Mechanika kwantowa II

Rachunek zaburzeń w mechanice kwantowej

1° Rachunek zaburzeń dla stanów stacjonarnych

Niech $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$ będzie Hamiltonianem układu niezależnym od czasu, o widmie dyskretnym.
Załóżmy, że znamy stany własne $\hat{H}_0$:

$$\hat{H}_0 |\Phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\Phi_n\rangle \quad ; \quad \langle \Phi_n | \Phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$$

oraz $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ dla $n \neq m$

Stany $|\Phi_n\rangle$ nie zależą od czasu i odpowiadają stacjonarnym rozwiązaniom r-nia Schrödingera:

$$+i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_n(\vec{r}, t) = \hat{H}_0 \Phi_n(\vec{r}, t)$$

gdzie $\Phi_n(\vec{r}, t) = e^{-iE_n^{(0)} t/\hbar} \langle \vec{r} | \Phi_n \rangle$

Chcemy znaleźć metodę wyznaczania kolejnych przybliżeń stanów własnych i energii własnych $\hat{H}$:

$$\hat{H} |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$$

gdzie $\hat{V}$ jest zaburzeniem, a $\lambda \in \mathbb{R}$ małym parametrem $(0 \leq \lambda \leq 1)$

Założenia:

1) $|\psi_n(\lambda)\rangle$ i $E_n(\lambda)$ są analitycznymi funkcjami parametru λ (tzn. istnieje rozwinięcie w szereg Taylora, które jest zbieżne) dla $\lambda \in (0, 1)$
2) $|\psi_n(0)\rangle = e^{i\alpha} |\Phi_n\rangle$, $E_n(0) = E_n^{(0)}$, $\alpha \in \mathbb{R}$
3) $\lambda \hat{V}$ jest małe w tym sensie, że $|E_n(\lambda) - E_n^{(0)}| \ll |E_n(\lambda) - E_m^{(0)}|$ dla $n \neq m$

Ponieważ $|\Phi_n\rangle$ tworzą bazę w p. Hilberta zatem

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_m a_m(\lambda)\,|\Phi_m\rangle$$

przy czym z założenia 3): $a_m(0) = e^{i\alpha}\delta_{nm}$

$$\hat{H}\,|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_m a_m(\lambda)\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}\right)|\Phi_m\rangle = \sum_m a_m(\lambda)\left(E_m^{(0)} + \lambda\hat{V}\right)|\Phi_m\rangle =$$

$$= E_n(\lambda)\,|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_m a_m(\lambda)\,E_n(\lambda)\,|\Phi_m\rangle$$

Stąd

$$(*)\quad \sum_m a_m(\lambda)\left(E_m^{(0)} + \lambda\hat{V}\right)|\Phi_m\rangle = E_n(\lambda)\sum_m a_m(\lambda)\,|\Phi_m\rangle$$

Działając lewostronnie wektorem bra $\langle\Phi_k|$ na $(*)$:

$$\sum_m a_m(\lambda)\left(E_m^{(0)}\langle\Phi_k|\Phi_m\rangle + \lambda\langle\Phi_k|\hat{V}|\Phi_m\rangle\right) = E_n(\lambda)\sum_m a_m(\lambda)\langle\Phi_k|\Phi_m\rangle$$

Korzystając z tego że $\langle\Phi_k|\Phi_n\rangle = \delta_{kn}$ mamy:

$$a_k(\lambda)\,E_k^{(0)} + \lambda\sum_m a_m(\lambda)\langle\Phi_k|\hat{V}|\Phi_m\rangle = E_n(\lambda)\,a_k(\lambda)$$

Oznaczmy: $\langle\Phi_k|\hat{V}|\Phi_m\rangle \overset{\text{ozn.}}{=} V_{km}$

$$\left(E_n(\lambda) - E_k^{(0)}\right)a_k(\lambda) = \lambda\,a_k(\lambda)\,V_{kk} + \lambda\sum_{m\neq k} a_m(\lambda)\,V_{km}$$

$$(**)\quad \boxed{\left(E_n(\lambda) - E_k^{(0)} - \lambda V_{kk}\right)a_k(\lambda) = \lambda\sum_{m\neq k} a_m(\lambda)\,V_{km}}$$

R-nie $(**)$ jest dokładne i jest punktem wyjścia dla różnych schematów przybliżeń.
Standardowy ciąg przybliżeń konstruujemy posługując równ. $(**)$ w postaci:

$$\begin{cases} a_k(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i a_k^{(i)} \\ E_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i E_n^{(i)} \end{cases}, \quad \text{gdzie } a_k^{(0)} = e^{i\alpha}\delta_{kn}$$

(z uwagi na założenie 3)

Podstawiając do (**) otrzymujemy

$$(***)\quad \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} - E_k^{(0)} - \lambda V_{kk}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j a_k^{(j)} = \lambda \sum_{m\neq k} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j a_m^{(j)} V_{km}$$

$$(***) \sum_{i,j} \lambda^{i+j} E_n^{(i)} a_k^{(j)} - \left(E_k^{(0)} + \lambda V_{kk}\right) \sum_j \lambda^j a_k^{(j)} = \sum_{m\neq k} \sum_j \lambda^{j+1} a_m^{(j)} V_{km}$$

Porównując wyrazy przy kolejnych potęgach λ otrzymujemy:

$$\lambda^0 : \quad E_n^{(0)} a_k^{(0)} - E_k^{(0)} a_k^{(0)} = 0$$

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) e^{i\alpha} \delta_{kn} = 0 \quad \leftarrow \text{to r-nie jest zawsze spełnione}$$

$$\lambda^1 : \quad E_n^{(0)} a_k^{(1)} + E_n^{(1)} a_k^{(0)} - E_k^{(0)} a_k^{(1)} - V_{kk} a_k^{(0)} = \sum_{m\neq k} a_m^{(0)} V_{km}$$

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) a_k^{(1)} + \left(E_n^{(1)} - V_{kk}\right) a_k^{(0)} = \sum_{m\neq k} e^{i\alpha} \delta_{mn} V_{km}$$

$$k=n : \quad \left(E_n^{(1)} - V_{nn}\right) a_n^{(0)} = 0 \implies \boxed{E_n^{(1)} = V_{nn}}$$

$$k\neq n : \quad \left(E_n^{(0)} - E_k^{0}\right) a_k^{(1)} = e^{i\alpha} V_{kn}$$

$$\boxed{a_k^{(1)} = e^{i\alpha} \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0}} \; ; \quad k\neq n$$

Zatem w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń:

$$\begin{cases} E_n(\lambda) \approx E_n^{(0)} + \lambda V_{nn} \\ |\psi_n(\lambda)\rangle \approx |\Phi_n\rangle e^{i\alpha} + \lambda e^{i\alpha} \sum_{k\neq n} \frac{\langle \Phi_k | \hat{V} | \Phi_n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} |\Phi_k\rangle \cancel{+ \lambda a_n^{(1)} |\Phi_n\rangle} \end{cases}$$

~~Współczynnik $a_n^{(1)}$ jest nieokreślony, a~~ funkcja $|\psi_n(\lambda)\rangle$ jest nieunormowana.

Jako warunek dodatkowy możemy zażądać aby $\langle \psi_n(\lambda) | \psi_n(\lambda)\rangle = 1$ w każdym rzędzie rachunku zaburzeń lub aby $\langle \Phi_n | \psi_n^{(i)}\rangle = 0$ gdzie $|\psi_n(\lambda)\rangle = e^{i\alpha} |\Phi_n\rangle + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i |\psi_n^{(i)}\rangle$

Zatem z warunku:

$$\langle \Phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$$

mamy: $a_n^{(1)} \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = 0 \implies a_n^{(1)} = 0$

$$\lambda^2: \quad E_n^{(0)} a_k^{(2)} + E_n^{(1)} a_k^{(1)} + E_n^{(2)} a_k^{(0)} - E_k^{(0)} a_k^{(2)} - V_{kk} a_k^{(1)} =$$

$$= \sum_{m \neq k} a_m^{(1)} V_{km}$$

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) a_k^{(2)} + \left(E_n^{(1)} - V_{kk}\right) a_k^{(1)} + E_n^{(2)} a_k^{(0)} = \sum_{m \neq k} a_m^{(1)} V_{km}$$

$k=n$: $$E_n^{(2)} a_n^{(0)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn} V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} e^{i\alpha}$$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \Phi_m | \hat{V} | \Phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

$k \neq n$: $$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) a_k^{(2)} + \left(V_{nn} - V_{kk}\right) e^{i\alpha} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{\substack{m \neq k \\ m \neq n}} e^{i\alpha} \frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$a_k^{(2)} = \sum_{\substack{m \neq k \\ m \neq n}} e^{i\alpha} \frac{V_{mn} V_{km}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} - e^{i\alpha} \frac{\left(V_{nn} - V_{kk}\right) V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}$$

$$a_k^{(2)} = e^{i\alpha} \left[\sum_{\substack{m \neq k \\ m \neq n}} \frac{V_{km} V_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} + \frac{V_{kk} V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} - \frac{V_{kn} V_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2} \right]$$

$$\boxed{a_k^{(2)} = e^{i\alpha} \sum_{m \neq n} \frac{V_{km} V_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} - e^{i\alpha} \frac{V_{kn} V_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2}} \quad ; \; k \neq n$$

Zatem w drugim rzędzie rachunku zaburzeń:

$$\begin{cases} E_n(\lambda) \approx E_n^{(0)} + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ \\ |\psi_n(\lambda)\rangle \approx e^{i\alpha} |\Phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle \end{cases}$$

gdzie

$$|\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq n} \left(e^{i\alpha} \sum_{m \neq n} \frac{V_{km} V_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} - e^{i\alpha} \frac{V_{kn} V_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2} \right) |\Phi_k\rangle + a_n^{(2)} |\Phi_n\rangle$$

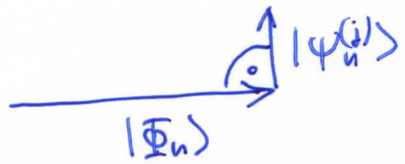
Żądając aby $\langle \Phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0$ otrzymujemy $a_n^{(2)} = 0$

<u>Uwagi</u>

1° Otrzymany w ten sposób przepis na obliczanie kolejnych poprawek do $E_n^{(0)}$ i $|\Phi_n\rangle$ nazywamy <u>rachunkiem zaburzeń Rayleigha-Schrödingera</u>.

2° Szereg perturbacyjny jest zbieżny jeśli λ jest odpowiednio małe, oraz $|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ dla wszystkich $m \neq n$.

3° R-nia rachunku zaburzeń określają jedynie (z dokładnością do czynnika fazowego) ~~prosto~~ poprawkę prostopadłą do niezaburzonego stanu $|\Phi_n\rangle$



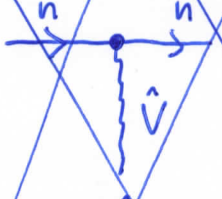
Istnieje zawsze swoboda przy określeniu długości $|\Phi_n\rangle$.

4° Dla stanu o najniższej energii $E_0(\lambda) < E_n(\lambda)$; $n>0$ drugi rząd rachunku zaburzeń daje zawsze obniżenie energii $E_0^{(2)} = \sum_{m\neq 0} \frac{|V_{m0}|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0$

5° Zaburzenie energii $E_n^{(0)}$ jest duże jeśli istnieją duże elementy macierzowe $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_m \rangle$ pomiędzy stanem n-tym oraz m-tym i $|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ jest małe.

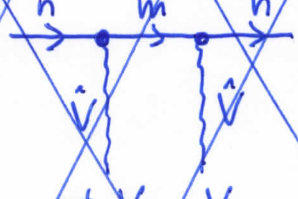
6° Poprawki do energii wygodnie jest przedstawić graficznie:

pierwszy rząd



$\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle$

drugi rząd



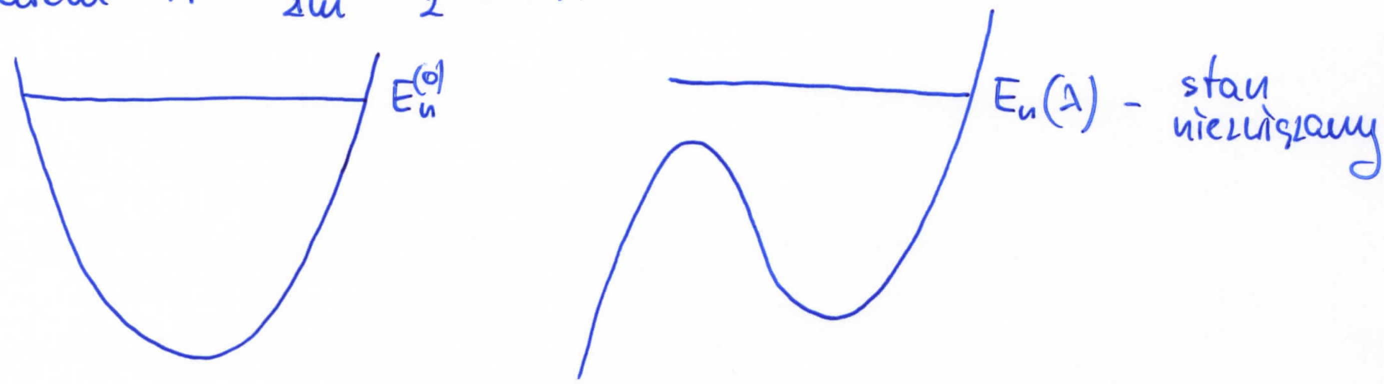
$\sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}$

Stąd nietrudno się domyślić jaki będzie wzór na poprawkę do energii w p-tym rzędzie rachunku zaburzeń:

6° Istnieją przypadki gdy nawet dla małego λ struktura zaburzonego stanu ulega gwałtownej zmianie.

Np. $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$ i $\hat{V} = \hat{x}^3$

zatem $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + \lambda \hat{x}^3$



$\lambda = 0$ $\lambda > 0$

W takim przypadku struktura $|\psi_n(\lambda)\rangle$ jest drastycznie różna od $|\Phi_n\rangle$ i rachunek zaburzeń dla $|\psi_n(\lambda)\rangle$ nie będzie działać.

Przypadek stanów zdegenerowanych

Niech dla pewnego n zachodzi:

$$\hat{H}_0 |\Phi_{n\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\Phi_{n\alpha}\rangle \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \ldots, g$$

Wartość własna jest g-krotnie zdegenerowana.

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$

~~Jeśli chcemy skonstruować ciąg przybliżeń dla E_n^0 i któregoś ze stanów $|\Phi_{n\alpha}\rangle$ musimy najpierw usunąć degenerację lub spowodować aby $\langle \Phi_{n\alpha} | \hat{V} | \Phi_{n\alpha'}\rangle = 0$~~

Zdefiniujmy operator $\hat{V}'$ taki że:

$$\langle \Phi_k | \hat{V}' | \Phi_l \rangle = 0 \quad ; \quad k, l \neq n$$

$$\langle \Phi_k | \hat{V}' | \Phi_{n\alpha} \rangle = 0 \quad ; \quad \alpha = 1, \ldots, g$$

$$\langle \Phi_{n\alpha} | \hat{V}' | \Phi_k \rangle = 0$$

$$\langle \Phi_{n\alpha} | \hat{V}' | \Phi_{n\alpha'} \rangle = \langle \Phi_{n\alpha} | \hat{V} | \Phi_{n\alpha'} \rangle$$

V - macierz będąca repr. $\hat{V}$ w bazie $|\Phi_k\rangle$

$$V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & & & \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ & & & V_{n_1 n_1} \cdots & V_{n_1 n_g} & \\ & & & \vdots & \vdots & \\ & & & V_{n_g n_1} \cdots & V_{n_g n_g} & \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix} ; \quad V' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{matrix} V_{n_1 n_1} & \cdots & V_{n_1 n_g} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{n_g n_1} & \cdots & V_{n_g n_g} \end{matrix} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

V' - macierz będąca repr. $\hat{V}'$ w bazie $|\Phi_k\rangle$

H_0 - macierz będąca repr. $\hat{H}_0$ w bazie $|\Phi_k\rangle$

$$H_0 = \begin{bmatrix} E_1^{(0)} & & & & & 0 \\ & E_2^{(0)} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & E_{n_1}^{(0)} & & \\ & 0 & & & \ddots \; E_{n_g}^{(0)} & \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Definiujemy $\hat{H}_0' = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}'$ czyli $\hat{H} = \hat{H}_0' + \lambda(\hat{V} - \hat{V}')$

Rozwiązujemy ściśle zagadnienie własne dla $\hat{H}_0'$ co sprowadza się do diagonalizacji macierzy H_0'. Zauważmy, że ponieważ H_0' ma niediagonalną tylko klatkę o wymiarach $g\times g$ zatem diagonalizacja sprowadza się do diagonalizacji klatki $g\times g$: $\bar{H}_0' = \begin{bmatrix} E_{n_1}^{(0)} + \lambda V_{n_1 n_1} & \cdots & \lambda V_{n_1 n_g} \\ \vdots & & \vdots \\ \lambda V_{n_g n_1} & \cdots & E_{n_g}^{(0)} + \lambda V_{n_g n_g} \end{bmatrix}$

Zatem

$$(*) \quad \bar{H}_0' \vec{c}^{\beta} = \tilde{E}^{(0)}_{n_\beta} \vec{c}^{\beta} \quad ; \quad \beta = 1, 2, \dots, g$$

wyznacza nam stany własne:

$$|\tilde{\Phi}_{n_\beta}\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g} c_\alpha^\beta \, |\Phi_{n_\alpha}\rangle \quad \text{i wart. własne } \tilde{E}^{(0)}_{n_\beta}$$

Następnie konstruujemy ciąg przybliżeń traktując stany własne $\hat{H}_0'$ jako niezaburzone:

$$\hat{H}_0' |\Phi_k\rangle = E_k^{(0)} |\Phi_k\rangle \; ; \; k \neq n$$
$$\hat{H}_0' |\tilde{\Phi}_{n\beta}\rangle = \tilde{E}_{n\beta}^{(0)} |\Phi_{n\beta}\rangle \; ; \; \beta = 1, 2, \ldots, g$$

a operator $\lambda(\hat{V} - \hat{V}')$ jako zaburzenie.

Zauważmy, że nawet jeśli po rozwiązaniu (**) degeneracja nie została całkowicie zniesiona, tzn. istnieją np. stany $|\tilde{\Phi}_{n\beta}\rangle$ i $|\tilde{\Phi}_{n\beta'}\rangle$ odpowiadające tej samej wart. własnej $\tilde{E}_{n\beta}$, to element macierzowy $\langle \tilde{\Phi}_{n\beta} | (\hat{V} - \hat{V}') | \tilde{\Phi}_{n\beta'} \rangle = 0$.

Dzięki temu w szeregu przybliżeń nie wystąpią nieskończoności.

Powyższą procedurę można stosować również w przypadku gdy energie nie są zdegenerowane, ale zachodzi:

$$\frac{|\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_m \rangle|}{E_n^0 - E_m^0} \gg 1$$

dla pewnych n, m. W takim przypadku rachunek zaburzeń zastosowany do stanu n-tego lub m-tego może prowadzić do rozbieżności. Należy więc najpierw rozwiązać zagadnienie własne dla

$$\begin{bmatrix} E_n^{(0)} - \lambda V_{nn} & V_{nm} \\ V_{mn} & E_m^{(0)} - \lambda V_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_n^\beta \\ c_m^\beta \end{bmatrix} = \tilde{E}_\beta \begin{bmatrix} c_n^\beta \\ c_m^\beta \end{bmatrix} ; \beta = 1, 2$$

definiując nowe stany
$$|\tilde{\Phi}_n\rangle = c_n^1 |\Phi_n\rangle + c_m^1 |\Phi_m\rangle$$
$$|\tilde{\Phi}_m\rangle = c_n^2 |\Phi_n\rangle + c_m^2 |\Phi_m\rangle$$

odpowiadające energiom: $\tilde{E}_1^{(0)}$ i $\tilde{E}_2^{(0)}$ ~~i dopiero dl~~

Teraz można już stosować rozwinięcie w szereg perturbacyjny (ze zmodyfikowanym op. zaburzającym).

Przykład

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

$$\hat{V} = \hat{x}^2$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + \lambda \hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\hat{x}^2\left(m\omega^2 + 2\lambda\right)$$

~~Stany własne~~

Energie własne $\hat{H}_0$: $E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$; $n = 0, 1, 2, \ldots$

Energie własne $\hat{H}$: $E_n(\lambda) = \hbar\sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right)$

Znajdźmy przybliżenie $E_n(\lambda)$ stosując rachunek zaburzeń.

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}$$

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_m \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

- $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_m \rangle = \langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_m \rangle$

Skorzystamy z własności op. kreacji i anihilacji dla osc. harmonicznego:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^+\right), \quad \text{oraz} \quad |\Phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n |\Phi_0\rangle$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right) \underset{[a, a^+] = 1}{=} \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + 2\hat{a}^+\hat{a} + 1\right)$$

Zatem

$$\langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_m \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\langle \Phi_n | \hat{a}^2 | \Phi_m \rangle + \langle \Phi_n | (\hat{a}^+)^2 | \Phi_m \rangle + \langle \Phi_n | \cancel{\hat{a}\hat{a}^+} | \Phi_m \rangle + 2\langle \Phi_n | \hat{a}^+\hat{a} | \Phi_m \rangle\Big)$$

~~Rozważmy~~

$$\cancel{\hat{a}^2 |\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}}\hat{a}^2(\hat{a}^+)^m|\Phi_0\rangle}$$

Rozważmy

$$\langle \Phi_n | \hat{a}^2 = \langle \Phi_0 | \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{n+2} = \langle \Phi_0 | \frac{1}{\sqrt{(n+2)!}} \hat{a}^{n+2} \sqrt{(n+1)(n+2)} =$$

$$= \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle \Phi_{n+2} |$$

stąd

$$\langle \Phi_n | \hat{a}^2 | \Phi_m \rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)}\, \delta_{m\, n+2}$$

Podobnie

$$(\hat{a}^+)^2 | \Phi_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} (a^+)^{m+2} | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{(m+2)!}} (a^+)^{m+2} | \Phi_0 \rangle \sqrt{(m+1)(m+2)} =$$

$$= \sqrt{(m+1)(m+2)}\, | \Phi_{m+2} \rangle$$

czyli

$$\langle \Phi_n | (\hat{a}^+)^2 | \Phi_m \rangle = \sqrt{(m+1)(m+2)}\, \delta_{m+2\, n} = \sqrt{(n-1)n}\, \delta_{n\, m+2}$$

Analogicznie $\langle \Phi_n | \hat{a}^+ \hat{a} | \Phi_m \rangle = n\, \delta_{nm}$ (patrz wk I)

Zatem

$$\langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_m \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\, \delta_{m\, n+2} + \sqrt{n(n-1)}\, \delta_{n\, m+2} + \delta_{nm} + 2n\, \delta_{nm} \right)$$

Czyli

$$E_n^{(2)} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \frac{(n+1)(n+2)}{\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - \hbar\omega(n+\frac{5}{2})} + \frac{\hbar^2}{(2m\omega)^2} \frac{n(n-1)}{\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - \hbar\omega(n-\frac{3}{2})} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4(m\omega)^2(\hbar\omega)} \left(\frac{(n+1)(n+2)}{(-2)} + \frac{n(n-1)}{2} \right) =$$

$$= \frac{\hbar}{4m^2\omega^3} \left(-\frac{1}{2}(n^2+3n+2) + \frac{1}{2}(n^2-n) \right) = \frac{\hbar}{4m^2\omega^3} (-2n-1)$$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \frac{-\hbar}{4m^2\omega^3} (2n+1)}$$

Stąd

$$E_n(\lambda) \approx \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\lambda}{m\omega}\left(n+\tfrac{1}{2}\right) - \frac{\hbar\lambda^2}{4m^2\omega^3}(2n+1) =$$

$$= \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left(\hbar\omega + \frac{\hbar\lambda}{m\omega} - \frac{\hbar\lambda^2}{2m^2\omega^3}\right)$$

Porównajmy z rozwinięciem dokładnej energii wokół $\lambda = 0$:

$$E_n(\lambda) = \hbar\sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{m}}\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \approx$$

$$\approx \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left(\hbar\omega + \hbar\frac{1}{2\sqrt{\omega^2+\frac{2\lambda}{m}}}\frac{2}{m}\Bigg|_{\lambda=0}\cdot\lambda + \frac{1}{2}\hbar\frac{1}{m}\left(-\frac{1}{2}\right)\frac{1}{\left(\sqrt{\omega^2+\frac{2\lambda}{m}}\right)^3}\frac{2}{m}\Bigg|_{\lambda=0}\cdot\lambda^2\right) =$$

$$= \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left(\hbar\omega + \frac{\hbar\lambda}{m\omega} - \frac{\hbar\lambda^2}{2m^2\omega^3}\right)$$

2° Rachunek zaburzeń w przypadku zależności zaburzenia od czasu

Niech $\hat{H}_0$ będzie Hamiltonianem o stanach własnych $|\Phi_n\rangle$ i energiach własnych $E_n^{(0)}$: $\hat{H}_0|\Phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\Phi_n\rangle$

Pełny Hamiltonian $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}(t)$ przy czym zakładamy że $\hat{V}(t)$ dla $t<0$ było równe zeru.

