

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.

Zatem, iż znamy stany własne \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 |\Phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\Phi_n\rangle ; \quad \langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{nm}$$

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

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

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

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

Chcemy znaleźć metodą wyznaczając kolejnych przybliżeń stanów stacjonarnych i energii tych samych \hat{H} :

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

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

Założenia:

1) $|\psi_n(\lambda)\rangle$ i $E_n(\lambda)$ są analitycznymi funkcjami parametru λ (tzn. istnieje rozwinięcie w szereg Taylora, które jest ibreine) 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, iż $|E_n(\lambda) - E_n^{(0)}| \ll |E_n(\lambda) - E_m^{(0)}|$ dla $n \neq m$

Ponieważ $|\Phi_n\rangle$ tworzy bazę w g. Hilberta zatem

(2)

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

przy czym w stanie 3): $a_m(0) = e^{i\alpha} J_{km}$

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

Stąd

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

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

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

Konstatując 2 tego i.e. $\langle \Phi_k | \Phi_n \rangle = \delta_{kn}$ mamy:

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

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

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

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

R-nie (**) jest dobradzie i jest punktem wyjścia dla dalszych schematów przybliżeń.

Standardowy ciąg przybliżeń konstruujemy posługując się wzr. (**)

w postaci:

$$\begin{cases} a_k(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i a_k^{(i)}, \text{ gdzie } a_k^{(0)} = e^{i\alpha} J_{kn} \\ E_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \end{cases} \quad (z \text{ uwagi na stanie 3})$$

Podstawiając do (***) otrzymujemy

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

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

Ponownie mamy przy kolejnych potęgach λ otrzymujemy:

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

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

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

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

$$k=n : (E_n^{(1)} - V_{nn}) a_n^{(0)} = 0 \Rightarrow \boxed{E_n^{(1)} = V_{nn}}$$

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

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

Zatem w pierwszym nadrzadzie rachunku zaburzeń:

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

~~Wystarczy~~ $a_m^{(1)}$ jest niewielka funkcja $|\Psi_n(\lambda)\rangle$ jest niesymetryczna.

Jako ostatni dodatkowy warunek zaspakoić aby $\langle \Psi_n(\lambda) | \Psi_n(\lambda) \rangle = 1$ w każdym nadrzadzie rachunku zaburzeń lub aby $\langle \Phi_n | \Psi_n^{(1)} \rangle = 0$ gdzie $|\Psi_n(\lambda)\rangle = e^{i\alpha} |\Phi_n\rangle + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i |\Psi_n^{(i)}\rangle$

Zatem 2 warunek:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Zatem w drugim kolejnym rachunku zabunieć:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_n(\lambda) \approx E_n^{(0)} + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{array} \right.$$

$$\left. \quad |\psi_n(\lambda)\rangle \approx e^{i\alpha} |\Phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle \right)$$

gdzie

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

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

Uwagi

10. Otrzymamy u tego sposobu przepis na obliczanie kolejnych poprawek do $E_n^{(0)}$ i $|\Psi_n\rangle$ nazywamy rachunkiem zaburzeń Rayleigha - Schrödingera.
20. Szereg perturbacyjny jest ibiejący jeśli λ jest odjemnością male, oraz $|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ dla wszystkich $m \neq n$.
30. Wynia rachunku zaburzeń określają jedynie (z dokładnością do czynnika fazowego) prostą poprawkę prostopadającą do niezaburzonego stanu $|\Psi_n\rangle$

