה מה זה ספין $\frac{1}{2}$). במקרה **הספציפי** של שלושה רכיבים, ניתן לתת פירוש גיאומטרי.

$$\psi(x, y, z) = \psi_x \hat{x} + \psi_y \hat{y} + \psi_z \hat{z} \quad (4.78)$$

(רמאות קטנה: לדוגמה, השדה האקטרומגנטי או החשמלי, שיש לו שלושה רכיבים). בפונקציה וקטורית, צריך לשוב גם את "ערך" הפונקציה וגם את הכיוון שלה. במקרה של שדה עם שלושה רכיבים, מיחסים לו ספין 1.

* זהירות: ספינור לא כל כך פשוט. מדובר במרחבים שונים! (סיבוב במרחב האמיתי משרה סיבוב במרחב אחר)

– למעשה, חקרנו את האופרטור $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ (חיבור של תנע זוויתי מרחבי וספין, שנובע מהעובדה שפונקצית הגל היא לא סקאלרית, יש לה כמה רכיבים)

– נקח חלקיק בלי ספין. בהצגה וקטורית:

$$\begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_+(x_1) \\ \psi_-(x_1) \\ \psi_+(x_2) \\ \psi_-(x_2) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.79)$$

בספינור (של ספין $\frac{1}{2}$) יש לכל נקודה במרחב, 2 ערכים.

4.5 חיבור תנע זוויתי¹³

הבעיה: ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים של אופרטורי תנע זוויתי של מערכת המורכבת מכמה חלקים.

דוגמה 7.4 ספין+תנע^ז אורביטלי, ספין+ספין.

4.5.1 דוגמאת חימום – חיבור שני ספינים, ללא דרגות חופש אורביטליות.

המערכת מתוארת על ידי מצב המערכת של שני ספינים, s, m

$$|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (4.80)$$

נסתכל על המקרה בו s_1, s_2 הם חצי, ו- $m_1, m_2 = \pm \frac{1}{2}$. נסמן את המצבים בתור

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.81)$$

מהו אופרטור הספין?

$$\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_1^{(1)} \otimes \mathbb{I}^{(2)}$$

$$\mathbf{s}_2 = \mathbb{I}^{(1)} \otimes \mathbf{s}_2^{(2)}$$

כאשר $s_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, כאשר σ מטריצות פאולי:

$$\sigma_x^i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y^i = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z^i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

~

$$s_{i-} = s_{ix} - is_{iy} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_{i+} = s_{ix} + is_{iy} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

נשים לב ש- $[s_{1x}, s_{2y}] = 0$ וכן, אבל לעומת זאת,

$$\begin{aligned} [s_{1x}, s_{1y}] &= i\hbar s_{1z} \\ [s_{2x}, s_{2y}] &= i\hbar s_{2z} \end{aligned}$$

כלומר, האופרטורים, בין מרחבים שונים - מתחלפים, אבל בתוך אותו מרחב, שומרים על יחסי החילוף של תנ"ז. לכן, האופרטור הכולל s_x, s_y

$$[s_x, s_y] = [s_{1x} + s_{2x}, s_{1y} + s_{2y}] = i\hbar (s_{1z} + s_{2z}) = i\hbar s_z \quad (4.82)$$

הספין הכולל מקיים יחסי חילוף של יוצר סיבובים (תנע זוויתי). כדי לחבר תנע זוויתי, נעובד עם האופרטורים שמייצגים לנו נע זוויתי כללי של המערכת. אנחנו רוצים את הערכים העצמיים של

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 &= (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 \\ s_z &= (s_{1z} + s_{2z}) \end{aligned}$$

נבנה מטריצה אוניטרית שתעבור לנו בין הבסיסים. נעשה זאת עבור שני ספינים, בצורה הארוכה. נסתכל על s_z :

$$\begin{aligned} s_z |\uparrow\uparrow\rangle &= (s_{1z} + s_{2z}) |\uparrow\uparrow\rangle = 2\frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\uparrow\rangle \\ s_z |\uparrow\downarrow\rangle &= 0 |\uparrow\downarrow\rangle \\ s_z |\downarrow\uparrow\rangle &= 0 |\downarrow\uparrow\rangle \\ s_z |\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

נשים לב ש- s_z מנוון. יש לנו שני וקטורים עם אותו ערך עצמי. ולכן, כל קומבינציה לינארית מהצורה

$$|\psi\rangle = \alpha |\downarrow\uparrow\rangle + \beta |\uparrow\downarrow\rangle \quad (4.83)$$

תיתן

$$s_z |\psi\rangle = 0 \quad (4.84)$$

וזאת למרות ש- s_{1z} ו- s_{2z} לא מוגדרים בבסיס הזה. (אם נמדוד את s_{1z} על $|\psi\rangle$, נקבל כל פעם תוצאה אחרת, כתלות ב- α, β). נמצא את הבסיס של \mathbf{s}^2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 &= \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 \\ &= s_1^2 + s_2^2 + 2(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z}) \\ &= s_1^2 + s_2^2 + (s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+}) + 2s_{1z}s_{2z} \end{aligned}$$

נבצע בפירוט את המעבר האחרון:

$$\begin{aligned} s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+} &= (s_{1x} + is_{1y})(s_{2x} - is_{2y}) + (s_{1x} - is_{1y})(s_{2x} + is_{2y}) \\ &= 2(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y}) \end{aligned}$$

האיברים האלכסוניים מופיעים בסכום פעמיים בסימנים שונים, ולכן הם נופלים.
זכרו:

$$\begin{aligned} s_{i+} |\uparrow\rangle_i &= 0 \\ s_{i+} |\downarrow\rangle_i &= \hbar |\uparrow\rangle_i \\ s_{i-} |\uparrow\rangle_i &= \hbar |\downarrow\rangle_i \\ s_{i-} |\downarrow\rangle_i &= 0 \end{aligned}$$

אזי

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 |\uparrow\downarrow\rangle &= (s_1^2 + s_2^2 + 2s_{1z}s_{2z} + s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+}) |\uparrow\downarrow\rangle \\ &= \hbar^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right) + 2 \left(\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{1}{2} \right) \right) |\uparrow\downarrow\rangle + \cancel{s_{1+}s_{2-} |\uparrow\downarrow\rangle} + s_{1-}s_{2+} |\uparrow\downarrow\rangle \\ &= \hbar^2 |\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2 |\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

בצורה דומה,

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 |\downarrow\uparrow\rangle &= \hbar^2 |\downarrow\uparrow\rangle + \hbar^2 |\downarrow\uparrow\rangle \\ \mathbf{s}^2 |\uparrow\uparrow\rangle &= 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle \\ \mathbf{s}^2 |\downarrow\downarrow\rangle &= 2\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

בבניה זו, s^2 אינו מלכסן. אנחנו רוצים לעבור לבסיס בו s^2 אלכסוני. בבסיס זה

$$\mathbf{s}^2 = \hbar^2 \begin{matrix} \uparrow\uparrow, & \uparrow\downarrow, & \downarrow\uparrow, & \downarrow\downarrow \\ \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.85)$$

כדי ללכסן, מספיק ללכסן את תת המטריצה המנוונת, $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

קל לבדוק שהבסיס הנ"ל אלכסוני:

$$\begin{aligned} &|\uparrow\uparrow\rangle \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &|\downarrow\downarrow\rangle \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

נבדוק שאכן זה כך: $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ טריוויאליים, נבדוק את האחרים.

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right) &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \\ &= 2\hbar^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right) \end{aligned}$$

ובצורה דומה,

$$\mathbf{s}^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right) = 0 \quad (4.86)$$

נסכם

$$\mathbf{s}^2 = 2\hbar^2 \begin{Bmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{Bmatrix} \quad (4.87)$$

שלישייה זו נקראת טריפלט ועבור ע"ע 0:

$$0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (4.88)$$

המצב הזה נקרא סינגלט.

$$\begin{aligned} s_z |\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar |\uparrow\uparrow\rangle \\ s_z \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right) &= 0 \\ s_z |\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle \\ s_z \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right) &= 0 \end{aligned}$$

ברישום שונה:

$$\begin{aligned} |s=1, m=1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |s=1, m=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |s=0, m=-1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \\ |s=0, m=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

בבסיס זה,

$$s^2 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 2\hbar^2 & \\ & & 2\hbar^2 \\ & & & 2\hbar^2 \end{pmatrix} \quad (4.89)$$

חיבור תנע זוויתי הוא מעבר בבסיס. עברנו מבסיס שמלכסן את $(s_1^2, s_2^2, s_{1z}, s_{2z})$ לבסיס שמלכסן את (s^2, s_z, s_1^2, s_2^2) . סימבולית: $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \rightarrow 1 \oplus 0$. מחברים מרחב של ספין 1 עם מרחב של ספין אפס.

הערה 4.8 • ברור ש- $|\uparrow\uparrow\rangle$ הוא המצב היחיד עם $s = 1, m = 1$. על מצב זה אפשר להפעיל את האופרטור $s_- = s_{1-} + s_{2-}$. נזכר

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (4.90)$$

אזי

$$\begin{aligned} s_- \underbrace{|\uparrow\uparrow\rangle}_{|s=1, m=1\rangle} &= \sqrt{(1+1)(1-1+1)} |s=1, m=0\rangle \\ &= \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} |\downarrow\uparrow\rangle + \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} |\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

קיבלנו את $|s=1, m=0\rangle$ (כמעט בחינם). אם נמשיך כך, נקבל שלושה וקטורים עצמיים. את הרביעי ניתן לקבל על ידי אורתוגונליות.

• המקדמים שמקשרים בין הבסיס $\{m_1, m_2\}$ ל- $\{s, m\}$,

$$|s, m\rangle = c_1 |\downarrow\downarrow\rangle + c_2 |\uparrow\downarrow\rangle \quad (4.91)$$

(c_1, c_2) נקראים **מקדמי קלבש-ג'ורדן**. בבחירה, תמיד ממשיים.

4.6 חיבור תנע זוויתי כללי

נסתכל על שני אופרטורים, \mathbf{J}_1 ו- \mathbf{J}_2 , שפועלים במרחבים אחרים.

$$\begin{aligned} [J_{1i}, J_{1j}] &= i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \\ [J_{1i}, J_{2j}] &= 0 \end{aligned}$$

אופרטור סיבוב, משרה סיבוב בתת מרחב 2-1,

$$\left(1 - \frac{i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{n}\delta\phi}{\hbar}\right) \otimes \left(1 - \frac{i\mathbf{J}_2 \cdot \hat{n}\delta\phi}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i(\mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{J}_2) \cdot \hat{n}\delta\phi}{\hbar}$$

כאשר

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (4.92)$$

חשוב לזכור ש-

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \quad (4.93)$$

(עבור J תנע זוויתי כללי)

צריך לעבור בסיס:

4.6.1 אפשרות ראשונה:

מצבים עצמיים של $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$, נסמן על ידי $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$. בבסיס זה,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &= j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\ J_{iz} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &= \hbar m_i |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (i = 1, 2) \end{aligned}$$

4.6.2 אפשרות שניה לבסיס:

הבסיס שבו $J_z, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2$, נשים לב ש- $[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_i^2] = 0$, ולכן ניתן לבחור בסיס שמלכסן אותם סימולטנית. נראה שהם מתחלפים:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)(\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2) = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + \mathbf{J}_1\mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_2\mathbf{J}_1 \\ J_{1+} &= J_{ix} + iJ_{iy} \\ J_{1-} &= J_{ix} - iJ_{iy} \\ \mathbf{J}^2 &= \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 - J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} + 2J_{1z}J_{2z} \end{aligned}$$

נשתמש ב- $[J^2, J_{\pm}] = 0$, $[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar H_z$ ו- $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$. המצבים בבסיס הנ"ל יסומנו ב- $|j_1, j_2; j, m\rangle$. בבסיס זה,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i^2 |j_1, j_2; j, m\rangle &= j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \mathbf{J}^2 |j_1, j_2; j, m\rangle &= j(j + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j, m\rangle \\ J_z |j_1, j_2; j, m\rangle &= \hbar m |j_1, j_2; j, m\rangle \end{aligned}$$

חשוב לזכור שלמרות ש- $[\mathbf{J}^2, J_z] = 0$, $[\mathbf{J}^2, J_{1z}] \neq 0$. נזכר בדוגמה של ספינים:

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle}_{(1)} \quad (4.94)$$

(1) הם מקדמי קלבש-ג'ורדן, שאותם אנחנו רוצים לחשב.¹⁴

¹⁴ישנם טבלאות למקדמי קלבש-ג'ורדן, בפרט גם באתר הקורס

שאר ערכי m יתקבלו על ידי

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \hbar [2(j_1 + j_2)]^{1/2} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$$

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \frac{1}{\hbar [2(j_1 + j_2)]^{1/2}} (J_{1-} + J_{2-}) \left| j_1 j_2; \overbrace{j_1}^{m_1} \overbrace{j_2}^{m_2} \right\rangle_{(B)}$$

(כאשר הקטים המסומנים ב- (B) הם בבסיס של $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ ושאר הקטים בבסיס של $|j_1 j_2; jm\rangle$)

$$= \frac{1}{[2(j_1 + j_2)]^{1/2} \hbar} \left[\hbar \sqrt{2j_1} |j_1 j_2; j_1 - 1, j_2\rangle_{(B)} + \hbar \sqrt{2j_2} |j_1 j_2; j_1, j_2 - 1\rangle_{(B)} \right]$$

$$= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle_{(B)} + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle_{(B)} \quad (4.102)$$

שאר מצבי m מתקבלים על ידי הורדות נוספות.

אחרי בניית צירופים של בסיס ישן שפורשות את $|j_1 + j_2, m\rangle$, זים "ימינה" בטבלה. במקרה של $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$, תזוזה ימינה היא ל- $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$. יודעים שצירוף בבסיס הישן של $|j_1 j_2; j_1 - 1, j_2\rangle$ ו- $|j_1 j_2; j_1, j_2 - 1\rangle$ ומחפשים צירוף אורתוגונלי ומנורמל ל- (4.102). במקרה זה,

$$|j_1 + j_2 - 1, j_2 + j_1 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2; j_1, j_2 - 1\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2; j_1 - 1, j_2\rangle \quad (4.103)$$

נחזור שוב לדוגמה של ספין $\frac{1}{2}$. בחרנו את $|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$, ובאמצעות אופרטורי הורדה, עברנו ל- $|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ ול- $|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$, ומאורתוגונליות, מצאנו את $|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$.

4.6.4 תכונות של מקדמי קלבש-ג'ורדן

$$|j_1, j_2; jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \quad (4.104)$$

1.

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \neq 0 \quad (4.105)$$

אם (ורק אם? לא בטוח שזה "ורק אם", יריב צריך לחשוב על זה) $j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$ (כאשר בלי הגבלת הכלליות, $j_1 \geq j_2$)

2.

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \neq 0 \quad (4.106)$$

אם ורק אם $m = m_1 + m_2$.

3. נבחר את המקדמים כממשיים.

4. המקדם $\langle j_1 j_2; j_1, j - j_1 | j_1 j_2; jm\rangle$ נבחר כחיובי

שתי הבחירות בנקודות (3) ו-(4) קובעות את הסימנים של המקדמים.

4.7 הפיצול הדק של אטום המימן¹⁷

אטום המימן שפתרנו בסמסטר שעבר, לא מכיל מספר תיקונים ש"מקלקלים" קצת את התמונה, אבל הופכות אותו למדויק יותר. תיקון אחד נובע מצימוד של ספינים ותיקון נוסף יחסותי. במהלך החישוב, אנחנו נרמה מעט. החישוב האמיתי נובע ממשוואת דיראק. הפיצול דק הוביל לשני פרסי נובל. האחד על מדידתו והאחד על הבנתו (על ידי פיינמן). בקורס הקודם רשמנו את ההמילטוניאן של אטום המימן:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4.107)$$

כאשר ze הוא מטען הגרעין. פתרנו אותו על ידי רישום הלפלסיאן:

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (4.108)$$

וקיבלנו מצבים עצמיים $|\phi_{nlm}\rangle$,

$$\langle \mathbf{r} | \phi_{nlm} \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.109)$$

l מקבל ערכים: $l = 0, \dots, n - 1$ ורמות האנרגיה

$$E_n = -\frac{1}{2} m_e c^2 \frac{(z\alpha)^2}{n^2} \quad (4.110)$$

כאשר α , מספר חסר מימדים המכונה Fine Structure constant,

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (4.111)$$

ספין מוסיף ניוון $\times 2$ לכל רמה. H_0 הוא קירוב למציאות, ויש לו תיקונים:

1. תיקונים יחסותיים¹⁸: אנרגיה קינטית יחסותית

$$K = \sqrt{(pc)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \quad (4.112)$$

נפתח את השורש אזי

$$K \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} \quad (4.113)$$

(בעצם, צריך לעשות את זה עם משוואת דיראק, אבל בנתיים נשתמש בזה) זהו תיקון ל- H_0 ונקרא לו

$$H_1 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \right)^2 \frac{1}{m_e c^2} \quad (4.114)$$

נעריך את סדר הגודל של הביטוי: $\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}$ היא בערך האנרגיה של אטום מימן:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \approx \alpha^2 m_e c^2 \quad (4.115)$$

ולכן התיקון הוא מסדר גודל של α^2 קטן יותר מהסדר המוביל, ולכן נוכל לטפל בו באמצעות תורת הפרעות.

לפעמים
סבלנות
ומחשבה
הם הרבה
יותר חשובים
מהפעלה של
טכניקות
מתקדמות.

¹⁷מבוסס על גזירוביץ', הוא אוהב לעבוד עם SI, ואנחנו נלך איתו
¹⁸פה אנחנו מרמים קצת, בצורה שנותנת את התוצאה הנכונה

2. **צימוד ספין-מסילה:** יש אינטראקציה של הספין של האלקטרון (המומנט המגנטי של הספין של האלקטרון) עם השדה המגנטי שנוצר מהמטען של הפרוטון. הפרוטון יוצר שדה חשמלי, והאלקטרון אז בתוכו. חלקיק שזז במהירות גבוהה בתוך שדה חשמלי, מרגיש שדה מגנטי

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2} = -\frac{\mathbf{v} \times (-\vec{\nabla}\phi)}{c^2} \\ &= \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \frac{\mathbf{r} d\phi}{r dr} \end{aligned}$$

כאשר $\phi(\mathbf{r})$ הוא הפוטנציאל הנוצר על ידי הפרוטון. המומנט המגנטי של האלקטרון נתון על ידי

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e} g \mathbf{S} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S} \quad (4.116)$$

(כאשר g היחס הג'ירומגנטי). המומנט הנ"ל מגיב עם השדה המגנטי על ידי האינטראקציה

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} &= \frac{e}{m_e} \mathbf{S} \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{r} \frac{1}{c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \underbrace{\mathbf{p} \times \mathbf{r}}_{=-\mathbf{L}} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \\ &= -\frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \end{aligned}$$

במקרה של אטום מימן,

$$\phi = \frac{ze}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4.117)$$

ולכן האינטראקציה הנוספת היא

$$H_2 = \frac{1}{2} \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3} \quad (4.118)$$

19

4.7.1 נחשב את התיקון היחסותי, H_1

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \left(H_0 + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \end{aligned}$$

נחשב באמצעות תורת ההפרעות:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{nlm} | H_1 | \phi_{nlm} \rangle &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left\langle \phi_{nlm} \left| \left(H_0 + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \left(H_0 + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right| \phi_{nlm} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left[E_n^2 + 2E_n \left\langle \phi_{nlm} \left| \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right| \phi_{nlm} \right\rangle + \left\langle \phi_{nlm} \left| \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2 \right| \phi_{nlm} \right\rangle \right] \end{aligned}$$

¹⁹ התיקון הזה אינו נכון. באופן כללי, צריך לקחת בחשבון שהאלקטרון אינו נע בקו ישר, מכאן מגיע הפקטור $\frac{1}{2}$. דיון מפורט בלקסון.

הוא נובע גם ממשוואת דיראק

נותר לעשות אינטגרלים על דרגות החופש המרחביות, ונקבל:

$$\langle \phi_{nlm} | H_1 | \phi_{nlm} \rangle = -\frac{1}{2} m_e c^2 (z\alpha)^2 \cdot \left[\frac{2(z\alpha)^2}{n^3(2l+1)} - \frac{3(z\alpha)^2}{4n^4} \right] \quad (4.119)$$

כאן אין תיקון שנובע מהספין: H_1 לא תלוי ב- S ולכן אינו מפצל ניוון שתלוי ב- S .

4.7.2 נחשב את תיקון ספין מסילה, ${}^{20}H_2$

עבור כל n ו- ℓ נתונים, יש ניוון של $2(2\ell+1)$ ב- H_0 . (המקדם "2" מגיע מהספין). עבור $n=2$, אפשר לקבל $\ell=0$, ואז יש ניוון 2 (ספין) ועבור $\ell=1$, יש ניוון של $2 \cdot 3 = 6$ (2 מהספין, 3 מהתנע הזוויתי האורביטלי). בעקרון, היינו צריכים תורת הפרעות מנוונת, אבל את הלכסון במרחבים המנוונים אנחנו מקבלים באמצעות חיבור תנע זוויתי. נשתמש בעובדה ש-

$$\mathbf{S} + \mathbf{L} = \mathbf{J} \quad (4.120)$$

כאשר \mathbf{J} אופרטור התנע הזוויתי הכללי. הוא אינו קשור לאופרטור $\mathbf{X} \times \mathbf{P}$, אלא הוא יוצר הסיבובים.

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{L}^2 \quad (4.121)$$

ולכן, קיבלנו שהביטוי שיש לנו בהמילטוניאן, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ הוא

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \quad (4.122)$$

כלומר, כדי ללכסן את האופרטור $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, נעבוד בבסיס שבו $J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2$ מלוכסנים, ואז הבעיה נפתרה. נזכר: הערכים האפשריים שהאינדקס j , השייך ל- \mathbf{J}^2 , יכול לקבל, בהקבע ℓ , האינדקס השייך ל- \mathbf{L}^2 הם:

$$j = \ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2} \quad (4.123)$$

וכמובן, עבור כל j

$$m = -j, \dots, +j \quad (4.124)$$

אז

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \left| \ell + \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \left| \ell + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \left(\left(\ell + \frac{1}{2} \right) \left(\ell + \frac{3}{2} \right) - \ell(\ell+1) - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \right) \left| \ell + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \ell \left| \ell + \frac{1}{2} \right\rangle \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \left| \ell - \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \left| \ell - \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2} \hbar^2 (\ell+1) \left| \ell - \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

כאן, הניוון של הרמה הראשונה, עבור $\left| \ell + \frac{1}{2} \right\rangle$, הוא $2(\ell + \frac{1}{2}) + 1$, והניוון של $\left| \ell - \frac{1}{2} \right\rangle$ הוא $2(\ell - \frac{1}{2}) + 1$. (הניוון נובע מ- \mathbf{J}_z . כל ערך של "m" שמתאים ל- j הזה הוא מנוון).

• ב- $n=2$, הניוון הכולל:

$$2 \cdot \left(\overbrace{\frac{1}{2}}^{\ell+\frac{1}{2}} + 1 \right) + 0 = 2 \quad \text{עבור } \ell=0, \text{ אם } j=0+\frac{1}{2}, \text{ הניוון הוא } 2$$

- עבור $\ell = 1$, הניוון הוא 6.