W przypadku zaburzenia zależnego od czasu nie istnieją stany stacjonarne. Zatem nie interesuje nas znalezienie przybliżenia dla stanów własnych i wartości własnych $\hat{H}$ w pewnej chwili t, ale prawdopodobieństwo, że cząstka znajdująca się początkowo w stanie $|\Phi_n\rangle$ (dla $t<0$) znajdzie się w pewnej chwili $t>0$ w stanie $|\Phi_m\rangle$.

W tym celu musimy skonstruować rachunek zaburzeń dla pełnego r-nia Schrödingera:

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

z war. początkowym: $|\psi(0)\rangle = |\Phi_n\rangle$

Rozłóżmy $|\psi(t)\rangle$ w bazie stanów własnych $\hat{H}_0$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle \;;\; |\psi(0)\rangle = |\Phi_n\rangle \underset{\uparrow}{\Longrightarrow} a_k(0) = \delta_{kn}$$

warunek początkowy

Podstawiając do r-nia Schrödingera otrzymujemy:

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle + i\hbar \sum_k a_k(t)\left(-\frac{iE_k^{(0)}}{\hbar}\right) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle =$$

$$= \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \hat{H} |\Phi_k\rangle = \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} E_k^{(0)} |\Phi_k\rangle +$$

$$+ \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \lambda \hat{V}(t) |\Phi_k\rangle$$

Działając na powyższe r-nie z lewej strony ~~przez~~ wektorem bra $\langle\Phi_m|$ otrzymujemy:

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \langle\Phi_m|\Phi_k\rangle = \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \lambda \langle\Phi_m|\hat{V}(t)|\Phi_k\rangle$$

Oznaczmy $\langle\Phi_m|\hat{V}(t)|\Phi_k\rangle = V_{mk}(t)$

Ponieważ $\langle\Phi_m|\Phi_k\rangle = \delta_{km}$ stąd

$$\frac{da_m}{dt} e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} = \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_k a_k(t)\, e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} V_{mk}(t)$$

czyli

$$(*) \quad \boxed{\frac{da_m}{dt} = \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_k a_k(t)\, e^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar} V_{mk}(t)}$$

Jest to ścisłe r-nie (układ r-ń) na współczynniki $a_m(t)$, pozwalające obliczyć a_m dla dowolnego t przy ustalonych warunkach początkowych (w naszym przypadku $a_m(0) = \delta_{mn}$). Jest to ~~[illegible]~~ układ r-ń różniczkowych rzędu pierwszego, ponieważ r-nie Schrödingera jest r-niem rzędu pierwszego względem czasu.

Szukamy rozwiązania w postaci szeregu:

$$a_m(t) = a_m^{(0)}(t) + \lambda a_m^{(1)}(t) + \lambda^2 a_m^{(2)}(t) + \ldots$$

$$a_m(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i a_m^{(i)}(t)$$

Podstawiając do (*) i porównując wyrazy przy potęgach λ otrzymujemy kolejne rzędu rachunku zaburzeń.

$$\sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \frac{da_m^{(j)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{j+1} a_k^{(j)}(t)\, e^{i\omega_{mk} t}\, V_{mk}(t)$$

gdzie oznaczyliśmy $\omega_{mk} = \dfrac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$ $\left[\frac{1}{s}\right]$

$$\lambda^0 : \quad \frac{da_m^{(0)}}{dt} = 0 \quad \longrightarrow \quad a_m^{(0)} = \text{const.}$$

$$\cancel{\lambda^1 : \quad \frac{da_m^{(1)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k a_k^{(0)}(t)\, e^{i\omega_{mk} t}\, V_{mk}(t)}$$

Zauważmy, że jest to r-nie, które byśmy otrzymali gdyby $V_{mk}(t) = 0$ czyli $\hat{H} = \hat{H}_0$

Zatem $a_m^{(0)} = \delta_{mn}$ - z warunku początkowego

Pierwszy rząd rachunku zaburzeń:

$$\lambda^1 : \quad \frac{da_m^{(1)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k a_k^{(0)}\, e^{i\omega_{mk} t}\, V_{mk}(t)$$

Zatem
$$\boxed{a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt'\, e^{i\omega_{mn} t'}\, V_{mn}(t')} \quad \text{dla } t \geq 0$$

Zauważmy, że $a_m^{(1)}(t)$ jest proporcjonalny do transformaty Fouriera $V_{mn}(t)$ w przedziale czasu od włączenia zaburzenia do t.

Rozważmy więc jako szczególny przypadek zaburzenie harmoniczne.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}\, 2\sin(\omega t)$$

Wtedy
$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i^2\hbar} \int_0^t dt'\, e^{i\omega_{mn} t'} \left(e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'}\right) V_{mn}$$

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{mn}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'}\right] V_{mn}$$

$$(*)\quad a_m^{(1)}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}-1}{(\omega_{mn}+\omega)} - \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-1}{(\omega_{mn}-\omega)}\right] V_{mn}$$

Zauważmy, że wyrażenie w nawiasie jest znacząco różne od zera gdy

$$\omega_{mn} \approx \pm\omega \quad, \text{tzn.} \quad \boxed{E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \approx \pm\hbar\omega} \quad (**)$$

Zatem prawdopodobieństwo, że układ po czasie t znajdzie się w stanie $|\Phi_m\rangle$ wynosi:

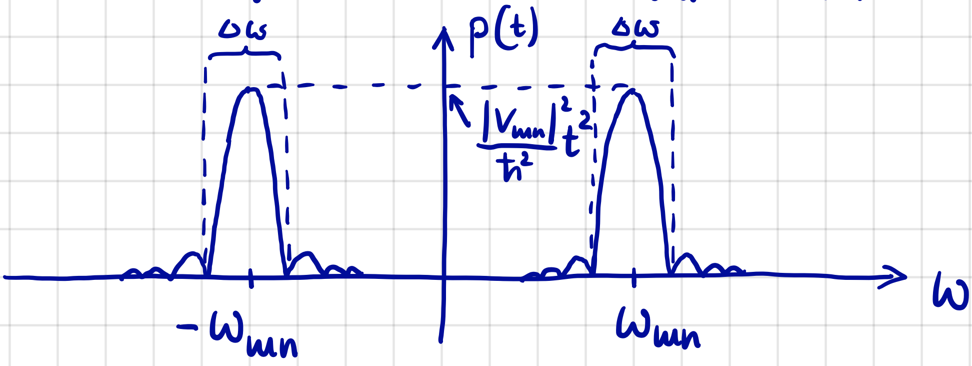
$$p(t) = \lambda^2 |a_m^{(1)}(t)|^2 = \lambda^2 \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2}\left(\left|\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}-1}{\omega_{mn}+\omega}\right|^2 + \left|\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-1}{\omega_{mn}-\omega}\right|^2 + \left(\begin{matrix}\text{człon}\\ \text{interferencyjny}\end{matrix}\right)\right)$$

$$\left|\frac{e^{i(\omega_{mn}\pm\omega)t}-1}{\omega_{mn}\pm\omega}\right|^2 = \frac{1+e^{i(\omega_{mn}\pm\omega)t}+e^{-i(\omega_{mn}\pm\omega)t}+1}{(\omega_{mn}\pm\omega)^2} = \frac{2+2\cos\left((\omega_{mn}\pm\omega)t\right)}{(\omega_{mn}\pm\omega)^2} =$$

$$= \frac{4\sin^2\left[\frac{(\omega_{mn}\pm\omega)t}{2}\right]}{(\omega_{mn}\pm\omega)^2}$$

$$\boxed{p(t) = \frac{4|V_{mn}|^2}{\hbar^2}\left[\frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{mn}-\omega)t\right]}{(\omega_{mn}-\omega)^2} + \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{mn}+\omega)t\right]}{(\omega_{mn}+\omega)^2} + \left(\begin{matrix}\text{człon}\\ \text{interferencyjny}\end{matrix}\right)\right]}$$

gdzie λ zostało włączone do $\hat{V}$: $\lambda V_{mn} \to V_{mn}$

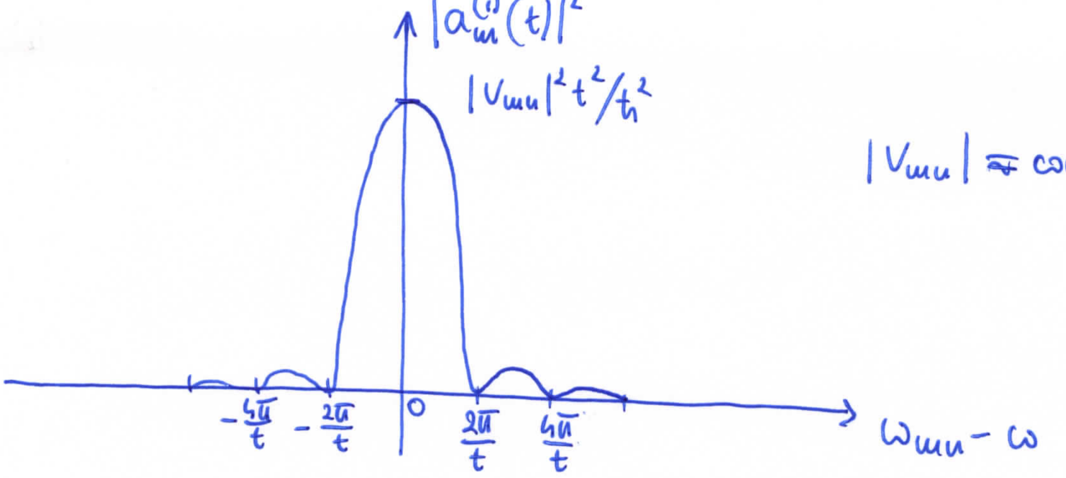


$$\hbar\omega_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$$

$$p(t) \xrightarrow{\omega_{mn}=\pm\omega} \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2}t^2$$

Zatem w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń układ poddany zaburzeniu harmonicznemu o częstości ω będzie z największym prawdopodobieństwem wzbudzał się do stanu o energii $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} + \hbar\omega$ lub ulegał deekscytacji (emisja wymuszona) do stanu o energii $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} - \hbar\omega$.

Człon interferencyjny staje się znikomy (w porównaniu z maksymalną wartością $p(t)$) dla czasów $t \gg \left|\frac{1}{\omega_{mn}}\right|$, bo $\Delta\omega = \frac{4\pi}{t}$ (patrz rysunek).



$|V_{mn}| \neq$ const.

Uwagi

- Pod wpływem słabego zaburzenia harmonicznego o częstości ω stan układu kwantowego, po odpowiednio długim czasie, z dużym prawdopodobieństwem będzie mieć energię $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} \pm \hbar\omega$ gdzie $E_n^{(0)}$ było energią początkową układu.
- W przypadku układu kwantowego o widmie dyskretnym sposobem na spowodowanie przejścia układu ze stanu o energii E_1 do stanu o energii E_2 ($E_2 > E_1$ - wzbudzenie układu) jest poddanie układu zaburzeniu o częstości:
$\hbar\omega = E_2 - E_1$ - jest to warunek rezonansu.
- Stosowalność rachunku zaburzeń:
$$|a_m^{(1)}(t)|^2 \ll 1$$
Jest to praktycznie warunek na t. Dla stanów rezonansowych (czyli takich że $E_m^{(0)} = E_n^{(0)} \pm \hbar\omega$) warunek ten po krótkim czasie przestaje być spełniony (patrz rysunek).
- O prawdopodobieństwie przejścia decyduje również wielkość elementu macierzowego potencjału zaburzającego:
$V_{mn}(t) = \langle \Phi_m | \hat{V}(t) | \Phi_n \rangle$

Wzbudzenie układu do stanów o widmie ciągłym

Niech Hamiltonian będzie postaci: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}\cos(\omega t)$

$p(t) = \sum_m |a_m^{(1)}(t)|^2$ – prawdopodobieństwo wzbudzenia po czasie t.

W przypadku widma ciągłego należy zastąpić sumowanie całkowaniem:

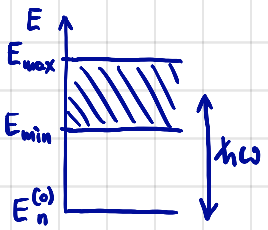
$p(t) = \int_a^b d\alpha \, |a_\alpha^{(1)}(t)|^2$ – gdzie parametr α numeruje stany widma ciągłego

Wygodnie jest zastąpić α przez energię E:

$$p(t) = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \, \frac{d\alpha}{dE} \, |a_E^{(1)}(t)|^2$$

gdzie $g(E) = \frac{d\alpha}{dE}$ ma sens gęstości stanów, tzn. $g(E)\,dE$ określa ilość stanów przypadających na przedział: $(E, E+dE)$

Podstawiając wyrażenie: $|a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{mn}-\omega)t\right]}{(\omega_{mn}-\omega)^2}$



$$p(t) = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \, g(E) \, \frac{|\langle\alpha(E)|\hat{V}|\Phi_n\rangle|^2}{\hbar^2\left(\frac{E-E_n^{(0)}}{\hbar}-\omega\right)^2} \sin^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E-E_n^{(0)}}{\hbar}-\omega\right)t\right]$$

Niech $x = \frac{1}{2}\left(\frac{E-E_n^{(0)}}{\hbar}-\omega\right)t$; $dx = \frac{1}{2}\frac{t}{\hbar}dE$

Wtedy:

$$p(t) = \int_{\frac{1}{2}\left(\frac{E_{min}-E_n^{(0)}}{\hbar}-\omega\right)t}^{\frac{1}{2}\left(\frac{E_{max}-E_n^{(0)}}{\hbar}-\omega\right)t} \frac{2\hbar}{t} dx \, g(x) \, \frac{|\langle\alpha(x)|\hat{V}|\Phi_n\rangle|^2}{\hbar^2 \frac{4x^2}{t^2}} \sin^2 x$$

Zauważmy, że dominujący wkład do całki pochodzi od otoczenia $x=0$ tzn. od energii bliskich $E = E_n^{(0)} + \hbar\omega$

Przy założeniu, że $g(x)$ oraz $|\langle\alpha(x)|\hat{V}|\Phi_n\rangle|^2$ są wolnozmiennymi funkcjami x w otoczeniu $x=0$ otrzymujemy:

$$p(t) = 2\frac{t}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} g(0) \, |\langle\alpha(0)|\hat{V}|\Phi_n\rangle|^2 \, \frac{\sin^2 x}{x^2} \quad \leftarrow$$

Rozciągnięcie przedziału całkowania jest uzasadnione, bo $\frac{\sin^2 x}{x^2}$ szybko zanika dla $x \neq 0$

Ponieważ: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$ zatem:

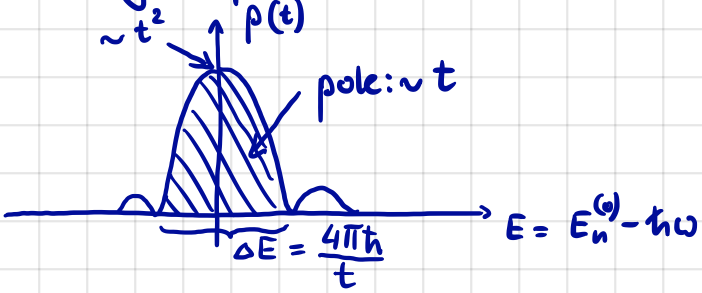
$$p(t) = 2\pi \frac{t}{\hbar} g(E_m^{(0)}) \left| \langle \alpha(E_m^{(0)}) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \right|^2$$

Zatem prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu wynosi:

$$(*) \quad \boxed{\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} g(E_m^{(0)}) \left| \langle \alpha(E_m^{(0)}) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \right|^2} \; ; \text{ gdzie } E_m^{(0)} = E_n^{(0)} + \hbar\omega$$

Relację (*) nazywa się <u>złotą regułą Fermiego</u> (Fermi golden rule).

1) Zauważmy, że w odróżnieniu od p-stwa wzbudzenia do stanu dyskretnego, które rośnie jak t^2 w złotej regule Fermiego: $p(t) \sim t$. Różnica bierze się stąd, że złota reguła Fermiego opisuje wzbudzenie do grupy stanów końcowych



2) Złota reguła Fermiego stosuje się do czasów odpowiednio długich, dla których przedział $\Delta E = \frac{4\pi\hbar}{t}$ jest na tyle mały, że wielkość $g(E) \left| \langle \alpha(E) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \right|^2$ jest w tym przedziale z dobrym przybliżeniem stała.

3) Ponadto t musi być na tyle małe aby stosowalny był rachunek zaburzeń tzn.:
$\boxed{\Gamma t \ll 1}$

<u>Sprzężenie stanu dyskretnego do widma ciągłego (czas życia układu)</u>

Rozważmy przypadek zaburzenia stałego w czasie, tzn.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

przy czym $\hat{H}_0$ posiada stan własny: $\hat{H}_0 |\Phi_n\rangle = E_n |\Phi_n\rangle$

Ponadto $\hat{H}_0$ ma widmo ciągłe: $\hat{H}_0 |\alpha(E)\rangle = E |\alpha(E)\rangle$

Załóżmy że przedział energii E widma ciągłego zawiera w sobie E_n. (18)

Spełnione są następujące warunki ortogonalności:

$$\begin{cases} \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = 1 \\ \langle \Phi_n | \alpha(E) \rangle = 0 \\ \langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \end{cases}$$

, oraz warunek zupełności: $|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| + \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$

Załóżmy, że $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \langle \alpha | \hat{V} | \alpha \rangle = 0$ (jeśli takie elementy macierzowe byłyby niezerowe to można je włączyć do $\hat{H}_0$).

Ponadto $\langle \alpha | \hat{V} | \alpha' \rangle = 0$ - brak sprzężenia pomiędzy stanami należącymi do widma ciągłego.

Zatem jedynie: $\langle \alpha | \hat{V} | \Phi_n \rangle \neq 0$

Pytanie: jakie jest p-stwo, że układ będący w chwili początkowej $t=0$ w stanie $|\Phi_n\rangle$ znalazł się po czasie t w stanach widma ciągłego?

Stosując złotą regułę Fermiego dla przypadku $\omega = 0$ (stałe zaburzenie) mamy:

(**) $\boxed{p(t) = 1 - \Gamma t}$; gdzie $\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} g(E_n) \left| \langle \alpha(E_n) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \right|^2$; $g(E) = \frac{d\alpha}{dE}$

przy czym tutaj E_n jest energią początkową, bo zaburzenie nie zależy od czasu.

Formuła (**) zakłada, że $t \ll \frac{1}{\Gamma}$, tzn. $p(t) \approx 1$

Rozważmy zachowanie $p(t)$ dla dużych t wychodząc poza pierwszy rząd rachunku zaburzeń:

$$\frac{da_m}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k a_k(t)\, e^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar}\, V_{mk}(t)$$

Korzystając z tego, że $\hat{V}$ nie zależy od czasu oraz $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \langle \alpha | \hat{V} | \alpha' \rangle = 0$ mamy:

$$\begin{cases} \frac{da_n}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E)\, e^{-i(E-E_n)t/\hbar} \langle \Phi_n | \hat{V} | \alpha(E) \rangle\, a_\alpha(t) \\ \frac{da_\alpha}{dt} = \frac{1}{i\hbar} a_n(t)\, e^{i(E-E_n)t/\hbar} \langle \alpha(E) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \end{cases}$$

zatem: $$\frac{da_n}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E)\, e^{-i(E-E_n)t/\hbar}\, V_{n\alpha}\, a_n(t')\, e^{i(E-E_n)t'/\hbar}\, V_{\alpha n}$$ (19)

$$(\ast\ast\ast)\quad \frac{da_n}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E)\, e^{-i(E-E_n)(t-t')/\hbar}\, |\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2 a_n(t')$$

Rozważmy całkę: $$\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, f(E)\, e^{-i(E-E_n)(t-t')/\hbar} \quad ; \quad E_{max} - E_{min} \gg \hbar\Gamma$$

gdzie $$f(E) = g(E)\, |\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2$$

Funkcja $f(E)$ jest wolnozmienna, co oznacza, że całka jest znacząco różna od zera dla $t \approx t'$.

Zatem we wzorze $(\ast\ast\ast)$ dokonamy przybliżenia: $a_n(t') \approx a_n(t)$:

$$\frac{da_n}{dt} \approx -\frac{1}{\hbar^2} a_n(t) \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E)\, |\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2 \int_0^t e^{-i(E-E_n)(t-t')/\hbar}\, dt' =$$

Zauważmy, że całka $\int_0^t e^{-i(E-E_n)(t-t')} dt'$ jest rozbieżna gdy $t\to\infty$ i $E = E_n$.

Dlatego rozważymy: $$\lim_{\varepsilon\to 0^+} \int_0^t e^{-i(E-E_n-i\varepsilon)(t-t')/\hbar} dt' = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1 - e^{-i(E-E_n-i\varepsilon)t/\hbar}}{i(E-E_n-i\varepsilon)}$$

Ponieważ interesują nas długie czasy, zatem możemy położyć $t\to\infty$, czyli:

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0^+\\ t\to+\infty}} \int_0^t dt'\, e^{-i(E-E_n-i\varepsilon)(t-t')/\hbar} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{-i\hbar}{E-E_n-i\varepsilon}$$

$$\frac{da_n}{dt} \approx \frac{i}{\hbar} a_n(t) \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E) \frac{|\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2}{E-E_n-i0^+}$$

Skorzystamy z własności: $$\int_a^b \frac{f(x)}{x-i0^+} dx = P\int_a^b \frac{f(x)}{x} dx + i\pi f(0)$$

$$\frac{da_n}{dt} \approx \frac{i}{\hbar} a_n(t) \left[i\pi\, g(E_n) |\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E_n)\rangle|^2 + P\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E) \frac{|\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2}{E-E_n} \right]$$

$$\frac{da_n}{dt} \approx a_n(t)\Big[-\frac{\Gamma}{2} - \frac{i}{\hbar} \underbrace{P\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE\, g(E) \frac{|\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2}{E_n-E}}_{\delta E_n}\Big] = a_n(t)\left(-\frac{\Gamma}{2} - \frac{i}{\hbar}\delta E_n\right)$$

Zatem

$$\frac{da_n}{dt} \approx -a_n(t)\left[\frac{\Gamma}{2} + \frac{i}{\hbar}\delta E_n\right]$$

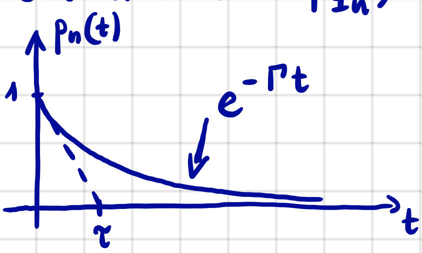
$$(*)\quad a_n(t) \approx e^{-\frac{\Gamma t}{2}} e^{-i\delta E_n \cdot t/\hbar}$$

czyli: $(**)$ $\boxed{p_n(t) = |a_n(t)|^2 \approx e^{-\Gamma t}}$; $\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} g(E_n) \, |\langle \Phi_n | \hat{V} | \alpha(E_n)\rangle|^2$

Powyższy wynik jest słuszny dla długich czasów : $t \gtrsim \frac{1}{\Gamma}$

Wzór $(*)$ określa <u>prawo rozpadu</u> układu kwantowego.

<u>Czas życia</u> układu w stanie $|\Phi_n\rangle$ określamy jako $\tau = \frac{1}{\Gamma}$



Zauważmy, że sprzężenie stanu ze stanami widma ciągłego powoduje dwa efekty:

1) <u>Nieodwracalny rozpad</u> układu kwantowego, tzn. przejście układu do widma ciągłego (człon $e^{-\Gamma t/2}$ we wzorze $(*)$)

2) <u>Modyfikację energii</u> E_n na skutek sprzężenia z widmem ciągłym:

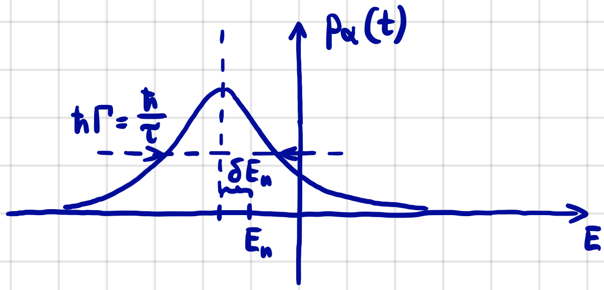
$$\delta E_n = P\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \, g(E) \frac{|\langle \Phi_n | \hat{V} | \alpha(E)\rangle|^2}{E_n - E} \longleftarrow \left\{ \text{Porównaj z poprawką do energii w drugim rzędzie rachunku zaburzeń} \right\}$$

Rozkład energii stanów końcowych po długim czasie : $t \gg \frac{1}{\Gamma}$

$$\frac{da_\alpha}{dt} = \frac{1}{i\hbar} a_n(t) e^{i(E-E_n)t/\hbar} \langle \alpha(E) | \hat{V} | \Phi_n \rangle \approx \frac{1}{i\hbar} e^{-i(E_n + \delta E_n - E)\frac{t}{\hbar}} e^{-\frac{\Gamma}{2}t} V_{\alpha n}$$

$$a_\alpha(t) \approx \frac{1}{i} \frac{e^{-i(E_n+\delta E_n - E)t/\hbar} e^{-\frac{\Gamma}{2}t} - 1}{-i(E_n + \delta E_n - E) - \frac{\Gamma}{2}\hbar} V_{\alpha n} \xrightarrow{t\to+\infty} \frac{-\langle \alpha(E) | \hat{V} | \Phi_n\rangle}{E_n + \delta E_n - E - i\hbar\frac{\Gamma}{2}}$$

czyli $\boxed{\lim_{t\to+\infty} p_\alpha(t) = \frac{|\langle \alpha(E) | \hat{V} | \Phi_n \rangle|^2}{(E_n + \delta E_n - E)^2 + \left(\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)^2}}$



Ponieważ $|\langle\Phi_n|\hat{V}|\alpha(E)\rangle|^2$ jest praktycznie stałe w przedziale energii $\Delta E = \hbar\Gamma$ zatem

$$p_\alpha(t) \sim \frac{1}{(E_n + \delta E_n - E)^2 + \left(\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)^2}$$

i rozkład energii stanów końcowych podlega rozkładowi Lorentza o szerokości $\hbar\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$ odwrotnie proporcjonalnemu do czasu życia.

Wielkość $\hbar\Gamma$ nazywamy naturalną szerokością stanu $|\Phi_n\rangle$.

Powyższy opis stosuje się do szerokiej klasy zagadnień:
- rozpadów promieniotwórczych,
- emisji spontanicznej fotonów przez jądra atomowe, atomy, układy molekularne,
- rozpadów cząstek elementarnych,

...

Zauważmy, że opisany proces rozpadu wprowadza zasadę nieoznaczoności pomiędzy czasem życia a szerokością stanu, która odzwierciedla rozrzut energii końcowych.

Im krótszy czas życia układu kwantowego tym większy rozrzut energii stanów końcowych:

$$\boxed{\Delta E\,\tau = \hbar} \quad ; \quad \Delta E = \hbar\Gamma$$

Podobny efekt był widoczny w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń dla zaburzenia harmonicznego o częstości ω. Maksymalne p-stwo wzbudzenia zachodziło dla stanu o energii $E_n + \hbar\omega$, ale nieoznaczoność tej energii była rzędu $\Delta E = \frac{4\pi}{t}\hbar$ gdzie t jest czasem trwania zaburzenia.

Tego typu relacje postaci: $\boxed{\Delta E \cdot t \sim \hbar}$ noszą nazwę relacji nieoznaczoności pomiędzy czasem i energią.

Należy jednak pamiętać, że mają one inny charakter niż zasada nieoznaczoności Heisenberga (nie ma operatora czasu w mechanice kwantowej).

Stany "czyste" i mieszane

Stan "czysty" w mechanice kwantowej jest to stan opisywany funkcją falową: $\psi(\bar{r}, t) = \langle \bar{r} | \psi(t) \rangle$; $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, która spełnia r-nie: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{r}, t) = \hat{H} \psi(\bar{r}, t)$

Czasem jednak nie znamy f. falowej lub nawet f. falowa nie istnieje. Tak się dzieje gdy np.:

- wnioskujemy o f. falowej na podstawie dokonanych pomiarów.
- interesujący nas układ jest częścią większego układu, z którym może wymieniać energię, pęd, itd. (np. zespół kanoniczny w mechanice statystycznej).

W takim przypadku o układzie możemy powiedzieć jedynie, że np. w pewnej chwili czasu t_0 znajduje się z prawdopodobieństwem p_1 w stanie $|\Phi_1(t_0)\rangle$, z p-stwem p_2 w stanie $|\Phi_2(t_0)\rangle$, itd.

Taki stan układu nazywamy <u>stanem mieszanym</u>

Przypuśćmy, że $\langle \Phi_i(t_0) | \Phi_j(t_0) \rangle = \delta_{ij}$ (stany $|\Phi_i(t_0)\rangle$ tworzą bazę ortonormalną).

Zauważmy, że musi zachodzić: $\sum_i p_i = 1$; $p_i \geq 0$

Do opisu układu w stanie mieszanym używamy operatora gęstości:

$$\hat{\varrho}(t) = \sum_i |\Phi_i(t)\rangle p_i \langle \Phi_i(t)| = \sum_i \hat{P}_i(t) \, p_i$$

gdzie $\hat{P}_i(t) = |\Phi_i(t)\rangle\langle \Phi_i(t)|$ jest operatorem rzutowym na stan $|\Phi_i(t)\rangle$.

Zauważmy, że $\hat{\varrho}(t)^{+} = \hat{\varrho}(t)$ oraz

$$[\hat{\varrho}(t)]^2 = \sum_{i,j} |\Phi_i(t)\rangle p_i \langle \Phi_i(t)|\Phi_j(t)\rangle p_j \langle\Phi_j(t)| = \left| \langle\Phi_i(t)|\Phi_j(t)\rangle = \delta_{ij} \right|$$

$$= \sum_i |\Phi_i(t)\rangle p_i^2 \langle \Phi_i(t)|$$

Zatem $[\hat{\varrho}(t)]^2 = \hat{\varrho}(t)$ tylko wtedy gdy $p_i^2 = 0,1$; czyli np. $p_i = \delta_{ij}$ (bo $\sum_i p_i = 1$)

Taki przypadek odpowiada stanom "czystym", ponieważ oznacza, że układ znajduje się z p-stwem 1 w stanie $|\Phi_j(t)\rangle$, czyli jego f. falowa wynosi $\Phi_j(\bar{r},t) = \langle \bar{r}|\Phi_j(t)\rangle$.

Zatem operator gęstości $\hat{\varrho}(t)$ opisuje zarówno stany "czyste" $([\hat{\varrho}(t)]^2 = \hat{\varrho}(t))$ i stany mieszane $([\hat{\varrho}(t)]^2 \neq \hat{\varrho}(t))$.

Przy pomocy $\hat{\varrho}(t)$ możemy obliczyć <u>wartość średnią</u> dowolnego op. $\hat{A}$ w stanie mieszanym:

$$\bar{A}(t) \overset{df}{=} \sum_i p_i \langle\Phi_i(t)|\hat{A}|\Phi_i(t)\rangle = \sum_i \langle\Phi_i(t)|\hat{A}\hat{\varrho}(t)|\Phi_i(t)\rangle =$$

$$\overset{ozn.}{=} \mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{\varrho}(t)\}$$

Zauważmy, że wartość $\bar{A}(t)$ <u>nie zależy</u> od wyboru bazy ortonormalnej, po której wykonujemy sumowanie.

<u>Dowód</u>

Rozważmy dowolną bazę ortonormalną $|\varphi_k\rangle$; $\langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{kl}$

$$\mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{\varrho}\} = \sum_k \langle\varphi_k|\hat{A}\hat{\varrho}|\varphi_k\rangle = \sum_{k,l} \langle\varphi_k|\hat{A}|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\hat{\varrho}|\varphi_k\rangle =$$

$\sum_l |\varphi_l\rangle\langle\varphi_l| = \hat{1}$ – war. zupełności bazy.

$$= \sum_{k,l,i} p_i \langle\Phi_i(t)|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\hat{A}|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\Phi_i(t)\rangle = \sum_i p_i \langle\Phi_i(t)|\hat{A}|\Phi_i(t)\rangle = \bar{A}(t)$$

Zatem $\boxed{\bar{A}(t) = \mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{\varrho}(t)\}}$

Zauważmy, że w przypadku stanu "czystego": $|\Phi_j(t)\rangle$

$$\bar{A}(t) = \mathrm{Tr}\{\hat{A}\,\hat{\varrho}(t)\} = \sum_i \delta_{ij} \langle\Phi_j(t)|\hat{A}|\Phi_j(t)\rangle = \langle\hat{A}\rangle_{\Phi_j}$$

Zatem dla stanu "czystego": $\bar{A}(t) = \langle\hat{A}\rangle$

Ewolucja czasowa $\bar{A}(t)$:

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\{\hat{A}\,\hat{\varrho}(t)\} = \frac{d}{dt}\sum_k \langle\varphi_k|\hat{A}\,\hat{\varrho}(t)|\varphi_k\rangle =$$

$$= \sum_k \langle\varphi_k|\hat{A}\frac{d\hat{\varrho}}{dt}|\varphi_k\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{A}\frac{d\hat{\varrho}}{dt}\}$$

ale

$$\frac{d\hat{\varrho}}{dt} = \sum_i p_i \frac{d}{dt}|\Phi_i(t)\rangle\langle\Phi_i(t)| = \sum_i p_i\left(\frac{d}{dt}|\Phi_i(t)\rangle\right)\langle\Phi_i(t)| +$$

$$+ \sum_i p_i |\Phi_i(t)\rangle\frac{d}{dt}\left(\langle\Phi_i(t)|\right) = \left|\begin{array}{l}\frac{d}{dt}|\Phi_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\Phi_i(t)\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\Phi_i(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Phi_i(t)|\hat{H}^+, \quad \hat{H}^+ = \hat{H}\end{array}\right| =$$

$$= \sum_i \frac{p_i}{i\hbar}\hat{H}|\Phi_i(t)\rangle\langle\Phi_i(t)| - \sum_i \frac{p_i}{i\hbar}|\Phi_i(t)\rangle\langle\Phi_i(t)|\hat{H} =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\varrho}(t)]$$

Czyli $\displaystyle \frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\{\hat{A}[\hat{H},\hat{\varrho}(t)]\} = \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\{\hat{A}(\hat{H}\hat{\varrho}(t) - \hat{\varrho}(t)\hat{H})\} =$

$$= \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{H}\hat{\varrho}(t) - \hat{H}\hat{A}\hat{\varrho}(t)\} = \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\{[\hat{A},\hat{H}]\hat{\varrho}(t)\}$$

gdzie skorzystaliśmy z własności: $\mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = \mathrm{Tr}\{\hat{B}\hat{A}\}$ zachodzącej dla dowolnych op. $\hat{A}$ i $\hat{B}$ (sprawdzić).

Podsumowując: $\boxed{i\hbar\frac{d\bar{A}}{dt} = \mathrm{Tr}\{[\hat{A},\hat{H}]\hat{\varrho}(t)\} \;;\; i\hbar\frac{d\hat{\varrho}}{dt} = [\hat{H},\hat{\varrho}(t)]}$

Dygresja: w mechanice klasycznej analogiem $\hat{\varrho}$ jest funkcja $\varrho(\vec{q},\vec{p},t)$, która określa gęstość p-stwa w chwili czasu t znalezienia układu klasycznego o współrzędnych: $\vec{q}(t)$ i $\vec{p}(t)$.

Tw. Liouville'a: $\displaystyle \frac{\partial\varrho}{\partial t} = \{H, \varrho\}$

Wstęp do kwantowej teorii rozpraszania

Cząstka swobodna i problem unormowania:

Niech $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Stany własne: $|\varphi_{\vec{p}}\rangle$ są stanami własnymi op. pędu:

$$\hat{\vec{p}}\,|\varphi_{\vec{p}}\rangle = \vec{p}\,|\varphi_{\vec{p}}\rangle \quad ; \quad \vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$$

W reprezentacji położeniowej:

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\varphi_{\vec{p}}\rangle = N e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} = N e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad ; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

$\vec{k}$ - wektor falowy

Stany $|\varphi_{\vec{p}}\rangle$ tworzą bazę stanów ortogonalnych, nieunormowanych:

$$\langle\varphi_{\vec{p}}|\varphi_{\vec{p}'}\rangle = \int d^3r\, \langle\varphi_{\vec{p}}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\varphi_{\vec{p}'}\rangle = |N|^2 \int d^3r\, e^{i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}\frac{1}{\hbar}} =$$

$$= |N|^2 \int d^3r\, e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} = |N|^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

Widać, że dla dowolnego $N \neq 0$: $\langle\varphi_{\vec{p}}|\varphi_{\vec{p}}\rangle = \infty$

Zatem stany $|\varphi_{\vec{p}}\rangle$ są nieunormowane. Stałą N można wybrać dowolnie $(N \neq 0)$. Zwykle żądamy aby:

$$\langle\varphi_{\vec{p}}|\varphi_{\vec{p}'}\rangle = \delta(\vec{k}-\vec{k}') \implies N = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

Zatem (*) $\boxed{\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}} \quad ; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$

~~Stan opisany funkcją falową jest stanem stacjonarnym~~

$$\hat{H}_0\,\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m}\,\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$$

Pełne rozwiązanie r-nia Schrödingera przy warunku początkowym: $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r},0) = \varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$ daje: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = \hat{H}_0\,\varphi_{\vec{p}}(\vec{r},t)$

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\vec{p}}t}\,\varphi_{\vec{p}}(\vec{r},0) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\vec{p}}t}\,\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

gdzie $E_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

Stan stacjonarny opisany funkcją falową:

$$(**)\ \varphi_{\vec p}(\vec r,t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\vec k\cdot\vec r - \frac{i}{\hbar}E_p t} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_p t}\langle \vec r|\varphi_{\vec p}\rangle$$

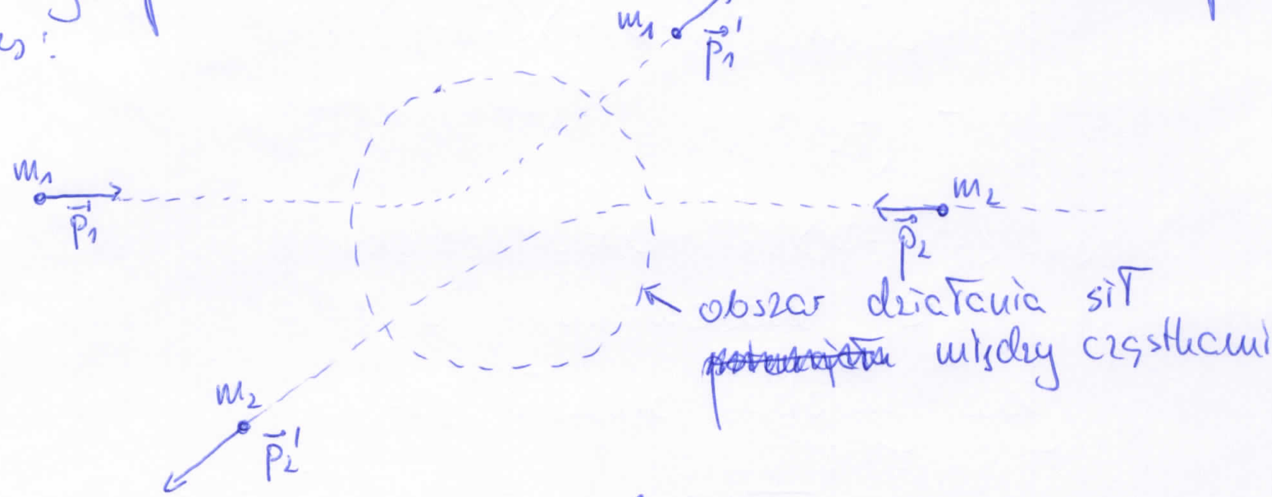
odpowiada cząstce o pędzie $\vec p = \hbar\vec k$ i energii $E_p = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Stany takie są wygodne do stosowania, choć są <u>nienormowalne</u>, ponieważ są stanami własnymi $\hat H_0$.

Unormowania można dokonać rozważając kombinacje liniowe stanów (**) (czyli paczki falowe). Jednak wtedy otrzymane stany nie będą stanami własnymi $\hat H_0$.

<u>Rozpraszanie jako zagadnienie dwóch ciał:</u>

Chcemy opisać w ramach mechaniki kwantowej następujący proces:



Zatem $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r_1,\vec r_2,t) = \hat H\psi(\vec r_1,\vec r_2,t)$

gdzie $\psi(\vec r_1,\vec r_2,t)$ jest funkcją falową dwóch cząstek.

przy czym spełnione są następujące warunki:

$$(*)\begin{cases} \lim\limits_{t\to-\infty}\psi(\vec r_1,\vec r_2,t) = \varphi_{\vec p_1}(\vec r_1,t)\,\varphi_{\vec p_2}(\vec r_2,t) \\ \lim\limits_{t\to+\infty}\psi(\vec r_1,\vec r_2,t) = \sum\limits_{\vec p_1',\vec p_2'}\varphi_{\vec p_1'}(\vec r_1,t)\,\varphi_{\vec p_2'}(\vec r_2,t)\,c_{\vec p_1'\vec p_2'} \quad i \quad \vec p_1'+\vec p_2' = \vec p_1+\vec p_2 \end{cases}$$

Ponieważ w procesie rozpraszania energia całkowita układu jest zachowana zatem wystarczy rozwiązać zagadnienie niezależne od czasu: $\quad \hat H\psi(\vec r_1,\vec r_2) = E\psi(\vec r_1,\vec r_2)$

gdzie $E = E_{\bar{p}_1} + E_{\bar{p}_2} = E_{\bar{p}_1'} + E_{\bar{p}_2'}$

Rozważmy $\hat{H}$ postaci: $H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$

gdzie $\nabla_1^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right)$; $\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$

Zakładamy ponadto że $V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \to 0$ dla $|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|$ odpowiednio dużych.

R-nie $\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)\right]\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = E\,\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$

można wyseparować na 2 r-nia: jedno opisujące ruch środka masy (swobodny) i drugie opisujące ruch względny (patrz atom wodoru) postaci:

$$(**)\quad \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\bar{r})\right]\varphi(\bar{r}) = \varepsilon\,\varphi(\bar{r})$$

gdzie $\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{R}}\,\varphi(\bar{r})$;

oraz $E = \frac{P^2}{2M} + \varepsilon$

$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$
$\vec{R} = \frac{1}{M}(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2)$
$M = m_1 + m_2$
$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$
$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Ponieważ ruch środka masy nie wnosi żadnych układów do procesu wpraszania zatem cała informacja o procesie rozpraszania jest zawarta w r-niu (**).

Warunki brzegowe (*) sprowadzają się teraz do:

~~$\lim_{|\bar{r}|\to\infty} \varphi(\bar{r}) = \{ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ – fala padająca~~

~~(*)~~ żądania aby dla dużych r (tzn takich, dla których $V(r) = 0$) $\varphi(\vec{r})$ było rozwiązaniem r-nia

$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\varphi(\bar{r}) = \varepsilon\,\varphi(\bar{r})$; $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$; $\bar{p} = \hbar\bar{k}$; $\vec{p} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$

Spodziewamy się znaleźć rozwiązanie postaci:

$$(a)\quad \varphi_\varepsilon(\bar{r}) = \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}}_{\text{fala padająca}} + \underbrace{\varphi_\varepsilon^{(+)}(\bar{r})}_{\text{fala rozproszona}}$$

R-nie (**) możemy zapisać w postaci:

$$\left[-\nabla^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\right]\varphi_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\varphi_\varepsilon(\vec{r})$$

$$(***)\quad (\nabla^2 + k^2)\varphi_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\varphi_\varepsilon(\vec{r})$$

Ogólne rozwiązanie r-nia (***) zgodne z warunkiem (a) ma postać:

$$\varphi_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\, G_0(\bar{r},\bar{r}')V(\bar{r}')\varphi_\varepsilon(\bar{r}')$$

gdzie $G_0(\bar{r},\bar{r}')$ jest rozwiązaniem równania:

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\bar{r},\bar{r}') = \delta(\bar{r}-\bar{r}')$$

Sprawdzenie:

$$(\nabla^2+k^2)\varphi_\varepsilon(\bar{r}) = (\nabla^2+k^2)\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'(\nabla^2+k^2)G_0(\bar{r},\bar{r}')V(\bar{r}')\varphi_\varepsilon(\bar{r}') =$$

$$= 0 + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\,\delta(\bar{r}-\bar{r}')V(\bar{r}')\varphi_\varepsilon(\bar{r}') = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\bar{r})\varphi_\varepsilon(\bar{r})$$

Funkcję $G_0(\bar{r},\bar{r}')$ nazywamy <u>funkcją Greena</u>.