נשאר החלק הרדיאלי של ההמילטוניאן $(\frac{1}{r^3})$,

$$\langle \phi_{jm_j\ell} | H_2 | \phi_{jm_j\ell} \rangle = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{ze^2 \hbar}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \cdot \begin{cases} \ell & , j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell + 1) & , j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \cdot \int_0^\infty r^2 dr \cdot (R_{n\ell}(r))^2 \frac{1}{r^3} \quad (4.125)$$

את ה"אינטגרציה" הזוויתית ($\iint Y_{\ell m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} Y_{\ell m}^* d\varphi d\theta$) קיבלנו באמצעות חיבור תנע זוויתי, ונתור לנו לעשות את האינטגרל על הרכיב הרדיאלי. מחישוב האינטגרל מתקבל:

$$\ell \neq 0 \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n\ell} = \frac{z^3}{a_0^3} \frac{2}{n^3 \ell (\ell + 1) (2\ell + 1)} \quad (4.126)$$

והתוצאה הכללית עבור צימוד ספין-מסילה,

$$\Delta E_{L.S} = \frac{1}{4} m_e c^2 (z\alpha)^4 \frac{\{-\ell-1\}}{n^3 \ell (\ell + \frac{1}{2}) (\ell + 1)} \quad \ell \neq 0 \quad (4.127)$$

(כאשר $\{-\ell-1\}$ הוא ℓ עבור $j = \ell + \frac{1}{2}$ ו- $\ell-1$ עבור $j = \ell - \frac{1}{2}$) יחד עם התיקון היחסי מתקבל

$$\Delta E_{total} = \frac{1}{2} m_e c^2 (z\alpha)^4 \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (4.128)$$

(תקף גם עבור $\ell = 0$)

4.7.3 סיכום התוצאות:

עבור אטום מימן "אידיאלי" $S = \frac{1}{2}$, $\ell = 0, 1$, $n = 2$, לכולם יש אותה רמת אנרגיה

$${}^2P_{3/2}, \underbrace{{}^2P_{1/2}}_{\substack{\ell=1 \\ j=\frac{1}{2} \\ n=2}}, \underbrace{{}^2S_{1/2}}_{\substack{\ell=0 \\ j=\frac{1}{2} \\ n=2}} \quad (4.129)$$

(S) היא הנוטציה המקובלת ל- $\ell = 0$, ו- P עבור $\ell = 1$)

נוסף תיקון ספין-מסילה, שגורם לפיצול (הפעם, לכל אחד מהאיברים רמת אנרגיה אחרת הנבדלת ב- $\Delta E_{S.L}$) :

$$\rightarrow \begin{cases} {}^2P_{3/2} \\ {}^2S_{1/2} \\ {}^2P_{1/2} \end{cases} \quad (4.130)$$

לעומת זאת, לאחר התיקון היחסותי,

$$\rightarrow \begin{cases} \cdot \\ {}^2P_{3/2} \\ {}^2S_{1/2}, {}^2P_{1/2} \end{cases} \quad (4.131)$$

כלומר, התיקון היחסותי מוסיף ניוון שהוסיף תיקון ספין-מסילה. ב-1947, Lamb מדדו פיצול נוסף ברמה זו: $m_e c^2 (z\alpha)^4 \alpha \log \alpha$, אינטראקציה של אלקטרון עם השדה של עצמו. פיינמן הסביר את הפיצול באמצעות אלקטרודינמיקה קוונטית.

5 תנועה של חלקיק טעון בשדה מגנטי

5.1 חזרה על דינמיקה קלאסית²¹

חלקיק נקודתי בעל מסה m_e ומטען $-e$.
קלאסית, החלקיק מקיים את משוואות כח לורנץ:

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (5.1)$$

קוונטית, צריך המילטוניאן: השדה החשמלי והמגנטי, לא מופיעים בהמילטוניאן, אלא הפוטנציאלים עבור השדות הללו.

כדי לבנות את ההמילטוניאן, צריך פוטנציאלים עבור השדות \mathbf{E} ו- \mathbf{B} :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \vec{\nabla} \times \mathbf{A} \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\vec{\nabla} \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \end{aligned}$$

התנאים נובעים ממשוואות מקסוול: התנאי הראשון נובע מ- $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0$, והשני מ- $\vec{\nabla} \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0$.

הערה 5.1 יש לנו חופש בחירה, חופש כיוול (gauge invariance), של הפוטנציאלים.

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \vec{\nabla} g(\mathbf{r}, t) \quad (5.2)$$

יוביל לאותו שדה מגנטי. השדה החשמלי ישאר זהה אם נבחר

$$\phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (5.3)$$

התנאי ל- \mathbf{A} ברור: הוא נובע מזה ש- $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} = 0$.

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{\partial (\vec{\nabla} g)}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi - \vec{\nabla} \frac{\partial g}{\partial t} \quad (5.4)$$

אזי ההמילטוניאן בשדה אלקטרומגנטי הוא

$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 - e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (5.5)$$

ואכן, לפי משוואות המילטון:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} \end{aligned}$$

נבדוק שמשוואות תהנועה אכן משתחררות:

$$v_i = \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \quad (5.6)$$

מסקנה מעניינת שנובעת מהביטוי: התנע אינו "mv", הוא תלוי בפוטנציאל. מאחר ולפוטנציאל יש חופש כיוול, יש לנו חופש כיוול בתנע!

²¹נעבוד ביחידות SI

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{e}{m_e} (p_k + eA_k) \frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (5.7)$$

(כאשר בביטוי הראשון יש סכימה על k).

$$\begin{aligned} m_e \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= \frac{d}{dt} (p_i + eA_i) = \frac{dp_i}{dt} + e \left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} \right) \\ &= -\frac{e}{m_e} \overbrace{\left(m_e \frac{dx}{dt} \right)}^{\frac{dp_i}{dt}} \frac{\partial A_k}{\partial x_i} + \frac{e \partial \phi}{\partial x_i} + e \frac{\partial A_i}{\partial t} + e \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} \\ &= e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + e \frac{dx_k}{dt} \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x_i} \right) \end{aligned}$$

אנחנו יכולים לזהות בביטוי את השדה החשמלי ואת השדה המגנטי מכח לורנץ,

$$\begin{aligned} &= eE_i + e \left(\mathbf{v} \times \left(-\vec{\nabla} \times \mathbf{A} \right) \right)_i \\ &= eE_i - e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_i \end{aligned}$$

ואכן, ההמילטוניאן נותן לנו את כח לורנץ.

נסתכל גם על הלגרנזיאן (הוא יפה יותר כאן...):

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (5.8)$$

כאשר $\mathbf{p} = m_e \dot{\mathbf{x}} - e\mathbf{A}$ אזי

$$L = \dot{\mathbf{x}}(m_e \dot{\mathbf{x}} - e\mathbf{A}) - \frac{1}{2m_e} (m_e \dot{\mathbf{x}} - e\mathbf{A} + e\mathbf{A})^2 + e\phi \quad (5.9)$$

ולבסוף, אחרי עוד קצת אלגברה:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \frac{1}{2} m_e \dot{\mathbf{x}}^2 + e\phi - e\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A} \quad (5.10)$$

5.2 הבעיה הקוואנטית²²

בהנתן ההמילטוניאן, ניתן לעבור לבעיה הקוונטית: משוואת שרדינגר תקבל את הצורה,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \left[\frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + e\mathbf{A} \right)^2 - e\phi \right] \psi \quad (5.11)$$

כאשר $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$. נקודה בולטת במשוואת שרדינגר: השדות עצמם אינם מופיעים, מופיעים רק הפוטנציאלים: הפוטנציאל הוקטורי המגנטי והפוטנציאל החשמלי. במכניקה קוונטית, מחויבים להשתמש בפוטנציאלים, ויש לזה השלכות.

במעבר כיוול, נקבל את משוואת שרדינגר,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + e\mathbf{A}' + e\vec{\nabla}g \right)^2 - e\phi' - e \frac{\partial g}{\partial t} \right] \psi \quad (5.12)$$

כמובן שה"תוצאות" חייבות להיות זהות גם אחרי טרנספורמצית הכיוול. נגדיר את פונקצית הגל,

$$\psi' = e^{-i\Lambda(\mathbf{r},t)} \psi \quad (5.13)$$

כאשר $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ היא פאזה התלויה במקום ובזמן, שהיא הפתרון של המשוואה לאחר הטרנספורמציה. הפאזה לא משפיעה על התוצאה הפיזיקאלית.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\Lambda} \psi') = -i \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \psi' e^{-i\Lambda} + e^{-i\Lambda} \frac{\partial \psi'}{\partial t} \quad (5.14)$$

אזי

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi = -i\hbar \vec{\nabla} (e^{-i\Lambda} \psi') = -\hbar (\vec{\nabla} \Lambda) e^{-i\Lambda} \psi' - i\hbar e^{i\Lambda} \vec{\nabla} \psi' \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= e^{-i\Lambda} \left[-i \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi' \\ -\hbar \vec{\nabla} \psi &= e^{-i\Lambda} \left[-\hbar (\vec{\nabla} \Lambda) - i\hbar \vec{\nabla} \right] \psi' \end{aligned}$$

אפשר להסתכל על הטרנספורמציה בתור "שינוי באופרטור הגזירה" על ידי הוספת איבר. נציב זאת בהמילטוניאן

$$i\hbar \mathcal{L}^{-i\Lambda} \left[-i \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi' = \left[\frac{1}{2m_e} \mathcal{L}^{-\Lambda} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \hbar (\vec{\nabla} \Lambda) + e\mathbf{A}' + e\vec{\nabla}g \right)^2 - e\phi' \mathcal{L}^{-i\Lambda} - e \frac{\partial g}{\partial t} \mathcal{L}^{-i\Lambda} \right] \psi' \quad (5.16)$$

אזי, אם נבחר $\Lambda = \frac{e}{\hbar} g$, קיבלנו תוצאות זהו. נחזור למשוואת שרדינגר:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \left[\frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + e\mathbf{A}' \right) - e\phi' \right] \psi' \quad (5.17)$$

לסיכום, חופש הכיול:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \vec{\nabla}g \\ \phi' &= \phi + \frac{\partial g}{\partial t} \end{aligned}$$

ונתאים את הפאזה

$$\psi' = e^{i \frac{e}{\hbar} g(\mathbf{r}, t)} \psi \quad (5.18)$$

הפאזה אינה משפיעה על התוצאה הפיזיקאלית, $|\psi|^2$. דרך מודרנית לחשוב על הטרנספורמציה הזו, נובעת ממשוואת שרדינגר של חלקיק חופשי:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi \quad (5.19)$$

למשוואה יש סימטריה $\psi \rightarrow e^{i\phi} \psi$ עבור ϕ קבועה (סימטריה זו מכונה $U(1)$, סימטריה גלובאלית). נדרוש שהמשוואה תהיה סימטרית תחת הטרנספורמציה

$$\psi \rightarrow e^{i\phi(\mathbf{r}, t)} \psi \quad (5.20)$$

כאשר הפעם, ϕ היא פונקציה של מקום וזמן. זו "סימטריה לוקאלית". כדי שתהיה סימטריה כזו, חייבים להמציא את השדה האלקטרומגנטי. באמצעות השיטה הזו, מייצרים, בימנו, את רוב הכוחות בטבע.

5.3 פתרון משוואת שרדינגר בשדה מגנטי קבוע²³

עבור שדה

$$\mathbf{B} = B\hat{z} \quad (5.21)$$

נבחר בכיול של לנדאו:

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \quad (5.22)$$

(בחירה אפשרית אחרת: $\mathbf{A} = (-y\frac{B}{2}, x\frac{B}{2}, 0)$.)

²³כל פעם שאתם צוברים יותר מדי בטחון עצמי לגבי כמה פיזיקה אתם יודעים, תפתחו את לנדאו וליפשיץ. זה לפחות מה שאני עושה" -י. כפרי

לפני שנפתור את הבעיה, כמה נקודות:

1. המהירות בכיוון \hat{z} , ניתנת על ידי,

$$v_i = \frac{1}{m_e} [p_i + eA_i] \quad (5.23)$$

כאשר A_i היא פונקציה של מקום. בצורה כללית, בדרך כלל, $[v_i, v_j] \neq 0$. כלומר, המהירות לא יכולה להיות מוגדרת סימולטנית בשני כיוונים שונים. נחשב את יחסי החילוף:

$$\begin{aligned} [v_x, v_y] &= \frac{1}{m_e^2} [p_x + eA_x, p_y + eA_y] \\ &= \frac{e}{m_e^2} [[p_x, A_y] + [A_x, p_y]] \\ & \text{כאשר את התנע, כזכור, בחרנו כך ש-} [p_x, p_y] = 0 \\ &= \frac{e}{m_e^2} [-i\hbar\partial_x A_y + i\hbar\partial_y A_x] \\ &= (-?) \frac{ie\hbar}{m_e^2} B_z \end{aligned}$$

כלומר, ככל שהשדה המגנטי בכיוון \hat{z} חזק יותר, האי-ודאות במישור הניצב לו, גדלה. בצורה דומה,

$$\begin{aligned} [v_y, v_z] &= \frac{ie\hbar}{m_e^2} B_x \\ [v_z, v_x] &= \frac{ie\hbar}{m_e^2} B_y \end{aligned}$$

2. כיוול שונה דורש שינוי בפונקציה הגל. כלומר, עבור $\psi' = e^{i\frac{e}{\hbar}g}\psi$

$$\langle \psi' | \mathbf{x} | \psi' \rangle = \langle \psi | \mathbf{x} | \psi \rangle \quad (5.24)$$

כי הפאזה אינה משנה את ערך התצפית. אבל

$$\langle \psi' | \mathbf{p} | \psi' \rangle \neq \langle \psi | \mathbf{p} | \psi \rangle \quad (5.25)$$

כי \mathbf{p} תלוי בכיוול.

$$e^{-i\frac{e}{\hbar}g}\mathbf{p}e^{i\frac{e}{\hbar}g} = \mathbf{p} + e\vec{\nabla}g \quad (5.26)$$

אבל

$$\mathbf{\Pi} = m\mathbf{v} = \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad (5.27)$$

נשמר בטרנספורמציה כיוול:

$$\langle \psi' | \mathbf{\Pi} | \psi' \rangle = \langle \psi | \mathbf{\Pi} | \psi \rangle \quad (5.28)$$

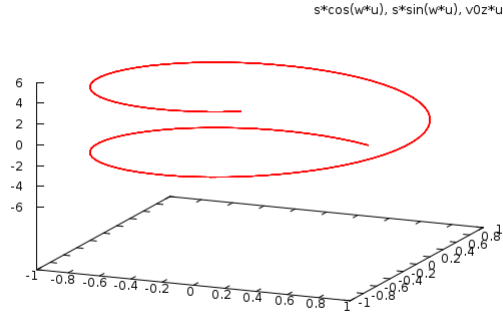
3. קלאסית, משוואות התנועה בשדה קבוע,

$$m_e \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (5.29)$$

ועבור $\mathbf{B} = B\hat{z}$, פתרון משוואות התנועה הוא מהצורה

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \sigma \cos(\omega_c t - \varphi_0) \\ y(t) &= y_0 + \sigma \sin(\omega_c t - \varphi_0) \\ z(t) &= v_{0z}t + z_0 \end{aligned}$$

כאשר $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$.



כאשר

$$\begin{aligned} x_0 - x &= -\frac{1}{\omega_c} v_y \\ y_0 - y &= \frac{1}{\omega_c} v_x \end{aligned}$$

כאשר (x_0, y_0) הוא מרכז המעגל.

הפתרון נרשום את ההמילטוניאן מפורשות:

$$H = \frac{1}{2m_e} (p_x - eBy)^2 + \frac{1}{2m_e} P_y^2 + \frac{1}{2m_c} P_z^2 \quad (5.30)$$

ורוצים לפתור את משוואת שרדינגר:

$$H\psi = E\psi \quad (5.31)$$

שימו לב ש- x, z אינם מופיעים מפורשת בהמילטוניאן, ולכן התנע בכיוונים אלו, p_x, p_z , מתחלף עם ההמילטוניאן. אזי נבחר פונקציית גל

$$\psi = e^{i/\hbar(p_x x + p_z z)} \chi(y) \quad (5.32)$$

נציב את פונקציית הגל במשוואה ונקבל

$$\frac{1}{2m_e} \left[(\hat{p}_x - eB\hat{y})^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] e^{i/\hbar(p_x x + p_z z)} \chi(y) = E e^{i/\hbar(p_x x + p_z z)} \chi(y) \quad (5.33)$$

$$\frac{1}{2m_e} \left[(p_x - eB\hat{y})^2 + p_z^2 - \hbar \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \chi(y) = E \chi(y) \quad (5.34)$$

כאשר במשוואה השנייה, p_x, p_z הם מספרים, ולא אופרטורים. נרשום,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \chi + \frac{e^2 B^2}{2m_e} \left(y - \frac{p_x}{eB} \right) \chi(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m_e} \right) \chi(y) \quad (5.35)$$

זוהי משוואה לאוסצילטור הרמוני חד מימדי $(p^2 + x^2)\psi = E\psi$. נזהה את הקבועים,

$$\omega_c = \frac{|e|B}{m_e}$$

$$y_0 = \frac{p_x}{eB}$$

ולכן, הספקטרום יהיה,

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{p_z^2}{2m_e} \quad (5.36)$$

המספרים הקוונטיים הם n, p_z ו- p_x , שמספר על ניוון. פונקצית הגל,

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_H^{1/2} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}} H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right) \quad (5.37)$$

כאשר $a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}$ ו-

$$\psi = e^{i(p_x x + p_z z)} \chi_n a_H \quad (5.38)$$

עד כדי פאזה, פונקצית הגל אינה תלויה ב- x .

זכרו ש- $y_0 = \frac{p_x}{eB}$.

הערה 5.2 בחירה של כיוול אחר היתה יכולה לתת לנו מבנה דומה, שממורכז סביב x ולא סביב y . אבל יש לנו ניוון אינסופי ב- x , וניתן להשתמש בו כדי לעבור בין פונקציות גל. בחירה של כיוול, נותנת לנו מידע שונה על הבעיה.

זכרו, שקלאסית,

$$y_0 = y + \frac{1}{\omega_c} v_x$$

$$x_0 = x - \frac{1}{\omega_c} v_y$$

כלומר,

$$y_0 = y + \frac{1}{\omega_c} \left(\frac{1}{m_e} \left(p_x + e \underbrace{A_x}_{-By} \right) \right)$$

$$= y + \frac{1}{\frac{eB}{m_e}} \left(\frac{1}{m_e} (p_x - eBy) \right)$$

$$= \frac{p_x}{eB}$$

אז y_0 הוא אכן מרכז התנועה.

$$x_0 = x - \frac{p_y}{eB} \quad (5.39)$$

(מושאר בתור תרגיל בית, לבדוק שהוא גודל נשמר)

כמובן ש- $[x_0, y_0] \neq 0$, ולכן לא ניתן לדעת את שניהם במקביל.

כיוול שונה כמובן, שהיינו יכולים להתחיל בכיוון

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad (5.40)$$

ואז היינו מקבלים פונקציות גל שמרוחות על ציר y סביב $x_0 = \frac{p_y}{eB}$. התוצאות מסתדרות, בגלל הניוון הענק.

ניוון? נסתכל על מערכת בשטח $S = L_x \cdot L_y$ יחידות אורך, לא תנע, ו- S שטח, ולא ספין) יודעים ש- p_x מקבל ערכים (עבור חלקיק חופשי בתנאי שפה מחזוריים):

$$p_x = 0, \frac{2\pi\hbar}{L_x}, \frac{2\pi\hbar \cdot 2}{L_x}, \dots \quad (5.41)$$

לכן, באינטרוול Δp_x , יש $\frac{L_x}{2\pi\hbar} \Delta p_x$ ערכים אפשריים של p_x . נזכור ש-

$$y_0 = \frac{p_x}{eB} \quad (5.42)$$

אבל y_0 יכול לקבל ערכים רק בתוך שטח המערכת: $0 < y_0 < L_y$ כלומר,

$$0 < \frac{p_x}{eB} < L_y \quad (5.43)$$

ולכן, האינטרוול של ערכי p_x , Δp_x , מוגבל על ידי L_y ונתון על ידי

$$\Delta p_x = eBL_y \quad (5.44)$$

ולכן מספר המצבים המנוונים נתון על ידי

$$\frac{eBL_y L_x}{2\pi\hbar} = \frac{eBS}{2\pi\hbar} \quad (5.45)$$

עבור ערך מסויים של n ו- p_z .
בדרך כלל, מגדירים אורך מגנטי,

$$\ell_B^2 = \frac{\hbar}{eB} \quad (5.46)$$

ורושמים שהניוון נתון על ידי

$$n^* = \frac{L_x L_y}{2\pi\ell_B^2} \quad (5.47)$$

או שהניוון ליחידת שטח הוא $\frac{1}{2\pi\ell_B^2}$, מספר המצבים ברמת לנדאו אחת.

$$\hbar\omega_c = \frac{eB\hbar}{m_e} = \frac{\hbar^2}{m_e\ell_B^2} \quad (5.48)$$

5.4 אפקט אהרונוב-בוהם²⁴

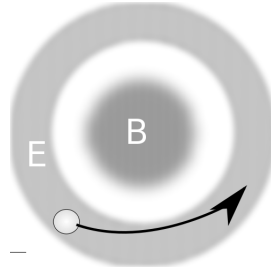
במכניקה קוונטית, חייבים להשתמש בפוטנציאלים, לתיאור תנועה של חלקיק בשדה אלקטרומגנטי. צילינדר, עם רדיוס פנימי וחיצוני ρ_a ו- ρ_b בהתאמה, יוצר פוטנציאל כך שחלקיק טעון, אינו יכול לעזוב את הגליל.

סליל אינסופי, העובר בתוך הצילינדר, יוצר שדה מגנטי, \mathbf{B} , שנמצא רק בתוך הסליל. לכן, אין שדה מגנטי שנמצא בתוך הצילינדר, אך מחוץ לסליל. המערכת מתוארת באיור (3).
בעיה הקוונטית, ננחש שהספקטרום החלקיק, שנמצא בתוך דפנות הצילינדר, $\psi(\rho_b) = \psi(\rho_a) = 0$, לא יושפע מהשדה המגנטי, שעובר בתוך הסליל. אפקט בוהם-אהרונוב קובע שניחוש זה שגוי. שימו לב, שלמרות שאין שדה בצילינדר, \mathbf{A} אינו מתאפס. לפי משפט סטוקס,

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int_S (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} \quad (5.49)$$

האינטגרל לאורך המסלול שווה לאינטגרל של הרוטור על המשטח,

$$= \pi\rho_c^2 B \quad (5.50)$$



איור 3: אפקט בוהם אהרונוב: החלקיק כלוא בתוך השדה החשמלי, הרחק מהשדה המגנטי

עבור מסלול ρ_c , רדיוס הסליל. נבחר

$$\mathbf{A} = \frac{B\rho_c^2}{2\rho} \hat{\phi} \quad (5.51)$$

ואכן, אינטגרל

$$\oint_c \overbrace{\frac{B\rho_c^2}{2\rho} \hat{\phi}}^{\mathbf{A}} \cdot \overbrace{\hat{\rho}}^{\mathbf{J}} d\phi = \pi\rho_c^2 B \quad (5.52)$$

עבור עקום c כלשהו ברדיוס ρ , מחוץ לסליל. (האינטגרל המשטחי מקבל תרומה מתוך השדה שבתוך הסליל, עבור כל משטח החותך את הסליל. ולכן, על שפה של כל משטח כזה, ובפרט, משטח ששפתו מחוץ לסליל, השדה אינו אפס).
נזכור ש-

$$\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \quad (5.53)$$

ובקוארדינות צילנדריות,

$$\vec{\nabla} = \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{\phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (5.54)$$

בנוכחות שדה מגנטי, פוטנציאל וקטורי, הופך להיות

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{ie}{\hbar} \frac{B\rho_c^2}{2} \quad (5.55)$$

כאשר פותרים את זה קלאסית, באמצעות משוואה

$$\oint_c \overbrace{\frac{B\rho_c^2}{2\rho} \hat{\phi}}^{\mathbf{A}} \cdot \overbrace{\hat{\rho}}^{\mathbf{J}} d\phi = \pi\rho_c^2 B \quad (5.56)$$

עבור עקום c כלשהו ברדיוס ρ , מחוץ לסליל. (האינטגרל המשטחי מקבל תרומה מתוך השדה שבתוך הסליל, עבור כל משטח החותך את הסליל. ולכן, על שפה של כל משטח כזה, ובפרט, משטח ששפתו מחוץ לסליל, השדה אינו אפס).

$$\oint_c \overbrace{\frac{B\rho_c^2}{2\rho} \hat{\phi}}^{\mathbf{A}} \cdot \overbrace{\hat{\rho}}^{\mathbf{J}} d\phi = \pi\rho_c^2 B \quad (5.57)$$

עבור עקום c כלשהו ברדיוס ρ , מחוץ לסליל. (האינטגרל המשטחי מקבל תרומה מתוך השדה שבתוך הסליל, עבור כל משטח החותך את הסליל. ולכן, על שפה של כל משטח כזה, ובפרט, משטח ששפתו מחוץ לסליל, השדה אינו אפס).
אז איפשהו בדרך התיקון שנובע מהשדה של הסליל יתאפס. בפיתוח הקוונטי, זה אינו קורה.