Zauważmy, że $G_0(\bar{r},\bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, \frac{e^{i\bar{q}\cdot(\bar{r}-\bar{r}')}}{k^2-q^2}$, bo

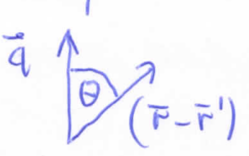
$$(\nabla^2+k^2)G_0(\bar{r},\bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\,\frac{1}{k^2-q^2}(\nabla^2+k^2)e^{i\bar{q}\cdot(\bar{r}-\bar{r}')} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\,\frac{1}{k^2-q^2}(-q^2+k^2)e^{i\bar{q}\cdot(\bar{r}-\bar{r}')} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, e^{i\bar{q}\cdot(\bar{r}-\bar{r}')} = \delta(\bar{r}-\bar{r}')$$

Czyli

$$G_0(\bar{r}-\bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\,\frac{e^{i\bar{q}\cdot(\bar{r}-\bar{r}')}}{k^2-q^2} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty\int_{-1}^{1}\int_0^{2\pi} q^2dq\, d(\cos\theta)\, d\varphi\,\frac{e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|\cos\theta}}{k^2-q^2}$$

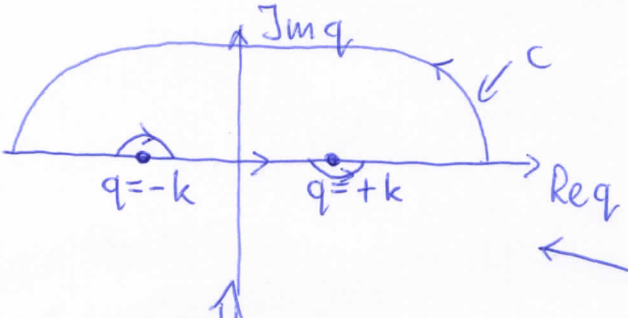


$$G_0(\bar{r}-\bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty q^2 dq \, \frac{1}{k^2-q^2}\,\frac{1}{iq|\bar{r}-\bar{r}'|}\left(e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|} - e^{-iq|\bar{r}-\bar{r}'|}\right) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{q^2 dq\, e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|}}{(k^2-q^2)\,iq|\bar{r}-\bar{r}'|} - \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{q^2 dq\, e^{-iq|\bar{r}-\bar{r}'|}}{(k^2-q^2)\,iq|\bar{r}-\bar{r}'|} =$$

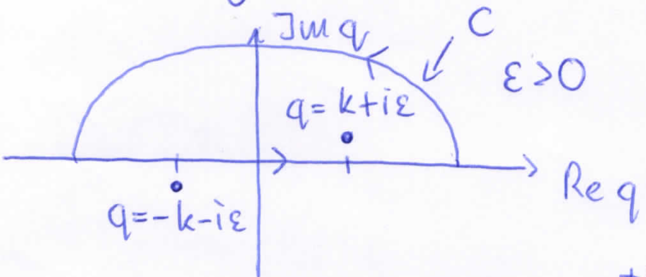
$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i|\bar{r}-\bar{r}'|}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|}}{k^2-q^2}\, q\, dq \qquad q \to -q$$

Ta całka jest nieokreślona dopóki nie zdefiniujemy sposobu obejścia biegunów.



Tak wybieramy! Jak się okaże taki wybór jest zgodny z warunkiem (a).

$$\Updownarrow$$



$$G_0^{(+)}(\bar{r}-\bar{r}') = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{(2\pi)^2 i|\bar{r}-\bar{r}'|}\int_{-\infty}^{+\infty} q\,\frac{e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|}}{(k+i\varepsilon)^2-q^2}\,dq = \left|\begin{matrix}\text{Lemat}\\ \text{Jordana}\end{matrix}\right| =$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{(2\pi)^2 i|\bar{r}-\bar{r}'|}\int_C q\,\frac{e^{iq|\bar{r}-\bar{r}'|}\,dq}{(k+i\varepsilon)^2-q^2} = \left|\begin{matrix}\text{Przez residua}\\ \text{bieguna: } q=k+i\varepsilon\end{matrix}\right| =$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{(2\pi)^2 i|\bar{r}-\bar{r}'|}\,2\pi i\,\frac{e^{i(k+i\varepsilon)|\bar{r}-\bar{r}'|}}{(-k-i\varepsilon)\,2}(k+i\varepsilon)$$

Czyli

$$\boxed{G_0^{(+)}(\bar{r}-\bar{r}') = -\frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|}}$$

Stąd

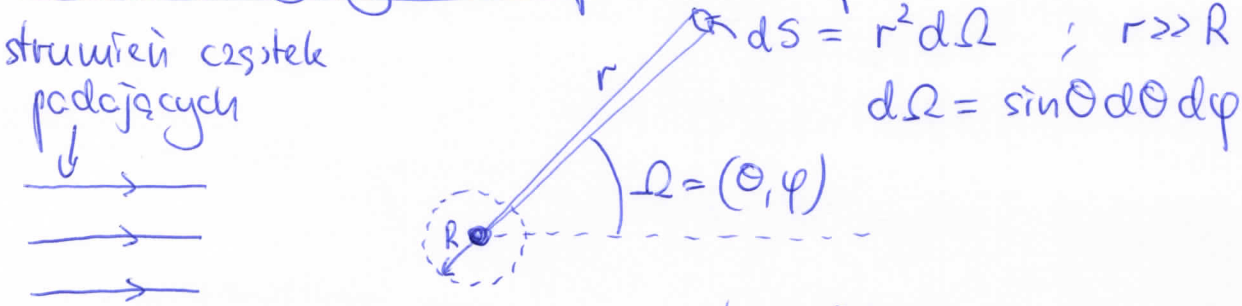
$$(*)\quad \boxed{\varphi_E(\bar{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\,\frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|}V(\bar{r}')\varphi_E(\bar{r}')}$$

R-nie (*) jest "rozwiązaniem" r-nia Schrödingera dla ruchu względnego cząstek ze szczególnymi warunkami brzegowymi.

Zauważmy bowiem, że $G_0^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}\,') \xrightarrow[|\vec{r}|\to\infty]{} -\dfrac{e^{ikr}}{4\pi r}$ opisuje rozchodzącą się falę kulistą.

Drugi człon r-nia (**) przedstawia zatem superpozycję fal kulistych generowanych z każdego punktu $\vec{r}\,'$, dla którego $V(\vec{r}\,')\neq 0$ (por. zasada Huyghensa).

Przekrój czynny i amplituda rozpraszania



R - zasięg potencjału.

Klasycznie:

$$\frac{d\sigma}{\cancel{d\Omega}} = \frac{\text{liczba cząstek docierających do } dS \text{ w jednostce czasu}}{\text{liczba cząstek padających na jedn. powierzchni w jedn. czasu}}$$

Kwantowo:

$$\frac{d\sigma}{\cancel{d\Omega}} = \frac{\text{wartość gęstości prądu p-stwa fali rozproszonej przechodzącego przez pow. } dS}{\text{wart. gęstości prawdopodobieństwa fali padającej.}}$$

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2\mu i}\left[\varphi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\varphi(\vec{r},t) - \varphi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\varphi^*(\vec{r},t)\right]$$

Ponieważ w naszym przypadku $\varphi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}\varphi_\varepsilon(\vec{r})$

zatem $\vec{j} = \vec{j}(\vec{r})$

Wartość gęstości prądu prawdopodobieństwa fali padającej:

$$|\vec{j}_{in}| = \left|\frac{\hbar}{2\mu i}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\nabla}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\nabla}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)\right| =$$

$$= \left|\frac{\hbar}{2\mu i}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(i\vec{k} - (-i\vec{k})\right)\right| = \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar}{\mu}k$$

Wartość gęstości prądu p-stwa fali rozproszonej przechodzącej przez powierzchnię dS:

$$\left|\vec{j}_{sc}\cdot d\vec{S}\right| = \left|\frac{\hbar}{2\mu i}\left(\varphi_\varepsilon^{(+)*}(\vec{r})\vec{\nabla}\varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r}) - \varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r})\vec{\nabla}\varphi_\varepsilon^{(+)*}(\vec{r})\right)\cdot d\vec{S}\right|$$

przy czym $|\vec{r}| \gg R$ – zasięg oddziaływania

$$d\vec{S} = \vec{n}\, r^2 d\Omega \quad , \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$$

Zatem

$$\left|\vec{j}_{sc}\cdot d\vec{S}\right| = \left|\frac{\hbar}{2\mu i}\left(\varphi_\varepsilon^{(+)*}(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r}) - \varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\varphi_\varepsilon^{(+)*}(\vec{r})\right)\right| r^2 d\Omega$$

Rozważmy $\varphi_\varepsilon(\vec{r})$ dla dużych $|\vec{r}|$ (tzn. dużo większych niż zasięg oddziaływania wyznaczony potencjałem $V(\vec{r}) \neq 0$).

$$\varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r}) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\, \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}V(\vec{r}')\varphi_\varepsilon(\vec{r}') =$$

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}\, e^{-ik\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}'}}{r\left(1-\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}\right)} \approx \frac{e^{ikr}}{r}\, e^{-ik\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}'}\left(1+\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}\right)$$

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2} \approx \sqrt{x^2+y^2+z^2+(-2xx'-2yy'-2zz')} \approx$$

$$\approx \sqrt{x^2+y^2+z^2}\left[1+\frac{xx'+yy'+zz'}{x^2+y^2+z^2}\right] = r - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r}$$

Zachowując tylko wyrazy rzędu $\frac{1}{r}$ otrzymujemy:

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r}\, e^{-i\vec{k}_r\cdot\vec{r}'}$$

$$\varphi_\varepsilon^{(+)}(\vec{r}) \underset{|\vec{r}|\to\infty}{\approx} -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}_r\cdot\vec{r}'}V(\vec{r}')\varphi_\varepsilon(\vec{r}') =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}A(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

gdzie $\boxed{A(\theta,\varphi) = -\sqrt{2\pi}\,\frac{\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}_r\cdot\vec{r}'}V(\vec{r}')\varphi_\varepsilon(\vec{r}')}$ amplituda rozpraszania

Zauważmy, że $A(\theta,\varphi)$ zależy tylko od kątów, które są zawarte w orientacji wektora $\vec{k}_r = k\frac{\vec{r}}{r} = k\vec{n}$

Czyli

$$|\vec{j}_{sc}\cdot d\vec{S}| = \left|\frac{\hbar}{2\mu i}\frac{1}{(2\pi)^3}|A(\theta,\varphi)|^2\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{-ikr}}{r}\right)\right| r^2 d\Omega =$$

$$= \frac{\hbar}{2\mu}\frac{1}{(2\pi)^3}|A(\theta,\varphi)|^2\left|\frac{e^{-ikr}}{r}\left(ik\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2}\right) - c.c.\right| r^2 d\Omega$$

$$= \frac{\hbar}{2\mu}\frac{1}{(2\pi)^3}|A(\theta,\varphi)|^2\frac{2k}{r^2} r^2 d\Omega$$

Zatem

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{j}_{sc}\cdot d\vec{S}|}{|\vec{j}_{in}|\,d\Omega} = \frac{\frac{\hbar}{\mu}\frac{k}{(2\pi)^3}|A(\theta,\varphi)|^2}{\frac{\hbar}{\mu}\frac{k}{(2\pi)^3}}$$

Czyli (**) $$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\theta,\varphi)|^2}$$

(***) $$\boxed{\sigma = \int |A(\theta,\varphi)|^2 d\Omega = \int |A(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}$$

<u>Uwagi</u>

1) Wzór (**) jest zdefiniowany w układzie środka masy, tzn. w układzie w którym $\vec{P}=0$. Przeszliśmy do tego układu w momencie, w którym zajęliśmy się rozw. zagadnienia ruchu względnego cząstek pomijając ruch środka masy (czyli kładąc $\vec{P}=0$). Aby przejść do ukł. laboratoryjnego ($\vec{P}\neq 0$) trzeba przetransformować kąty θ i φ. Tym niemniej (***) czyli σ jest takie samo we wszystkich układach.

2) Zauważmy, że kolejne człony rozwinięcia $\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ zniknęłyby po podstawieniu do $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ i przejściu: $|\vec{r}|\to\infty$.

3) Ze wzorów (**) i (***) wynika, że cała informacja o rozpraszaniu jest zawarta w amplitudzie rozpraszania.

Przybliżenie Borna

$$A(\theta,\varphi) = -\sqrt{2\pi}\,\frac{\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\, e^{i\vec{k}_r\cdot\vec{r}'}\, V(\vec{r}')\,\varphi_E(\vec{r}')$$

Załóżmy, że rozpraszanie jest słabe, tzn. $\varphi_E(\vec{r}') \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$

Wtedy

$$A(\theta,\varphi) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}_r\cdot\vec{r}'}\, V(\vec{r}')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$$

Oznaczmy $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_r$

$$\boxed{A(\theta,\varphi) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, V(\vec{r}')\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'}}$$ - Przybliżenie Borna dla amplitudy rozpraszania.

W przybliżeniu Borna $A(\theta,\varphi)$ jest proporcjonalne do przestrzennej transformaty Fouriera potencjału.

Warunek stosowalności przybliżenia Borna: $\left|\varphi_E^{(+)}(\vec{r})\right| \ll \left|\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right|$

Czyli

$$\cancel{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \gg \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{2\mu}{\hbar^2}\left|\int d^3r'\,\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\,V(\vec{r}')\,\varphi_E(\vec{r}')\right| \approx \left|\begin{array}{l}\text{rozważmy:}\\ \vec{r}=0\\ \varphi_E(\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}\end{array}\right| =}$$

$$\cancel{= \frac{2\mu}{\hbar^2 4\pi}\left|\int d^3r'\,\frac{e^{ikr'}}{r'}\,V(\vec{r}')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}\right|\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}}$$

~~Przybliżenie Borna stosuje się gdy potencjał oddz. jest słaby lub jego zasięg jest mały.~~

Można pokazać, że daje to następujący warunek stosowalności przybliżenia Borna:

$$\begin{cases} (kR)\,\frac{\tilde{V}}{\varepsilon} \ll 1 & \text{dla } kR \gg 1 \\ (kR)^2\,\frac{\tilde{V}}{\varepsilon} \ll 1 & \text{dla } kR \ll 1 \end{cases}$$

gdzie R jest zasięgiem oddziaływania, a $\tilde{V} = \frac{1}{R}\int_0^R |V(r)|\,dr$

Czasem zdarzają się przypadki patologiczne.

Np. dla potencjału kulombowskiego przybliżenie Borna daje wynik dokładny.

Przykład

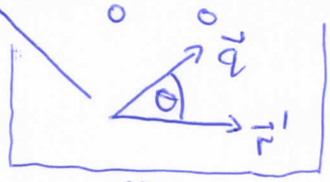
Rozważmy potencjał Yukawy postaci: $V(r) = g\dfrac{e^{-\alpha r}}{r}$; $\alpha > 0$

$g = \text{const.}$

Obliczmy różniczkowy przekrój czynny w przybliżeniu Borna.

$$A_B(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, g\frac{e^{-\alpha r'}}{r'}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta \int_0^{\infty} r'^2 dr'\, g\frac{e^{-\alpha r'}}{r'}\, e^{iqr'\cos\theta}$$

$$= -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{\infty} r'dr'\, g\, e^{-\alpha r'} e^{iqr'\cos\theta} =$$



$$= -\frac{\mu}{\hbar^2} g \int_0^{\infty} r'dr'\, e^{-\alpha r'}\frac{1}{iqr'}\left(e^{iqr'} - e^{-iqr'}\right) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} g \int_0^{\infty} dr'\, \sin(qr')\, e^{-\alpha r'} =$$

$$= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} g\left[-\frac{1}{q}\cos(qr')\, e^{-\alpha r'}\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty}\frac{1}{q}\cos(qr')\,\alpha\, e^{-\alpha r'} dr'\right] =$$

$$= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} g\left[\frac{1}{q} - \frac{1}{q^2}\alpha\sin(qr')\, e^{-\alpha r'}\Big|_0^{\infty} - \frac{\alpha^2}{q^2}\int_0^{\infty}\sin(qr')\, e^{-\alpha r'} dr'\right]$$

Czyli

$$\int_0^{\infty} dr'\, \sin(qr')\, e^{-\alpha r'} = \frac{1}{q} - \left(\frac{\alpha}{q}\right)^2\int_0^{\infty}\sin(qr')\, e^{-\alpha r'} dr'$$

$$\int_0^{\infty} dr'\, \sin(qr')\, e^{-\alpha r'} = \frac{\frac{1}{q}}{1+\left(\frac{\alpha}{q}\right)^2} = \frac{1}{q+\frac{\alpha^2}{q}}$$

Zatem

$$A_B(\theta,\varphi) = A_B(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} g\frac{1}{q^2+\alpha^2} \quad ; \quad q = |\bar{k} - \bar{k}_r|$$

$$q^2 = k^2 - 2\bar{k}\cdot\bar{k}_r + k_r^2 = 2(k^2 - \bar{k}\cdot\bar{k}_r$$

Niech θ będzie kątem pomiędzy $\bar{k}$ i $\bar{k}_r$

$$q^2 = 2k^2(1-\cos\theta) = 2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2} + \cos^2\frac{\theta}{2} - \cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\right) = 2k^2\cdot 2\sin^2\frac{\theta}{2}$$

Czyli $A_B(\theta) = -\dfrac{2\mu}{\hbar^2} g\dfrac{1}{4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\alpha^2} \Rightarrow \dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \dfrac{4\mu^2 g^2}{\left(4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\alpha^2\right)^2\hbar^4}$

Kładąc $\alpha = 0$ i $g = Z_1 Z_2 e^2$ otrzymujemy wzór Rutherforda

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{2\hbar^2 k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2} \leftarrow$$

Różniczkowy przekrój czynny w ukł. środka masy dla rozpraszania cząstek o ładunkach $Z_1 e$ i $Z_2 e$.

Ruch cząstki kwantowej i klasycznej

Rozważmy r-nie Schrödingera z Hamiltonianem niezależnym od czasu: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = \hat{H} |\varphi(t)\rangle$

R-nie to ma rozwiązanie postaci: $(*)\ |\varphi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\varphi(t_0)\rangle$

gdzie $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\right)^n \hat{H}^n$

Operator ~~$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$~~ $\hat{U}(t-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$

jest operatorem ewolucji i ma następujące własności:

1° jest unitarny: $\hat{U}^+(t-t_0)\,\hat{U}(t-t_0) = \hat{1}$

2° $\hat{U}(t_2-t_1)\,\hat{U}(t_1-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_2-t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} = \hat{U}(t_2-t_0)$

Sens fizyczny operatora ewolucji.

Rozważmy bazę ortonormalną w p. Hilberta: $|\Phi_n\rangle$

Niech $|\varphi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\Phi_n\rangle$. Wtedy z r-nia $(*)$ mamy:

$$\langle \Phi_k | \varphi(t)\rangle = \langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \varphi(t_0)\rangle$$

Korzystając z zupełności bazy: $\sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = \hat{1}$

$$\sum_n c_n(t) \langle \Phi_k | \Phi_n\rangle = \sum_{k',n'} \langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \Phi_{k'}\rangle \langle \Phi_{k'} | \Phi_{n'}\rangle c_{n'}(t_0)$$

Czyli
$$c_k(t) = \sum_{k'} \langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \Phi_{k'}\rangle c_{k'}(t_0)$$

Widać zatem, że element macierzowy operatora ewolucji: $U_{kk'}(t-t_0) = \langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \Phi_{k'}\rangle$ określa amplitudę p-stwa że układ kwantowy, który w chwili t_0 znajdował się w stanie $|\Phi_{k'}\rangle$ znajdzie się w chwili t w stanie $|\Phi_k\rangle$.

Bo jeśli w chwili t_0: $|\varphi(t_0)\rangle = |\Phi_l\rangle$ tzn. $c_{k'}(t_0) = \delta_{k'l}$ to prawdopodobieństwo znalezienia układu w chwili t w stanie $|\Phi_k\rangle$ wynosi: $|c_k(t)|^2 = |\langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \Phi_l\rangle|^2$

Rozważmy teraz r-nie (✱) w reprezentacji położeniowej:

$$\langle \vec{r} \,|\, \varphi(t)\rangle = \langle \vec{r}\,|\, \hat{U}(t-t_0)\,|\,\varphi(t_0)\rangle = \int d^3r' \,\langle \vec{r}\,|\,\hat{U}(t-t_0)\,|\,\vec{r}\,'\rangle\langle \vec{r}\,'\,|\,\varphi(t_0)\rangle$$

Czyli $\quad \varphi(\bar{r}, t) = \int U(\bar{r}, \bar{r}', t-t_0)\, \varphi(\bar{r}', t_0)\, d^3r'$

gdzie oznaczyliśmy $\; U(\bar{r}, \bar{r}', t-t_0) = \langle \bar{r}\,|\,\hat{U}(t-t_0)\,|\,\bar{r}'\rangle$.

Zbadajmy strukturę funkcji $U(\bar{r}, \vec{r}\,', t-t_0)$, która określa amplitudę p-stwa znalezienia cząstki w chwili t w punkcie $\vec{r}$, jeśli w chwili t_0 znajdowała się w punkcie $\vec{r}\,'$.

$$\hat{U}(t-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(\hat{T}+\hat{V})}$$

gdzie $\quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad ; \quad \hat{V} = V(\bar{r})$

Operatory $\hat{T}$ i $\hat{V}$ nie komutują: $[\hat{T}, \hat{V}] \neq 0$ więc w ogólności:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(\hat{T}+\hat{V})} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{T}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{V}}$$

Rozważmy jednak: $\displaystyle \lim_{\tau\to 0} \hat{U}(\tau) = \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{T}+\hat{V})\tau}} \lim_{\tau\to 0} e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{T}+\hat{V})\tau} =$

$$= \lim_{\tau\to 0}\left(1 - \frac{i}{\hbar}(\hat{T}+\hat{V})\tau + O(\tau^2)\right) = \lim_{\tau\to 0} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}$$

Ale z własności op. $\hat{U}$ wynika że: $\displaystyle \hat{U}(t-t_0) = \lim_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty\\ N\tau = t-t_0}} \left[\hat{U}(\tau)\right]^N$

Czyli

$$\hat{U}(t-t_0) = \lim_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty\\ N\tau = t-t_0}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} \cdots\; e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}$$

Zatem

$$U(\bar{r}, \bar{r}', t-t_0) = \lim_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty\\ N\tau = t-t_0}} \int d^3r_1\, d^3r_2 \ldots d^3r_{N-1}\, \langle \vec{r}\,|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}\,|\, r_{N-1}\rangle\langle \bar{r}_{N-1}| \ldots |\bar{r}_{1}\rangle\langle \bar{r}_{1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}\,|\,\bar{r}'\rangle$$

Rozważmy element macierzowy:

$$\lim_{\tau\to 0} \langle \vec{r}_{i+1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}\,|\,\vec{r}_{i}\rangle = \lim_{\tau\to 0} \int d^3r \int d^3p\; \langle \vec{r}_{i+1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}\,|\,\bar{p}\rangle\langle \bar{p}\,|\,\vec{r}\rangle\langle \vec{r}\,|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}\,|\,\vec{r}_{i}\rangle$$

gdzie skorzystaliśmy z tego, że $\int d^3r\, |\bar{r}\rangle\langle\bar{r}| = \hat{1}$ i $\int d^3p\, |\bar{p}\rangle\langle\bar{p}| = \hat{1}$

Zauważmy, że

$$\hat{T}|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p}\rangle \quad i \quad \hat{V}|\vec{r}\rangle = V(\vec{r})|\vec{r}\rangle$$

czyli

$$\langle \vec{r}_{i+1}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau}|\vec{p}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\tau}\langle \vec{r}_{i+1}|\vec{p}\rangle$$

$$\langle \vec{r}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau}|\vec{r}_i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{r})\tau}\langle \vec{r}|\vec{r}_i\rangle$$

ale $\langle \vec{r}|\vec{r}_i\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$ i $\langle \vec{r}_i|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Zatem

$$\lim_{\tau\to 0}\langle \vec{r}_{i+1}|\hat{U}(\tau)|\vec{r}_i\rangle = \lim_{\tau\to 0}\int d^3r\int d^3p\, \langle \vec{r}_{i+1}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r}_i)\right)\tau} =$$

$$= \lim_{\tau\to 0}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p\, e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot(\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r}_i)\right)\tau} =$$

$$= \lim_{\tau\to 0}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i)-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}V(\vec{r}_i)\tau} =$$

$$\boxed{\int d^3p\,\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} p_i A_{ij} p_j + \sum_{i=1}^{3} p_i J_i} = (\det A)^{-1/2}\, e^{\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_i A^{-1}_{ij} J_j}}$$

$$= \lim_{\tau\to 0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i)^2}{2\tau} - V(\vec{r}_i)\tau\right)}$$

ale $\lim_{\tau\to 0}\frac{\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i}{\tau} = \vec{v}_i$

czyli

$$\lim_{\tau\to 0}\langle \vec{r}_{i+1}|\hat{U}(\tau)|\vec{r}_i\rangle = \lim_{\tau\to 0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m v_i^2}{2} - V(\vec{r}_i)\right)\tau}$$

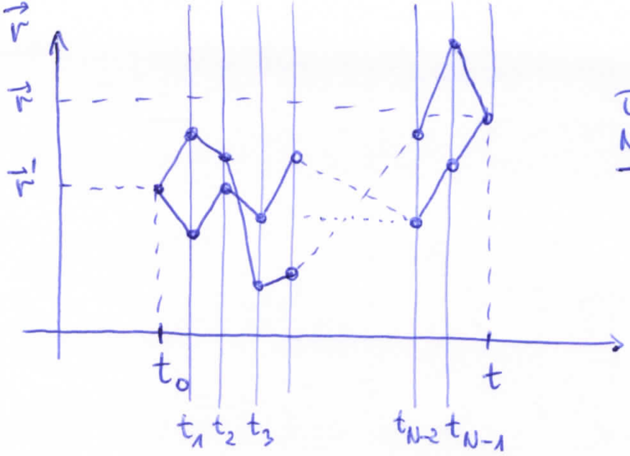
gdzie $\vec{v}_i = \vec{v}(t_i)$; $\vec{r}_i = \vec{r}(t_i)$; $t_i = i\tau$; $i = 1, 2, \ldots, N$

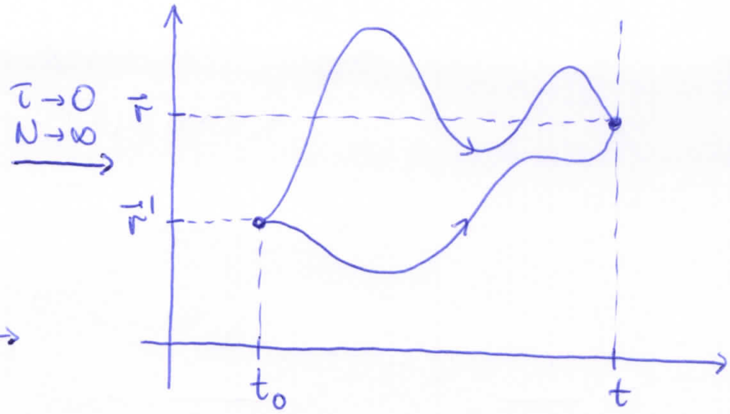
Zatem

$$\boxed{(*)\; U(\vec{r},\vec{r}', t-t_0) = \lim_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty\\ N\tau = t-t_0}}\prod_{j=1}^{N-1}\int\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3/2} d^3r_j\; e^{\frac{i}{\hbar}L(\vec{r}_j,\dot{\vec{r}}_j)\tau} \;;\; L(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = \frac{m}{2}(\dot{\vec{r}})^2 - V(\vec{r})}$$

f. Lagrange'a

Wzór (*) pozwala policzyć $U(\vec{r},\vec{r}', t-t_0)$ dla ustalonego potencjału $V(\vec{r})$.