5.4.1 פתרון באמצעות אינטגרלי מסלול

בתרגול נפתור את הבעיה עבור חלקיק בצילינדר. כאן נפתור את אפקט בוהם אהרונוב בצורה קצת שונה. נתקוף את בעיית הפיזור על ידי אינטגרלי מסלול.

הבעיה: חלקיק יוצא מנקודה A , עובר דרך שני סדקים לתוך תווך שמכיל סליל אינסופי שיוצר שדה מגנטי B . החלקיק אינו נוגע בשדה המגנטי. נפתור את בעיית הפיזור ונראה שפיזור החלקיק תלוי באופן לא טריוויאלי בשדה המגנטי.

נסמן ב- x_1 נקודה באזור A ו- x_n נקודה באזור B (לאחר הסדקים, ולאחר השדה).

$$L = \frac{m_e}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - e \frac{dx}{dt} \cdot \mathbf{A} = L^{(0)} - e \frac{dx}{dt} \cdot \mathbf{A} \quad (5.58)$$

באינטגרלי מסלול, אנחנו מחפשים את הפעולה,

$$u(x, t; x', t') = A \sum_{\text{all path}} e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (5.59)$$

נסתכל על מסלול שמחבר את שתי הנקודות, $(x_{n-1}, t_{n-1}) \rightarrow (x_n, t_n)$. נקבל

$$S^{(0)}(n, n-1) \rightarrow S^{(0)}(n, n-1) - e \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \frac{dx}{dt} \cdot \mathbf{A} \quad (5.60)$$

כאשר $S^{(0)}$ היא הפעולה ללא פוטנציאל וקטורי. היות ו- \mathbf{A} לא תלוי בזמן, נוכל להחליף $t \rightarrow x$ ולקבל:

$$= S^{(0)}(n, n-1) - e \int_{x_{n-1}}^{x_n} \mathbf{A} \cdot ds \quad (5.61)$$

לכן, עבור כל מסלול (מסויים) שמחבר את x_1 ו- x_n , נקבל מכפלה על כל הקטעים, $[x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$

$$\prod_{\text{all segments}} e^{iS^{(0)}(n, n-1)\hbar} \rightarrow \left(\prod_{\text{all segments}} e^{iS^{(0)}(n, n-1)\hbar} \right) \cdot e^{-\frac{ie}{\hbar} \int_{x_1}^{x_n} \mathbf{A} \cdot ds} \quad (5.62)$$

זו אינה התרומה על כל המסלולים, אלא, השינוי בתרומה עבור מסלול אחד מסויים, כאשר ds רץ על המסלול המסויים הנבחר. תרומה זו תלויה רק בבחירת במסלול עצמו, היא אינה תלויה בדינמיקה. צריך לסכם על המסלולים. נסתכל על צמד מסלולים שנעים מעל השדה המגנטי.

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{A} \cdot ds_1 - \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{A} \cdot ds_2 = \oint_c \mathbf{A} \cdot ds = \int_s \vec{\nabla} \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{A} \quad (5.63)$$

כאשר עקום c הוא העקום המשותף של חיבור המסלול s_1, s_2 , ומשטח s , הוא המשטח שהם מגבילים. היות ומשטח זה אינו כולל את האזור בו יש שדה מגנטי, הרוטור של הפוטנציאל הוקטורי, מתאפס. בצורה דומה, הפאזה בין כל שני מסלולים העוברים מתחת לסליל, גם היא מתאפסת. ללא פוטנציאל וקטורי

$$U = \int_{\text{above}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar[\mathbf{x}(t)]} + \int_{\text{below}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar[\mathbf{x}(t)]} \quad (5.64)$$

עם פוטנציאל וקטורי,

$$U = \left[\int_{\text{above}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar[\mathbf{x}(t)]} \right] e^{-ie/\hbar \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} ds_{\text{above}}} + \left[\int_{\text{below}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar[\mathbf{x}(t)]} \right] e^{-ie/\hbar \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} ds_{\text{below}}} \quad (5.65)$$

כאשר המסלול בין x_1 ל- x_N הוא מסלול כלשהו שעובר מעל (מתחת) לשדה המגנטי. ניתן להוציא את הפאזה מהסכימה, משום שהפאזה של כל המסלולים שעוברים מעל (מתחת) לשדה, היא זהה.

כדי לראות תבנית התאבכות, צריך להסתכל על $|U|^2$. הפרש הפאזות בין המסלולים מעל ומתחת יראה מהצורה:

$$\begin{aligned} \Delta\phi &= -\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}_{\text{above}} + \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_n} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}_{\text{below}} \\ &= \frac{e}{\hbar} \oint_{\text{above and below}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \end{aligned}$$

כאשר כאן, האינטגרל המסלולי מקיף את הסליל, שבו יש שדה מגנטי, ולכן, לפ משפט סטוקס,

$$= \frac{e}{\hbar} \Phi_B \quad (5.66)$$

כאשר Φ_B הוא השתף בתוך הסליל. זווית ההתאבכות תלויה ב- $\cos(\Delta\phi)$, כאשר $\Delta\phi$ תלוי בשתף המגנטי. בכלל שלביו יש מחזוריות ב- 2π , התמונה שרואים תחזור על עצמה כל

$$\Delta\phi = 2\pi \implies \frac{e}{\hbar} \Phi_B = 2\pi \quad (5.67)$$

גודל זה מגדיר יחידה בסיסית של שתף מגנטי:

$$\Delta\Phi_B = \frac{2\pi\hbar}{e} \quad (5.68)$$

5.4.2 ניסויי התאבכות איבוד קוהרנטיות (dephasing)

או, למה לקח להם כל כך הרבה שנים לעשות ניסוי מפורש של אפקט בוהם-אהרונב.

נגדיר היטב שני מסלולים. נכניס למערכת של טבעת בין שני מסלולים, $\ell(x)$ שרצה במסלול העליון ו- $r(x)$ שנעה במסלול התחתון. נניח ששתי חבילות הגלים מוגבלות רק למסלול הקלאסי שמוקצה להן. איך נראית תבנית ההתאבכות בסוף?

במציאות, תמיד יש **סביבה**. שמשפיעה גם היא על ההתאבכות. הסביבה יכולה להיות גם מכשיר המדידה שלנו.

פונקציית הגל, ב- $t = 0$, הנקודה שבה האלקטרון נכנס לטבעת,

$$\psi(t=0) = [\ell(x) + r(x)] \otimes \chi_0(\eta) \quad (5.69)$$

כאשר χ_0 היא פונקציית הגל של הסביבה, ו- η הן דרגות החופש של הסביבה (סדר גודל של 10^{23} דרגות חופש). נשאל את עצמנו מה פונקציית הגל, בזמן τ , ביציאה מהטבעת.

החבילה שזזה למעלה, עוברת אינטראקציה שונה עם הסביבה מפונקציית הגל שעברה למטה:

$$\psi(x, \tau) = \ell(x, \tau) \otimes \chi_\ell(\eta, \tau) + r(x, \tau) \otimes \chi_r(\eta, \tau) \quad (5.70)$$

נסתכל על תבנית ההתאבכות:

$$|\psi(\tau)|^2 = |\ell(x, \tau) \otimes \chi_\ell(\eta, \tau)|^2 + |r(x, \tau) \otimes \chi_r(\eta, \tau)|^2 + 2\text{Re} \left[\ell^*(x, \tau) r(x, \tau) \int d\eta \chi_\ell^*(\eta, \tau) \chi_r(\eta, \tau) \right] \quad (5.71)$$

איבר ההתאבכות הוא המחובר השלישי. האינטגרל $\int d\eta \chi_\ell^*(\eta, \tau) \chi_r(\eta, \tau)$ יהיה אפס, כי מספיק שדרגת חופש אחת אורתוגונלית, וכל האינטגרל מתאפס. כאשר שתי הסביבות נהיות אורתוגונליות, אין התאבכות, והמערכת **איבדה קוהרנטיות**.

דרך אחרת להסתכל על זה: הסביבה מכניסה פאזה ראנדומית, ש"מוחקת" את תמונת ההתאבכות. אפשר להראות ש-

$$\langle e^{i\phi} \rangle = \int d\eta \chi_\ell^*(\eta) \chi_r(\eta) \quad (5.72)$$

אפשר להראות ש- ϕ הוא הפרש הפאזות הרנדומיות ש- ℓ ו- r מקבלות, ו- $\langle e^{i\phi} \rangle$ הוא הממוצע על פני מסיונות.

הנושא נוגע בכל מני דברים שבגלכם הצעיר, מאוד מטרידים אתכם. בגיל המתקדם והציני, אני מעדיף להשאיר מחשבות כאלו לשירותים. י.כ.

6 בעיות תלויות בזמן²⁵

עד כה, בכל הבעיות שדיברנו עליהם, ההמילטוניאן היה ללא תלות בזמן. כלומר, פונקציית הגל תלויה בזמן בצורה טריוויאלית. בהינתן

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (6.1)$$

אז ההתקדמות בזמן נתונה על ידי

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \quad (6.2)$$

הרבה פעמים $H(t)$ תלוי בזמן. למשל, אינטראקציה של אטום עם קרינה אלקטרומגנטית: שמשנתה בזמן. באופן כללי, צריך לפתור את משוואת שרדינגר התלויה הזמן:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (6.3)$$

דרכי פתרון למשוואת שרדינגר התלויה בזמן

1. נומרית, באמצעות מחשב.

2. פתרון מדויק – רק במקרים בודדים.

3. קירובים.

בקורס הזה, לא נדון בפתרונות נומריים, נבצע פתרון מדויק לתהודה פרה־מגנטית, ונפתח שלוש שיטות קירוב. לבסוף, נחשב אינטראקציה של אטום עם קרינה אלקטרומגנטית, ואולי גם נגיע לקווינטות השדה האלקטרומגנטי, לקבלת פליטה ספונטנית של קרינה.

6.1 פתרונות מדויקים – תהודה פרה־מגנטית

נדון בדינמיקה של ספינים, ונשכח, כרגע, מדרגות החופש האחרות של המערכת. המומנט המגנטי של חלקיק קשור לספין דרך הביטוי:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{eg}{2mc} \mathbf{S} \quad (6.4)$$

כאשר e שלילי, μ חיובי, ו־ g הוא הקבוע הג'ירומגנטי. עבור אלקטרון, $g \simeq 2$. כאשר יש שדה מגנטי,

$$\begin{aligned} H &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{ge}{2mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{ge\hbar}{4mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \end{aligned}$$

כלומר, האנרגיה היא הנמוכה ביותר כאשר החלקיק והשדה מצביעים לאותו הכיוון. המומנט המגנטי של הפרוטון, $g_p = 5.56$. גם לניוטרון, למרות שהוא חלקיק ניטרלי, יש מומנט מגנטי. נרצה לקחת שדה מגנטי תלוי בזמן: $\mathbf{B}(t)$.

6.1.1 ספין בשדה מגנטי קבוע

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \\ = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

כאשר עבור אלקטרון, $\gamma = -\frac{eg}{2mc}$.

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \\ U(t) = e^{-iHt/\hbar} = e^{i\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} t/\hbar}$$

זהו אופרטור המסובב את הוקטור בזווית התלויה בזווית של \mathbf{B}

$$= e^{-i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{S}/\hbar} \quad (6.5)$$

כאשר $\boldsymbol{\theta} = -\gamma \mathbf{B} t$.

לדוגמא, $\langle s \rangle$ יסתובב סביב הציר המוכתב על ידי השדה המגנטי, \mathbf{B} , בתדירות $|\omega_0| = \gamma |B|$.

דוגמא: $\mathbf{B} = B\hat{z}$, אזי

$$U(t) = e^{i\gamma t B S_z/\hbar} = e^{i\omega_0 S_z/2} \quad (6.6)$$

נניח מצב התחלתי בכיוון \hat{x} : כלומר,

$$S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

אזי $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. ההתפתחות בזמן:

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} \\ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

אזי,

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} \\ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \\ = \frac{\hbar}{4} (e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t}) = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega_0 t)$$

עבור

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega_0 t)$$

$$\langle S_z \rangle = 0$$

הספין מסתובב במישור (נקבע על ידי תנאי השפה).

6.1.2 תהודה פרהמגנטית, שדה מגנטי משתנה בזמן

נתחיל שוב בשדה $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{z}$. הספין יבצע פרסציה סביב השדה בתדירות $\omega_0 = -\gamma B_0$. נסתכל על המערכת במערכת צירים המסתובבת בתדירות ω במקביל ל- \mathbf{B}_0 (שונה, בצורה כללית מ- ω_0). התדירות שנראית במערכת המסתובבת, תהיה

$$\boldsymbol{\omega}_r = \boldsymbol{\omega}_0 - \boldsymbol{\omega} = -\gamma \mathbf{B}_0 - \boldsymbol{\omega} \\ = -\gamma (\mathbf{B}_0 + \boldsymbol{\omega}/\gamma)$$

במערכת מסתובבת, יש שדה אפקטיבי:

$$\mathbf{B}_r = \mathbf{B}_0 + \boldsymbol{\omega}/\gamma \quad (6.9)$$

התוצאה נכונה גם אם ω ו- \mathbf{B}_0 אינם מקבילים.

בעיה אמיתית:

$$\mathbf{B} = B \cos(\omega t) \hat{x} - B \sin(\omega t) \hat{y} + B_0 \hat{z} \quad (6.10)$$

שדה מגנטי תלוי בזמן, מסתובב עם כיוון השעון במישור \hat{x}, \hat{y} . נניח

$$\boldsymbol{\mu}(t=0) = \mu \hat{z} \quad (6.11)$$

מה ההתפתחות בזמן של $\boldsymbol{\mu}(t)$? החיים קלים. נסתכל על $\mu_z(t)$. כדי לפתור, נוח לחשוב על הבעיה במערכת צירים שמסתובבת עם השדה: $\boldsymbol{\omega} = -\omega \hat{z}$. במערכת החדשה, השדה

$$\mathbf{B}_r = B \hat{x}_r + \left(B_0 - \frac{\omega}{\gamma} \right) \hat{z} \quad (6.12)$$

כאשר \hat{x}_r המערכת המסתובבת. אין תלות בזמן של \mathbf{B}_r , ולכן הפתרון: הספין יסתובב סביב \mathbf{B}_r בתדירות

$$\boldsymbol{\omega}_r = -\gamma \mathbf{B}_r \quad (6.13)$$

$$|\boldsymbol{\omega}_r| \equiv \omega_r = \gamma \left[B^2 + \left(B_0 - \frac{\omega}{\gamma} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (6.14)$$

רוצים את μ_z .
(ציור..)

$$\sin^2 \alpha = \frac{B^2}{B^2 + \left(B_0 - \frac{\omega}{\gamma} \right)^2} \quad (6.15)$$

כאשר α היא הזווית בין \mathbf{B}_r לציר \hat{z} .

$$= \frac{\gamma^2 B^2}{\gamma^2 B^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \quad (6.16)$$

אזי

$$\mu_z(t) = \mu_z \cos^2 \alpha + \mu_z \sin^2 \alpha \cos(\omega_r t) \quad (6.17)$$

אז הפתרון הכללי של הבעיה:

$$\mu_z(t) = \mu_z(t=0) \cdot \left[\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} + \frac{\omega^2 B^2 \cos(\omega_r t)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} \right] \quad (6.18)$$

הגדלת ω מקטינה את הרכיב של \mathbf{B}_r בכיוון \hat{z} . לכן, α גדל. האמפליטודה של האוסצילציות גדלה, ומקבלת מקסימום ב- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, או, $\omega = \omega_0$ ו- $\mathbf{B}_r = B \hat{i}_r$. כיום האפליקציה החשובה ביותר של התהודה הזו היא מכשירי NMR\MRI.

הערה 6.1 הלקח הכי חשוב מהתרגיל הזה: הפתרון הספציפי תפור על המערכת הספציפית הזו. אין לנו שיטת פתרון כללית לפתרונות תלויים בזמן.

הכי טוב
בפיזיקה,
לפתח תורות
הפרעות

6.2 שיטות קירוב

6.3 קירוב (הפרעה) פיתאומית

(Sudden approximation).

נניח ש- H משתנה בצורה פתאומית (בפרק זמן ε). נניח שלפני שינוי H , פונקצית הגל היתה $|\psi_b\rangle$. מה המצב לאחר השינוי?
נסתכל על משוואת שרדינגר,

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \tag{6.19}$$

ונסתכל על פרק הזמן בין $-\frac{\varepsilon}{2}$ ל- $\frac{\varepsilon}{2}$, ונבצע אינטגרציה:

$$\left| \psi \left(\frac{\varepsilon}{2} \right) \right\rangle - \left| \psi \left(-\frac{\varepsilon}{2} \right) \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} H(t) |\psi(t)\rangle dt \tag{6.20}$$

כאשר $\varepsilon \rightarrow 0$, עבור שינוי סופי ב- $H(t)$, נקבל,

$$\left| \psi \left(\frac{\varepsilon}{2} \right) \right\rangle = \left| \psi \left(-\frac{\varepsilon}{2} \right) \right\rangle \tag{6.21}$$

או,

$$\underbrace{|\psi_a\rangle}_{\text{after}} = \underbrace{|\psi_b\rangle}_{\text{before}} \tag{6.22}$$

כמובן, שקירוב הוא לא פיזיקלי.

אבל, הקירוב טוב, אם השינוי של H מהיר ביחס לזמנים אחרים בבעיה. בבסיס אחרי השינוי (שיסומן על ידי $|\psi_n^{\bar{\omega}}\rangle$) הפונקציה לפני המעבר נראית

$$|\psi_b\rangle = \sum_n |\psi_n^{\bar{\omega}}\rangle \langle \psi_n^{\bar{\omega}} | \psi_b \rangle \tag{6.23}$$

6.4 קירוב אדיאבטי²⁶

נניח שיש לנו המילטוניאן $H(\lambda)$, שתלוי בפרמטר λ , חסר יחידות, שניתן לשליטה. נגדיר $\lambda = 0$ כהמילטוניאן בסיס, H_0 .

נראה שעבור כל ערך של λ , יש למערכת ספקטרום שתלוי ב- λ . בספקרום, שתי רמות לא חוצות אחת את השנייה. באופן כללי, זה קורה..

נניח המילטוניאן עם שתי רמות חוצות:

$$\begin{pmatrix} -\lambda + \lambda_0 & \\ & \lambda - \lambda_0 \end{pmatrix} \tag{6.24}$$

האיברים הלא אלכסוניים, ואם נלכסן את ההמילטוניאן, רמות האנרגיה מתקרבות, אך אינן חוצות זו את זו. (במישור $(E - \lambda)$)

נראה שאם נתחיל ברמת מסויימת, ונשנה את λ לאט, נשאר באותה רמת אנרגיה.

הערה 6.2 אי וודאות באנרגיה: $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. הוא אינו נובע מיחס חילוף כמו $[x, p]$. אפשר להבין אותו מאי הוודאות המושרשת בהתמרת פוריה, $\Delta \omega \Delta t \sim 1$, ובהכפלה ב- \hbar , נקבל את $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. לכן, אם עושים דברים מהר, אז אפשר ליצור ערעורים באנרגיה.

קיים בסיס, שמלכסן את $H(\lambda)$. נסמן את הבסיס $|n(\lambda)\rangle$ המתאים לערך העצמי $E_n(\lambda)$. את פונקצית הגל, ניתן תמיד לפתח בבסיס הנ"ל:

$$|\psi\rangle = \sum_m a_m(t) |n(\lambda)\rangle \quad (6.25)$$

נניח שמשנים את λ לאט, כלומר, $\lambda(t) = \delta t$, כאשר δ קטן. נרצה לקחת את $\delta \propto \frac{1}{T}$ ואת $T \rightarrow \infty$. נציב את $|\psi\rangle$ במשוואת שרדינגר:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = i\hbar \left[\sum_n (\partial_t a_n(t)) |n(\lambda)\rangle + \sum_n a_n(t) \frac{\partial}{\partial \lambda} |n(\lambda)\rangle \right] \quad (6.26)$$

(תוך שימוש בקשר: $\frac{\partial}{\partial t} = \delta \frac{\partial}{\partial \lambda}$)

$$= H \sum_n a_n(t) |n(\lambda)\rangle \quad (6.27)$$

ובאגף השני של משוואת שרדינגר, נקבל,

$$= \sum_n a_n(t) E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle \quad (6.28)$$

נכפיל את המשוואה עם $\langle m(\lambda)|$ ונקבל, מאורתוגונליות,

$$i\hbar\partial_t a_m(t) + i\hbar\delta \sum_n a_n(t) \left\langle m(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| n(\lambda) \right\rangle = E_m(\lambda) a_m(t) \quad (6.29)$$

כאשר $|n(\lambda)\rangle$ הוא לאו דווקא פונקציה עצמית של $\frac{\partial}{\partial \lambda}$, ולכן $\langle m(\lambda) | \frac{\partial}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle \neq \delta_{mn}$, והסכימה על האיבר הזה אינה נופלת. וכאשר $\delta \rightarrow 0$,

$$i\hbar\partial_t a_m(t) = E_m(\lambda) a_m(t) \quad (6.30)$$

כלומר, האיבר שעלול להעביר אותנו למצב אחד, איבר הסכום, נעלם כי הוא תלוי ב- δ . אם לא היינו משאיפים את $\delta \rightarrow 0$, אזי כל a_m היה תלוי בכל מכפלה של $|n(\lambda)\rangle$ ב- $\langle m(\lambda)|$, והעסק היה מאוד מסובך.

הערה 6.3 1. הנחנו $\lambda = \delta t$, קל להשתכנע שעבור $\lambda(t) = \delta f(t)$, התוצאות זהות.

2. הרמות אינן חוצות.

6.4.1 כמה איטי צריך להיות?

נחליף משתנים, ונגדיר,

$$\begin{aligned} a_m(t) &= \tilde{a}_m(t) e^{i/\hbar \int_0^t E_m(\lambda(t')) dt'} \\ &= \tilde{a}_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar\delta} \int_0^\lambda E_m(\lambda') d\lambda'} \end{aligned}$$

נסתכל על הנגזרת בזמן של $a_m(t)$

$$\frac{\partial a_m}{\partial t} = e^{-\frac{i}{\hbar\delta} \int_0^\lambda E(\lambda') d\lambda'} \left[\frac{\partial \tilde{a}_m}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} E_m(\lambda) \tilde{a}_m \right] \quad (6.31)$$

נציב את \tilde{a}_m במשוואה (6.29), והאיבר $\frac{i}{\hbar} E_m(\lambda) \tilde{a}_m$ יפול עם ה- $E_m(\lambda) a_m(t)$ שבאגף הימני של משוואה (6.29).

נסתכל על האיבר האמצעי,

$$i\hbar\delta \sum_{an} a_n(t) \left\langle m(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| n(\lambda) \right\rangle = i\hbar\delta \sum_n \tilde{a}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar\delta} \int_0^\lambda E(\lambda') d\lambda'} \left\langle m \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle$$

וממשוואה (6.29), נקבל,

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{a}_m}{\partial t} = -i\hbar \delta \sum_n \tilde{a}_n \left\langle m \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar \delta} \int_0^\lambda [E_m(\lambda') - E_n(\lambda')] d\lambda'} \quad (6.32)$$

ב- $\delta \rightarrow 0$, אנחנו רוצים לדרוש אוסצילציות חזקות. זהו "קירוב נקודת אוכף": $e^{i\frac{\lambda}{\delta}}$ הוא בפאזה אקראית, ולכן מתמצע לאפס. כדי שיתבטל האיבר, אנחנו רוצים לדרוש δ קטן מספיק שיהרוס את האוסצילציות הכי איטיות במערכת.

נסתכל על איבר שהולך כמו $e^{\frac{i}{\hbar \delta} \Delta E}$. כל עוד $\hbar \delta \ll \Delta E$, מדובר בקירוב טוב. נזהה את

$$\omega_{min} = \frac{\Delta E_{min}}{\hbar} \quad (6.33)$$

והדרישה לקירוב היא

$$\delta \ll \omega_{min} \quad (6.34)$$

היות ו- $\delta \sim \frac{1}{T}$, נדרוש $T \gg \frac{1}{\omega_{min}}$.

6.5 תורת הפרעות

נקח המילטוניאן

$$H = H^0 + H'(t) \quad (6.35)$$

6.5.1 תזכורת: תורת הפרעות לא תלויה הזמן

בהנתן המילטוניאן H^0 והמילטוניאן הפרעה:

$$H = H^0 + H' \quad (6.36)$$

פיתחנו את המצב המלא $|n\rangle$ כטור:

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots \quad (6.37)$$

כאשר כשיודעים את $|n^0\rangle$, זהו מצב עצמי של H^0 .

$$E = E^0 + E^1 + E^{(2)} + \dots \quad (6.38)$$

מפתחים באיטרציות:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (6.39)$$

מסדר אפס:

$$H^0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad (6.40)$$

ומסדרים גבוהים:

$$(H^0 + H') (|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots) = (E_n^0 + E_n^1 + \dots) (|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots) \quad (6.41)$$

בפיתוח מסדר ראשון, נשארים לנו

$$H^0 |n^0\rangle + H^0 |n^1\rangle + H' |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \quad (6.42)$$

האיברים $H^0 |n^0\rangle$ ו- $E_n^0 |n^0\rangle$ נופלים, ובהכפלה ב- $\langle n^0|$, מאורתוגונליות של n^1, n^0 , קיבלנו

$$E_n^1 = \langle n^0 | H' | n^0 \rangle \quad (6.43)$$

6.5.2 בעיות תלויות בזמן

נפתח תורת הפרעות, למצב

$$H(t) = H^0 + H'(t) \tag{6.44}$$

כאשר H^0 הוא המילטוניאן שאינו תלוי בזמן, ו- $H'(t)$ הוא תיקון קטן התלוי בזמן.

שאלה: אם בזמן $t = 0$, המערכת במצב $|i^0\rangle$ של H^0 , מה האמפליטודה שלה להיות ב- $|f^0\rangle$ בזמן t ($f \neq i$)?

פיתוח לסדר אפס - ברור שהאמפליטודה 0. המצב מתקדם בזמן כמו

$$|\psi\rangle = e^{-iH^0 \frac{t}{\hbar}} |i^0\rangle \tag{6.45}$$

היות ו- $\langle f^0 | i^0 \rangle = 0$, האמפליטודה היא אפס.

תוכנית העבודה:

- סדר ראשון
- סדרים גבוהים יותר

- אינטראקציה עם שדה אלקטרומגנטי

פיתוח לסדר ראשון: רוצים לפתור את משוואת שרדינגר,

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \tag{6.46}$$

כאשר $H = H^0 + H^1(T)$. רוצים לפתח לסדר ראשון ב- H^1 . היות והבסיס שמלכסן את H^0 פורש את המרחב, ניתן לרשום

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^0\rangle \tag{6.47}$$

רוצים למצוא את $c_n(t)$ בהנתן $c_n(0)$. כמובן, שללא H^1 , כלומר, בסדר אפס,

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-\frac{iE_n^0 t}{\hbar}} \tag{6.48}$$

נשתמש באינפורמציה הזו,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \underbrace{d_n(t)}_{c_n(t)} e^{-iE_n t/\hbar} |n_0\rangle \tag{6.49}$$

שינוי בזמן של $d_n(t)$ יהיה רק מ- $H^1(t)$. מצפים שניתן לפתח את $d_n(t)$ בחזקות של $H^1(t)$.

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 - H' \right) |\psi(t)\rangle = 0 \tag{6.50}$$

$$\sum_n \left[i\hbar \dot{d}_n + E_n^0 d_n - H^0 d_n - H' d_n \right] e^{-iE_n^0 t/\hbar} |n^0\rangle = 0 \tag{6.51}$$

H_0 שפועל על $|n^0\rangle$ נותן E_0 , ולכן $E_0^0 d_n - H^0 d_n \rightarrow 0$

$$\sum_n \left[i\hbar \dot{d}_n - H'(t) d_n \right] e^{-iE_n^0 t/\hbar} |n^0\rangle = 0 \tag{6.52}$$

נכפול משמאל ב-

$$\langle f^0 | e^{iE_f^0 t/\hbar} \tag{6.53}$$

ונקבל

$$i\hbar \dot{d}_f(t) = \sum_n \langle f^0 | H'(t) | n^0 \rangle e^{i\omega_{fn}t} d_n(t) \tag{6.54}$$

כאשר $\omega_{fn} = \frac{E_f^0 - E_n^0}{\hbar}$.

המרנו את משוואת שרדינגר המלאה, למשוואה שבה אנחנו מסתכלים, במקום על המקדמים $c_n(t)$ המכילים אינפורמציה גם על H^0 וגם על H' , למקדמים d_f שמכילים מידע רק על השינוי בזמן של H' . בפיתוח משוואה (6.54) אין כלל קירוב, זוהי משוואה מדויקת.

6.5.3 מקרה פשוט: $d_n(0) = \delta_{ni}$ ²⁷

כלומר, בזמן $t = 0$, המקדם היחיד שאינו מתאפס הוא המצב i^- , או: המצב הוא " $|i^0\rangle$ " טהור. מהו $d_f(t)$, עבור f כלשהו (שווה, או שונה מ- n)?

סדר אפס: "חזקות 0 של H' "

$$i\hbar \dot{d}_f = 0 \tag{6.55}$$

או

$$\begin{aligned} \dot{d}_f &= 0 \\ d_f^{(0)} &= const = \delta_{fi} \end{aligned}$$

סדר ראשון: נציב את סדר אפס בתוך משוואה (6.54).

$$\dot{d}_f = -\frac{i}{\hbar} \langle f^0 | H'(t) | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t} \tag{6.56}$$

בגלל ה- δ^- , נשאר לנו רק האיבר ה- i^- . ביחד עם תנאי התחלה, מקבלים את המשוואה לסדר ראשון:

$$d_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f^0 | H'(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \tag{6.57}$$

$$d_f = d_f^{(0)} + d_f^{(1)} + \dots \tag{6.58}$$

$$i\hbar (\dot{d}_f^{(0)} + \dot{d}_f^{(1)}) = \sum_n \langle f^0 | H'(t) | n^0 \rangle (d_f^{(0)} + d_f^{(1)}) \tag{6.59}$$

את סדר אפס פתרנו, ולכן בצד שמאל הוא מתאפס. לעומת זאת, בצד ימני, $d_f^{(1)}$ מתבטל, כי לאחר ההכפלה, מתקבל איבר מסדר שני

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{d}_f^{(1)} &= \sum_n \langle f^0 | H'(t) | n^0 \rangle \delta_{ni} \\ \dot{d}_f^{(1)} &= \langle f^0 | H'(t) | i^0 \rangle \end{aligned}$$

וקיבלנו את המשוואה שלנו,

$$d_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f^0 | H'(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \quad (6.60)$$

דוגמה 1.6 אוסילטור הרמוני חד מימדי, ברמת היסוד.

$$|0^0\rangle = |0\rangle \quad (6.61)$$

בזמן $t = -\infty$, נפעיל את ההפרעה $H'(t) = -e\mathcal{E}xe^{-t^2/\tau^2}$. כלומר, ההפרעה היא "מכה" נקודתית בזמן $t = 0$, אבל יש לה רוחב מסויים τ . הפרעה בין זמן $t = -\infty$ ל- $t = \infty$, ונשאל מה ההסתברות שהאוסילטון הוא במצב

$$|n^0\rangle \equiv |n\rangle \quad (6.62)$$

בזמן $t = \infty$?

אם $\tau \rightarrow \infty$, נצפה שזו תהיה הפרעה שכמעט ואינה משתנה בזמן; התהליך יהיה אדיאבטי, והמצב לא ישתנה. נשתמש במשוואה (6.57) עבור $n \neq 0$, נקבל,

$$d_n(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (-e\mathcal{E}) \langle n|x|0\rangle e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} e^{in\omega t} dt \quad (6.63)$$

כאשר ω היא תדירות האוסצילטור, ו- $n\omega = \frac{E_n^0 - E_0^0}{\hbar}$. כדי לחשב את $\langle n|x|0\rangle$, נשתמש באופרטורי העלאה והורדה:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (6.64)$$

לכן ישאר רק אלמנט מטריצה אחד: $\langle 1|x|0\rangle$. בסדר ראשון, האופרטור לא יכול לקחת אותנו מרמת היסוד לרמה השונה מ- $n = 1$.

$$d_1(\infty) = \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{\tau^2} + i\omega t} dt \quad (6.65)$$

ואחרי השלמה לריבוע, נקבל

$$d_1(\infty) = \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\pi\tau^2} e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}} \quad (6.66)$$

כאשר $\tau \rightarrow \infty$, $d_1(\infty) = 0$, ולכן הקירוב האדיאטי אכן עובד במקרה הזה. אי אפשר להסתכל על $\tau \rightarrow 0$ כעל הפרעה פתאומית, משום שזו הפרעה נקודתית, ולא שינוי קבוע שהתרחש בפתאומיות.

6.5.4 הפרעה מחזורית

כל פוטנציאל מחזורי ניתן לפתח ברכיבי פוריה. נסתכל על רכבי מסויים:

$$H'(t) = H' e^{i\omega t} + H'^\dagger e^{-i\omega t} \quad (6.67)$$

רוצים, שבהנתן שהמערכת בזמן $t = 0$ נמצאת במצב $|i^0\rangle$, רוצים לדעת מה האמפליטודה למעבר למצב $|f^0\rangle$, נתון בביטוי (6.54)

$$\begin{aligned} d_f(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_0^t \langle f^0 | H'(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[H'_{fi} e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} + H'^\dagger_{fi} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} \right] dt' \end{aligned}$$

נחשב את האינטגרלים בצורה מפורשת:

$$\begin{aligned} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{fi} + \omega)} H'_{fi} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{i(\omega_{fi} - \omega)} H'_{fi} \right] \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[\underbrace{\frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega}}_{(A)} H'_{fi} + \underbrace{\frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega}}_{(B)} H'_{fi} \right] \end{aligned}$$

נניח ויש לנו קרן אור בתדירות מסויימת (שדה חשמלי/מגנטי בתדירות מסויימת) ומשנים את התדירות. הפיקים בביטוי יוצרו, בביטוי (A), עבור $\omega_{fi} = -\omega$, וב- (B) $\omega_{fi} = \omega$.

• עבור איבר (A), $E_f^0 = E_i^0 - \hbar\omega$, האיבר $e^{i\omega t}$ מתייחס לפליטה מאולצת: ההפרעה גרמה לירידה ברמת באנרגיה.

• עבור (B), $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$, זוהי בליעה: המערכת עלתה רמת אנרגיה עקב ההפרעה.

הסתברות המעבר ב- $|i^0\rangle$ ל- $|f^0\rangle$ נתונה על ידי $|d_f|^2$. נסתכל ליד $\omega_{fi} = \omega$ או $\omega_{fi} = -\omega$.

ליד $\omega = \omega_{fi}$ אזי

$$\begin{aligned} |d_f|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} |H'_{fi}|^2 \left| \frac{e^{-i(\omega_{fi}-\omega)t/2} - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t/2}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |H'_{fi}|^2 \left[\frac{\sin((\omega_{fi}-\omega)t/2)}{(\omega_{fi}-\omega)t/2} \right]^2 \end{aligned}$$

זוהי פונקציה שמקבלת פיק ב- $\omega_{fi} = \omega$, ברוחב $\Delta x \approx \pi$, לכן, יש סיכוי טוב למעבר כאשר $\frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2} \lesssim \pi$, או, בצורה אחרת,

$$E_f^0 t = (E_i^0 t + \hbar\omega t) \pm 2\hbar\pi \quad (6.68)$$

או,

$$\begin{aligned} E_f^0 - E_i^0 &= \hbar\omega \pm \frac{2\hbar\pi}{t} \\ &= \hbar\omega \left(1 \pm \frac{2\pi}{\omega t} \right) \end{aligned}$$

בזמנים ארוכים: לוקחים הרבה אטומים, ומנדנדים אותו עם קרינה אלקטרומגנטית. לאחר זמן רב: מה הקצב שבו אלקטרונים מתנתקים מהאטום?
נסתכל על ההפרעה מזמן $-\frac{T}{2}$ לזמן $\frac{T}{2}$. כאשר $T \rightarrow \infty$,

$$d_f = \lim_{T \rightarrow \infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) 2\pi \left[H'_{fi} \delta(\omega_{fi} - \omega) + H'_{fi} \delta(\omega_{fi} + \omega) \right] \quad (6.69)$$

זה בעייתי, כי הביטוי שאנחנו רוצים הוא $|d_f|^2$, ואנחנו לא ממש יודעים לטפל ב- δ^2 ... כדי לטפל ב- δ^2 , נסתכל על

$$\delta(\omega_{fi} - \omega) \delta(\omega_{fi} - \omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\delta(\omega_{fi} - \omega)}{2\pi} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} dt$$

מסתכלים על האקסופוננט רק כאשר $\omega_{fi} - \omega$, ולכן הוא מתאפס, אזי

$$= \delta(\omega_{fi} - \omega) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi} \quad (6.70)$$

במקום הסתברויות מעבר, חושבים על הסתברות מעבר ליחידת זמן (או, קצב המעבר).

הערה 6.4 הסתברות מעבר ליחידת זמן, או קצב מעבר: ההסתברות לעבור ממצב A למצב B מקיימת, בכל יחידת זמן אינפיניטסימלית dt

$$P_{A \rightarrow B} = \frac{dt}{\tau} \quad (6.71)$$

עבור סאקלת זמן מסויימת τ . ניתן לשאול, מה ההסתברות שלא נעבור למצב B מזמן $t = 0$ עד זמן $t = T$: ההסתברות לא-לעבור ליחידת זמן היא $1 - \frac{dt}{\tau}$, אזי ההסתברות היא

$$\prod_i^{T/dt} \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)^{T/dt} = e^{-t/\tau} \quad (6.72)$$

זהו **תהליך פואסוני**.

ב- T גדול, קצב המעבר הוא

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{|d_f|^2}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) \quad (6.73)$$

תוצאה זו נקראת **כלל הזהב של פרמי**, Fermi's golden rule, נוחסא זו משמשת לא למעבר בין שתי רמות ספציפיות, אלא עבור רצף של מצבים.²⁸ במצבים אמיתיים, בדרך כלל יש קבוצה של מצבים עם אנרגיה בסביבה של $|i^0\rangle$ או $|f^0\rangle$ (ספקטרום רציף). במקרים אלו, מגדירים **צפיפות מצבים**, $\rho(E)$: בין אנרגיה E ל- $E + dE$: מספר המצבים בין אנרגיה E ל- $E + dE$ נתון על ידי $\rho(E) dE$ (במקרה של רמה בדידה, $\rho(E) \propto \delta$). כדי לעשות זאת, מוסיפים לכלל הזהב את הביטוי $\rho(E) dE$. כדי לשאול על מעבר מ- $|i^0\rangle$ ל- $E \rightarrow E + \Delta$. צריך לבצע אינטגרל על כלל הזהב באינטרוול,

$$\int dE \rho(E) R_{i \rightarrow f} \quad (6.74)$$

וזה נתון,

$$|d_f|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \rho(E_f) \Big|_{E_f \cong E_i - \hbar\omega} \quad (6.75)$$

6.5.5 סדרים גבוהים

לפני הפעלת כלל הזהב, נפתח את תורת הפרעות לסדרים גבוהים יותר.

הרעיון: H^0 לא גורם למעברים. נבודד את ההתפתחות בזמן שנגרמת מ- $H'(t)$. נרשום את משוואת שרדינגר:

$$i\hbar \partial_t |\psi_s(t)\rangle = [H_s^0 + H'_s(t)] |\psi_s(t)\rangle \quad (6.76)$$

עבור המשוואה, הוגדר פרופגטור:

$$|\psi_s(t)\rangle = U_s(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle \quad (6.77)$$

ברור:

$$i\hbar \frac{dU_s}{dt} = [H_s^0 + H'_s(t)] U_s \quad (6.78)$$

(האינדקס s מתייחס לאופרטורים ופונקציות גל בהצגת שרדינגר, בהמשך הפיתוח נעבור להצגות אחרות)

נזכור מספר תכונות של הפרופגטור:

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \mathbb{I} \\ U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) &= U(t_3, t_1) \\ U(t_1, t_1) &= \mathbb{I} \end{aligned}$$

ר-

$$U(t_1, t_2)^\dagger = U(t_2, t_1) \quad (6.79)$$

ללא $H'_s(t)$, משוואת שרדינגר (מסדר אפס) נתונה על ידי הביטוי

$$i\hbar \frac{dU_s^0}{dt} = H_s^0 U_s^0 \quad (6.80)$$

עבור מקרה זה, הפרופגטור,

$$U_s^0(t, t_0) = e^{-iH_s^0(t-t_0)/\hbar} \quad (6.81)$$

כלומר, U_s^0 מסובב אותנו במרחב הילברט. נעבור למערכת ש"מסתובבת עם H^0 במערכת זו, נגדיר $H'(t)$ משנה דינמיקה (או, סיבוב) במרחב הילברט. נעבור למערכת ש"מסתובבת עם H^0 במערכת זו, נגדיר

$$|\psi_I(t)\rangle = [U_s^0(t, t_0)^\dagger] |\psi_s(t)\rangle \quad (6.82)$$

. הצגה זו נקראת Interaction Picture. כאשר $H'(t)$ אינו אפס, כמובן שבזמן $t = t_0$ הוא שמן הפעלת ההפרעה

$$|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi_s(t_0)\rangle \quad (6.83)$$

נרשום משוואות תנועה עבור $|\psi_I(t)\rangle$ (על ידי גזירה של מכפלה):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle &= \left(i\hbar \frac{dU_s^{0\dagger}}{dt} \right) |\psi_s\rangle + U_s^{0\dagger} i\hbar \frac{d|\psi_s\rangle}{dt} \\ &= -U_s^{0\dagger} H_s^0 |\psi_s\rangle + U_s^{0\dagger} (H_s^0 + H'_s) |\psi_s\rangle \end{aligned}$$

לכן, כצפוי, במערכת המסתובבת, מתאפסת ההתפתחות בזמן של H_s^0 , ונקבל,

$$\begin{aligned} &= U_s^{0\dagger} H'_s |\psi_s\rangle \\ &= U_s^{0\dagger} H'_s \underbrace{U_s^0 U_s^{0\dagger}}_{=\mathbb{I}} |\psi_s\rangle \\ &= U_s^{0\dagger} H'_s U_s^0 |\psi_I\rangle \end{aligned}$$

נגדיר את הפרופגטור בבסיס החדש, $H'_I(T) = U_s^{0\dagger} H'_s U_s^0$, ונקבל,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H'_I(t) |\psi_I(t)\rangle \quad (6.84)$$

הערות:

- רוצים לחשב אמפליטודות מעבר:

$$P(\omega, t) = |\langle \omega_s | \psi_s(t) \rangle|^2 \quad (6.85)$$

כאשר $\langle \omega_s |$ היא תוצאה ω של אופרטור Ω (וקטור עצמי של Ω_s)

בתמונת האינטראקציה,

$$|\psi_s(t)\rangle \mapsto U_s^{0\dagger}(t, t_0) |\psi_s(t)\rangle = |\psi_I(t)\rangle \quad (6.86)$$

ובצורה דומה,

$$|\omega_s\rangle \mapsto U_S^{0\dagger}(t, t_0) |\omega_s\rangle \equiv |\omega_I(t)\rangle \quad (6.87)$$

לכן,

$$\langle \omega_s | \psi_s(t) \rangle = \langle \omega_I(t) | \psi_I(t) \rangle \quad (6.88)$$

כלומר, חישוב בהצגת האינטראקציה יתן תוצאה ישירה.

בצורה אחרת,

$$\Omega_I(t) = U_s^{0\dagger} \Omega_s U_s^0 \quad (6.89)$$

אזי,

$$\begin{aligned} \Omega_I(t) |\omega_I(t)\rangle &= U_s^0 \Omega_S U_s^0 U_S^\dagger |\omega_s\rangle \\ &= U_s^{0\dagger} \Omega_s |\omega_s\rangle = \omega U_s^{0\dagger} |\omega_s\rangle \\ &= \omega |\omega_I(t)\rangle \end{aligned}$$

• מהן משוואות התנועה של Ω_I ,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\Omega_I}{dt} &= i\hbar \frac{dU_s^{0\dagger}}{dt} \Omega_s U_s^0 + U_s^{0\dagger} \Omega_S i\hbar \frac{dU_s^0}{dt} \\ &= U_s^{0\dagger} [\Omega_s, H_s^0] U_s^0 \\ &= [\Omega_I, H_I^0] \end{aligned}$$

בדומה למשוואות התנועה של משוואת היזנברג.

בהצגת שרדינגר: הוקטור מסתובב, ובהצגת היזנברג, האופרטורים מסתובבים. בהצגת האינטראקציה: משהו באמצע...