Zatem możemy zapisać:

$$\boxed{\mathcal{U}(\vec{r},\vec{r}\,',t-t_0) = \int [D\vec{r}]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec{r},\dot{\vec{r}})dt}} \quad (\ast\ast)$$

gdzie przez $\int[D\vec{r}]$ oznaczyliśmy $\lim\limits_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty \\ N\tau\to t-t_0}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\, dt}\right)^{\frac{3N}{2}} \int d^3 r_1 \ldots d^3 r_{N-1}$

Zatem amplituda prawdopodobieństwa jest równa sumie po wszystkich trajektoriach łączących punkt $\vec{r}\,'$ z $\vec{r}$, przy czym wkład od każdej trajektorii jest proporcjonalny do $e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec{r},\dot{\vec{r}})dt}$ gdzie działanie $\int_{t_0}^{t} L(\vec{r},\dot{\vec{r}})dt$ jest liczone wzdłuż trajektorii.

Granica klasyczna: $\hbar \to 0$

Rozważmy postać wyrażenia $(\ast)$ lub $(\ast\ast)$ w granicy $\hbar\to 0$.

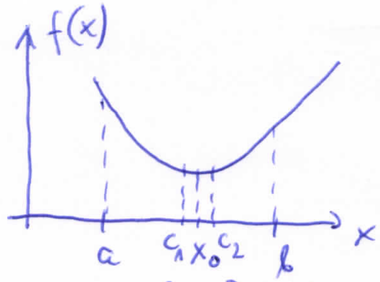
Wynik pomocniczy:

$$\lim_{\hbar\to 0} \int_a^b e^{i\frac{1}{\hbar}f(x)}dx = \sqrt{\hbar}\, A(x_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)} + O(\hbar)$$

gdzie $x_0 \in (a,b)$ i $f'(x_0)=0$ i $f''(x_0)\neq 0$; $A(x_0)$ - stała

Dowód

Niech



Podzielmy przedział (a,b) na sumę 3 przedziałów: $(a,c_1)\cup(c_1,c_2)\cup(c_2,b)$ takich że $x_0\in(c_1,c_2)$ oraz w przedziałach (a,c_1) i (c_2,b): $f'(x)\neq 0$

Rozważmy $\lim\limits_{\hbar\to 0}\int_a^{c_1} e^{\frac{i}{\hbar}f(x)}dx = \left| \begin{array}{l} y=f(x) \\ x=\tilde{f}(y) \text{ - istnieje f. odwrotna bo } f'(x)\neq 0 \\ dx = \tilde{f}'(y)dy\ ;\ \tilde{f}'(y)\neq 0 \text{ bo } f'(x)\neq 0. \end{array}\right| =$

$$= \lim_{\hbar\to 0} \int_{f(a)}^{f(c_1)} \tilde{f}'(y) e^{\frac{i}{\hbar}y} dy = \tilde{f}'(y)\frac{\hbar}{i} e^{\frac{i}{\hbar}y}\Big|_{f(a)}^{f(c_1)} - \frac{\hbar}{i}\int_{f(a)}^{f(c_1)} \tilde{f}''(y) e^{\frac{i}{\hbar}y} dy =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[\tilde{f}'(y) e^{\frac{i}{\hbar}y}\Big|_{f(a)}^{f(c_1)} - \int_{f(a)}^{f(c_1)} \tilde{f}''(y) e^{\frac{i}{\hbar}y} dy\right] = O(\hbar)$$

Analogicznie: $\int_{c_2}^{b} e^{\frac{i}{\hbar}f(x)} dx \xrightarrow{\hbar\to 0} O(\hbar)$

Rozważmy $\lim_{\hbar\to 0}\int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{\hbar}f(x)} dx = \left|\begin{array}{l}\text{jeśli } (c_1, c_2) \text{ jest} \\ \text{dostatecznie mały} \\ \text{to } f(x) \approx f(x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2\end{array}\right| =$

$$\approx \lim_{\hbar\to 0}\int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{\hbar}\left[f(x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2\right]} dx = \lim_{\hbar\to 0} e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2} dx$$

$$= \left|\begin{array}{l} y = x - x_0 \\ dy = dx\end{array}\right| = \lim_{\hbar\to 0} e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\int_{c_1-x_0}^{c_2-x_0} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}f''(x_0)y^2} dy = \left|\begin{array}{l}\text{Niech } c_1 \text{ i } c_2 \\ \text{będą takie że} \\ c_1 - x_0 = -\varepsilon = -(c_2-x_0);\ \varepsilon>0\end{array}\right| =$$

$$= \lim_{\hbar\to 0} e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}f''(x_0)y^2} dy = \lim_{\hbar\to 0} 2 e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\int_{0}^{\varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}f''(x_0)y^2} dy = \left|\begin{array}{l} z = \frac{1}{2\hbar}f''(x_0)y^2 \\ y = \sqrt{\frac{2\hbar z}{f''(x_0)}}\end{array}\right|$$

$$= \lim_{\hbar\to 0} 2 e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\int_{0}^{\frac{1}{2\hbar}f''(x_0)\varepsilon^2} e^{iz}\sqrt{\frac{2\hbar}{f''(x_0)}}\frac{1}{2\sqrt{z}} dz = \lim_{\hbar\to 0}\sqrt{\hbar}\, e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}\underbrace{2\int_0^\infty e^{iz}\frac{1}{\sqrt{2f''(x_0)z}} dz}_{A(x_0)}$$

Czyli dominujący wkład do całki $\int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}f(x)} dx$ w granicy $\hbar\to 0$ wnoszą otoczenia punktów $x_0 \in (a,b)$, dla których $f'(x_0) = 0$: $\lim_{\hbar\to 0}\int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}f(x)} dx \approx \sqrt{\hbar}\, A(x_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}f(x_0)}$

Rozważmy teraz

$$\lim_{\hbar\to 0} U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) = \lim_{\hbar\to 0}\lim_{\substack{\tau\to 0 \\ N\to\infty \\ N\tau = t-t_0}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3N/2}\prod_{j=1}^{N-1}\int d^3r_j\, e^{\frac{i}{\hbar}L(\vec{r}_j, \dot{\vec{r}}_j)\tau}$$

Rozważmy $\lim_{\hbar\to 0}\int d^3r_j\, e^{\frac{i}{\hbar}\left[m\frac{(\vec{r}_{j+1}-\vec{r}_j)^2}{2\tau} - V(\vec{r}_j)\tau + m\frac{(\vec{r}_j-\vec{r}_{j-1})^2}{2\tau}\right]} =$

$$\lim_{\hbar\to 0} e^{\frac{i}{\hbar}m\left(\frac{r_{j+1}^2}{2\tau}+\frac{r_{j-1}^2}{2\tau}\right)}\int d^3r_j\, e^{\frac{i}{\hbar}\left[m\left(\frac{2r_j^2}{2\tau} - 2\frac{\vec{r}_{j+1}\cdot\vec{r}_j}{2\tau} - 2\frac{\vec{r}_{j-1}\cdot\vec{r}_j}{2\tau}\right) - V(\vec{r}_j)\tau\right]}$$

Dominujący wkład to całki pochodzi od takich $\vec{r}_j$ dla których

$$\vec{\nabla}_j\left[\frac{m r_j^2}{\tau} - 2\frac{m}{2\tau}\left(\vec{r}_{j+1}\cdot\vec{r}_j + \vec{r}_{j-1}\cdot\vec{r}_j\right) - V(\vec{r}_j)\tau\right] = 0\ ; \quad \begin{cases}\vec{\nabla}_j = \left(\frac{\partial}{\partial x_j}, \frac{\partial}{\partial y_j}, \frac{\partial}{\partial z_j}\right) \\ \vec{r}_j = (x_j, y_j, z_j)\end{cases}$$

$$m\frac{2\vec{r}_j}{\tau} - \frac{m}{\tau}\left(\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_{j-1}\right) - \vec{\nabla}_j V\tau = 0$$

ale

$$\lim_{\tau\to 0} \frac{\vec r_{j+1} - 2\vec r_j + \vec r_{j-1}}{\tau^2} = \ddot{\vec r}_j$$

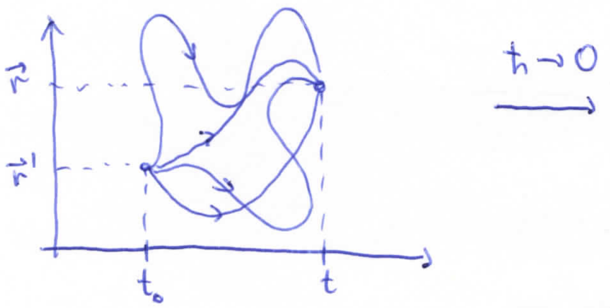
czyli mamy: $\left(-m\ddot{\vec r}_j - \vec\nabla_j V\right)\tau = 0$

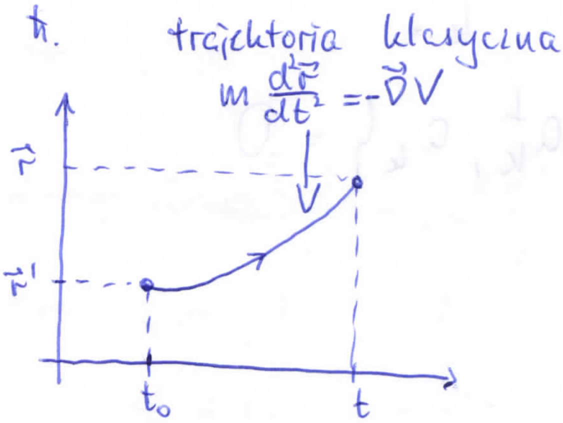
Zatem dominujący wkład do całki pochodzi od $\vec r_j$, dla którego spełnione jest klasyczne r-nie ruchu: $m\frac{d^2}{dt^2}\vec r_j = -\vec\nabla_j V$

Zatem w granicy klasycznej wkład do $U(\vec r,\vec r',t-t_0)$ pochodzi od trajektorii, dla której $\delta\int_{t_0}^{t} L\,dt = 0$ czyli dla której spełnione są r-nia Eulera-Lagrange'a.

$$U(\vec r,\vec r',t-t_0) \xrightarrow{\hbar\to 0} A e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec r_{cl},\dot{\vec r}_{cl})dt} \quad ; \quad \delta\int_{t_0}^{t} L(\vec r_{cl},\dot{\vec r}_{cl})dt = 0$$

gdzie $\vec r_{cl}$ i $\dot{\vec r}_{cl}$ oznaczają położenia i prędkości dla trajektorii klasycznej, A - stała niezależna od $\hbar$.





Podsumowanie

1° Rozwiązanie r-nia Schrödingera jest określone poprzez op. ewolucji $\hat U = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H(t-t_0)}$. W reprezentacji położeniowej $U(\vec r,\vec r',t-t_0) = \langle\vec r|\hat U(t-t_0)|\vec r'\rangle$ wyznacza f. falową w chwili czasu t na podstawie znajomości f. falowej w chwili t_0: $\varphi(\vec r,t) = \int d^3r'\, U(\vec r,\vec r',t-t_0)\,\varphi(\vec r',t_0)$

2° $$U(\vec r,\vec r',t-t_0) = \lim_{\substack{\tau\to 0\\ N\to\infty\\ N\tau = t-t_0}} \prod_{j=1}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3/2}\int d^3r_j\, e^{\frac{i}{\hbar}L(\vec r_j,\dot{\vec r}_j)\tau} \quad ; \quad L(\vec r,\dot{\vec r}) = \frac{m}{2}(\dot{\vec r})^2 - V(\vec r)$$

gdzie L jest funkcją Lagrange'a cząstki w potencjale $V(\vec r)$.

3° W granicy klasycznej: $(\hbar\to 0)$: $U(\vec r,\vec r',t-t_0) \sim e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec r_{cl},\dot{\vec r}_{cl})dt}$

gdzie $\vec r_{cl}(t)$ jest trajektorią klasyczną zdefiniowaną warunkiem: $\delta\int_{t_0}^{t} L(\vec r,\dot{\vec r})dt = 0$. Można zatem zinterpretować wyrażenie 2° jako sumę po wszystkich trajektoriach: $U(\vec r,\vec r',t-t_0) = \int[D\vec r]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\vec r,\dot{\vec r})dt}$

4° Granica klasyczna ($\hbar \to 0$) stosuje się wtedy jeśli zmiany działania $\int_{t_0}^{t} L(\bar{r}, \dot{\bar{r}})\,dt$ liczone wzdłuż sąsiednich trajektorii są duże w porównaniu z $\hbar$. Przez sąsiednie trajektorie rozumiem trajektorie odróżnialne od siebie. Odróżnialność jest determinowana precyzją urządzeń pomiarowych lub warunkami w jakich znajduje się badany układ. Np. trajektorie elektronu odległe od siebie o 1 Å są odróżnialne w przypadku ruchu elektronów w atomie, natomiast nieodróżnialne w przypadku ruchu elektronów w lampie elektronowej. Stąd wynika, że granica klasyczna oznacza duże masy lub duże wymiary układów.

5° Przybliżenie klasyczne mechaniki kwantowej jest analogiczne do przybliżenia optyki falowej przez optykę geometryczną.

mechanika kw.:	f. falowa (r. Schrödingera)	→ trajektorie cząstek (zas. Hamiltona)	: mechanika klasyczna
optyka falowa:	fala e.m. (r. Maxwella)	→ promienie (zas. Fermata)	: optyka geom.

6° Dwie metody kwantowania układu klasycznego:

<u>Kwantowanie kanoniczne</u>

1° Definiujemy funkcję Hamiltona: $H(\vec{q}, \vec{p})$

2° Zastępujemy współrzędne kanonicznie sprzężone przez operatory

$$\vec{q} \to \hat{\vec{q}}$$
$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\vec{D}_q$$

3° Konstruujemy Hamiltonian $\hat{H} = H(\hat{\vec{q}}, \frac{\hbar}{i}\vec{D}_q)$ i r-nie S.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{q}, t) = \hat{H}\varphi(\vec{q}, t)$$

<u>Kwantowanie metodą całek po trajektoriach</u>

1° Definiujemy f. Lagrange'a $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$

2° Obliczamy $U(\vec{q}, \vec{q}', t - t_0)$

3° Funkcje falowe obliczamy z r-nia

$$\varphi(\vec{q}, t) = \int d^3q'\, U(\vec{q}, \vec{q}', t - t_0)\,\varphi(\vec{q}', t_0)$$

Metoda WKB (Wentzel - Kramers - Brillouin)

Rozwiążmy r-nie Schrödingera:

$$(*)\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar r,t) = \hat H\,\psi(\bar r,t)$$

gdzie $\hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar r)$

Dla ustalonego $\bar r$ i t $\psi(\bar r,t)$ jest liczbą zespoloną zatem możemy napisać: $\psi(\bar r,t) = A(\bar r,t)\,e^{\frac{i}{\hbar}S(\bar r,t)}$ gdzie $A(\bar r,t)$ i $S(\bar r,t)$ są funkcjami rzeczywistymi.

Podstawiając do $(*)$ otrzymujemy:

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} + i\hbar A e^{\frac{i}{\hbar}S}\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla\cdot\left(\vec\nabla A\,e^{\frac{i}{\hbar}S} + A e^{\frac{i}{\hbar}S}\frac{i}{\hbar}\vec\nabla S\right) + V(\bar r)Ae^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}S} - Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2 A\,e^{\frac{i}{\hbar}S} + 2\frac{i}{\hbar}\vec\nabla A\cdot\vec\nabla S\,e^{\frac{i}{\hbar}S} + Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\left(\frac{i}{\hbar}\vec\nabla S\right)^2 + Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\right) + V(\bar r)Ae^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Mnożąc obie strony przez $\psi^*(\bar r,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}S}$ otrzymujemy:

$$i\hbar A\frac{\partial A}{\partial t} - A^2\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(A\nabla^2 A + 2\frac{i}{\hbar}A\vec\nabla A\cdot\vec\nabla S - \frac{A^2}{\hbar^2}(\vec\nabla S)^2 + \frac{i}{\hbar}A^2\nabla^2 S\right) + V(\bar r)A^2$$

Rozważmy oddzielnie część rzeczywistą i urojoną tego r-nia:

1° Część rzeczywista: $-A^2\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}A\nabla^2 A + \frac{1}{2m}A^2(\vec\nabla S)^2 + V(\bar r)A^2$

2° Część urojona: $\hbar A\frac{\partial A}{\partial t} = -\left(+\frac{\hbar}{m}A\vec\nabla A\cdot\vec\nabla S + \frac{\hbar}{2m}A^2\nabla^2 S\right)$

Ad 2°

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}A^2 = \frac{-1}{2m}\left[2A\vec\nabla A\cdot\vec\nabla S + A^2\nabla^2 S\right] =$$

$$= -\vec\nabla\cdot\frac{1}{2m}\left[A^2\vec\nabla S\right] \quad \text{czyli} \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t}A^2 = -\vec\nabla\cdot\left[\frac{A^2\vec\nabla S}{m}\right]}$$

ale $|\psi(\vec{r},t)|^2 = A^2$

oraz $\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = \frac{\hbar}{2mi}\left(Ae^{-\frac{i}{\hbar}S}\vec{\nabla}\left(Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\right) - \right.$

$\left. - Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\vec{\nabla}\left(Ae^{-\frac{i}{\hbar}S}\right)\right) = \frac{\hbar}{2mi}\left[A\vec{\nabla}A + 2A^2\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S - A\vec{\nabla}A\right] = \frac{\hbar}{mi}\frac{i}{\hbar}A^2\vec{\nabla}S$

Czyli r-nie 2° jest po prostu r-niem ciągłości:

$$\boxed{\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\circ\vec{j}} \quad ; \quad \varrho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$$

Ad 1°

$$-A^2\frac{\partial S}{\partial t} = A^2\left[\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V(\vec{r})\right] - \frac{\hbar^2}{2m}A\nabla^2 A$$

<u>Rozważmy granicę klasyczną: $\hbar \to 0$</u>

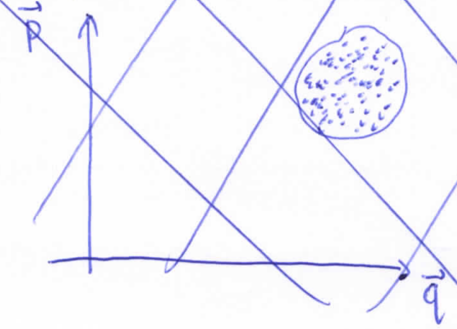
Wtedy otrzymujemy:

$$\begin{cases} -\dfrac{\partial S}{\partial t} = \dfrac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V(\vec{r}) \\ \text{oraz} \\ \dfrac{\partial}{\partial t}A^2 + \vec{\nabla}\left[A^2\dfrac{\vec{\nabla}S}{m}\right] = 0 \end{cases}$$

gdzie $A = A(\vec{r},t)$, $S = S(\vec{r},t)$

<u>Dygresja</u>

~~Rozważmy zbiór punktów (cząstek) w p. fazowej, które w pewnej chwili czasu t zajmują pewien obszar. Każdy punkt ewoluuje niezależnie zgodnie z r-niami Hamiltona:~~

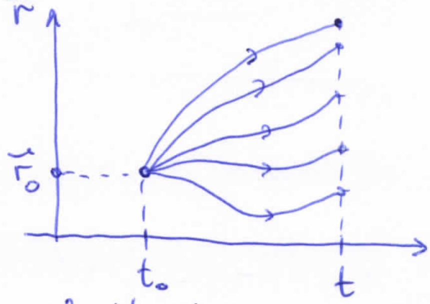


$$\begin{cases} \dot{\vec{q}} = +\vec{\nabla}_p H(\bar{q},\bar{p}) \\ \dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}_q H(\bar{q},\bar{p}) \end{cases}$$

Dygresja

Rozważmy cząstkę klasyczną poruszającą się od punktu $\vec{r}_0 = \vec{r}(t_0)$ do punktu $\vec{r}_1$ [redacted] $= \vec{r}(t_1)$ w przedziale czasu $t_1 - t_0$. Trajektoria tego ruchu jest wyznaczona przez warunek stacjonarności działania: $\underline{\delta S = 0}$, przy warunkach brzegowych: $\delta\vec{r}_0 = \delta\vec{r}_1 = 0$ (gdzie $S = \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})\,dt$)

Rozważmy teraz zbiór wielu trajektorii, po których poruszać się będzie cząstka w przedziale czasu $t - t_0$, startując z punktu $\vec{r}_0$ z różnymi prędkościami.