בחזרה לתורת הפרעות: נגדיר פרופגטור בהצגת האינטראקציה,

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle \quad (6.90)$$

לכן,

$$i\hbar \frac{dU_I(t, t_0)}{dt} = H_I'(t) U_I(t, t_0) \quad (6.91)$$

פתרון של U_I נותן, מיידית, את U_S מ-

$$U_s(t, t_0) = U_s^0(t, t_0) U_I(t, t_0) \quad (6.92)$$

כאשר, כזכור, $|\psi_s\rangle = U_s^0(t, t_0) |\psi_I(t)\rangle$,

כדי לפתח תורת הפרעות, נשתמש במשוואה הדיפרנציאלית בהצגת האינטראקציה:

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I'(t') U_I(t', t_0) dt' \quad (6.93)$$

כאשר ה-" I " הוא מתנאי ההתחלה: $U_I(t_0, t_0) = I$. בתורת הפרעות בסדרים של H_I' :

• סדר אפס,

$$U_I^{(0)}(t, t_0) = I + O(H_I') \quad (6.94)$$

• מסדר ראשון, נציב את U_I^0 באינטגרל, ונקבל,

$$U_I^{(1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I'(t') I dt' + \dots \quad (6.95)$$

• לסדרים גבוהים יותר: נציב את U_I^1 ב-(6.93), ונקבל את הביטוי לסדר שני:

$$U_I^{(2)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I'(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H_I'(t') H_I'(t'') dt' dt'' + \dots \quad (6.96)$$

ולסדר שני:

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \int_{t_0}^{t''} dt' dt'' dt''' H_I'(t') H_I'(t'') H_I'(t''') \quad (6.97)$$

כדי להראות שזה לפיתוח הקודם, נשחזר את הביטוי מסדר ראשון²⁹ -

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) e^{iE_n^0 t/\hbar} |n_0\rangle \quad (6.98)$$

ואז, עבור $d_f(t)$ קיבלנו, מסדר ראשון,

$$d_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0=0}^t \langle f^0 | H'(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi} t'} dt \quad (6.99)$$

כאשר $\omega_{fi} = \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar}$. מ-(6.95), כדי לחשב את d_f , רוצים לקדם בזמן את $|i_0\rangle$, כלומר, את הפרופגטור $U(t, t_0) |i_0\rangle$, שואלים מה ההיטל על $|f^0\rangle$. היות ורוצים לגזור משוואה $d_f(t)$ אז צריך היטל של $\langle f^0 | e^{iE_f^0(t-t_0)/\hbar}$ צריך, למעשה, לחשב את הביטוי

$$\begin{aligned} d_f(t) &= \langle f_0 | e^{-iE_f^0(t-t_0)/\hbar} U_s(t, t_0) | i_0 \rangle \\ &= \langle f_0 | U_s^{0\dagger}(t, t_0) U_s(t, t_0) | i_0 \rangle \end{aligned}$$

כאשר, מהגדרת הטרנספורמציה להצגת האינטראקציה,

$$U_s(t, t_0) = U_s^0(t, t_0) U_i(t, t_0) \quad (6.100)$$

נחלץ את U_i , ונקבל,

$$d_f(t) = \langle f_0 | U_i(t, t_0) | i_0 \rangle \quad (6.101)$$

נשתמש ב- $U_I(t, t_0)$ לסדר ראשון,

$$\begin{aligned} d_f(f) &= \left\langle f_0 \left| I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I'(t') dt' + O(H_I'^2) \right| i_0 \right\rangle \\ &= \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle f_0 | H_I'(t') | i_0 \rangle dt' \end{aligned}$$

על ידי שימוש בהגדרת $U_s(0)$, משחזרים את הגזירה הקודמת.

פירוש פיזיקאלי לקירוב לפרופגטור מסדר שני בהצת האינטראקציה, הפרופגטור, מסדר שני, נתון על ידי

$$U_I^{(2)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I'(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H_I'(t') H_I'(t'') dt' dt'' + \dots \quad (6.102)$$

נחזור להצגת שרדינגר:

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_S^0(t, t_0) \underbrace{U_S^{0\dagger}(t', t_0) H_S' U_S(t', t_0)}_{H_I'} dt' \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' U_S^0(t, t_0) U_S^{0\dagger}(t', t_0) H_S' U_S^0(t', t_0) U_S^{0\dagger}(t'', t_0) H_S' U_S^0(t'', t_0) + \dots$$

נזכיר ש- $U_S^{0\dagger}(t_1, t_2) = U_S^0(t_2, t_1)$ אזי, למשל, את הביטוי $U_S^0(t, t_0) U_S^{0\dagger}(t', t_0)$ נוכל לרשום כ-

$$U_S^0(t, t_0) U_S^{0\dagger}(t', t_0) = U_S^0(t, t_0) U_S^0(t_0, t') \\ = U_S^0(t, t')$$

לאחר פישוטים כאלה, נקבל את

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_S^0(t, t') H_S' U_S^0(t', t_0) dt' \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' U_S^0(t, t') H_S' U_S^0(t', t'') H_S' U_S^0(t'', t_0)$$

"נצייר" את האיברים השונים בתורת הפרעות: הפרופגטור כולו, סכום כל הפרעות, הוא סכום של האיברים הבאים:

- מסדר ראשון: הפרופגטור הוא פשוט U_S^0 , ללא הפרעה תלויה בזמן
- בסדר ראשון, קוראת הפרעה בזמן t' , ולפניו (ואחריו) ההתפתחות בזמן היא לפי U_S^0 .
- מסדר שלישי, קורות שתי הפרעות נקודתיות בזמן t'' וזמן t' .

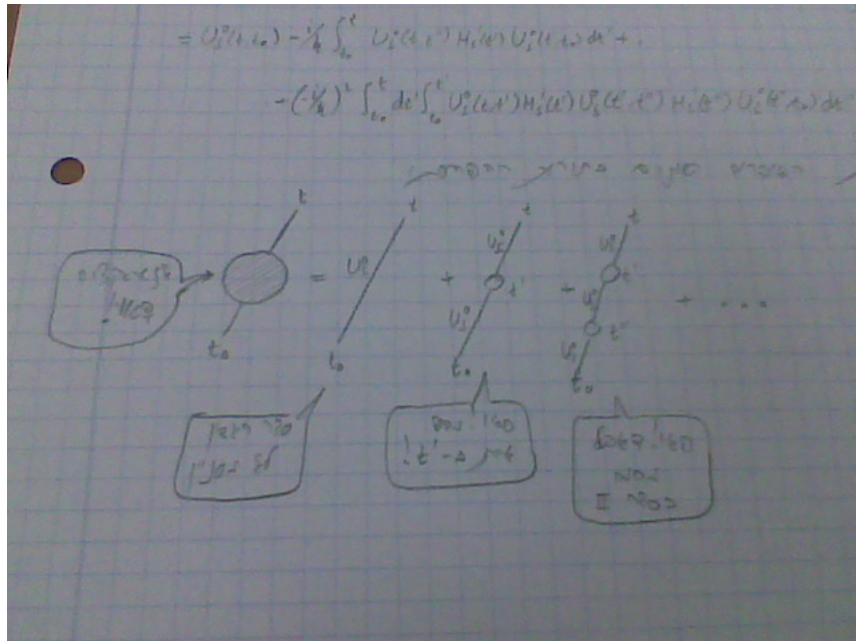
וכן הלאה. מצבי הביניים, המצבים שבין שתי "מכות" (הפרעות), מכונים מצבים וירטואלים. נסתכל על אמפליטדת מעבר מ- $|i_0\rangle$ ל- $|f_0\rangle$

$$\langle f_0 | U_S(t, t_0) | i_0 \rangle = \delta_{fi} e^{-iE_i^0(t-t_0)/\hbar} \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t e^{-iE_f^0(t-t')/\hbar} \langle f_0 | H' | i_0 \rangle e^{-iE_i^0(t'-t_0)/\hbar} dt' \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_n e^{-iE_f^0(t-t')/\hbar} \langle f_0 | H' | n_0 \rangle e^{-iE_n^0(t'-t'')/\hbar} \langle n_0 | H' | i_0 \rangle e^{-iE_n^0(t''-t_0)/\hbar}$$

הערה 6.5 ישנם מקרים שבהם הטורים הללו, של תורת הפרעות מתבדרים, אבל בכל זאת ניתן לדבר בה.

6.5.6 אינטראקציה של אטום עם קרינה אלקטרומגנטית

כדי לעשות את החישוב יותר אלגנטי, נתייחס גם לאטום בתור גוף קוונטי, ואל הקרינה האלקטרומגנטית נתייחס כאל קרינה קלאסית.



איור 4: פיתוח איטרטיבי של תורת ההפרעות תלויה בזמן. באדיבות ברק קציר

תזכורת: אלקטרודינמיקה קלאסית: משוואת מקסוול, ביחידות cgs ,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \vec{\nabla} \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \\ \vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \vec{\nabla} \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \end{aligned}$$

על ידי הגדרת $\mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}$ ו- $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi$ ניתן לרשום את משוואות מקסוול בצורה:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2 \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) &= -4\pi\rho \\ \vec{\nabla}^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) &= -\frac{4\pi \mathbf{j}}{c} \end{aligned}$$

תוך שימוש בזהות, $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \mathbf{A} = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) - \vec{\nabla}^2 \mathbf{A}$, נוכל לעבור כיוול,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \vec{\nabla} \Lambda \\ \phi' &= \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

נסתכל על מקרה שבו $\rho = \mathbf{j} = 0$, ונעבוד בכיוול של קולון (Coulomb gauge). בכיוול של קולון, נבחר $\phi = 0$, $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0$ ³⁰. תחת הבחירות הללו, נרשום את משוואות מקסוול בצורה

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \tag{6.103}$$

³⁰אפשר להראות שכל כיוול נוכל להביא לצורה זו

זוהי משוואת גלים, עבור אורך גל מסויים,

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (6.104)$$

כאשר מתקיים, $\omega^2 = k^2 c^2$, או, $\omega = kc$. שימו לב ש- $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0$,

$$0 = \vec{\nabla}^2 \cdot \mathbf{A} = -k^2 \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (6.105)$$

כלומר, \mathbf{k} , \mathbf{A}_0 ניצבים: \mathbf{A} ניצב לכיוון התקדמות הגל. השדות \mathbf{E} , \mathbf{B} המתאימים,

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\left(\frac{\omega}{c}\right) \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

$$\mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A} = -(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

ולכן, גם \mathbf{B} וגם \mathbf{E} ניצבים ל- \mathbf{k} , וניצבים זה לזה.

האפקט הפוטואלקטרי במימן³¹ נניח אטום מימן ברמת היסוד, $|1, 0, 0\rangle$, הממוקם בראשית, ופוגע בו גל

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (6.106)$$

נרצה לשאול מה קצב היינון של האטום, כתוצאה מהשדה. בהפרעה מחזורית, נטפל באמצעות כלל הזהב של פרמי.

קצב המעבר, $R_{i \rightarrow f}$, ביחידות של אחד-חלקי זמן, נתון על ידי

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f^0 | H' | i^0 \rangle|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) \quad (6.107)$$

ראשית, נזהה את H' : בתורת הפרעות, רוצים שדה אלקטרומגנטי חלש: A קטן. ההמילטוניאן הכולל יהיה,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - q\phi \quad (6.108)$$

q הוא המטען של החלקיק שמגיב עם השדה האלקטרומגנטי.

בכיוול שלנו, $\phi = 0$, ולכן ניתן להסירו (זהו ϕ של שדה אלקטרומגנטי חופשי!), ולפתוח את ההמילטוניאן ל-³²

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{P}^2) - \frac{1}{2mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \frac{q}{2mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + \underbrace{\frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2}_{\text{for small } A} \quad (6.109)$$

נסתכל על האיבר $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$:

$$\mathbf{P} \cdot (\mathbf{A}\psi) = (\mathbf{P} \cdot \mathbf{A})\psi + (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P})\psi \quad (6.110)$$

אבל בכיוול קולון, $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = 0$, ו-

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{q}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + q\phi \quad (6.111)$$

כאשר כאן, $q\phi$ הוא הפוטנציאל הנוצר על ידי הפרוטון. עד הביטוי האחרון פתחנו את ההמילטוניאן על חלקיק חופשי, ועכשיו מדובר על אטום מימן. זהו לא הפוטנציאל החופשי ולכן כיוול קולון לא "מסלק" אותו, אלא רק את הפוטנציאל של הקרינה האלקטרומגנטית. נפצל את ההמילטוניאן ל-

$$H = H^0 + H' \quad (6.112)$$

³¹ זה ממש על קצה המזלג. שלא נחשוב שאנחנו מתחילים להבין את התחום הזה
³² 02.06.2009, תרגיל בית: לפתור חלקיק חופשי בקוארדינטות ספריות.

כאשר H^0 יהיה האנרגיה הקינטות והפוטנציאלית לאטום מימן, ו- H' יהיה ההפרעה שלנו:

$$H' = -\frac{q}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (6.113)$$

אם נסתכל על אלקטרון (במטען e ובמסה m_e) אזי, בהצבת \mathbf{A} של גל אלקטרומגנטי

$$\begin{aligned} H' &= \frac{e}{m_e c} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{A}_0 \mathbf{P}_0 \\ &= \frac{e}{2m_e c} \left(e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right) \mathbf{A}_0 \mathbf{P}_0 \end{aligned}$$

היות ומסתכלים על בליעה של קרינה (האטום הוא ברמת היסוד, ולכן לא יכול לפלוט קרינה), האיבר השני, $e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$, ה"אחראי" על פליטה, לא משחק תפקיד, ונשארים עם

$$H'(t) = \frac{e}{2m_e c} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (6.114)$$

אזי

$$H'(t) = H' e^{-i\omega t} \quad (6.115)$$

והחלק של ההפרעה שאינו תלוי בזמן, יהיה:

$$H' = \frac{e}{2m_e c} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} \quad (6.116)$$

המצב ההתחלתי, $|i^0\rangle$, נתון על ידי פונקצית הגל של אטום מימן ברמת היסוד,

$$\psi_{1,0,0} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0} \quad (6.117)$$

כאשר $a_0 = \frac{\hbar}{m_e e^2}$, רדיוס בוהר. רוצים ליינן את האטום, אזי המצב הסופי, $|f^0\rangle$, יהיה חלקיק חופשי:

$$\psi_f = \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (6.118)$$

כאשר עבור חלקיק חופשי, אנחנו מזניחים את ההשפעה של הפרוטון המיונן. ל- $|f^0\rangle$ האמיתי יש תיקון הנובע מקיומו של הפרוטון, שזנחנו כרגע. אנחנו רוצים שהתיקון לפונקציה המעבר יהיה קטן ביחס לשיקולים האחרים שלנו, כלומר, שתורת ההפרעות תתן לנו תיקון גדול יותר מהתיקון על ידי נוכחות האלקטרון

הערה 6.6 כאשר עושים חשבון מלא, ההזנחה של הפרוטון עובדת רק עבור יינון מרמת היסוד.

צריכים לחשב (תחילה, את התיקון ללא תלות בזמן)

$$H'_{fi} = \langle f^0 | H' | i^0 \rangle \quad (6.119)$$

האיבר המחזורית, נותן לנו פונקציה דלתא, לפי כלל הזהב של פרמי.

$$H'_{fi} = \frac{2}{2m_e c} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \int \underbrace{e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r} / \hbar}}_{\text{Free}^*} \underbrace{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P}}_{\text{EM field}} \underbrace{e^{-r/a_0}}_{\text{Bounded}} d^3 r \quad (6.120)$$

האינטגרל הזה עדין קשה למדי, אז נקרב עוד קצת:

כדי לשחרר את האלקטרון, צריכים להשקיע אנרגיה מסדר גודל של $\hbar\omega \sim \frac{e^2}{a_0}$. התנע של הקרינה האלקטרומגנטית הדרושה כדי ליינן את האטום, היא

$$\hbar k = \frac{\hbar\omega}{c} \simeq \frac{e^2}{a_0 c} \quad (6.121)$$

התנע ההתחלתי של אלקטרון הוא $p \sim \frac{\hbar}{a_0}$, משיקולי אי-ודאות. לכן, היחס בין התנע של הקרינה האלקטרומגנטית לתנע של האלקטרון,

$$\frac{\hbar k}{p} \simeq \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137} \quad (6.122)$$

התנע של הפוטון שמשחרר את האלקטרון, הרבה יותר נמוך מהתנע של האלקטרון עצמו. לכן, יש טווח רחב שבו משחררים את האלקטרון, אבל עדין, $\frac{\hbar k}{p} \ll 1$. באזור זה, $\frac{\hbar k}{p} \simeq \frac{\hbar k}{\hbar/a_0} = ka_0 \ll 1$. מהשיקולים הנ"ל, אורך הגל ($\lambda \sim k$) גדול בהרבה מסדר הגודל של האטום, a_0 : שהקרינה האלקטרומגנטית כמעט ואינה משתנה (מרחבית) בסדרי הגודל של האטום. כלומר, האטום ירגיש בקירוב קרינה אחידה בנפח האטום, שמשתנה בצורה מחזורית בזמן. לכן, בקירוב ראשון, נוכל לקבוע $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1$. הקירוב הנ"ל נקרא "הקירוב הדיפולי" (Electric dipole approximation).

הערה 6.7 קירוב דיפול: נניח שהאלקטרון רואה שדה חשמלי קבוע שמבצע תנודות בזמן

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{A}_0}{2} e^{-i\omega t} \right) \\ &= \frac{i\omega}{2c} \mathbf{A}_0 e^{i\omega t} \end{aligned}$$

אם היינו מנחשים אינטראקציה עם דיפול,

$$H'(t) = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{E} \quad (6.123)$$

כאשר $\boldsymbol{\mu}$ הוא מומנט הדיפול של האלקטרון, $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r}$

$$H'(t) = \frac{i\omega e}{2c} \mathbf{A}_0 \mathbf{r} e^{-i\omega t} \quad (6.124)$$

רוצים להראות שהביטוי זהה ל- $H'(t) = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} e^{-i\omega t}$. כדי לראות, נזכר ש- $H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$, ואלו קל לבדוק

$$[\mathbf{r}, H^0] = \frac{i\hbar}{m_e} \mathbf{P} \quad (6.125)$$

ולכן,

$$\begin{aligned} \langle f^0 | \mathbf{P} | i^0 \rangle &= \frac{m_e}{i\hbar} \langle f^0 | \mathbf{r} H^0 - H^0 \mathbf{r} | i^0 \rangle \\ &= \frac{m_e}{i\hbar} (E_i^0 - E_f^0) \langle f^0 | \mathbf{r} | i^0 \rangle \\ &= im\omega \langle f^0 | \mathbf{r} | i^0 \rangle \end{aligned}$$

ולכן,³³

$$\begin{aligned} \left\langle f^0 \left| \frac{e}{2m_e c} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} \right| i^0 \right\rangle &= \frac{ie\omega}{2c} \mathbf{A}_0 \langle f^0 | \mathbf{r} | i^0 \rangle \\ &= \langle f^0 | -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E} | i^0 \rangle \end{aligned}$$

לאחר ההזנחות, קיבלנו

$$H'_{fi} = \overbrace{\frac{2}{2m_e c} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}}}^N \int e^{-i\mathbf{p}_f \mathbf{r} / \hbar} \mathbf{A}_0 \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) e^{-r/a_0} d^3r$$

³³במעבר מהשורה הראשונה לשנייה, הפעלנו את H^0 , פעם אחת ימינה ופעם אחת שמאלה! מנהסתם אפשר לעשות את זה, וזה די מגניב... עבור A, B הרמיטיים, $\langle i|AB|f \rangle = -\langle i|BA|f \rangle = b_f \langle i|A|f \rangle - \langle A^\dagger B^\dagger |i|f \rangle = b_f \langle i|A|f \rangle - b_i \langle i|A|f \rangle$

ולאחר אינטגרציה בחלקים,

$$H'_{fi} = N \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f \int e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r} / \hbar} e^{-r/a_0} d^3r \quad (6.126)$$

נשים לב שכאן, \mathbf{p}_f , האיבר בפונקציה גל שהאלקטרון בחוץ הוא מספר ולא אופרטור. האינטגרל,

$$\int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-ip_f r \cos \theta / \hbar} e^{-r/a_0} r^2 dr d(\cos \theta) d\phi \quad (6.127)$$

כדי לעשות את האינטגרל הזה, ראשית עושים אינטגרל לפי $\cos \theta$: זהו אינטגרל פשוט על אקספוננט. אחד הקבועים ("ר") יבטל לנו את אחד ה-rים. את האינטגרל שנותר, של $\frac{\partial}{\partial k} \int e^{-kr} dr = \frac{\partial}{\partial k} \int r e^{-kr} dr$, ולכן,

$$= \frac{8\pi/a_0}{\left[\left(\frac{1}{a_0} \right)^2 + \left(\frac{p_f}{\hbar} \right)^2 \right]^2} \quad (6.128)$$

לכן,

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{2m_e c} \right) \frac{1}{8\pi^3 \hbar^3} \frac{1}{\pi a_0^3} \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) \cdot \frac{|\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2 \cdot 64\pi^2 a_0^6}{\left[1 + \left(\frac{p_f a_0}{\hbar} \right)^2 \right]^4} \quad (6.129)$$

מהביטוי, ניתן לראות שהכיוון המועדף של \mathbf{p}_f , כיוון האלקטרון הנפלט, הוא הכיוון של השדה החשמלי (הוא הכיוון של \mathbf{A}_0). הסבר אינטואטיבי: השדה החשמלי \mathbf{E} מנדנד את האלקטרון, ועשוי "לקרוע" אותו מהאטום, בכיוון שלו. הסיכוי, מקירוב ראשון, שהאלקטרון יפלט בניצב לשדה החשמלי הוא אפס. את התוצאה הזו קל לבדוק במעבדה: אור מקוטב פוגע בגביש. רוצים לבדוק מה קצב היינון בזווית $d\Omega$ בין התנעים $\mathbf{p}_f \rightarrow \mathbf{p}_f + d\mathbf{p}_f$. פונקציית ה- δ הכלל הזהב, קובעת,

$$\frac{p_f^2}{2m_e} = E_i^0 + \hbar\omega \quad (6.130)$$

בצורה מופרשת,

$$\delta \left(\frac{\mathbf{p}_f^2}{2m_e} - E_i^0 - \hbar\omega \right) = \frac{m}{p_f} \delta \left(p_f - [2m(E_i^0 + \hbar\omega)]^{1/2} \right) \quad (6.131)$$

ואז, קצב היינון לזווית מרחבית $d\Omega$, בין $\mathbf{p}_f \rightarrow \mathbf{p}_f + d\mathbf{p}_f$, נתונה על ידי

$$\begin{aligned} R_{i \rightarrow d\Omega} &= \int d\mathbf{p}_f \mathbf{p}_f^2 R_{i \rightarrow f} d\Omega = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 m_e p_f d\Omega \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 m_e p_f d\Omega \\ &= \frac{3a_0^3 e^2 p_f |\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2}{m\pi \hbar^4 c^2 \left[1 + \left(\frac{p_f a_0}{\hbar} \right)^2 \right]^4} \end{aligned}$$

אלקטרוני שיוצאים אוהבים לצאת מקבילים ל- \mathbf{A}_0 . שימו לב שאין תלות ב- \mathbf{k} , כיוון הקרינה הפוגעת. אפשר לחשב קצב יינון כללי. לנוחיות, נבחר $\mathbf{A}_0 = A_0 \hat{z}$, אז,

$$R_{i \rightarrow all} = \frac{16a_0 e^3 p_f^3 |\mathbf{A}_0|^2}{3m\hbar^4 c^2 \left[1 + \left(\frac{p_f a_0}{\hbar} \right)^2 \right]^4} \quad (6.132)$$

6.5.7 כללי ברירה, בקירוב הדיפול³⁵

בקירוב הדיפולי, אלמנטי המטריצה היו מהצורה

$$\langle f^0 | \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}_0 \mathbf{p} | i^0 \rangle \propto \langle f^0 | \mathbf{r} | i^0 \rangle \quad (*)$$

עבור אטום מימן, המצבים ההתחלתיים הם

$$|i_0\rangle = |n, l, m\rangle \quad (6.133)$$

ונרצה לעבור למצב סיום

$$|f^0\rangle = |n', l', m'\rangle \quad (6.134)$$

המעבר הוא אפשרי רק אם אלמנט המטריצה (*) אינו אפס. כדי לענות על כך, נרשום את \mathbf{r} באמצעות $Y_{l,m}$ ים:

$$\begin{aligned} z &= r \cos \theta = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0} \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ x + iy &= -r \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,1} \\ x - iy &= r \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,-1} \end{aligned}$$

מציבים באלמנט המטריצה:

$$\mathbf{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (6.135)$$

נסתכל לודוגמא על הרכיב $z\hat{z}$:

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | z | nlm \rangle &\sim \int Y_{l'm'}^* \underbrace{Y_{10}}_{=z\hat{z}} Y_{lm} \sin \theta d\varphi \\ &\left[\int e^{-im'\varphi + 0 + im\varphi} d\varphi \sim \delta_{mm'} \right] \\ \langle n'l'm' | z | nlm \rangle &\sim \delta_{mm'} \int \sin \theta d\theta Y_{l'm'}^* Y_{10} Y_{lm} \end{aligned}$$

נשתמש בזהות: $Y_{10} Y_{lm} = AY_{l-1,m} + BY_{l+1,m}$, ולכן, $z\hat{z}$ יכול לצמד רק $m' = m$ ו- $l' = l \pm 1$.

סיבה: השדה האלקטרומגנטי הקוונטי מורכב מפוטונים, שיש להם תנע זוויתי, עם ספין של ± 1 . המעבר הזה הוא שימור תנע זוויתי: אם בולעים או פולטים פוטון, התנע הזוויתי יכול להשתנו לפי התנע הזוויתי של פוטון, ± 1 . קל להראות שהאיברים האחרים, $x\hat{x} + y\hat{y}$, מרשים מעברים כך שסך הכל, רק המעברים הבאים מותרים:

$$\begin{aligned} m' &= m \pm 1, m \\ l' &= l \pm 1 \end{aligned}$$

דרך אחרת לראות את זה היא להסתכל על תכונות סימטריה של $Y_{l,m}$ ים, אבל לא נעשה את זה כרגע.

³⁵7.06.2009, פתרון של אטום מימן ברצף לא נעשה בכיתה, את הפרטים ניתן לראות בלנדאו-ליפשיץ

7 פיזור אלסטי

אנחנו נלמד רק את החלקים הפחות חשובים בנושא המאוד עשיר הזה, ונדון בפיזורים אלסטיים. פיזור נהיה הרבה יותר מעניין ברגע שנסתכל על פיזורים לא-אלסטיים: כאשר עוברת אנרגיה בין המפזר למטרה או כאשר מספר החלקיקים לא נשמר.

רוצים להבין מבנה של חלקיק (או גוף מסובך יותר, כמו נוזלים גבישים וכיו"ב). אחת מהדרכים לעשות זאת היא באמצעות פיזור. בפיזור אידיאלי: יש לנו ידע על הקליע וידע על כוחות שפועלים על הקליע, ואנו נשאל מה המבנה של המטרה.

לדוגמה: ניסוי שנעשה ב-Slac³⁶, לוקחים פוטון, חלקיק נקודתי (בנתיים) ויודעים איך הוא מבצע אינטראקציה עם ה"עולם". את הפוטון יורים על ניוטרון. ככל שהפוטון אנרגטי יותר, עם אורך גל יותר קטן, לומדים יותר על הניוטרון. היות והפוטון הגיב עם הניוטרון, למדו שהניוטרון מכיל מטען, כי הניוטרון אינו מגיב עם חלקיקים שאינם נושאי מטען.

ב-CERN: יורים צמד פרוטונים אחד על השני. זה מייצר כמויות עצומות של נתונים, כי שני הפרוטונים הם מורכבים למדי. יש המון נתונים על כל התנגשות, וצריך לסנן רק את הנתונים הרלוונטיים.

פיזור, בצורה סכמתית: חלקיקים עם נתונים מסויימים מתנגשים, ונפלטים חלקיקים מסויימים עם נתונים מסויימים (לאו דווקא אותם חלקיקים ו/או עם אותם נתונים)

$$a(\alpha) + b(\beta) + \dots \rightarrow f(\gamma) + g(\delta) \quad (7.1)$$

חלקיק אחד פוגע בפונציאל כלשהו, $V(r)$ (נניח שהפוטנציאל הזה קבוע). נשאל מה הסיכוי למדידת החלקיק בכל אחד מאוסף גלאים המפוזרים במרחב.

7.1 פיזור ממדרגת פוטנציאל במימד אחד

נסתכל על פוטנציאל במימד אחד, מהצורה

$$V(x) = v_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & , x < 0, \text{ Zone I} \\ V_0 & , x > 0, \text{ Zone II} \end{cases} \quad (7.2)$$

זורקים חלקיק בעל אנרגיה E מצד שמאל על המדרגה (מכיוון של אזור I). קלאסית: הבעיה טריוויאלית: עם $E > V_0$, החלקיק ימשיך. אחרת: הוא יחזור.

קוונטית? צריך תנאי התחלה/שפה:

$$\psi_I(x, t=0) = \psi_I(x) = (\pi^2 \Delta^2)^{-1/4} e^{ik_0(x+a)} e^{-(x+a)^2/2\Delta} \quad (7.3)$$

זהו גאוסיאן הממורכז סביב $-a$, המיקום הממוצע, ויש לו תנע ממוצע $\hbar k_0$. מהגדרת הגאוסיאן,

$$\Delta x = \frac{\Delta}{\sqrt{2}}$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\Delta}$$

נרצה לדעת מה קורה בגבול $\Delta p \rightarrow 0$, או, $\Delta \rightarrow \infty$. כלומר, בקירוב טוב, התנע ידוע, p_0 , המיקום לא. האנרגיה ידועה בקירוב טוב:

$$E_0 \cong \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad (7.4)$$

נסתכל על המקרה, $E_0 > V_0$: חבילת גלים שתוטח בפוטנציאל: חלק מחבילת הגלים תעבור, וחלק תוחזר. זמן הפגיעה הוא $t = \frac{a}{v} = a \left[\frac{p_0}{m} \right]^{-1}$ רוצים לדעת:

³⁶המאיץ הקווי של סטנפורד

• מה מקדם ההחזרה

$$R = \int |\psi_R|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty \quad (7.5)$$

• מקדם ההעברה:

$$T = \int |\psi_I|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty \quad (7.6)$$

באופן כללי, הבעיה תלויה בתנאי ההתחלה: חבילת הגלים הספציפית איתה מתחילים.

פתרון:

1. מצאו את הפונקציות העצמיות ההמילטוניאן, $\psi_E(x)$.

2. מחשבים את ההיטלים $a(E) = \langle \psi_E | \psi_I \rangle$

3. קדמו כל רכיב בזמן, עם פאזה $e^{-iEt/\hbar}$

4. בזמן $t \rightarrow \infty$, זהו את ψ_T, ψ_R

בסוף, גם נרצה לראות שהפתרון אקוויולנטי לבעיה שאינה תלויה בזמן.

1. הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן: פותרים בנפרד בכל אחד מהפוטנציאלים השונים, ותופרים את הפתרונות:

• אזור I, $V = 0$:

$$\psi_E(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (7.7)$$

• באזור II, $V = V_0$:

$$\psi_E(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (7.8)$$

בבעיות פיזור, נקבע $D = 0$. המקדם מתאר גל שנע שמאלה באזור II. זה לא מצב פיזיקלי בבעיית פיזור כזו, ולכן נזרוק את האיבר. נדרוש רציפות ורציפות בנגזרת.

• מרציפות:

$$A + B = C \quad (7.9)$$

• מרציפות הנגזרת:

$$ik_1(A - B) = ik_2C \quad (7.10)$$

ולכן,

$$B = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) A = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right) A$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} A$$

לכן, הפונקציות העצמית הן, עד כדי קבוע:

$$\psi_E = A \left[\left(e^{ik_1x} + \frac{B}{A} e^{-ik_1x} \right) \Theta(-x) + \frac{C}{A} e^{ik_2x} \Theta(x) \right] \quad (7.11)$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \text{ כאשר}$$

היות ויש קשר בין k_1 ו- E , $k_1 = +\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, ניתן להשתמש ב- E כאינדקס. בנוסף, יודעים את הקשר

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar}} = \sqrt{k_1^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (7.12)$$

ולכן,

$$\psi_E(x) = \psi_{k_1}(x) = A \left[\left(e^{ik_1x} + \frac{B}{A} e^{-ik_1x} \right) \Theta(-x) + \frac{C}{A} e^{i(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}x} \Theta(x) \right] \quad (7.13)$$

לנירמול, נבחר $A = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}$ (בעצם, אפשר לקבל את A רק אחרי שסיימו את החשבון, אבל יריב מוכן לגלות לנו את המקדם הזה מראש)

2. חישוב ההיטלים:

$$a(k_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left[e^{-ik_1x} + \underbrace{\left(\frac{B}{A} \right)^* e^{ik_1x}}_{(B)} \right] \Theta(-x) + \underbrace{\left(\frac{C}{A} \right)^* e^{-ik_2x}}_{(A)} \Theta(x) \right) \psi_I(x) dx \quad (7.14)$$

כאשר את $\psi_I(x)$ בחרנו כך שהוא רחוק בצד שמאל וממוקד סביב $k = k_0$ (נע ימיני). נוכל לזרוק מהאינטגרל את (A) , כי הביטוי נמצא הרחק מימין, באזור II, ולכן אין חפיפה בינה ובין ψ_I , שנמצא באזור I. נוכל לזרוק גם את הביטוי (B) , משום שהתנע שלו, כיוון התנועה, הוא בכיוון הפוך משל ψ_I . נשארו עם

$$a(k_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_1x} \psi_I(x) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_1x} \frac{1}{\sqrt{\pi\Delta^2}} e^{ik_0(x+a)} e^{-(x+a)^2/2\Delta^2} dx$$

מותר היה לנו להשאיר את הגבולות ב- $[-\infty, +\infty]$ ולזרוק את ה- $\Theta(-x)$, בגלל שהגאוסיאן שלנו דועך מספיק מהר, וממילא קרוב מספיק לאפס באזור II. את האינטגרל נפתור באמצעות השלמה לריבוע, ונקבל,

$$= \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^{1/4} e^{-(k_1 - k_0)^2 \Delta^2 / 2} e^{ik_1 a} \quad (7.15)$$

Δ גדול, ו- ak_1 ממורכז סביב $k_1 = k_0$, ולכן אפשר להזניח תרומה מה- k_1 שרחוקים מאוד מ- k_0 .

3. קידום פונקצית הגל בזמן:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} a(k_1) e^{-iE(k_1)t/\hbar} \psi_{k_1}(x) dk_1 \\ &= \left(\frac{\Delta}{4\pi^4}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{e^{-i\hbar k_1^2 t/2m}}_{\psi_{k_1}(x)} \underbrace{e^{-(k_1-k_0)^2 \Delta^2/2}}_{\psi_{k_1}(x)} \underbrace{e^{ik_1 a}}_{\psi_{k_1}(x)} \\ &\quad \cdot \left\{ \underbrace{e^{ik_1 x}}_{(A)} \Theta(-x) + \underbrace{\frac{B}{A} e^{-ik_1 x}}_{(B)} \Theta(-x) + \frac{C}{A} e^{i\sqrt{k_1^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} x} \Theta(x) \right\} dk_1 \end{aligned}$$

נעיר שגם השורה השניה נמצאת בתוך האינטגרל. אפשר לבדוק שב- $t = 0$ מקבלים את $\psi_I(x)$, וזה מצדיק את הבחירה של A .

4. נשאיף את $t \rightarrow \infty$ ונזהה את האיבר המוחזר והאיבר המועבר נסתכל על האינטגרל של האיבר המוכפל ב- (A) :

$$\left(\frac{\Delta}{4\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\hbar k_1^2 t/2m} e^{-(k_1-k_0)^2 \Delta^2/2} e^{ik_1 a + ik_1 x} dk_1 \quad (7.16)$$

איבר זה מתאר תזוזה בזמן ימינה של פונקצית גל גאוסיאנית (באזור I). היא מוכפלת ב- $\Theta(-x)$, ולכן, בזמנים ארוכים, כאשר $x > 0$, האינטגרל כולו ימות בגלל ה- $\Theta(-x)$. בזמנים ארוכים, האיבר הזה, כולו, עובר לצד האפל³⁷, ומתבטל.

פיזיקלית זה גם ברור: פונקצית הגל הזו מתארת את הגל הפוגע. בזמנים ארוכים, הגל הפוגע נעלם והופך לגל יוצא וגל מוחזר. נבחן את איבר (B) :

$$\left(\frac{\Delta}{4\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\hbar k_1^2 t/2m} e^{-(k_1-k_0)^2 \Delta^2/2} \left(\frac{B}{A}\right) e^{ik_1 a - ik_1 x} \Theta(-x) dk_1 \quad (7.17)$$

זהו גאוסיאן שנע שמאלה, עם תנע ממוצע $-\hbar k_0$. האיבר $e^{-ik_0 x}$ נע שמאלה, אפילו ש- k_0 חיובי... בזמן $t \rightarrow -\infty$, $\Theta(-x) \equiv 1$, כי הגל מתקדם לתוך איזור I, ושם $\Theta(-x)$ לא מפריע לנו.. בעיקרון, B/A תלוי ב- k , אבל חבילת הגלים מאוד צרה סביב k_0 , ולכן נזהה

$$\psi_R = \underbrace{\Theta(-x)}_{=1} \cdot \underbrace{\left(\frac{B}{A}\right)_0}_{\text{Gaussian moving left given } k_1=k_0} \quad (7.18)$$

טיעון זה היה תקף עבור כל פונקציה ממורכזת מספיר סביב k_0 . פורמלית, זהו קירוב נקודת אוקף.³⁸ היות והקבועים נבחרו כך שהגאוסיאן מנורמל ב- $t = 0$, נקבל ש-

$$R = \int |\psi_R|^2 dx = \left| \left(\frac{B}{A}\right)_0 \right|^2 = \left(\frac{\sqrt{E_0} - \sqrt{E_0 - V_0}}{\sqrt{E_0} + \sqrt{E_0 - V_0}} \right)^2 \quad (7.19)$$

ניתן לראות שאל התוצאה קל היה לזקבל מהפונקציות העצמיות, ψ_E , בנוסחא 7.7, נזהה את $Ae^{ik_1 x}$ בתור הגל הפוגע ואת $Be^{-ik_1 x}$ בתור הגל המוחזר. בגלל שחבילת הגלים שלנו צרה מאוד סביב תנע k מסויים, היא מאוד "מרוחה" במרחב³⁹. לכן, ההבדל בין הבעיה התלויה בזמן לבעיה הלא-תלויה בזמן מטשטש, וניתן לעשות את הקירוב הזה.

³⁷ אבל יש שמה עוגיות
09.06.09³⁸

³⁹ הסיפור אינו מחליף את החשבון! הוא לכל היותר מצדיק אותו בדיעבד

אזי, מקדם העברה מקיים $T + R = 1$, ולכן

$$T = \frac{4\sqrt{E_0}\sqrt{E_0 - V_0}}{[\sqrt{E_0} + \sqrt{E_0 - V_0}]^2}$$

$$= \sqrt{\frac{E_0 - V_0}{E_0}} \left| \left(\frac{C}{A} \right)_0 \right|^2$$

אם כן, מדוע קיבלנו את התיקון ולא "פשוט" $\left| \left(\frac{C}{A} \right)_0 \right|^2$? הפונציות העצמיות שלנו הן

$$\psi_{k_0}(x) = \left[\underbrace{A_0 e^{ik_0 x}}_{(I)} + \underbrace{B_0 e^{-ik_0 x}}_{(R)} \right] \Theta(-x) + \underbrace{C_0 e^{ix \sqrt{(k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2})}}}_{(T)} \Theta(x) \quad (7.20)$$

לכן, זרמי ההסתברות הם:

- (I) , זרם ההסתברות הפוגע הוא $j_I = |A_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m}$
- (R) , זרם ההסתברות המוחזר הוא $j_R = |B_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m}$
- (T) , זרם ההסתברות המועבר הוא $j_T = |C_0|^2 \frac{\hbar}{m} \sqrt{(k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2})}$

ולכן, כפונקציה של הזרמים, מקדם ההחזרה הוא

$$R = \frac{j_R}{j_I} = \left| \frac{B_0}{A_0} \right|^2 \quad (7.21)$$

ומקדם ההעברה הוא

$$T = \frac{j_T}{j_I} = \left| \frac{C_0}{A_0} \right|^2 \frac{\sqrt{(k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2})}}{k_0}$$

$$= \left| \frac{C_0}{A_0} \right| \sqrt{\frac{E_0 - V_0}{E_0}}$$

חזרה על רעיונות:

1. התחלנו עם חבילת הגלים עם תנע ממוצע

$$\langle p_0 \rangle = \hbar k_0 \quad (7.22)$$

ומיקום ממוצע,

$$\langle x \rangle \rightarrow -\infty \quad (7.23)$$

2. פתרנו את הפונקציות העצמיות של $H = T + V$, ופיתחנו את חבילת הגלים בפונקציות העצמיות (חישבנו את $a(k)$)

3. קיבלנו את החבילות בזמן: חישבנו את T ואת R .

מצאנו שעבור חבילת גלים צרה (סביב $\hbar k_0$) הצורה הראשונית של חבילת הגלים לא חשובה: $R(k_0), T(k_0)$

4. ראינו שניתן להחליף בעיה דינמית בבעיה סטטית.

בשלושה מימדים, נניח שניתן להחליף את הבעיה הדינמית בבעיה סטטית, ונפתור אותה.

7.2 פיזור בשלושה מימדים

יורים אלומה של חלקיקים לכיוון מטרה. דבר ראשון, נאפיין את האלומה:

- יש לה רדיוס מקסימלי, ρ_{max}
 - תנע ממוצע, $\langle \mathbf{p} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$
 - נניח שהחלקיקים מפוזרים אחיד בכיוון הניצב ל- \mathbf{k}_0 .
 - נסמן ב- ρ את פרמטר הפגיעה.
 - אלומה אחידה, $\eta(\rho)$ הוא מספר החלקיקים שחוצים יחידת שטח ליחידת זמן במישור המוגדר על ידי ρ . האלומה אחידה, ולכן $\eta(\rho) = \eta$, קבוע.
- נניח $\rho_{max} \gg r_0$, כאשר r_0 גודל המטרה. נמקם גלאי בזווית מרחבית $d\Omega$ מהמטרה. בהנתן קצב פגיעה של חלקיקים במטרה, מה הקצב שבו חלקיקים מפוזרים לגלאי שמכסה זווית מרחבית $d\Omega$ סביב (θ, φ) . מתמטית, מגדירים את חתך הפעולה הדיפרנציאלי:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} \cdot d\Omega \quad (7.24)$$

המוגדר כמספר החלקיקים המפוזרים ל- $d\Omega$ ליחידת זמן, חלקי מספר החלקיקים הפוגעים ליחידת זמן ליחידת שטח במישור המוגדר על ידי ρ . חתך הפעולה הדיפרנציאלי הוא ביחידות של שטח.

האלגוריתם:

1. נקח חבילת גלים, עם תנע ממוצע $\langle \mathbf{p} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$, ופרמטר פגיעה ממוצע $\langle \rho \rangle$ (רחוקים ממטרה).
2. לפתח בפונקציות עצמיות של $H = T + V$, כאשר V הוא הפוטנציאל המפזר. לפונקציות העצמיות יש את הצורה של גל פוגע + גל מוחזר:

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{Hitting} + \psi_{Scattered} \quad (7.25)$$

3. נקדים את חבילת הגלים בזמן.
4. מזהים את הגל המפוזר ב- $t \rightarrow \infty^-$, ומחשבים את צפיפות ההסתברות (זרם ההסתברות) שקשורה בו. מבצעים אינטגרציה על $d\Omega$ סביב (θ, φ) , ונקבל את ההסתברות שחלקיק יגיע לגלאי שלנו. בדומה למימד אחד, מגלים שהתוצאה תלויה רק ב- $\hbar \mathbf{k}_0$ ו- $\langle \rho \rangle$.

נקרא לתוצאה,

$$P(\langle \rho \rangle, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega) \quad (7.26)$$

5. חושבים על קרן עם צפיפות $\eta(\rho)$. מספר החלקיקים המפוזרים ל- $d\Omega$ ליחידת זמן:

$$\eta(d\Omega) = \int P(\langle \rho \rangle, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega) \eta(\rho) d^2 \rho \quad (7.27)$$

מניחים ש- $\eta(\rho)$ קבוע במישור הנוצב לאלומה, ולכן, חתך הפעולה הדיפרנציאלי

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\eta(d\Omega)}{\eta} = \int P(\langle \rho \rangle, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega) d^2 \rho \quad (7.28)$$

אחרי כל החשבון, מגלים שניתן לקבל את אותן תוצאות מהפתון הסטטי, $\psi_{\mathbf{k}_0}$ (עבור אלומה עם \mathbf{k}_0 מדויק).

ספציפית, עבור $\mathbf{k}_0 = k\hat{z}$,

$$\psi_{\mathbf{k}_0} = e^{ikz} + \psi_{sc}(r, \theta, \varphi) \quad (7.29)$$

ψ_{sc} כמובן, תלוי במטרה. אבל, יש לנו אינפורמציה על מבנה רחוק ממטרה: רחוק מהמטרה, החלקיק חופשי, ולכן, (לאחר העברת אגפים במשוואת שרגינגר, וצמצום קבועים..)

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{sc} = 0 \quad (r \rightarrow \infty) \quad (7.30)$$

בסימטריה כדורית, ניתן לכתוב את הפוטנציאל באמצעות פונקציות בסל, $j_\ell(r), n_\ell(r)$,

$$\psi_{sc} = \sum_{\ell, m} (A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr)) Y_\ell^m(\varphi, \theta) \quad (7.31)$$

כאשר $j_\ell(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - \ell\frac{\pi}{2})}{kr}$, ו- $n_\ell(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{\cos(kr - \ell\frac{\pi}{2})}{kr}$. רוצים ש- ψ_{sc} יתאר גל יוצא: e^{ikr} , ולכן, נרצה ש- $\frac{A_\ell}{B_\ell} \propto -i$, ולכן, נקבל ש-

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{ikr}}{kr} \underbrace{\sum_{\ell} \sum_m (-i)^\ell (-B_\ell) Y_\ell^m(\theta, \varphi)}_{f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)} \quad (7.32)$$

כאשר B_ℓ יהיו תלויים במטרה עצמה, במפזר, אזי

$$\psi_{sc} \equiv \frac{e^{ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$$

$$\psi_{\mathbf{k}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + \underbrace{f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)}_{\text{scatter amplitude}} \frac{e^{ikr}}{r}$$

כדי לקבל את חתך הפעולה הדיפרנציאלי, נרצה לקבל את צפיפות ההסתברות הפוגעת ליחידת זמן, ואת צפיפות ההסתברות המפזרת ליחידת זמן (ל- $d\Omega$) ב- $r \rightarrow \infty$.