Dla takich trajektorii możemy zdefiniować działanie jako funkcję punktu końcowego, do którego dociera cząstka w chwili t:

$$(*)\quad S(\vec{r}, t) = \int_{t_0}^{t} L(\vec{r}\,', \dot{\vec{r}}\,')\,dt' \quad ; \quad \vec{r} = \vec{r}(t)$$

Obliczmy zmianę S dla sąsiednich trajektorii:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t} \delta L\,dt' = \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}\,'} \cdot \delta\vec{r}\,' + \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}\,'} \cdot \delta\dot{\vec{r}}\,' \right) dt' = \left| \begin{aligned} \delta\dot{\vec{r}}\,' &= \delta \frac{d\vec{r}\,'}{dt} = \\ &= \frac{d}{dt}\delta\vec{r}\,' \end{aligned} \right| =$$

$$= \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}\,'} \cdot \delta\vec{r}\,' + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}\,'} \cdot \delta\vec{r}\,' \right) - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}\,'} \cdot \delta\vec{r}\,' \right) dt' =$$

$$= \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}\,'} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} \right) \cdot \delta\vec{r}\,'\,dt' + \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}\,'} \cdot \delta\vec{r}\,' \Big|_{t_0}^{t} = \vec{p}\,' \cdot \delta\vec{r}\,' \Big|_{t_0}^{t}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że dla każdej trajektorii klasycznej spełnione są r-nia Lagrange'a: $\frac{\partial L}{\partial \vec{r}\,'} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}\,'}\right) = 0$

Ponieważ wszystkie trajektorie zaczynają się w $\vec{r}_0$ czyli $\delta\vec{r}\,'(t_0) = \delta\vec{r}_0 = 0$

Stąd $\quad \delta S = \vec{p} \cdot \delta\vec{r} \quad$ gdzie $\vec{p} = \vec{p}(t)$

czyli $\quad \boxed{\frac{\partial S}{\partial \vec{r}} = \vec{p}}$

Zauważmy ponadto, że z r-nia (*) mamy:

$$\frac{dS}{dt} = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$$

Czyli $\frac{dS}{dt} = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\partial S}{\partial \vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} - H\left(\vec{r}, \frac{\partial S}{\partial \vec{r}}\right)$

ale $S = S(\vec{r}, t)$ czyli $\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial \vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} + \frac{\partial S}{\partial t}$

Porównując obydwa r-nia otrzymujemy: $\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(\vec{r}, \frac{\partial S}{\partial \vec{r}}\right)$,

Zatem dla f. Hamiltona postaci: $H(\bar{r}, \bar{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\bar{r})$

otrzymujemy: $\boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{r})}$ - r-nie Hamiltona-Jacobiego

gdzie $\vec{\nabla} S(\bar{r}, t) = \vec{p}$

Zatem w granicy klasycznej funkcję falową można skonstruować z rozwiązania r-nia H-J (+ r-nie ciągłości z°). $S(\bar{r}, t)$, która jest (dla ustalonego $\bar{r}$ i t) fazą funkcji falowej ma z klasycznego punktu widzenia tę własność, że $\vec{\nabla} S = \vec{p}$ czyli powierzchnia stałej fazy jest prostopadła do trajektorii klasycznych (por. z optyką falową i geometryczną).

<u>Koniec dygresji</u>

W granicy klasycznej r-nia:

$$(*)\begin{cases} -\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{r}) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\left(\rho(\bar{r}, t)\, \frac{\vec{\nabla} S}{m}\right) \end{cases}$$

gdzie $\bar{p}(\bar{r}, t) = \vec{\nabla} S$

opisują ruch nieoddziałujących punktów materialnych o masie m, o rozkładzie przestrzennym $\rho(\bar{r}, t)$ i rozkładzie pędu $\bar{p}(\bar{r}, t)$, gdzie każdy z punktów materialnych porusza się zgodnie z r-niami Hamiltona:

$$\begin{cases} \dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}_r H \\ \dot{\vec{r}} = \vec{\nabla}_p H \end{cases} ; \quad H = H(\bar{r}, \bar{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\bar{r})$$

R-nia (*) stanowią pierwsze przybliżenie funkcji falowej i noszą nazwę przybliżenia WKB.
Można skonstruować ciąg kolejnych przybliżeń zwany metodą WKB

Niech $\psi(\bar{r},t) = A(\bar{r},t)\, e^{\frac{i}{\hbar} S(\bar{r},t)}$; $A, S \in \mathbb{R}$

Przedstawienie to nie jest jednoznaczne, bo $A(\bar{r},t) \to -A(\bar{r},t)$ jest równoważne $S(\bar{r},t) \to S(\bar{r},t) + \pi\hbar(2n+1)$; $n = 0, \pm 1, \ldots$

Przyjmijmy że $A(\bar{r},t) \geq 0$. Wtedy

$$\psi(\bar{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}\left(S(\bar{r},t) + \frac{\hbar}{i}\ln A(\bar{r},t)\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\bar{r},t)}$$

gdzie $\sigma(\bar{r},t) \overset{\text{ozn.}}{=} S(\bar{r},t) - i\hbar \ln A(\bar{r},t)$

Podstawiając $\psi(\bar{r},t)$ do r-nia Schrödingera $\left(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right)$:

$$\frac{i}{\hbar} i\hbar \frac{\partial\sigma}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}\sigma\, e^{\frac{i}{\hbar}\sigma}\right) + V(\bar{r})\, e^{\frac{i}{\hbar}\sigma}$$

$$-\frac{\partial\sigma}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{i}{\hbar}\nabla^2\sigma + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2(\vec{\nabla}\sigma)^2\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} + V(\bar{r})\, e^{\frac{i}{\hbar}\sigma}$$

$$(**)\quad \boxed{\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}\sigma)^2 + V(\bar{r}) + \frac{\partial\sigma}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\sigma}$$

Zakładamy, że prawa strona stanowi niewielkie zaburzenie i szukamy rozwiązania postaci: (***) $\sigma(\bar{r},t) = \sigma_0(\bar{r},t) + \hbar\sigma_1(\bar{r},t) + \ldots = \sum_{k=0}^{\infty}\hbar^k\sigma_k$

Metoda WKB polega na wstawieniu (***) do (**) i rozwiązywaniu oddzielnie r-ń dla członów przy ustalonych potęgach $\hbar$.

$$\frac{1}{2m}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\hbar^k\vec{\nabla}\sigma_k\right)^2 + V(\bar{r}) + \sum_{k=0}^{\infty}\hbar^k\frac{\partial\sigma_k}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\sum_{k=0}^{\infty}\hbar^k\nabla^2\sigma_k$$

$$\hbar^0 : \quad \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}\sigma_0)^2 + V(\bar{r}) + \frac{\partial\sigma_0}{\partial t} = 0 \qquad (a)$$

$$\hbar^1 : \quad \frac{1}{m}\vec{\nabla}\sigma_0\cdot\vec{\nabla}\sigma_1 + \frac{\partial\sigma_1}{\partial t} = \frac{i}{2m}\nabla^2\sigma_0 \qquad (b)$$

$$\vdots$$

Nietrudno sprawdzić, że r-nia (a) i (b) są równoważne r-niom (*) jeśli utożsamimy: $\sigma_0 = S$ i $\sigma_1 = -i\ln A$

Przypadek stanów stacjonarnych:

Jeśli $\psi(\bar{r},t) = \varphi_E(\bar{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ to oznacza, że

$A(\bar{r},t) = A(\bar{r})$ oraz $S(\bar{r},t) = S(\bar{r}) - Et$

Czyli $\psi(\bar{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\sigma(\bar{r}) - Et)}$; $\sigma(\bar{r}) = S(\bar{r}) - i\hbar \ln A(\bar{r})$

Wtedy r-nie (**) ma postać:

$$(**') \quad \boxed{\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}\sigma)^2 + [V(\bar{r}) - E] = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\sigma}$$

a ciąg przybliżeń metody WKB ma postać:

$$\hbar^0 : \quad \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}\sigma_0)^2 + [V(\bar{r}) - E] = 0 \qquad (a')$$

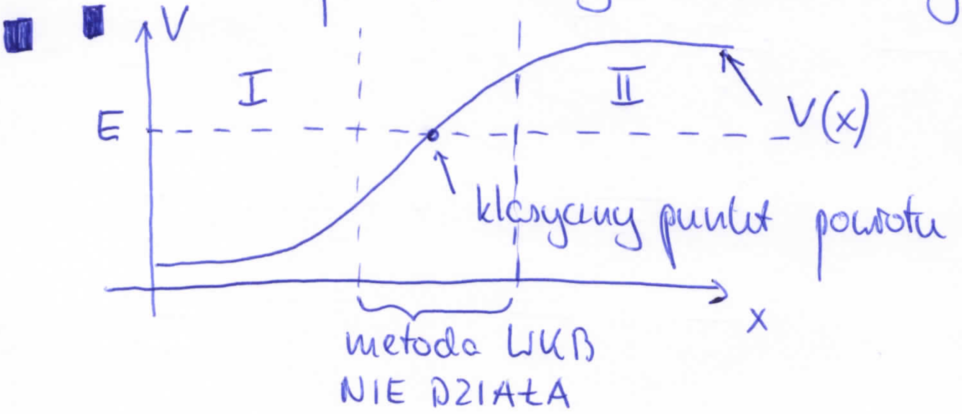
$$\hbar^1 : \quad \frac{1}{m}\vec{\nabla}\sigma_0 \cdot \vec{\nabla}\sigma_1 = \frac{i}{2m}\nabla^2\sigma_0 \qquad (b')$$

$$\vdots$$

Warunki stosowalności metody WKB:

Zauważmy, że z r-nia (**') wynika, że człon $\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\sigma$ można traktować jako małe zaburzenie gdy $\frac{\hbar}{2m}|\nabla^2\sigma| \ll |E - V(\bar{r})|$ lub równoważnie $\frac{\hbar}{2m}|\nabla^2\sigma| \ll \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}\sigma)^2$

Pierwszy z tych warunków oznacza, że metodę WKB można stosować w pewnej odległości od klasycznego punktu powrotu.



Równoważnie z drugiego warunku, podstawiając $\sigma \approx \sigma_0 = S$ otrzymujemy $\frac{\hbar}{2m}|\nabla^2 S| \ll \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2$, ale $\vec{p} = \vec{\nabla}S$

zatem $(*)\ \hbar\left|\vec{\nabla}\cdot\vec{p}(\vec{r})\right| \ll \left|\vec{p}(\vec{r})\right|^2$

Oznacza to, że zmiany pędu muszą być niewielkie w porównaniu z wartością pędu. Tymczasem w klasycznym punkcie powrotu $\vec{p}(\vec{r})=0$ (patrz r-nie (a') przy $V(\vec{r})=E$). Zatem $(*)$ nie jest spełnione.

Przykład

Rozważmy przypadek jednowymiarowy: $\psi(x,t)=\varphi_E(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)$$

Niech $V(x)$ i E wyglądają jak na powyższym rysunku. Znajdziemy przybliżenie WKB dla funkcji $\varphi_E(x)$ w obszarze I $(E>V(x))$ i obszarze II ($E<V(x)$ - obszar niedostępny klasycznie).

Obszar I: z r-nia (a') mamy $\frac{1}{2m}\left(\frac{d\sigma_0}{dx}\right)^2-(E-V(x))=0$

Czyli $\frac{d\sigma_0}{dx}=\pm\sqrt{2m(E-V(x))}$

$$\sigma_0(x)=\pm\int_a^x\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx' \quad ;\ a\text{ - dowolna stała}$$

z r-nia (b'): $\frac{1}{m}\frac{d\sigma_0}{dx}\frac{d\sigma_1}{dx}=\frac{i}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\sigma_0$

$$\pm\sqrt{2m(E-V(x))}\,\frac{d\sigma_1}{dx}=\pm\frac{i}{2}\frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-V(x))}$$

$$\frac{d\sigma_1}{dx}=\frac{i}{2}\,\frac{\frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-V(x))}}{\sqrt{2m(E-V(x))}}=\frac{i}{2}\frac{d}{dx}\ln\left[\sqrt{2m(E-V(x))}\right]$$

$$\sigma_1(x)=\frac{i}{2}\ln\left[\sqrt{2m(E-V(x))}\right]+\text{stała dowolna}$$

Zatem

$$\varphi_E(x)\overset{WKB}{\approx}e^{\frac{i}{\hbar}\left[\pm\int_a^x\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx'+\frac{i}{2}\hbar\ln\left[\sqrt{2m(E-V(x))}\right]+\text{stała dowolna}\right]}$$

$$\varphi_E(x)\overset{WKB}{\approx}\frac{\alpha}{\sqrt[4]{2m(E-V(x))}}\,e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_a^x\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx'} \quad ;\ a,\alpha\text{ - stałe}$$

Zauważmy, że w mechanice klasycznej $\sqrt{2m(E-V(x))} = p(x) = \hbar k(x)$

Stąd (I) $\varphi_E(x) \overset{WKB}{\approx} \frac{\alpha}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i\int_a^x k(x')dx'}$

stała α jest wyznaczona przez warunek unormowania $\varphi_E(x)$.

Zauważmy, że $|\varphi_E(x)|^2 \sim \frac{1}{p(x)}$

Obszar II: Z r-nia (a') mamy $\frac{1}{2m}\left(\frac{d\sigma_0}{dx}\right)^2 + (V(x)-E) = 0$

Czyli $\frac{d\sigma_0}{dx} = \pm i\sqrt{2m(V(x)-E)}$

$\sigma_0(x) = \pm i \int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)}\,dx'$; b - stała dowolna

Z r-nia (b'): $\pm\frac{1}{m} i\sqrt{2m(V(x)-E)}\frac{d\sigma_1}{dx} = \frac{i}{2m}\frac{d}{dx}\left[\pm i\sqrt{2m(V(x)-E)}\right]$

$$\frac{d\sigma_1}{dx} = \frac{i}{2}\frac{\frac{d}{dx}\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\sqrt{2m(V(x)-E)}} = \frac{d}{dx}\left(\frac{i}{2}\ln\left[\sqrt{2m(V(x)-E)}\right]\right)$$

$$\sigma_1(x) = \frac{i}{4}\ln\left[2m(V(x)-E)\right] + \text{stała dowolna}$$

Zatem

$$\varphi_E(x) \overset{WKB}{\approx} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\pm i\int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)}\,dx' + \frac{i\hbar}{4}\ln\left[2m(V(x)-E)\right] + \text{stała dowolna}\right]}$$

Oznaczmy $\varkappa(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V(x)-E)}$ - analogia do $k(x)$

Wtedy

(II) $\varphi_E(x) \overset{WKB}{\approx} \frac{\beta}{\sqrt{\varkappa(x)}} e^{\pm\int_b^x \varkappa(x')dx'}$; b, β - stałe

Zatem rozwiązanie w obszarze I opisuje funkcję oscylującą w przestrzeni. Rozwiązanie w obszarze II opisuje funkcję zanikającą eksponencjalnie (gdy odrzucimy rozw. z "+" na podstawie warunku brzegowego $\lim_{x\to+\infty}\varphi_E(x) = 0$). Zauważmy, że szybkość oscylacji funkcji I i zanikania funkcji II zależy od różnicy $\sqrt{|E-V(x)|}$. Aby otrzymać pełne rozwiązanie zawierające obszar wokół punktu powrotu należy "zszyć" rozwiązania I i II.

1° Równanie Schrödingera i transformacja Galileusza

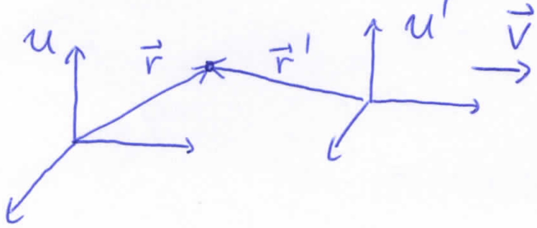
Zgodnie z zasadą względności r-nie Schrödingera powinno mieć taką samą postać we wszystkich inercjalnych układach odniesienia. Innymi słowy powinno być niezmiennicze ze względu na transformację Galileusza.
Oznacza to, że jeśli w pewnym układzie inercjalnym U zachodzi:

$$(*)\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(\bar{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r},t)\right]\varphi(\bar{r},t)$$

to w układzie U' również zachodzi:

$$(**)\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t'}\varphi'(\bar{r}',t')=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2+\tilde{V}(\bar{r}',t')\right]\varphi'(\bar{r}',t')$$

gdzie $\tilde{V}$ jest potencjałem V widzianym z układu U', tzn. $\tilde{V}(\bar{r}',t')=V(\vec{r}\,'+\vec{V}t',t')$ przy czym $(\bar{r},t)$ i $(\bar{r}',t')$ są związane transformacją Galileusza: (G) $\begin{cases}\vec{r}\,'=\vec{r}-\vec{V}t\\ t'=t\end{cases}$



φ' jest funkcją falową widzianą z układu U'.
Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie nie może zależeć od układu odniesienia zatem $|\varphi(\bar{r},t)|^2=|\varphi'(\bar{r}',t')|^2$
Oznacza to, że φ i φ' mogą się różnić co najwyżej fazą:

$$\varphi'(\bar{r}',t')=e^{i\alpha(\bar{r},t)}\varphi(\bar{r},t)\quad;\ \alpha(\bar{r},t)\in\mathbb{R}$$

Ponadto ponieważ $\vec{p}\,'=\vec{p}-m\vec{V}$ więc $\langle\hat{\vec{p}}\rangle_{U'}=\langle\hat{\vec{p}}\rangle_U-m\vec{V}$
gdzie $\langle\hat{\vec{p}}\rangle_{U'}=\int d^3r'\,\varphi'^*(\bar{r}',t')\,\hat{\vec{p}}\,\varphi'(\bar{r}',t')$ – wart. oczekiwana mierzona w U'
$\langle\hat{\vec{p}}\rangle_U=\int d^3r\,\varphi^*(\bar{r},t)\,\hat{\vec{p}}\,\varphi(\bar{r},t)$ – wart. oczekiwana mierzona w U
stąd mamy:

$$\int d^3r'\,\varphi'^*(\vec{r}\,',t')\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}'\varphi'(\vec{r}\,',t')=\left|\begin{matrix}\vec{\nabla}'=\vec{\nabla}\\ d^3r'=d^3r\end{matrix}\right|=\int d^3r\, e^{-i\alpha}\varphi^*\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}(e^{i\alpha}\varphi)=$$

$$= \int d^3r\, e^{-i\alpha}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{i}\, i\vec{\nabla}\alpha\, e^{i\alpha}\varphi + \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\varphi\, e^{i\alpha}\right) =$$

$$= \int d^3r \left(\hbar\vec{\nabla}\alpha\, |\varphi|^2 + \varphi^*\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\varphi\right)$$

ale $\int d^3r\, \varphi^*(\bar{r},t)\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\varphi(\bar{r},t) = \langle\hat{\vec{p}}\rangle_u$

Zatem $\int d^3r\, \hbar\vec{\nabla}\alpha\, |\varphi(\bar{r},t)|^2 = -m\vec{V}$ oraz $\int d^3r\, |\varphi(\bar{r},t)|^2 = 1$

Czyli $\alpha(\bar{r},t) = -\frac{1}{\hbar}m\vec{V}\cdot\vec{r} + \tilde{\alpha}(t)$ gdzie $\tilde{\alpha}(t)$ jest tylko funkcją t.

~~Funkcję $\tilde{\alpha}(t)$ możemy obliczyć rozważając ruch cząstki~~ swobodnej ~~o ustalonej energii. Jeśli w układzie U energia wynosi E, to w ukł. U' energia cząstki wynosi~~

Funkcję $\tilde{\alpha}(t)$ możemy wyznaczyć rozważając ruch cząstki swobodnej. Jeśli w układzie U cząstka ma pęd $\vec{p}$ i energię $E = \frac{p^2}{2m}$, tzn. jest opisywana f. falową $\varphi(\bar{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - \frac{p^2}{2m}t)}$

to w układzie U' funkcja falowa cząstki powinna być postaci:

$$\varphi'(\bar{r}',t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}'\cdot\bar{r}' - \frac{p'^2}{2m}t')}$$

ale ponieważ: $\begin{cases} \bar{p}' = \bar{p} - m\vec{V} \\ \bar{r}' = \bar{r} - \bar{V}t \\ t' = t \end{cases}$

zatem

$$\varphi'(\bar{r}',t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[(\bar{p}-m\bar{V})\cdot(\bar{r}-\bar{V}t) - \frac{(\bar{p}-m\bar{V})^2}{2m}t\right]} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\bar{p}\cdot\bar{r} - m\bar{V}\cdot\bar{r} - \bar{p}\cdot\bar{V}t + mV^2t - \frac{p^2}{2m} + \bar{p}\cdot\bar{V}t - \frac{mV^2}{2}t\right]} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}m\bar{V}\cdot\bar{r} + \frac{i}{\hbar}m\frac{V^2}{2}t}\, \varphi(\bar{r},t)$$

czyli $\tilde{\alpha}(t) = \frac{1}{\hbar}\frac{mV^2}{2}t$

<u>Podsumowując:</u>

Jeśli w układzie U ruch cząstki opisywany jest funkcją falową $\varphi(\bar{r},t)$, to w układzie U': (***) $\varphi'(\bar{r}',t') = e^{\frac{i}{\hbar}\left[-m\bar{V}\cdot\bar{r} + \frac{mV^2}{2}t\right]}\varphi(\bar{r},t)$.

Oczywiście oba układy są inercjalne i transformacja Galileusza pomiędzy nimi dana jest r-niami (G).

Sprawdzimy teraz czy r-nie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji Galileusza, tzn. czy $\varphi'(\bar r', t')$ spełnia (**).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} e^{\frac{i}{\hbar}[-m\bar V\cdot \bar r + \frac{mV^2}{2}t]}\varphi(\bar r, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + \tilde V(\bar r', t')\right] e^{\frac{i}{\hbar}[-m\bar V\cdot\bar r + \frac{mV^2}{2}t]}\varphi(\bar r, t)$$

ale $\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \bar r}\frac{\partial \bar r}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar V\cdot\vec\nabla$

oraz $\vec\nabla' = \vec\nabla$ i $\tilde V(\bar r', t') = V(\bar r' + \bar V t', t') = V(\bar r, t)$

Zatem

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec V\cdot\vec\nabla\right) e^{\frac{i}{\hbar}[-m\vec V\cdot \bar r + \frac{mV^2}{2}t]}\varphi(\bar r, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar r, t)\right] e^{i\alpha}\varphi(\bar r, t)$$

$$i\hbar\left[\frac{i}{\hbar}\frac{mV^2}{2}\varphi - \frac{i}{\hbar}mV^2\varphi + \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \vec V\cdot\vec\nabla\varphi\right] e^{\frac{i}{\hbar}[-m\vec V\cdot\bar r + \frac{mV^2}{2}t]} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\vec\nabla\cdot\left(\left(-\frac{i}{\hbar}m\vec V\right)\varphi e^{i\alpha} + \vec\nabla\varphi\, e^{i\alpha}\right)\right] + V(\bar r, t)\, e^{i\alpha}\varphi(\bar r, t)$$

$$\left(-\frac{mV^2}{2}\varphi + mV^2\varphi + i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} + i\hbar\vec V\cdot\vec\nabla\varphi\right)e^{i\alpha} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-2\frac{i}{\hbar}m\vec V\cdot\vec\nabla\varphi + \left(-\frac{i}{\hbar}m\vec V\right)^2\varphi + \nabla^2\varphi\right]e^{i\alpha} + V(\bar r, t)\, e^{i\alpha}\varphi(\bar r, t)$$

$$\cancel{\frac{mV^2}{2}}\varphi + i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \cancel{i\hbar\vec V\cdot\vec\nabla\varphi} = \cancel{i\hbar\vec V\cdot\vec\nabla\varphi} + \cancel{\frac{mV^2}{2}}\varphi - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V(\bar r, t)\varphi$$

Czyli $\quad i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V(\bar r, t)\varphi$

Ale to jest r-nie (*) spełnione w układzie U.

Zatem r-nie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji Galileusza przy czym funkcja falowa transformuje się zgodnie ze wzorem (***)

2° Transformacja Lorentza

Oznaczenia:

Niech $\vec x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ gdzie $x^0 = ct$; c - prędkość światła.
$\bar r = (x^1, x^2, x^3)$

Transformacja Lorentza określa ~~związek współrzędnych x^μ~~ związek pomiędzy $\vec x^\mu$ i $\vec x^{\mu'}$ w dwóch inercjalnych układach odniesienia U i U' poruszających się względem siebie z prędkością $\vec V$. Jeśli $|\vec V| \ll c$ to transformacja Lorentza przechodzi w transformację Galileusza (G).