זרם הסתברות נכנס למטרה, היות ו- e^{ikz} ב- $r \rightarrow \infty$ הרבה יותר גדול מ- $\frac{e^{ikr}}{r}$,

$$|j_{inc}| = \left| \frac{\hbar}{2mi} \left(e^{-ikz} \vec{\nabla} e^{ikz} - e^{ikz} \vec{\nabla} e^{-ikz} \right) \right| = \frac{\hbar k}{m} \quad (7.33)$$

עבור זרם יוצר צריך לחשב, עבור ρ_{max} , את נקודת הפגיעה רחוק מהמטרה. ρ_{max} , רוחב האלומה, גדול בהרבה מגודל המטרה, אבל סופי. עבור כל $\theta > 0$, נוכל להתאלם מהאלומה הפוגעת במרחק גדול (כי החלקיקים הפוגעים מתפזרים הרחק מהאלומה, עבור מדידה במרחק גדול מספר. לכן, עבור כל $\theta \neq 0$, ישאר, ב- $r \rightarrow \infty$, רק החלק המפוזר של ונקצית הגל:

$$\mathbf{j}_{sc} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_{sc}^* \vec{\nabla} \psi_{sc} - \psi_{sc} \vec{\nabla} \psi_{sc}^* \right) \quad (7.34)$$

בקוארדינטות כדוריות,

$$\vec{\nabla} = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{\partial}{r \partial \theta} + \hat{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.35)$$

כאשר $r \rightarrow \infty$, האיברים התלויים ב- $\frac{1}{r}$ זניחים, ולכן נשאר עם $\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r}$,

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) = f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{ike^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (7.36)$$

אזי,

$$\mathbf{j}_{sc} = \frac{\hat{e}_r}{r^2} |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad (7.37)$$

לכן, ההסתברות שזורמת ל- $d\Omega$ ליחידת זמן,

$$R(d\Omega) = \mathbf{j}_{sc} \cdot \hat{e}_r r^2 d\Omega = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 \frac{\hbar k}{m} d\Omega \quad (7.38)$$

נשתמש בזרם הנכנס: \mathbf{j}_{inc}

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot d\Omega = \frac{R(d\Omega)}{j_{inc}} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (7.39)$$

לכן, חתך הפעולה הדיפרציאלי,

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2} \quad (7.40)$$

ול- $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ יחידות של שטח.

לכן, כל הבעיה היא לחשב את $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)$. לחשב את המקדמים הנ"ל זה באופן כללי, ממש לא טריוויאלי. בקורס הזה, נחשב את $f_{\mathbf{k}}$ עבור סדר ראשון: עבור פוטנציאלים חלשים. נראה גם, בצורה לא מפורשת, איך מוצאים את $f_{\mathbf{k}}$ לפוטנציאלים חזקים יותר.

7.3 קירוב בורן (בלתי תלוי בזמן)

נתון המילטוניאן

$$H = H_0 + V \quad (7.41)$$

כאשר $H_0 = \frac{p^2}{2m}$ ו- V הפוטנציאל המפרז. מחפשים פתרונות מהצורה

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \psi_{sc} \quad (7.42)$$

כאשר $\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$. נפתח פורמליזם שיתן לנו פתרון בתבנית הזו. ללא V , הפתרונות הם פתרונות של חלקיק חופשי. בצורה כללית, נסמן את הפתרון החופשי בתור $|\phi\rangle$. לכן,

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (7.43)$$

כאשר E מהצורה $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. אנחנו רוצים פתרון של $(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ הוא בצורה כללית,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\phi\rangle \quad (*)$$

כאשר E הוא הע"ע של H_0 המתאים ל- $|\phi\rangle$.

נבדוק שזהו אכן פתרון: נפעיל על המשוואה את $(E - H_0)$:

$$(E - H_0) |\psi\rangle = V |\psi\rangle + (E - H_0) |\phi\rangle$$

הביטוי $(E - H_0) |\phi\rangle$ מתאפס: $H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle$, ולכן, לאחר העברת אגפים, נקבל

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (7.44)$$

המבנה הזה נח, משום שכאשר $V \rightarrow 0$, אז $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$. בעיה: סינגולריות ב- $\frac{1}{E - H_0}$. כדי להפטר מהסינגולריות, נרשום את משוואה (*) בצורה:

$$\boxed{|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^\pm\rangle} \quad (7.45)$$

זוהי משוואת ליפמן-שווינגר, והיא משוואה אינטגרלית.

בבסיס התנע,

$$\langle \mathbf{p} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\varepsilon} \langle \mathbf{p} | V | \psi^\pm \rangle \quad (7.46)$$

אבל אנחנו נתחיל בבסיס המקום:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3 \mathbf{x}' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^\pm \rangle \quad (7.47)$$

הכנסנו אופרטוק יחידה $\langle \mathbf{x}' | \langle \mathbf{x}' |$ באמצע המשוואה, וקיבלנו משוואה אינטגרלית. על $\left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle$ אפשר להסתכל כפונקציית גרין של הבעיה. כדי להתקדם, צריך לחשב את הגודל

$$G_\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (7.48)$$

נראה שכאשר $\varepsilon \rightarrow 0^+$, נקבל ש-

$$G_\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (7.49)$$

כאשר $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. לאחר הכנסת פעמיים אופרטור היחידה $|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$ (נשים לב ש- $\mathbf{p}', \mathbf{p}''$ הם מספרים ולא אופרטורים)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \mathbf{p}' \int d^3 \mathbf{p}'' \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle \quad (7.50)$$

כאשר

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{p}'\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}'' \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{p}''\mathbf{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \end{aligned}$$

ו-

$$\left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle = \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - \left(\frac{p'^2}{2m}\right) \pm i\varepsilon} \quad (7.51)$$

ולכן, נשארנו עם האינטגרל

$$G_\pm = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}'(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}}{\left[E - \left(\frac{p'^2}{2m}\right) \pm i\varepsilon\right]} \quad (7.52)$$

נשתש ב- $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, ונגדיר $\mathbf{p}' = \hbar \mathbf{q}$ ולכן

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^3 dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \cos \theta}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon'} \quad (7.53)$$

כאשר הגדרנו מחדש את ε' להיות $\varepsilon' = \varepsilon \frac{2m}{\hbar^2}$. האינטגרל לפי $d(\cos \theta)$ טריוויאלי, ולפי $d\varphi$ אפילו יותר:

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon'} \frac{e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (7.54)$$

נגדיר $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. במקום שני אינטגרלים מ-0 עד ∞ על q ו- $-q$, נוכל להפוך אחד מהם ולקבל אינטגרל על כל המישר:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqr}}{iqr} \frac{q^2 dq}{(k^2 - q^2 \pm i\varepsilon)} \\ &= -\frac{i}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iqr} q dq}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \end{aligned}$$

אינטגרל כזה פותרים על ידי משפט הרזידיום של קושי:

$$\oint f(z) dz = 2\pi i \sum_j R(z_j) \quad (7.55)$$

כאשר $R(z_j)$ הם הקטבים במישור הקומפלקסי. הקטבים במישור הקומפלקסי הם המקומות בהם הפונקציה "מתפוצצת" (או, המכנה מתאפס). אם נקח את המקדם של הפונקציה, נוציא את המקדם מסדר הראשון, וזה המקדם שרושמים בתור $R(z_j)$. נזהה את הקטבים:

$$k^2 - q^2 \pm i\varepsilon = 0 \quad (7.56)$$

נרשום זאת בצורה

$$\begin{aligned} (k + q \pm i\eta)(k - q \pm i\eta) &= 0 \\ &= k^2 - q \pm 2i\eta k \end{aligned}$$

(עד כדי η^2) נזה את $\varepsilon \cong 2\eta k$. יש לנו קטבים ב-

$$\begin{aligned} q_1 &= -k \mp i\eta \\ q_2 &= k \pm i\eta \end{aligned}$$

כדי לעשות מסלול סגור במישור המדומה עם q , הדרוש למשפט הרזידיום, ונבחר את תהסימן של q שכך שנקבל $-\infty$ ב- q גדול. [איזשהו אינטגרל על חצי מעגל שכולל את שני הקטבים]. אזי, במקרה של $+i\varepsilon$,

$$\begin{aligned} R(k + i\eta) &= \lim_{q \rightarrow k+i\eta} (q - k - i\eta) \frac{e^{iqr} q}{k^2 + i\varepsilon - q^2} \left(\frac{-i}{4\pi^2 r} \right) \\ &\xrightarrow{\eta \rightarrow 0} \frac{-ik(-1)}{2k(4\pi^2 r)} e^{ikr} = \frac{i}{8\pi^2 r} e^{ikr} \end{aligned}$$

ובצורה דומה, מקבלים:

$$R(-k + i\eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} = \frac{i}{8\pi^2 r} e^{-ikr} \quad (7.57)$$

ולבסוף, קיבלנו

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (7.58)$$

אפשר לזהות את הביטוי $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ בתור פונקציית גרין עבור משוואה ⁴⁰

$$\left(\vec{\nabla}^2 + \mathbf{k}^2 \right) G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.59)$$

ה- \pm מאפשר לנו לבחור את פונקציית הגל המתאימה: היוצאת מנקודת הפיזור או הפוגעת בה.

נציב את G במשוואת ליפמן-שווינגר (7.45), ונקבל

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^\pm \rangle \quad (7.60)$$

אנחנו באת רוצים לקבל גל יוצא, ולכן נבחר $+i\epsilon$, עבור $V = V(\mathbf{x})$. נכניס אופרטור יחידה ונבצע אינטגרציה רק עליו, ונקבל

$$\langle \mathbf{x} | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}) \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.61)$$

אז,

$$\int d^3x'' \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \psi^\pm \rangle = V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle \quad (7.62)$$

ולבסוף, נקבל

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle \quad (7.63)$$

אנחנו מדברים על בעיית פיזור: אלומרה שפוגעת עם $\mathbf{k} = \frac{p_c}{\hbar}$, או $|\phi\rangle = |\mathbf{p}_i\rangle$. האלומה פוגעת במטרה ומפוזרת הרחק מהמטרה. כאשר \mathbf{x}' "רץ" בתוך פוטנציאל המטרה, ו- \mathbf{x} היא הנקודה שבה אנחנו "מסתכלים", מסתכל על נקודות רחוקות מהפוטנציאל: כאשר $x \gg x'$. נגדיר $r = |\mathbf{x}|$ ו- $r' = |\mathbf{x}'|$ ואת הזווית ביניהם ב- α . אז,

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= \sqrt{r^2 - 2rr' \cos \alpha + r'^2} \\ &= r \left(1 - \frac{2r'}{r} \cos \alpha + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right)^{1/2} \\ &\stackrel{\frac{r'}{r} \ll 1}{\approx} r - \hat{r} \cdot \mathbf{x}' \end{aligned}$$

כאשר $\hat{r} = \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}$. נדיר, $\mathbf{k}' = k\hat{r}$ כאשר \mathbf{k}' הוא כיון הגל המפוזר. לכן, ניתן לרשום,

$$e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \stackrel{r \gg r'}{\approx} e^{\pm ikr \mp ik' \cdot \mathbf{x}'} \quad (7.64)$$

ובגבול של $r' \gg r$,

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \rightarrow \frac{1}{r} \quad (7.65)$$

זכרו, $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, ולכן

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (7.66)$$

לכן,

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle \stackrel{\text{large } r}{\approx} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle \quad (7.67)$$

כאשר בחרנו $|\mathbf{k}\rangle = |\phi\rangle$, הוא ההיטל של הגל שלנו על גל חופשי, פוגע, ויתר הביטוי הוא הגל המפוזר, ולכן, נוכל לזהות את $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ולרשום זאת במבנה,

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \quad (7.68)$$

כאשר k הוא הגל הנכנס ו- k' הוא הגל היוצא.

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar} \int d^3\mathbf{x} \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle \quad (7.69)$$

בצורה יותר קומפקטית,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^+ \rangle \quad (7.70)$$

7.3.1 קירוב בורן

עבור מפזר חלש, פונקציית הגל הפוגעת לא תשתנה הרבה.

$$\langle \mathbf{x}' | \psi^+ \rangle \rightarrow \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (7.71)$$

ולכן, בסופו של יום⁴¹,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \quad (7.72)$$

ניתן לרשום גם

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right|^2 \quad (7.73)$$

כאשר $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ו- $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i$, מעבר התנע. נוה להגדיר

$$|\mathbf{q}|^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = 2k^2 (1 - \cos\theta) = 4k^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (7.74)$$

עבור מקרים בהם $V(\mathbf{r}) = V(r)$, תלוי רק בגודלו של r ,

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr' \cos\theta} V(r') d(\cos\theta) d\phi' r'^2 dr' \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{\sin(qr')}{q} V(r') r' dr' = f_k(\theta) \end{aligned}$$

כאשר θ זווית הפיזור.

7.3.2 דוגמה: פיזור מפוטנציאל יוקוואה

(Yukawa)

$$V(r) = \frac{ge^{-\mu_0 r}}{r} \quad (7.75)$$

זהו פוטנציאל שתלוי רק ב- r . μ_0, g הם פרמטרים. בגבול של $\mu_0 \rightarrow 0$, זהו פוטנציאל קולומבי רגיל. הפוטנציאל הזה מקרב טוב כח שמייצר חלקיק-נשא-כח בעל מסה. נחשב את אמפליטודת הפיזור,

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}(\theta) &= -\frac{2mg}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{2i} e^{-\mu_0 r'} dr' \\ &= \frac{-2mg}{\hbar^2 (\mu_0^2 + q^2)} \end{aligned}$$

⁴¹זו הנוסחה שצריך לשים בדף נוסחאות...

ולכן,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 g^2}{\hbar^4 [\mu_0^2 + 4k^2 \sin^2(\frac{\theta}{2})]^2} \quad (7.76)$$

כלומר, מקדימה נראה הכי הרבה חלקיקים, בכיוון ההפוך לכיוון של \mathbf{k} , כאשר $\theta = \pi$, נראה מעט חלקיקים. בעקרון, $\mu_0 = 0$ נותן לנו פוטנציאל קולומבי, $g = ze^2$ ו- $p^2 = \frac{k^2}{2m}$

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right|_{Columb} = \frac{4m^2 g^2}{4\hbar^4 \underbrace{k^4}_{p^4} \sin^4(\frac{\theta}{2})} \quad (7.77)$$

ו- $k^4 = \frac{4m^2 p^4}{\hbar^4}$ ולכן,

$$= \frac{m^2 (ze^2)^2}{4p^4 \sin^4(\frac{\theta}{2})} \quad (7.78)$$

הקירוב הזה בעייתי, והוא לא חייב להיות תקף, כי הנחנו פוטנציאל סופי. אבל זו גם התוצאה הנכונה כאשר עושים את הפיזור בצורה מסודרת. וזו גם התוצאה עבור פיזור קלאסי מכוח קולומבי.

7.3.3 מתי קירוב בורן תקף?

כדי שקירוב בורן יהיה תקף, צריך להתקיים:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle \approx \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \quad (7.79)$$

או,

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \underbrace{\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle - \frac{2m^2}{\hbar} \int d^3 \mathbf{x}' \frac{e^{-|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle}_{\text{small}} \quad (7.80)$$

הבעיה יכולה להיות כאשר האינטגרל נותן ערך גדול. הוא עלול לתת ערך גדול כאשר x קטן. לכן, נבדוק את האינטגרל כאשר $x = 0$ (כלומר: ממש קטן. בחרנו את המטרה להיות ב-0). כלומר, במעבר לקירוב, נשאר עם האינטגרל,

$$\left| \frac{2m}{\hbar} \int d^3 \mathbf{x}' \frac{e^{ikr'}}{4\pi r'} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right| \ll 1 \quad (7.81)$$

זוהי דרישה קצת קיצונית לגבי מתי האינטגרל תקף ומתי לא. בצורה חלשה יותר, הדרישה היא עבור פוטנציאל ספריסימטרי,

$$4\pi \left| \frac{2m}{\hbar^2} \int dr' r' V(r') \right| \ll 1 \quad (7.82)$$

כאשר את האקספוננטים זרקנו כי הם מסדר גודל של 1.

7.4 קירוב בורן מסדרים גבוהים⁴²

הרעיון: לוקחים את משוואת לפימן-שווינגר (7.45) ומפתחים תורת הפרעות מסודרת, בעוצמת הפוטנציאל. נגדיר את האופרטור T :

$$V | \psi^+ \rangle = T | \phi \rangle \quad (\dagger)$$

⁴²21.06.2009, לקרוא בספר על פיזור גלים חלקיים, יריב לא ילמד את זה כי אין זמן, אבל זה חשוב

$$\begin{aligned} |\psi^+\rangle &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\psi^+\rangle \\ &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T |\phi\rangle \end{aligned}$$

נכפיל ב- V , ונקבל

$$V |\psi^+\rangle = V |\phi\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T |\phi\rangle \quad (7.83)$$

נשתמש שוב פעם באהות (†), ונקבל,

$$T |\phi\rangle = V |\phi\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T |\phi\rangle \quad (7.84)$$

את $|\phi\rangle$ ניתן לבחור כרצוננו, ולכן נקבל זהות עבור האופרטור T :

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T \quad (7.85)$$

שימו לב ש-

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | T | \phi \rangle \quad (7.86)$$

במקרה שלנו, פיזור, $|\phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$, וקיבלנו

$$= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \quad (7.87)$$

פותרים את T בצורה איטרטיבית:

$$T = \underbrace{V}_{1st} + \underbrace{V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V}_{2nd \text{ order}} + \underbrace{V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V}_{3rd \text{ order}} + \dots \quad (7.88)$$

אפשר לרשום:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_n f^{(n)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (7.89)$$

כאשר

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle \\ f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \left\langle \mathbf{k}' \left| V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V \right| \mathbf{k} \right\rangle \end{aligned}$$

נוסיף שני בסיסים שלמים של \mathbf{x} לביטוי ל- $f^{(2)}$:

$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3\mathbf{x}' d^3\mathbf{x}'' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \right| \mathbf{x}'' \right\rangle V(\mathbf{x}'') \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{k} \rangle \quad (7.90)$$

אפשר להסתכל על זה בתור

$$G = \left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \right| \mathbf{x} \right\rangle \quad (7.91)$$

פונקציית גרין שמקדמת אותנו ממצב למצב. אם נכניס איטרטיבית בסיס-שלם בכל צד, אפשר להסתכל על זה בתור: התחלה ב- \mathbf{k}' , ו"מכות" איטרטיביות מהפוטנציאל (הולכות ונחלשות, בכל סדר...)

8 חלקיקים זהים

עד כה דיברנו על בעיות של חלקיק אחד. העניינים מתחילים להיות יותר מעניינים כאשר יש הרבה דרגות חופש שעושות אינטראקציה. כדי לתאר מספר חלקיקים, אנחנו חייבים להרחיב מרחב הילברט.

דוגמה 1.8 חלקיקים שונים שמתוארים על ידי הוקטורים $|x_1\rangle, |x_2\rangle$. כל אחד מוקטורים הללו חי במרחב הילברט משלו, $\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2$, בהתאמה. מצב המערכת יתואר על ידי הוקטור

$$|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = |x_1\rangle |x_2\rangle = |x_1, x_2\rangle \quad (8.1)$$

הוקטור הזה חי במרחב המכפלה, $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$.

הערה 8.1 המרחב מכיל וקטורים לא מהצורה $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$. לדוגמה,

$$|\psi\rangle = |x'_1\rangle \otimes |x'_2\rangle + |x''_1\rangle \otimes |x''_2\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \quad (8.2)$$

הנקודה המעניינת היא כשמפעילים את הפורמליזם על חלקיקים זהים, מקבלים תוצאות מוזרות.

המקרה הקלאסי נסתכל על ניסוי פיזור, עם שני כדורים זהים. נקח שולחן ביליארד מלבני, עם כיסים בפינות בלבד. נסמן את הכיסים ב-1, 2, 3, 4. נקח 2 כדורי ביליארד שיוצאים מפינות 1, 2, מתנגשים, ופוגעים בכיסים 3, 4. ברור שהכדור שיצא מכיס 1 פגע בכיס 4, והכדור שיצא מסביבות כיס 2 פגע בסביבות כיס 3. לכן, קלאסית, ניתן ללכת אחורה בזמן על המסלולים של כל אחד מהכדורים, ולומר מאיפה הגיע כל חלקיק: שקול להוספת "צבע" לחלקיק.

המקרה הקוונטי אין מסלול מוגדר היטב לחלקיקים. אין ידע מדוייק על ההיסטוריה של החלקיק. אין בסיס פסיקלי להבחנה בין חלקיקים זהים. כלומר, במערכת הביליארד, אין משמעות לשאלה עם החלקיק שהגיע לכיס 3 יצא מסביבות כיס 2 או מסביבות כיס 1.

מסקנה 8.2 שתי הקונפיגורציות, שמשויכות להחלפת החלקיקים, חייבות להיות מתוארות על ידי אותו וקטור מצב.

שני חלקיקים שונים הממוקמים ב- a וב- b , אזי מצב המערכת:

$$|\psi\rangle = |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 \quad (8.3)$$

שונה מהמצב,

$$|\psi\rangle = |b\rangle_1 \otimes |a\rangle_2 \quad (8.4)$$

עבור חלקיקים זהים כמובן שאי אפשר להבדיל בין המצב $|a\rangle \otimes |b\rangle$ למצב $|b\rangle \otimes |a\rangle$. למעשה, לא ניתן להבדיל בין שני המצבים הללו לבין כל צירוף לינארי שלהם,

$$|\psi\rangle = c_1 |a\rangle \otimes |b\rangle + c_2 |b\rangle \otimes |a\rangle \quad (8.5)$$

כל הצירופים הללו יתנו אותם ערכי תצפית של מקום. עקרון זה ממכונה Exchange degeneracy. כלומר, הידע על הערכים העצמיים של המערכת, אינו מספר בצורה חד ערכית על מצב המערכת. כדי להתקדם, נגדיר אופרטור תמורות:

$$P_{12} |a\rangle |b\rangle = |b\rangle |a\rangle \quad (8.6)$$

ברור כי

$$P_{12}^{-1} = P_{21} = P_{12}$$

$$P_{12}^2 = 1$$

נסתכל על אופרטור A שפועל על וקטור מצב. נרשום A_1, A_2 הפועלים כך:

$$A_1 |a'\rangle |a''\rangle = a' |a'\rangle |a''\rangle \quad (*)$$

$$A_2 |a'\rangle |a''\rangle = a'' |a'\rangle |a''\rangle \quad (**)$$

נכפיל את (*) ב- P_{12} :

$$P_{12}A_1 |a'\rangle |a''\rangle = a' P_{12} |a'\rangle |a''\rangle = a' |a''\rangle |a'\rangle$$

$$P_{12}A_1 P_{12}^{-1} P_{12} |a'\rangle |a''\rangle = P_{12}A_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle |a'\rangle$$

ומשתי המשוואות, נקבל,

$$P_{12}A_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle |a'\rangle = a' |a''\rangle |a'\rangle \quad (8.7)$$

הביטוי מסדר עם (***) רק אם $P_{12}A_1 P_{12}^{-1} = A_2$. הצמדה ב- P_{12} מחליפה אינדקס של חלקיק בגודל המדיד.**דוגמה 2.8** המילטוניאן דו חלקיקי:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_p(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) + V_{ext}(\mathbf{x}_1) + V_{ext}(\mathbf{x}_2) \quad (8.8)$$

החלקיקים זהים, ולכן H חייב להיות סימטרי להחלפת אינדקס:

$$P_{12}HP_{12}^{-1} = H \quad (8.9)$$

לכן, $[H, P_{12}] = 0$. מתחלף עם ההמילטוניאן, ולכן הוא קבוע תנועה. היות ו- $P_{12}^2 = 1$, הערכים העצמיים שלו הם $+1$ או -1 .
 הערך העצמי $+1$ מתייחס לפונקציות גל סימטריות, והערך העצמי -1 מתייחס לפונקציות גל אנטיסימטריות (להחלפת אינדקס).

הוקטורים העצמיים הם

$$|ab\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle |b\rangle + |b\rangle |a\rangle)$$

$$|ab\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle |b\rangle - |b\rangle |a\rangle)$$

ניתן להרחיב את הדיון ליותר חלקיקים. נגדיר אופרטורים

$$p_{ij} |a'\rangle |a''\rangle \dots |a^i\rangle |a^{i+1}\rangle \dots |a^j\rangle \dots = |a'\rangle |a''\rangle \dots |a^j\rangle |a^{i+1}\rangle \dots |a^i\rangle \dots \quad (8.10)$$

כמו מקודם, $P_{ij}^2 = 1$, והערכים העצמיים שלו הם ± 1 .**דוגמה 3.8** שלושה חלקיקים:

$$|a'\rangle |a''\rangle |a'''\rangle \quad (8.11)$$

יש לנו $6 = 3!$ תמורות. אם דורשים וקטורים או סימטריים או אנטיסימטריים, נשארים עם הביטוי

$$|a'a''a'''\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\begin{array}{l} |a'\rangle |a''\rangle |a'''\rangle \pm |a''\rangle |a'\rangle |a'''\rangle \\ + |a''\rangle |a'''\rangle |a'\rangle \pm |a'''\rangle |a''\rangle |a'\rangle \\ + |a'''\rangle |a'\rangle |a''\rangle \pm |a'\rangle |a'''\rangle |a''\rangle \end{array} \right) \quad (8.12)$$

הניוון הכללי הוא 6. אנחנו דורשים רק וקטורים סימטריים ואנטיסימטריים, ומקבלים רק 2 וקטורים. כלומר, יש 4 וקטורים שהם לא סימטריים ולא אנטיסימטריים. אם $a' = a''$, אין וקטור אנטיסימטרי! הוקטור הסימטרי נשאר,

$$\begin{aligned} |a'a''\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|a'\rangle |a'\rangle |a''\rangle + |a'\rangle |a''\rangle |a'\rangle + |a''\rangle |a'\rangle |a'\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{2!}{3!}} \end{aligned}$$

במקרה הכללי, הנרימול הוא $\sqrt{\frac{N_1!N_2!\dots N_n!}{N!}}$ כאשר N הוא מספר החלקיקים, ו- N_i הוא מספר החלקיקים במצב i .

8.3 מסקנה אם פונקציית הגל היא אנטיסימטרית, לא ניתן למקם 2 חלקיקים באותו מצב קוונטי.

הנחת הסימטריה: הטבע מציג עבור N חלקיקים זהים, אך ורק פונקציות גל סימטריות ואנטיסימטריות. פונקציות גל סימטריות מתייחסות לבוזונים ופונקציות גל אנטיסימטריות מתייחסות לפרמיונים. יותר מרשים הקשר, שפרמיונים הם בעלי ספין חצי-שלם: $\dots, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$, ובוזונים הם בעלי ספין חצי שלם: $\dots, 0, 1, 3, \dots$.

כלומר, עבור פרמיונים, קיים לכל היותר אחד בכל מצב קוונטי, ועבור בוזונים, ניתן למצוא כמה שרוצים בכל מצב קוונטי.

דוגמה 4.8 ${}^3\text{He}$ הוא פרמיון ו- ${}^4\text{He}$ הוא בוזון (ולכן ${}^4\text{He}$ עושה עיבוי בוז-איינשטיין)

יש הבדל דרמטי בין הסימטריות: עבור שני פרמיונים, פונקציית הגל היחידה המותרת היא $\frac{1}{\sqrt{2}} (|a'\rangle |a''\rangle - |a''\rangle |a'\rangle)$ ועבור בוזונים, $|a'\rangle |a''\rangle$, ו- $|a''\rangle |a'\rangle$. באופן קלאסי, המצבים המותרים הם

$$\frac{|a'\rangle |a''\rangle + |a''\rangle |a'\rangle}{\sqrt{2}} \quad (8.13)$$

8.0.1 ומה עם כל היקום?

עד עכשיו הנחנו

$$H = H_{\text{system}} + H_{\text{universe}} \quad (8.14)$$

כלומר, פונקציית הגל שלנו היא

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_{\text{sys}} |\psi\rangle_{\text{univ}} \quad (8.15)$$

מניחים יש צימוד חלש עם היקום ושההמילטוניאנים אדטיביים. אז, המדידה על המערכת, למשל,

$$\begin{aligned} \rho(x_s) &= \int |\psi(x_s, x_{\text{univ}})|^2 dx_{\text{univ}} \\ &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2 \int |\psi_{\text{univ}}(x_{\text{univ}})| dx_{\text{univ}} \\ &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2 \end{aligned}$$

עם חלקיקים זהים, זה לא כל כך פשוט. צריך לדון במצבים סימטריים ואנטיסימטריים.. נניח ויש לנו שני חלקיקים זהים $G_m(x)$ על הירח ו- $G_E(X)$ על כדור הארץ. נסתכל על מקרה סימטרי,

$$\psi_s(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (G_E(\mathbf{x}_1) G_M(\mathbf{x}_2) + G_E(\mathbf{x}_2) G_M(\mathbf{x}_1)) \quad (8.16)$$

כלומר, לכאורה, צריכים להתחשב במה שוקרה על הירח.. נסתכל על צפיפות ההתסברות:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &\propto |G_E(\mathbf{x}_1)|^2 |G_M(\mathbf{x}_2)|^2 + |G_E(\mathbf{x}_2)|^2 |G_M(\mathbf{x}_1)|^2 \\ &\quad + G_E^*(\mathbf{x}_1) G_M(\mathbf{x}_1) G_M^*(\mathbf{x}_2) G_E(\mathbf{x}_2) + G_M^*(\mathbf{x}_1) G_E(\mathbf{x}_1) G_E^*(\mathbf{x}_2) G_M(\mathbf{x}_2) \end{aligned}$$

נשים לב שאם מודדים חלקיק, למשל, על כדור הארץ, אז הביטוי עבור המיקום של הירח הוא רחוק רחוק על הזנב, ולכן נשאר לנו רק האיבר הראשון. ברגע ששתי מערכות קרובות, האפקטים הללו נהיים משמעותיים.

8.0.2 צורת רישום קומפקטית לפונקציות גל אנטי-סימטריות⁴³

עבור חלקיק במימד אחד, מצבים קוונטים n . נחשוב על שלושה חלקיקים במצבים n_1, n_2, n_3 . הפונקציות החד חלקיקיות יהיו $\psi_{n_1}(x), \psi_{n_2}(x), \psi_{n_3}(x)$. אז פונקציית הגל הפרמיונית,

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) &= \sqrt{\frac{1}{3!}} (\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3) - \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_3}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) + \dots) \\ &= \sqrt{\frac{1}{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_3) & \psi_{n_2}(x_3) & \psi_{n_3}(x_3) \\ \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_2}(x_2) & \psi_{n_3}(x_2) \\ \psi_{n_1}(x_3) & \psi_{n_2}(x_3) & \psi_{n_3}(x_3) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

הצגה זו, באמצעות דטרמיננטה, מכונה "הדטרמיננטה של סליטר (Slater)". ישירות מהדטרמיננטה, ניתן לראות למשל, שעבור שני אינדקסים זהים, הדטרמיננטה מתאפסת.

8.1 מערכת של שני אלקטרונים

אלקטרונים הם פרמיונים (בספין $\frac{1}{2}$). הערכים העצמיים של P_{12} הם -1 . כדי לתאר את שני האלקטרונים, נבחר בבסיס

$$m_{s1}, m_{s2}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \quad (8.17)$$

כאשר m_{s1}, m_{s2} הם מצבי הספין של החלקיקים, $\pm \frac{1}{2}$. פונקציית גל כללית תהיה מהצורה

$$\psi = \sum_{m_{s1}} \sum_{m_{s2}} C(m_{s1}, m_{s2}) \langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle \quad (8.18)$$

נניח שההמילטוניאן מתחלף עם האופרטור S_{tot}^2 , כלומר $[S_{tot}^2, H] = 0$, אז הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן הן גם פונקציות של S_{tot}^2 . לכן, לפונקציה עצמית יהיה חלק מרחבי ϕ וחלק ספינורי χ :

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \chi \quad (8.19)$$

החלק הספינורי הוא מהצורה,

$$\chi(m_{s1}, m_{s2}) = \begin{cases} \begin{Bmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{Bmatrix} & \text{Triplet - symmetric} \\ \begin{Bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{Bmatrix} & \text{Singlet - Antisymmetric} \end{cases} \quad (8.20)$$

שינו לב ש-

$$\langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | P_{12} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x}_2, m_{s2}; \mathbf{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle \quad (8.21)$$

עבור האלקטרונים צריך להתקיים,

$$\langle \mathbf{x}_2, m_{s2}; \mathbf{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle = - \langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle \quad (8.22)$$

לכן, אפשר לרשום,

$$P_{12} = P_{12}^{space} P_{12}^{spin} \quad (8.23)$$

לכן, אם אחד מהאופרטורים, P^{space}, P^{spin} נותן (-1) , אז השני צריך לתת $(+1)$. לכן, אם החלק המרחבי סימטרי, החלק הספיני הוא סינגלט - אנטיסימטרי, וההפך.

דוגמה 5.8 נסתכל על משוואות שרדינגר עבור שני אלקטרונים:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V_{ext}(\mathbf{x}_1) + V_{ext}(\mathbf{x}_2) \right] \psi = E\psi \quad (8.24)$$

היא סכום של שתי משוואות שרדינגר: אין אינטראקציה בין החלקיקים. ברור ש- H מתחלף עם S_{tot}^2 , לכן, תכונות הטרנספורמציה מוגדרות תחת P_{12}^{spin} , ובנוסף, הפתרון הוא פריק: ניתן לרשום את הפתרון בצורה

$$w_A(x_1) w_B(x_2) \quad (8.25)$$

כאשר w_A, w_B הם הפתרונות של משוואות שרדינגר החד-חלקיקיות. הספינים הם בסינגלט או טריפלט, ולכן פונקציות הגל המרחביות יכולות להיות סמיטריות או אנטיסימטריות. החלק המרחבי,

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (w_A(\mathbf{x}_1) w_B(\mathbf{x}_2) \pm w_A(\mathbf{x}_2) w_B(\mathbf{x}_1)) \quad (8.26)$$

כאשר ה- $+$ הוא עבור סינגלט וה- $-$ עבור טריפלט. מה הסיכוי למצוא אלקטרונים ב- \mathbf{x}_1 ו- \mathbf{x}_2 : צפיפות ההסתברות היא:

$$\frac{1}{2} \left\{ |w_A(\mathbf{x}_1)|^2 |w_B(\mathbf{x}_2)|^2 + |w_A(\mathbf{x}_2)|^2 |w_B(\mathbf{x}_1)|^2 \pm 2\text{Re} [w_A(x_1) w_B(x_2) w_A^*(x_2) w_B^*(x_1)] \right\} \quad (8.27)$$

כאשר כאן, ה- $-$ הוא עבור הטרפלט וה- $+$ הוא עבור הסינגלט. האיבר המעורב מכונה "Exchange density". נסתכל על מצב שבו $x_1 = x_2$, אז, עבור הסינגלט, הם "אוהבים" לשבת באותו מקום - יש להם סיכוי גבוהה להיות באותו המקום. עבור הטרפלט, הביטוי יתאפס: הם לעולם לא יהיו באותו המקום.

אפשר לחזור על החשבון עם אינטראקציה בין האלקטרונים, ואפשר להראות שזה מוביל לאינטראקציה אפקטיבית מהצורה

$$-JS_1 \cdot S_2 \quad (8.28)$$

כאשר $J = 2 \int \psi_1^*(\mathbf{x}_1) \psi_2^*(\mathbf{x}_2) V_I(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi_2(\mathbf{x}_1) \psi_1(\mathbf{x}_2) d^3x_1 d^3x_2$. האינטראקציה הזו אחראית למגנטים.

9 הקירוב הסמי-קלאסי

(ידוע גם בשם WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin Approximation). חלקיק עם אנרגיה E נע בפוטנציאל קבוע V . הפונקציות העצמיות יהיו

$$\psi(x) = \psi(0) e^{\pm ipx/\hbar} \quad (9.1)$$

כאשר $p = \sqrt{2m(E - V)}$. (כאשר $+$ עבור חלקיק זה ימינה ו- $-$ עבור חלקיק שנע שמאלה). פונקציית גל כללית היא צירוף לינארי של איברים עם $+$ ועם $-$.

פונקציה עושה אוסצילציות במרחב עם אורך גל דה-ברולי, $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$: שינוי הפאזה ליחידת אורך קבוע. כאשר הפוטנציאל תלוי במיקום, $V = V(x)$ (אבל $V(x)$ משתנה לאט), נצפה שעל פני מרחקים קטנים ביחס למרחקים ש- $V(x)$ משתנה בהם, הפתרון יראה אותו הדבר:

$$\lambda(X) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \quad (9.2)$$

אנחנו יכולים לנחש שהיות ויש לנו $\lambda(x)$, אז

$$\psi(x) = \psi(0) e^{\pm i/\hbar \int_0^x p(x') dx'} \quad (9.3)$$

או, בצורה כללית יותר, $\psi(x) = \psi(x_0) e^{\pm i/\hbar \int_{x_0}^x p(x') dx'}$, פתרון כללי הוא צירוף לינארי של גל שנע ימינה וגל שנע שמאלה.

למרות ש- $\lambda(x)$ מוגדר בכל נקודה. ניתן להגדיר $\lambda(x)$ בצורה טובה, רק אם $\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| \ll 1$ (כלומר, עם λ לא משתנה כמעט לאורך מחזור אחד של אורך גל).

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{d\lambda}{dx} \frac{\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \quad (9.4)$$

ונרצה ש- $\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1$, $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}$. ולכן, זהו קירוב טוב כאשר $\hbar \rightarrow 0$.

9.1 פיתוח פורמלי

נתחיל ממשוואת שרדינגר:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right) \psi(x) = 0 \quad (9.5)$$

נגדיר $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ ואז המשווה היא מהצורה,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} p^2(x) \right) \psi(x) = 0 \quad (9.6)$$

נרשום,

$$\psi = e^{i\phi(x)/\hbar} \quad (9.7)$$

כאשר $\phi(x)$ לא בהכרח ממשי: $\psi(x) = \rho e^{i\tilde{\phi}}$ כאשר $\tilde{\phi}/\hbar = \phi/\hbar + i \ln \rho$. אז,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} e^{i\phi(x)/\hbar} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{i\phi'(x)}{\hbar} e^{i\phi(x)/\hbar} \right) \\ &= \left[- \left(\frac{\phi'}{\hbar} \right)^2 + \frac{i\phi''}{\hbar} \right] e^{i\phi(x)/\hbar} \end{aligned}$$

שימוש בזה נותן,

$$- \left(\frac{\phi'(x)}{\hbar} \right)^2 + \frac{i\phi''}{\hbar} + \frac{p^2}{\hbar^2} = 0 \quad (*)$$

מצפים שקירוב יהיה טוב גבול \hbar -ש קטן. נפתח את ϕ לטור ב- \hbar :

$$\phi = \phi_0 + \hbar\phi_1 + \hbar^2\phi_2 + \dots \quad (9.8)$$

לפי הקירוב הסמי-קלאסי, נשמיט את כל האיברים מסדר \hbar^2 ומעלה:

$$\begin{aligned} \phi(x) &\cong \phi_0 + \hbar\phi_1 \\ \phi'(x) &= \phi'_0 + \hbar\phi'_1 \\ \phi''(x) &= \phi''_0 + \hbar\phi''_1 \end{aligned}$$

נציב ב-(*):

$$- \left(\frac{(\phi'_0)^2 + 2\hbar\phi'_1\phi'_0 + \hbar^2(\phi'_1)^2}{\hbar^2} \right) + \frac{i(\phi''_0 + \hbar\phi''_1)}{\hbar} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = 0 \quad (9.9)$$

נסדר לפי חזקות של \hbar , ונקבל:

$$- \frac{(\phi'_0)^2 + p^2(x)}{\hbar^2} + \frac{i\phi''_0 + 2\phi_1\phi'_0}{\hbar} + O(\hbar^0) = 0 \quad (**)$$

נחשוב על הגבול של \hbar קטן. לכן, האיבר הדומיננטי הוא $-\frac{(\phi'_0)^2 + p^2(x)}{\hbar^2}$. נשווה את האיבר המוביל לאפס, ונקבל:

$$\begin{aligned} \phi'_0 &= \pm p(x) \\ \phi_0 &= \pm \int^x p(X') dx' \end{aligned}$$

לכן,

$$\psi(x) = Ae^{\pm \int^x p(x') dx'} = \psi(x_0) e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'} \quad (9.10)$$

נסתכל על האיבר הבא, של $\frac{1}{\hbar}$, ונדרוש שגם הוא יתאפס:

$$\begin{aligned} i\phi_0'' &= 2\phi_1'\phi_0' \\ \frac{\phi_0''}{\phi_0'} &= -2i\phi_1' \\ \ln \phi_0' &= -2i\phi_1 + c \end{aligned}$$

ולכן,

$$\begin{aligned} \phi_1 &= i \ln \left[(\phi_0')^{1/2} \right] + \frac{c}{2i} \\ &= i \ln \left(p(x)^{1/2} \right) + \tilde{c} \end{aligned}$$

בהצבת $\phi_0' = p(x)$ לכן,

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{i\phi(x)/\hbar} = Ae^{-\ln \sqrt{p(x)} \pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \\ &= \frac{A}{[p(x)]^{1/2}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \end{aligned}$$

נבחר נקודה שרירותית, ונקבל:

$$\boxed{\psi(x) = \psi(x_0) \sqrt{\frac{p(x_0)}{p(x)}} e^{\pm i\hbar \int_{x_0}^x p(x') dx'}} \quad (\dagger)$$

צפיפות ההסתברות מתנהגת כמו $\frac{1}{\rho(x)}$ ($\rho = |\psi|^2$). ואכן, בצורה קלאסית, אנחנו מצפים שההסתברות למצוא חלקיק הולכת כמו $\frac{1}{v(x)}$, המהירות הקלאסית.

9.1.1 מתי הקירוב תקף?

הקירוב טוב כאשר האיבר הראשון ב- $(\star\star)$ גדול מהשני.

$$\phi_0' = p(x) \quad (9.11)$$

מדד לגודל האיבר הראשון הוא $\left(\frac{\phi_0'}{\hbar}\right)^2$, והמדד לגודל הריבר השני הוא $\frac{\phi_0''}{\hbar}$. נדרש שיתקיים,

$$\left| \frac{\phi_0''}{\hbar} \right| \ll \left| \frac{\phi_0'}{\hbar} \right|^2 \quad (9.12)$$

$$\hbar \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\phi_0'} \right) \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (9.13)$$

9.2 אפליקציות של הקירוב הסמי-קלאסי ⁴⁴

9.2.1 מנהור

ניתן להשתמש בקירוב הסמי-קלאסי כאשר הפוטנציאל משתנה לאט.

$$\begin{aligned} V(x) &= \begin{cases} -V_0 & x < x_0 \\ V_{max} \rightarrow 0 & x > x_0 \end{cases} \\ \chi(x) &= \sqrt{2m(V(x) - E)} \end{aligned}$$

⁴⁴05.07.09, הושלם באדיבות דקלה אורן ורותם ענבר

נשתמש ב-(†),

$$\psi(x_e) = \psi(x_0) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_e} [2m(v(x)-E)]^{1/2} dx} \triangleq \psi(x_0) e^{-\frac{\gamma}{2}} \quad (9.14)$$

חלקיק בפנים עם אנרגיה $T = E - V = E + V_0$, יהיה במהירות

$$v = \frac{p}{m} = \frac{[2m(E + V_0)]^{1/2}}{m} \quad (9.15)$$

החלקיק פוגע בקיר בתדירות הנתונה על ידי $f = \frac{v}{2x_0}$. בכל פגיעה, הסיכוי לבריחה הוא $(\psi^2) e^{-\gamma}$ ולכן הסתברות הבריחה ליחידת זמן נתונה על ידי

$$R = \frac{[2m(E + V_0)]^{1/2}}{2mx_0} e^{-\gamma} \quad (9.16)$$

זמן הבריחה האופייני הוא $\tau = \frac{1}{R}$. ההסתברות להיות בפנים, A , נתונה על ידי $\frac{dA}{dt} = -RA$.

9.2.2 מצבים קשורים

נחלק את המרחב לשלושה חלקים, I ו- III הם איזורים אסורים ($E < V(x \in I, III)$), ו- II הוא אזור מותר ($E < V$). באזורים אסורים. לדוגמא,

$$\psi_{III}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{2m(V(x)-E)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx} \quad (9.17)$$

באזור המותר:

$$\psi_{II} = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' + B \right] \quad (9.18)$$

בנקודת המפנה הקלאסית ($V(x_1) = V(x_2) = E$) אורך הגל מתבדר - $v(x)$ משתנה מהר, והקירוב נשבר. כדי לסדר את הבעיה, מגדירים אזורים סביב x_1, x_2 , ובאזורים אלה פותרים את המשוואה במדויק, כלומר, תחת ההנחה ש- $v(x)$ משתנה לאט. בצד שמאל:

$$v(x) = v(x_1) + v'(x_1)(x - x_1) = E + v'(x - x_1) \quad (9.19)$$

בצורה דומה, בצד ימין ואחרי "תפירה", מקבלים את התוצאות הבאות: בסביבות x_1 :

$$\psi_{II}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right)$$

ובסביבות x_2 :

$$\psi_{II}(x) = \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad (9.20)$$

כדי ש- A, A' יתאימו, הפרש בפאזה בין הקוסינוסים צריך להיות,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{2} &= n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \\ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \end{aligned}$$

וקיבלנו תנאי קוונטיזציה סמי-קלאסי:

$$\oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) 2\pi \hbar \quad (9.21)$$

דוגמה עבור $V(x) = \lambda x^4$, לא נמצא פתרון מדויק. נזהה נקודת-מפנה-קלאסית כאשר $E = \lambda x^4$,

$$x_{1,2} = \pm \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4} \quad (9.22)$$

תנאי הקוונטיזציה:

$$\int_{-\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4}}^{\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4}} \sqrt{2m(E - \lambda x^4)} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad (9.23)$$

נגדיר, $x = \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4} y$, אזי $x^4 = \frac{E}{\lambda} y^4$,

$$\int_{-1}^1 \sqrt{(2mE)(1 - y^4)} \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4} dy = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

$$\sqrt{2mE} \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/4} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^4} dy = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

ולכן,

$$E^{3/4} = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \pi \lambda^{1/4}}{\sqrt{2m} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^4} dy} \quad (9.24)$$

ולבסוף, נקבל,

$$E = \frac{\left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar\right)^{3/4} \lambda^{1/3}}{(2m)^{2/3} \left(\int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^4} dy\right)^{3/4}}$$

$$E_n = \frac{5}{8} \frac{\left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar\right)^{4/3} \lambda^{1/3}}{(2m)^{2/3}}$$

בהשוואה של פתרון סמי-קלאסי לפתרון נומרי, מסדר אפס, מתקבל,

$$\frac{E_0(WKB)}{E_0(Numeric)} = 0.716 \quad (9.25)$$

אבל מסדר ראשון, מתקבל דיוק טוב בהרבה:

$$\frac{E_1(WKB)}{E_1(Numeric)} = 0.992 \quad (9.26)$$

10 חלקיקים זהים ואינטגרלי מסלול

לא באמת הבנתי את זה.