Niezmiennikiem transformacji Lorentza jest wielkość: $(ct)^2 - \bar{r}\cdot\bar{r}$

To znaczy $(ct)^2 - \bar{r}\cdot\bar{r} = (ct')^2 - \bar{r}'\cdot\bar{r}'$

Dlatego wygodnie jest wprowadzić dwa typy wektorów w czterowymiarowej przestrzeni:

$\vec{x}^\mu = (ct, \vec{r})$ - wektor kontrawariantny

$\vec{x}_\mu = (ct, -\vec{r})$ - wektor kowariantny

Wtedy bowiem $\vec{x}^\mu \cdot \vec{x}_\mu = \sum\limits_{\mu=0}^{3} x^\mu x_\mu = (ct)^2 - \bar{r}\cdot\vec{r}$ jest niezmiennikiem

Oznaczmy macierz transformacji Lorentza przez L, tzn:

$\vec{x}^{\mu\prime} = L\vec{x}^\mu$

czyli $\boxed{x^{\mu\prime} = \sum\limits_{\nu=0}^{3} L_{\mu\nu} x^\nu}$ (*)

Macierz transformacji Lorentza jest macierzą 4×4 zależną od prędkości względnej $\vec{V}$ układów inercjalnych U i U'.

Macierz L jest nieosobliwa i ma wyznacznik równy ±1.

Zbadajmy własności transformacyjne $\vec{x}_\mu$. Przypuśćmy, że

$\vec{x}'_\mu = \tilde{L}\vec{x}_\mu$ czyli $x'_\mu = \sum\limits_{\nu=0}^{3} \tilde{L}_{\mu\nu} x_\nu$

Ponieważ $\vec{x}_\mu \cdot \vec{x}^\mu = \vec{x}'_\mu \cdot \vec{x}^{\mu\prime}$ zatem

$$\vec{x}_\mu \cdot \vec{x}^\mu = \sum_{\mu=0}^{3} x_\mu x^\mu = \sum_{\mu=0}^{3} \sum_{\substack{\nu=0\\ \eta=0}}^{3} \tilde{L}_{\mu\nu} x_\nu L_{\mu\eta} x^\eta$$

Ta równość jest spełniona tylko wtedy gdy $\sum\limits_{\mu=0}^{3} \tilde{L}_{\mu\nu} L_{\mu\eta} = \delta_{\nu\eta}$

Czyli $\tilde{L}^T L = I$. Zatem $\tilde{L}^T = L^{-1}$

Zatem wektory $\vec{x}_\mu$ transformują się w następujący sposób:

$\vec{x}'_\mu = (L^{-1})^T \vec{x}_\mu$ czyli $\boxed{x'_\mu = \sum\limits_{\nu=0}^{3} (L^{-1})_{\nu\mu} x_\nu}$ (**)

<u>Terminologia</u>

Wielkości, które nie zmieniają się przy transformacji Lorentza nazywamy <u>skalarami</u>.

Wielkości, które transformują się zgodnie z r-niem (*) lub (**) nazywamy <u>czterowektorami</u>.

Przykład

Skalarem jest wielkość $\vec{x}_\mu \cdot \vec{x}^\mu = (ct)^2 - \vec{r}\cdot\vec{r}$ i jej dowolna funkcja.

Czterowektorami są: $\vec{x}_\mu$, $\vec{x}^\mu$, $\vec{p}_\mu = \left(\frac{1}{c}E, -\vec{p}\right)$, $\vec{p}^\mu = \left(\frac{1}{c}E, \vec{p}\right)$

Czterowektorem jest również wektor zbudowany z potencjałów pola e.m. (czteropotencjał): $\vec{A}^\mu = \left(\varphi(\vec{r},t), \vec{A}(\vec{r},t)\right)$

$$\vec{A}_\mu = \left(\varphi(\vec{r},t), -\vec{A}(\vec{r},t)\right)$$

Zauważmy, że mając dane dwa dowolne czterowektory: $\vec{\alpha}^\mu$ i $\vec{\beta}^\mu$ możemy utworzyć skalar: $\vec{\alpha}_\mu \cdot \vec{\beta}^\mu$

Zatem skalarem jest $\vec{x}^\mu \cdot \vec{p}_\mu = Et - \vec{p}\cdot\vec{r}$

Skalarem jest również $\vec{p}_\mu \cdot \vec{p}^\mu = \frac{1}{c^2}E^2 - p^2 = m_0^2 c^2 = \text{const.}$

O tym czy dana wielkość jest skalarem lub czterowektorem można się przekonać bezpośrednim rachunkiem.

Sprawdźmy czy $\vec{\partial}_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla}\right)$ jest czterowektorem.

Rozważmy $\frac{\partial}{\partial x^{\mu'}}$ w ukł. U': $\frac{\partial}{\partial x^{\mu'}} = \sum_{\nu=0}^{3} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\nu}{\partial x^{\mu'}}$

Ale z r-nia (*) $\vec{x}^{\mu'} = L\vec{x}^\mu \Rightarrow \vec{x}^\mu = L^{-1}\vec{x}^{\mu'}$

Czyli $x^\mu = \sum_{\nu=0}^{3} (L^{-1})_{\mu\nu} x^{\nu'}$. Zatem $\frac{\partial x^\mu}{\partial x^{\nu'}} = (L^{-1})_{\mu\nu}$

Stąd $\frac{\partial}{\partial x^{\mu'}} = \sum_{\nu=0}^{3} (L^{-1})_{\nu\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu}$

Porównując z (**) widać, że $\vec{\partial}_\mu$ jest czterowektorem kowariantnym

Analogicznie można pokazać, że $\vec{\partial}^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, -\vec{\nabla}\right)$ jest czterowektorem kontrawariantnym.

Zatem $\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{\partial}^\mu$ jest skalarem

Ogólnie: Tensorem rzędu N o n indeksach kowariantnych i m kontrawariantnych $(n+m=N)$ nazywamy wielkość, która przy zmianie układu inercjalnego transformuje się w następujący sposób:

$$T'^{\,\nu_1 \ldots \nu_m}_{\mu_1 \ldots \mu_n} = \sum_{\mu_1', \ldots, \mu_n' = 0}^{3} \sum_{\nu_1', \ldots, \nu_m' = 0}^{3} (L^{-1})_{\mu_1'\mu_1} \cdots (L^{-1})_{\mu_n'\mu_n} L_{\nu_1\nu_1'} \cdots L_{\nu_m\nu_m'} T^{\nu_1' \ldots \nu_m'}_{\mu_1' \ldots \mu_n'}$$

Zatem skalar jest tensorem zerowego rzędu, a czterowektor tensorem pierwszego rzędu.

3° Równanie Kleina-Gordona

Poszukujemy r-nia, które opisywałoby ruch swobodnej cząstki o masie spoczynkowej m_0 i było niezmiennicze względem transformacji Lorentza.

Rozważmy r-nie: $\left[\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{\partial}^\mu + \alpha\right]\varphi(\vec{x}^\mu) = 0$, gdzie α jest pewną stałą.

R-nie jest w oczywisty sposób niezmiennicze względem transformacji Lorentza, bo $\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{\partial}^\mu$ i α są skalarami.

Ponieważ $\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{\partial}^\mu = \frac{\partial^2}{\partial x^{0\,2}} - \nabla^2 = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$ zatem mamy:

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \alpha\right]\varphi(\bar{r}, t) = 0$$

Szukamy rozwiązania postaci $\varphi(\bar{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)}$ - z dokładnością do stałej normalizacyjnej. Zatem

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \alpha\right]e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)} = \left[\frac{1}{c^2}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 E^2 - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 + \alpha\right]e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)} = 0$$

Aby r-nie było spełnione musi zachodzić:

$$-\frac{1}{c^2}\frac{1}{\hbar^2}E^2 + \frac{p^2}{\hbar^2} + \alpha = 0$$

$$E^2 = p^2c^2 + \hbar^2c^2\alpha$$

Ponieważ r-nie ma opisywać cząstkę o masie m_0 zatem $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. To oznacza, że $\hbar^2c^2\alpha = m_0^2c^4$. Czyli $\alpha = \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2$

Zatem ostatecznie szukane r-nie ma postać:

$$(*)\quad \left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\varphi(\bar{r}, t) = 0$$

lub: $\left[\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{\partial}^\mu + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\varphi(\vec{x}^\mu) = 0$

Równanie (*) nazywa się r-niem Kleina-Gordona.

Problem I

Równanie (*) oprócz rozwiązania o energii $E_p = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} > 0$ ma również rozwiązanie odpowiadające $E_p = -\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} < 0$

Czyli mamy: $\varphi_\pm(\bar{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} \mp |E_p|t)}$

Jaka jest interpretacja fizyczna rozwiązań $\varphi_-(\bar{r},t)$?

Problem II

Wyprowadźmy r-nie ciągłości.

Z r-nia (*) mamy:
$$\varphi^*(\bar{r},t)\left[\vec{\partial}_\mu\cdot\vec{\partial}^\mu + \left(\frac{m_0c}{\hbar}\right)^2\right]\varphi(\bar{r},t) = 0$$
$$\varphi(\bar{r},t)\left[\vec{\partial}_\mu\cdot\vec{\partial}^\mu + \left(\frac{m_0c}{\hbar}\right)^2\right]\varphi^*(\bar{r},t) = 0$$

Odejmując r-nia stronami otrzymujemy:
$$\frac{1}{c^2}\varphi^*\frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi - \frac{1}{c^2}\varphi\frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi^* - \varphi^*\nabla^2\varphi + \varphi\nabla^2\varphi^* = 0$$
$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{c}\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{1}{c}\varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right) - \vec{\nabla}\cdot\left(\varphi^*\vec{\nabla}\varphi - \varphi\vec{\nabla}\varphi^*\right) = 0 \quad \Big| \frac{\hbar}{2m_0 i}$$

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar}{2m_0ci}\left[\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right]\right) - \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

gdzie $\vec{j}(\bar{r},t) = \frac{\hbar}{2m_0 i}\left[\varphi^*(\bar{r},t)\vec{\nabla}\varphi(\bar{r},t) - \varphi(\bar{r},t)\vec{\nabla}\varphi^*(\bar{r},t)\right]$

Zatem wielkość $\frac{i\hbar}{2m_0c^2}\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right)$ powinniśmy utożsamiać z gęstością p-stwa $\rho(\bar{r},t)$.

Wtedy otrzymujemy: $\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0}$

Lub w zapisie relatywistycznie niezmienniczym: $\boxed{\vec{\partial}_\mu\cdot\vec{j}^\mu = 0}$ (**)

gdzie $j^0 = c\rho(\bar{r},t) = \frac{i\hbar}{2m_0c}\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right)$

oraz $\vec{j}^\mu = (j^0, \vec{j})$

Zauważmy, że z niezmienniczości r-nia K-G względem transformacji

Lorentza wynika, że (**) jest spełnione w każdym inercjalnym ukł. odniesienia. To oznacza, że wielkość j^μ jest czterowektorem (czteroprąd).

Problem polega na tym, że ponieważ r-nie K-G jest r-niem różniczkowym drugiego rzędu względem czasu więc $\frac{\partial \varphi}{\partial t}$ i $\frac{\partial \varphi^*}{\partial t}$ są dowolne. To oznacza, że $\rho(\bar{r}, t)$ nie jest dodatnio określona. Nie można jej zatem interpretować jako gęstości prawdopodobieństwa.

Interpretacja (Pauli & Weisskopf)

Zauważmy, że w przeciwieństwie do r-nia Schrödingera, które zawiera czynnik "i" r-nie K-G jest rzeczywiste. To oznacza, że r-nie K-G może być spełnione przez funkcje rzeczywiste i funkcje zespolone.

Rozwiązania rzeczywiste r-nia K-G opisują cząstki bezspinowe i nienaładowane.

Rozwiązania zespolone opisują cząstki bezspinowe i naładowane przy czym rozwiązania typu φ_+ opisują cząstki o ładunku $+e$, a rozwiązania φ_- - cząstki o ładunku $-e$.

Wielkość $e\rho(\bar{r}, t)$ ma sens gęstości ładunku, a wielkość $e\bar{j}(\bar{r}, t)$ - gęstości prądu elektrycznego.

Zatem ogólne rozwiązanie opisujące ruch cząstki o ładunku $\pm e$ ma postać:

$$\varphi_\pm(\bar{r}, t) = \int d^3p\, f_\pm(\bar{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} \mp |E_p| t)} \quad ; \quad |E_p| = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$$

Wtedy

$$e\rho_\pm(\bar{r}, t) = \frac{i\hbar e}{2m_0c^2}\left[\varphi_\pm^* \frac{\partial \varphi_\pm}{\partial t} - \varphi_\pm \frac{\partial \varphi_\pm^*}{\partial t}\right] =$$

$$= \frac{ie\hbar}{2m_0c^2}\left[\int d^3p\; |f_\pm(\bar{p})|^2 \left(\mp\frac{i}{\hbar}|E_p| \mp \frac{i}{\hbar}|E_p|\right)\right] =$$

$$= \pm\frac{e}{m_0c^2}\int d^3p\; |f_\pm(\bar{p})|^2\, |E_p|$$

Kwestia normalizacji

Ponieważ wielkość $e\rho(\bar{r},t)$ utożsamiamy z gęstością ładunku, to wielkość $Q = e\int_V d^3r\, \rho(\bar{r},t)$ ma sens ładunku elektrycznego zamkniętego w objętości V.

Jeżeli wiemy, że w objętości V w pewnej chwili czasu znajdowała się cząstka o ładunku $\pm e$ to:

$$\pm e = e\int_V d^3r\, \rho(\bar{r},t) = \pm\frac{e}{m_0c^2}\int_V d^3r \int d^3p\; |f_\pm(\bar{p})|^2\, |E_p|$$

Czyli $\quad 1 = \frac{V}{m_0c^2}\int d^3p\; |f_\pm(\bar{p})|^2\, |E_p|$

Stąd widać, że wygodnie jest wybrać normalizację postaci:

$$\boxed{\varphi_\pm(\bar{r},t) = \int d^3p\; a_\pm(\bar{p})\sqrt{\frac{m_0c^2}{V|E_p|}}\; e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} \mp |E_p|t)}}$$

Wtedy $\quad Q = \pm e = \int_V d^3r\, e\rho(\bar{r},t) \quad$ i $\quad \int d^3p\, |a_\pm(\bar{p})|^2 = 1$

Zauważmy, że rozwiązanie opisujące cząstki nienaładowane otrzymujemy jako:

$$\varphi_0(\bar{r},t) = \int d^3p\, \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m_0c^2}{V|E_p|}}\left(a_+(\bar{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - |E_p|t)} + a_-(-\bar{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(-\bar{p}\cdot\bar{r} + |E_p|t)}\right)$$

przy warunku $a_+(\bar{p}) = a_-(-\bar{p}) = a_0(\bar{p})$

$$\boxed{\varphi_0(\bar{r},t) = \int d^3p\sqrt{\frac{2m_0c^2}{V|E_p|}}\; a_0(\bar{p})\cos\left[\frac{1}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - |E_p|t)\right]}$$

Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym

Zauważmy, że ponieważ $\vec{A}^\mu = (\varphi, \vec{A})$ jest czterowektorem to naturalnym uogólnieniem r-nia K-G, tak aby opisywało oddziaływanie z polem e.m. i jednocześnie zachowało niezmienniczość względem tr. Lorentza jest r-nie:

$$\left[\left(\vec{\partial}_\mu + \alpha \vec{A}_\mu\right)\cdot\left(\vec{\partial}^\mu + \alpha \vec{A}^\mu\right) + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\psi(\vec{x}^\mu) = 0$$

gdzie α jest stałą

Równanie jest niezmiennicze względem tr. Lorentza, bo $\vec{\partial}^\mu + \alpha\vec{A}^\mu$ jest sumą czterowektorów, czyli czterowektorem. Stałą α wyznaczamy z warunku, że w obecności pola e.m.

$\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$

Ponieważ $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ czyli $\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)$

Pamiętając, że $\vec{\partial}_\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right)$ i $\vec{A}_\mu = (\varphi, -\vec{A})$ widać, że $\alpha = \frac{ie}{\hbar c}$.

Zatem mamy: $\left[\left(\vec{\partial}_\mu + \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}_\mu\right)\cdot\left(\vec{\partial}^\mu + \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}^\mu\right) + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\psi(\vec{x}^\mu) = 0$

$$\left[\left(\partial_0 + \frac{ie}{\hbar c}A_0\right)\left(\partial^0 + \frac{ie}{\hbar c}A^0\right) + \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\left(-\vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right) + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\psi(\vec{x}^\mu) = 0$$

ale $\partial_0 = \partial^0 = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}$ i $A^0 = A_0 = \varphi(\vec{r}, t)$ zatem

$$\boxed{\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar}\varphi(\vec{r},t)\right)^2 - \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right]\psi(\vec{r},t) = 0} \quad (*)$$

R-nie (*) opisuje ruch naładowanej, bezspinowej cząstki w polu e.m.

Zauważmy, że po włączeniu pola e.m. funkcja $\varphi(\vec{r}, t)$ musi być zespolona.

4° Równanie Diraca

Równanie K-G jest r-niem różniczkowym drugiego rzędu względem czasu. Czy można utworzyć r-nie pierwszego rzędu, niezmiennicze względem transformacji Lorentza.
Rozważmy r-nie:

$$(*)\quad \left[\alpha\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} + \beta\right] \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

Jeśli α i β są stałymi, a $\vec{\gamma}^{\mu}$ jest czterowektorem to (*) jest w sposób oczywisty niezmiennicze względem transformacji Lorentza.
Ponieważ (*) powinno opisywać ruch cząstki swobodnej więc szukamy rozwiązania w postaci:

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = e^{\mp \frac{i}{\hbar} \vec{p}_{\mu} \cdot \vec{x}^{\mu}} = e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$$

Podstawiając do r-nia (*) otrzymujemy (pamiętając, że $\vec{\partial}_{\mu} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{\mu}}$):

$$\left[\mp \frac{i}{\hbar}\alpha\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{p}_{\mu} + \beta\right] e^{\mp \frac{i}{\hbar} \vec{p}_{\mu} \cdot \vec{x}^{\mu}} = 0$$

Zatem musi zachodzić: $\mp \frac{i}{\hbar}\alpha\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{p}_{\mu} + \beta = 0 \;\Big|\left(\pm\frac{i}{\hbar}\alpha\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{p}_{\mu} + \beta\right)$

Czyli

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2 (\vec{\gamma}^{\mu}\cdot\vec{p}_{\mu})(\vec{\gamma}^{\mu}\cdot\vec{p}_{\mu}) + \beta^2 = 0$$

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2 \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \gamma^{\mu} p_{\mu} \gamma^{\nu} p_{\nu} + \beta^2 = 0$$

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2 \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \left(\gamma^{\mu} p_{\mu} \gamma^{\nu} p_{\nu} + \gamma^{\nu} p_{\nu} \gamma^{\mu} p_{\mu}\right) + \beta^2 = 0$$

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2 \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \left(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu}\right) p_{\mu} p_{\nu} + \beta^2 = 0$$

Ponieważ w mechanice relatywistycznej musi zachodzić związek:

$$\vec{p}_{\mu}\cdot\vec{p}^{\mu} = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2 c^2$$

zatem otrzymane r-nie ~~daje związek~~ narzuca warunki na $\vec{\gamma}^{\mu}$ oraz α i β.

Zauważmy, że jeśli:

$$(**)\ \boxed{\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g_{\mu\nu}}$$

gdzie $g = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{bmatrix}$

to otrzymamy: $\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2(p_0^2 - \vec{p}\cdot\vec{p}) + \beta^2 = 0$

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2\left(\frac{E^2}{c^2} - p^2\right) + \beta^2 = 0$$

$$\frac{1}{\hbar^2}\alpha^2 m_0^2 c^2 + \beta^2 = 0$$

Stałe α i β możemy wybrać na wiele sposobów (ważny jest tylko stosunek α/β, który jest ustalony). Przyjmuje się:

$\alpha = i\hbar$, $\beta = -m_0 c$

Zatem r-nie (*) ostatecznie przyjmuje postać:

$$(***)\left[i\hbar\, \vec{\gamma}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu - m_0 c\right]\Phi(\vec{x}^\mu) = 0$$

przy czym $\vec{\gamma}^\mu$ jest czterowektorem, którego elementy spełniają warunki (**). R-nie (***) nazywa się <u>r-niem Diraca</u>.

Zauważmy, że warunki (**) implikują, że elementy czterowektora $\vec{\gamma}^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ nie mogą być liczbami. Z (**) wynika bowiem że $\gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu$ dla $\mu \neq \nu$.

Warunki (**) spełniane przez obiekty γ^μ noszą nazwę <u>algebry Clifforda</u>.

Okazuje się, że obiekty γ^μ mają reprezentację macierzową przy czym najmniejszymi macierzami spełniającymi warunek (**) są macierze 4×4.

Macierze γ^μ nazywamy <u>macierzami gamma</u>.

Macierze γ^μ spełniające algebrę Clifforda (**) nie są wyznaczone jednoznacznie. Przypuśćmy, że γ^μ spełniają (**) oraz że S jest ~~odwr~~ ~~nieosobliwą~~ odwracalną macierzą (istnieje S^{-1}) o tym samym rozmiarze co macierze gamma.

Zdefiniujmy $\gamma^{\mu\prime} = S\gamma^\mu S^{-1}$

Wtedy $\gamma^{\mu\prime}\gamma^{\nu\prime} + \gamma^{\nu\prime}\gamma^{\mu\prime} = S\gamma^\mu S^{-1} S\gamma^\nu S^{-1} +$

$$+ S\gamma^\nu S^{-1} S\gamma^\mu S^{-1} = S\left(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu\right)S^{-1} =$$

$$= 2Sg_{\mu\nu}S^{-1} = 2g_{\mu\nu}SS^{-1} = 2g_{\mu\nu}$$

Zatem macierze $\gamma^{\mu\prime}$ również spełniają (**).

W szczególnej formie macierze γ^μ wyrażają się przez macierze Pauliego: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Mianowicie:

$$(D)\quad \gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix}, \quad i = 1,2,3$$

gdzie $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ – macierz jednostkowa.

Spełnienie warunków (**) wynika wprost z własności macierzy Pauliego.

Naprzykład: $(\gamma^0)^2 + (\gamma^0)^2 = 2\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} = 2I$

$$(\gamma^i)^2 + (\gamma^i)^2 = 2(\gamma^i)^2 = 2\begin{bmatrix} -(\sigma_i)^2 & 0 \\ 0 & -(\sigma_i)^2 \end{bmatrix} = -2I, \quad i=1,2,3$$

$$\gamma^i\gamma^j + \gamma^j\gamma^i = \begin{bmatrix} -\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i \end{bmatrix} = 0, \text{ bo } \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0$$

dla $i \neq j$?? — dla $i - 1,2,3$.

Sprawdzić w domu. [Szczególną reprezentację (D) nazywamy reprezentacją Diraca]

Oznaczenie (Feynman): $\not{A} = \gamma^\mu \cdot A_\mu$

W takim zapisie r-nie Diraca ma postać: $\left[i\hbar \not{\partial} - m_0 c \right] \Phi(\vec{x}^\mu) = 0$.

Zauważmy, że ponieważ (⁎⁎) jest spełnione przez macierze, to r-nie Diraca jest tak naprawdę układem (przynajmniej czterech) równań różniczkowych. Czyli $\Phi(\vec{x}^\mu) = \begin{bmatrix} \varphi_1(\vec{x}^\mu) \\ \varphi_2(\vec{x}^\mu) \\ \vdots \end{bmatrix}$

Równanie Diraca zostało zaproponowane, aby wyjaśnić własności cząstek o spinie $\frac{1}{2}\hbar$ (w szczególności elektronu) i oddziaływania takich cząstek z polem e.m. (patrz: anomalny efekt Zeemana - MK I).

W dalszym ciągu ograniczymy się do reprezentacji czterowymiarowych macierzy gamma. Wtedy:

$$(⁎⁎⁎⁎)\quad \Phi(\vec{x}^\mu) = \begin{bmatrix} \varphi_1(\vec{x}^\mu) \\ \varphi_2(\vec{x}^\mu) \\ \varphi_3(\vec{x}^\mu) \\ \varphi_4(\vec{x}^\mu) \end{bmatrix}$$

Uwaga: Mimo że Φ posiada 4 składniki to nie jest czterowektorem.

Pytanie podstawowe: Czy f. falowa (⁎⁎⁎⁎) spełniająca r-nie Diraca ma szansę opisywać poprawnie cząstki o spinie $\frac{1}{2}\hbar$, skoro wiemy że takie cząstki wymagają raczej f. falowej w postaci spinora (patrz. MK I): $\varphi(\bar{r}, t) = \begin{bmatrix} \varphi_+(\bar{r}, t) \\ \varphi_-(\bar{r}, t) \end{bmatrix}$?

W tym celu rozważmy r-nie Diraca dla cząstki swobodnej o czteropędzie $\bar{p}_\mu$ w układzie odniesienia, w którym cząstka spoczywa. Wtedy $\bar{p}_\mu = \left(\frac{E}{c}, 0, 0, 0\right) = (m_0 c, 0, 0, 0)$ $\left[\text{bo } \left(\frac{E}{c}\right)^2 - \underset{0}{p^2} = m_0^2 c^2 \right]$

W takim przypadku:

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{bmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x^0}$$

Podstawiając do r-nia Diraca mamy:

$$\left[i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\gamma^0 p_0 - m_0 c\right]\Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

ponieważ $p_0 = m_0 c$ zatem

$$m_0 c\left[\gamma^0 - 1\right]\Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

Ale w reprezentacji Diraca $\gamma^0 - 1 = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & 0 \\ & 0 & -2 & \\ & & & -2 \end{bmatrix}$ co

oznacza, że tylko φ_1 i φ_2 mogą być różne od zera, tzn.

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Czyli w układzie odniesienia, w którym cząstka spoczywa funkcja falowa wygląda jak spinor.

Oznacza to również, że w dowolnym układzie odniesienia f. falowa ma co prawda w ogólności 4 składniki, ale tylko dwa z nich są niezależne.

(podobieństwo: patrz polaryzacja fali e.m).

Czyli ~~swobodna~~ cząstka ma dodatkowy wewnętrzny stopień swobody:

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \Phi_+(\vec{x}^{\mu})\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{bmatrix} + \Phi_-(\vec{x}^{\mu})\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{bmatrix}$$

Równanie ciągłości

Rozważmy r-nie Diraca i r-nie hermitowsko sprzężone:

$$\left[i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} - m_0 c\right] \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

$$-i\hbar\, \partial_{\mu} \Phi^{+}(\vec{x}^{\mu}) \cdot \vec{\gamma}^{\mu +} - m_0 c\, \Phi^{+}(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

Pomnóżmy pierwsze r-nie z lewej strony przez Φ^{+}, a drugie przez Φ z prawej i odejmijmy stronami.

$$\Phi^{+} i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} \Phi - m_0 c\, \Phi^{+}\Phi + i\hbar\, \partial_{\mu}\Phi^{+} \cdot (\gamma^{\mu})^{+} \Phi + m_0 c\, \Phi^{+}\Phi =$$

$$= i\hbar\, \Phi^{+} \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} \Phi + i\hbar\, \partial_{\mu}\Phi^{+} \cdot (\gamma^{\mu})^{+} \Phi = 0$$

Zauważmy jednak, że $\gamma^0 = (\gamma^0)^{+}$ i $-\gamma^i = (\gamma^i)^{+}$; $i = 1,2,3$ (wynika to bezpośrednio z reprezentacji Diraca macierzy gamma). Widać więc, że z uwagi na antyhermitowskość macierzy γ^i nie można powyższego r-nia zapisać w postaci:

$$\Phi^{+} \gamma^{\mu} \cdot \partial_{\mu} \Phi + \partial_{\mu}\Phi^{+} \cdot (\gamma^{\mu})^{+} \Phi \neq \vec{\partial}_{\mu} \cdot \left(\Phi^{+} \vec{\gamma}^{\mu} \Phi\right)$$

Zauważmy jednak, że $(\gamma^{\mu})^{+} = \gamma^0 \gamma^{\mu} \gamma^0$ zatem jeśli zamiast Φ^{+} użyjemy $\bar{\Phi} = \Phi^{+}\gamma^0$ to otrzymamy:

$$\bar{\Phi} \left[i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} - m_0 c\right] \Phi = 0$$

i r-nie hermitowsko sprzężone:

$$\left[-i\hbar\, \vec{\partial}_{\mu} \Phi^{+} \cdot (\vec{\gamma}^{\mu})^{+} - m_0 c\, \Phi^{+}\right] \bar{\Phi}^{+} = 0$$

Czyli

$$-i\hbar\, \vec{\partial}_{\mu} \Phi^{+} \cdot (\vec{\gamma}^{\mu})^{+} (\gamma^0)^{+} \Phi - m_0 c\, \Phi^{+} (\gamma^0)^{+} \Phi =$$

$$= -i\hbar\, \vec{\partial}_{\mu} \Phi^{+} \gamma^0 \cdot \vec{\gamma}^{\mu} \Phi - m_0 c\, \bar{\Phi}\Phi =$$

$$= -i\hbar\, \vec{\partial}_{\mu} \bar{\Phi} \cdot \vec{\gamma}^{\mu} \Phi - m_0 c\, \bar{\Phi}\Phi = 0$$

$\gamma^{\mu +} \gamma^{0 +} =$ ~~...~~ $=$

$\gamma^0 \gamma^{\mu} \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^{\mu}$

Odejmując te r-nia stronami otrzymujemy:

$$\bar{\Phi}\, i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \vec{\partial}_{\mu} \Phi + i\hbar\, \partial_{\mu} \bar{\Phi} \cdot \vec{\gamma}^{\mu} \Phi = 0$$

Czyli $\quad i\hbar\, \vec{\partial}_{\mu} \cdot \left(\bar{\Phi}\, \vec{\gamma}^{\mu} \Phi \right) = 0$

Zatem jeśli zdefiniujemy : $\vec{j}^{\mu} = \bar{\Phi}\, \vec{\gamma}^{\mu} \Phi$ to otrzymujemy r-nie ciągłości

$$\boxed{\vec{\partial}_{\mu} \cdot \vec{j}^{\mu} = 0}$$

Ponieważ r-nie zostało wyprowadzone dla dowolnego układu odniesienia więc $\vec{j}^{\mu}$ jest czterowektorem (bo $\vec{\partial}_{\mu} \cdot \vec{j}^{\mu}$ musi być skalarem).

Ponadto ponieważ $\vec{\gamma}^{\mu}$ jest z założenia czterowektorem więc wielkość $\bar{\Phi}\Phi$ jest skalarem.

$$j^{0} = \bar{\Phi}\, \gamma^{0} \Phi = \Phi^{+} \gamma^{0} \gamma^{0} \Phi = \Phi^{+} \Phi = \sum_{k=1}^{4} |\varphi_{k}|^{2}$$

gdzie $\quad \Phi(\vec{x}^{\mu}) = \begin{bmatrix} \varphi_1(\vec{x}^{\mu}) \\ \varphi_2(\vec{x}^{\mu}) \\ \varphi_3(\vec{x}^{\mu}) \\ \varphi_4(\vec{x}^{\mu}) \end{bmatrix}$

Widać że teraz j^{0} ma sens gęstości p-stwa bo jest dodatnio określona.

<u>Oddziaływanie e.m.</u>

Analogicznie do r-nia K-G spodziewamy się że r-nie Diraca w obecności pola e.m. ma postać.

$$\left[i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} + \alpha \vec{A}_{\mu} \right) - m_0 c \right] \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

gdzie $\vec{A}_{\mu} = (\varphi, -\vec{A})$ i α jest pewną stałą.

Pamiętając, że w obecności pola e.m. $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$

Czyli $\hat{\vec{p}} \to \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)$

Zatem widać że $\alpha = \frac{ie}{\hbar c}$

Czyli otrzymujemy:

$$(*)\ \left[i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}_{\mu} \right) - m_0 c \right] \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

R-nie $(*)$ opisuje cząstkę o spinie $\frac{1}{2}$ w polu e.m.

Rozważmy teraz r-nie sprzężone do $(*)$:

$$(**)\ \left[-i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu *} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) - m_0 c \right] \Phi^{*}(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

Zauważmy, że $-\vec{\gamma}^{\mu *}$ też spełnia algebrę Clifforda, bo

$$(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu})^{*} = (2 g_{\mu\nu})^{*}$$

$$(-\gamma^{\mu *})(-\gamma^{\nu *}) + (-\gamma^{\nu *})(-\gamma^{\mu *}) = 2 g_{\mu\nu}$$

Zdefiniujmy zatem macierz S taką że $-\gamma^{\mu *} = S \gamma^{\mu} S^{-1}$

Podstawiając do r-nia $(**)$ mamy:

$$\left[i\hbar\, S \gamma^{\mu} S^{-1} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) - m_0 c\, S S^{-1} \right] \Phi^{*}(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

$$S \left[i\hbar\, \gamma^{\mu} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) - m_0 c \right] \Phi_c(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

Czyli ostatecznie:

$$(***)\ \boxed{\left[i\hbar\, \vec{\gamma}^{\mu} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) - m_0 c \right] \Phi_c(\vec{x}^{\mu}) = 0}$$

gdzie $\boxed{\Phi_c(\vec{x}^{\mu}) = S^{-1} \Phi^{*}(\vec{x}^{\mu})}$ $(****)$

Zatem f. falowa Φ_c opisuje cząstkę o spinie $\frac{1}{2}$ i masie m_0, ale przeciwnym ładunku $-e$.

Zatem podobnie jak w r-niu K-G r-nie Diraca również przewiduje istnienie cząstek o tej samej masie i przeciwnym ładunku. Mimo, że w przypadku r-nia Diraca doszliśmy do tego wniosku w inny sposób niż dla r-nia K-G, to w obu przypadkach przyczyną zachodzenia tego zjawiska jest istnienie dwóch rozwiązań r-nia o energiach $\pm E$.

Zasada zachowania momentu pędu

Rozważmy r-nie Diraca dla cząstki swobodnej:

$$\left[i\hbar\,\vec{\gamma}^{\mu}\cdot\vec{\partial}_{\mu} - m_0 c\right]\Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

gdzie $\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$; $\gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix}$; $\vec{\partial}_{\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, \vec{\nabla}\right)$

Przepiszmy to r-nie w formie przypominającej r-nie Schrödingera:

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

Mamy

$$\left(i\hbar\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial(ct)} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial(ct)} \end{bmatrix} + i\hbar\begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} \\ -\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} m_0 c & 0 \\ 0 & m_0 c \end{bmatrix}\right)\Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

$$i\hbar\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix}\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \left(i\hbar c\begin{bmatrix} 0 & -\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} & 0 \end{bmatrix} + m_0 c^2\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}\right)\Phi(\vec{x}^{\mu})$$

zatem

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \left[-i\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + m_0 c^2\beta\right]\Phi(\vec{x}^{\mu})$$

gdzie $\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix}$; $\beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$

Zatem dla r-nia Diraca rolę Hamiltonianu pełni:

$$\boxed{\hat{H} = -i\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + m_0 c^2\beta}$$

Dla cząstki swobodnej moment pędu powinien być zachowany. Policzmy zatem:

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = \Big[-i\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + m_0 c^2\beta\,,\ \sum_{k,l}\varepsilon_{ikl}\, x_k \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_l}\Big] =$$

$$\hat{L}_i = (\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})_i$$

$$= -i\hbar c\,\frac{\hbar}{i}\sum_{k,l,m}\Big[\alpha_m\frac{\partial}{\partial x_m}\,,\ \varepsilon_{ikl}\,x_k\frac{\partial}{\partial x_l}\Big]$$

$$= -\hbar^2 c\sum_{k,l,m}\alpha_m\varepsilon_{ikl}\Big(\frac{\partial}{\partial x_m}x_k\frac{\partial}{\partial x_l} - x_k\frac{\partial}{\partial x_l}\frac{\partial}{\partial x_m}\Big) =$$

$$= -\hbar^2 c\sum_{k,l,m}\alpha_m\varepsilon_{ikl}\,\delta_{km}\frac{\partial}{\partial x_l} = -\hbar^2 c\sum_{k,l}\varepsilon_{ikl}\,\alpha_k\frac{\partial}{\partial x_l} = -\hbar^2 c(\vec{\alpha}\times\vec{\nabla})_i$$

Zatem $\quad [\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = -\hbar^2 c(\vec{\alpha}\times\vec{\nabla})$

czyli operator orbitalnego momentu pędu <u>nie komutuje</u> z Hamiltonianem wynikającym z r-nia Diraca.

Rozważmy zmodyfikowany operator momentu pędu:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$$

Wtedy

$$[\hat{H}, \hat{J}_i] = [\hat{H}, \hat{L}_i + \tfrac{1}{2}\hbar\sigma_i] = -\hbar^2 c(\vec{\alpha}\times\vec{\nabla})_i + \tfrac{1}{2}\hbar\,[-i\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}, \sigma_i] =$$

$$= -\hbar^2 c(\vec{\alpha}\times\vec{\nabla})_i - \tfrac{1}{2}i\hbar^2 c\sum_k\frac{\partial}{\partial x_k}\begin{bmatrix}0 & [\sigma_k,\sigma_i]\\ [\sigma_k,\sigma_i] & 0\end{bmatrix} = \Big|\,[\sigma_k,\sigma_i] = 2i\sum_l\varepsilon_{kil}\sigma_l\Big| =$$

$$= -\hbar^2 c(\vec{\alpha}\times\vec{\nabla})_i - \tfrac{1}{2}i\hbar^2 c\sum_{k,l}\frac{\partial}{\partial x_k}2i\,\varepsilon_{kil}\begin{bmatrix}0 & \sigma_l\\ \sigma_l & 0\end{bmatrix} =$$

$$= -\hbar^2 c(\vec{\alpha} \times \vec{\nabla})_i + \hbar^2 c \sum_{k,l} \varepsilon_{ilk} \begin{bmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_k} =$$

$$= -\hbar^2 c(\vec{\alpha} \times \vec{\nabla})_i + \hbar^2 c(\vec{\alpha} \times \vec{\nabla})_i = 0$$

Czyli Hamiltonian komutuje z operatorem $\hat{\vec{J}}$:

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{\vec{J}}] = 0}$$

gdzie $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ reprezentuje całkowity moment pędu cząstki (orbitalny i spinowy)

Stąd wynika, że spinowy moment pędu dodaje się do orbitalnego momentu pędu cząstki (tzn. powinien być traktowany w ten sam sposób).

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \\ \hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \end{cases}$$

gdzie $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$

$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$ $(2j+1$ - wartości$)$

Wyprowadzenie r-nia Pauliego z r-nia Diraca

Rozważmy elektron w polu e.m.

$$\left[i\hbar \gamma^\mu \cdot \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0 c \right] \Phi(x^\mu) = 0$$

gdzie $A_\mu = (\varphi, -\vec{A})$

Przepisujemy to r-nie do postaci : $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \hat{H} \Phi$

$$\left(i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial(ct)} + \frac{ie}{\hbar c}\varphi & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial(ct)} - \frac{ie}{\hbar c}\varphi \end{bmatrix} + i\hbar \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right) \\ -\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right) & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} m_0 c & 0 \\ 0 & m_0 c \end{bmatrix} \right) \Phi(x^\mu) = 0$$

$$i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix} \Phi(x^\mu) = \left(\begin{bmatrix} e\varphi & 0 \\ 0 & -e\varphi \end{bmatrix} - i\hbar c \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right) \\ -\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} m_0 c^2 & 0 \\ 0 & m_0 c^2 \end{bmatrix} \right) \Phi(x^\mu)$$

Zatem mamy : $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x^\mu) = \hat{H} \Phi(x^\mu)$

gdzie
$$\boxed{\hat{H} = -i\hbar c\, \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) + m_0 c^2 \beta + e\varphi(\vec{r}, t)}$$

Rozłóżmy : $\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_+ \\ \Phi_- \end{bmatrix}$

Wtedy

$$(*) \begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_+(\vec{r},t) = -i\hbar c \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\Phi_-(\vec{r},t) + \left(m_0 c^2 + e\varphi\right)\Phi_+(\vec{r},t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_-(\vec{r},t) = -i\hbar c \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\Phi_+(\vec{r},t) + \left(-m_0 c^2 + e\varphi\right)\Phi_-(\vec{r},t) \end{cases}$$

Będziemy szukać rozwiązań powyższych r-ń odpowiadających dodatnim energiom w granicy nierelatywistycznej :

$$(**) \quad m_0 c^2 \gg e\varphi \quad \text{oraz} \quad \left| \frac{\partial}{\partial t} \Phi_\pm \right| \ll \left| m_0 c^2 \Phi_\pm \right|$$

65e

Niech
$$\begin{cases} \Phi_+(\vec{r},t) = e^{-\frac{i m c^2 t}{\hbar}} \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) \\ \Phi_-(\vec{r},t) = e^{-\frac{i m_0 c^2 t}{\hbar}} \tilde{\Phi}_-(\vec{r},t) \end{cases}$$

Wstawiamy do r-nia (*):

$$(***)\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+ = -i\hbar c\, \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\tilde{\Phi}_- + e\varphi\, \tilde{\Phi}_+ \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_- = -i\hbar c\, \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\tilde{\Phi}_+ + (e\varphi - 2m_0c^2)\, \tilde{\Phi}_- \end{cases}$$

W granicy nierelatywistycznej drugie z r-ń można przybliżyć przez:

$$0 \approx -i\hbar c\, \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\tilde{\Phi}_+ - 2m_0c^2\, \tilde{\Phi}_-$$

Stąd w granicy nierelatywistycznej mamy:

$$\tilde{\Phi}_- = -\frac{i\hbar c\, \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)}{2m_0c^2}\tilde{\Phi}_+$$

Wstawiając do pierwszego z r-ń (***) otrzymujemy:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}_+ = \frac{-\hbar^2c^2\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\right]^2}{2m_0c^2}\tilde{\Phi}_+ + e\varphi\, \tilde{\Phi}_+$$

czyli

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\right]^2 + e\varphi\right)\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t)}$$

Rozważmy człon:

$$\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\right]^2 = \sum_{k,l}\sigma_k\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\sigma_l\left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c}A_l\right) =$$

$$= \sum_k\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)^2 + \sum_{k\neq l}\sigma_k\sigma_l\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_l\right)$$

$$\sum_{k\neq l}\sigma_k\sigma_l\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{ie}{\hbar c}A_l\right)=$$

$$=\sum_{k>l}\left[\sigma_k\sigma_l\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{ie}{\hbar c}A_l\right)+\sigma_l\sigma_k\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{ie}{\hbar c}A_l\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\right]=$$

$\sigma_k\sigma_l=-\sigma_l\sigma_k$ dla $k\neq l$

$$=\sum_{k>l}\sigma_k\sigma_l\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]=\frac{1}{2}\sum_{k>l}\sigma_k\sigma_l\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]-\frac{1}{2}\sum_{k>l}\sigma_l\sigma_k\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]$$

gdzie $\hat{\pi}_k=\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k$

czyli

$$\sum_{k\neq l}\sigma_k\sigma_l\hat{\pi}_k\hat{\pi}_l=\frac{1}{2}\sum_{k>l}\left[\sigma_k,\sigma_l\right]\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]=i\sum_{k>l}\sum_m\varepsilon_{klm}\sigma_m\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]$$

ale

$$\left[\hat{\pi}_k,\hat{\pi}_l\right]=\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{ie}{\hbar c}A_l\right)-\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{ie}{\hbar c}A_l\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)=$$

$$=+\frac{ie}{\hbar c}\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_k}\right)$$

czyli

$$\sum_{k\neq l}\sigma_k\sigma_l\hat{\pi}_k\hat{\pi}_l=i\sum_{k>l}\sum_m\varepsilon_{klm}\sigma_m\frac{ie}{\hbar c}\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\right)=$$

$$=-\frac{e}{\hbar c}\sum_{\substack{m\\k>l}}\sigma_m\varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_k}\right)=+\frac{e}{\hbar c}\frac{1}{2}\sum_m\sum_{k,l}\sigma_m\varepsilon_{mlk}\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_k}\right)=$$

$$=+\frac{e}{\hbar c}\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)$$ ← bo $\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)_m=\sum_{k,l}\varepsilon_{mlk}\frac{\partial A_k}{\partial x_l}=\frac{1}{2}\sum_{k,l}\varepsilon_{mlk}\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_k}\right)$

Zatem podsumowując

$$\boxed{\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla}-\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\right]^2=\sum_k\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ie}{\hbar c}A_k\right)^2+\frac{e}{\hbar c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}}$$

Czyli równanie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)\right]^2 \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) + e\varphi\,\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t)$$

można zapisać w postaci:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)^2 + \frac{e}{\hbar c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right] \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) + e\varphi\,\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t)$$

Ostatecznie otrzymujemy r-nie Pauliego:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)^2 \tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) - \frac{e\hbar}{2m_0 c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\,\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t) + e\varphi\,\tilde{\Phi}_+(\vec{r},t)}$$

gdzie $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0 c}$ jest magnetonem Bohra

Zatem r-nie Diraca daje automatycznie poprawne sprzężenie spinu z polem magnetycznym dla elektronu.

Zauważmy, że to sprzężenie jest inne niż dla orbitalnego momentu pędu, które jest postaci: $\frac{e}{2m_0 c}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B}$

Natomiast dla spinu mamy: $\frac{e}{m_0 c}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}$; $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$

Czyli ogólnie sprzężenie z polem magnetycznym jest postaci:

$$\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$$

gdzie $\hat{\vec{\mu}} = g\frac{e}{2m_e c}\begin{cases}\hat{\vec{L}} & ;\ g=1\\ \hat{\vec{S}} & ;\ g=2\end{cases}$

Podsumowanie

1) Można utworzyć relatywistyczne wersje r-nia falowego Schrödingera, które dają poprawny opis cząstek kwantowych (zgodność z doświadczeniami widm atomowych). (nie wspominam Hamiltonianu)
2) Relatywistyczne wersje r-nia Schrödingera przewidują istnienie spinu cząstek (r-nie Diraca) i istnienie antycząstek, czyli cząstek o tej samej masie i przeciwnym ładunku.
3) R-nie Diraca opisuje dobrze własności cząstki punktowej ze spinem (elektron, pozyton). Daje natomiast niepoprawne sprzężenie spinu z polem e.m. dla cząstek złożonych (np. proton, neutron).
4) Relatywistyczna mechanika kwantowa jest teorią spójną jedynie dla cząstek swobodnych. W przypadku istnienia zewnętrznego oddz. (np. elektromagnetycznego) relatywistyczna mechanika kwantowa jest jedynie przybliżeniem dobrym dla wolno-zmiennych (w czasie i przestrzeni) pól.
Przyczyną tego jest że w przypadku szybkozmiennych pól zewnętrznych pojawia się możliwość kreacji i anihilacji cząstek. Dlatego teoria oparta na pojęciu funkcji falowej pojedynczej cząstki jest <u>niespójna</u>.
5) Poprawne połączenie teorii względności z mechaniką kwantową musi prowadzić do teorii, w której liczba cząstek może się zmieniać w czasie. Teorią taką jest kwantowa teoria pola, w której podstawowym obiektem podlegającym ewolucji jest pole kwantowe. Funkcja falowa jest w tej teorii obiektem pochodnym, który opisuje konkretne wzbudzenie pola kwantowego.