$$\xrightarrow{\quad} |\Psi_n^{(0)}\rangle$$

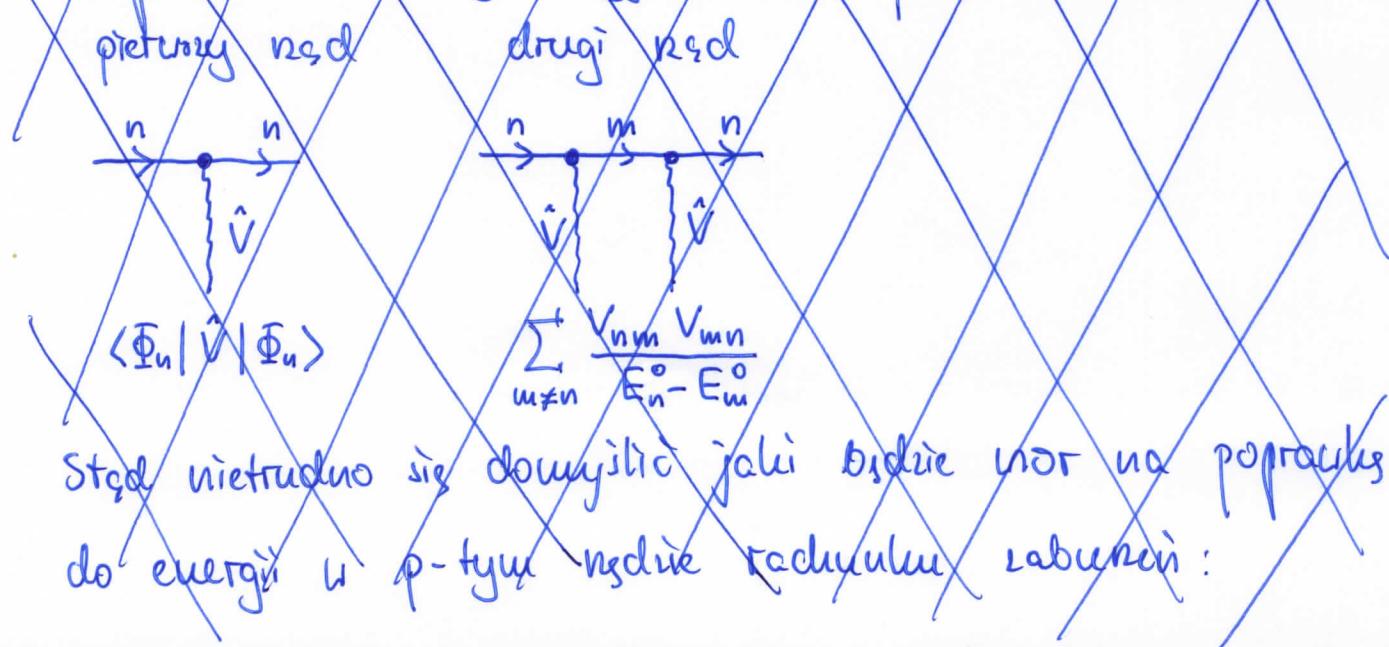
$\uparrow |\Psi_n^{(1)}\rangle$

Istnieje zawsze swoboda przy określaniu długości $|\Psi_n\rangle$.

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

50. Zaburzenie energii $E_n^{(0)}$ jest duie jeśli istnieją duie elementy macierzyste $\langle \Psi_n | \hat{V} | \Psi_m \rangle$ pomiędzy stanem n -tym oraz m -tym i $|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ jest male.

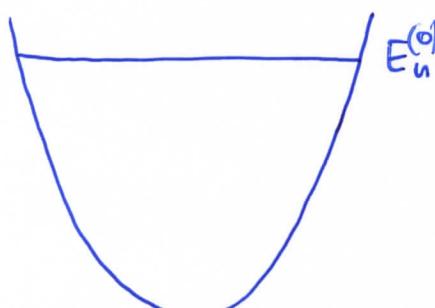
60. Poprawki do energii wygodnie jest przedstawić graficznie:



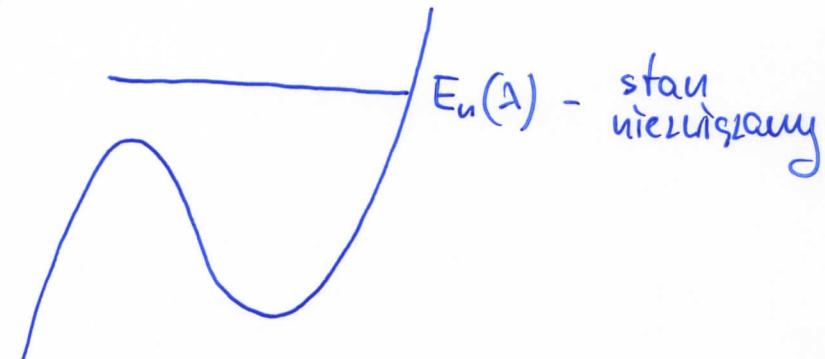
6° Istnieje przypadek gdy naucz dla mącego i struktury zaburzonego stanu ulega gwałtownej zmianie.

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

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



$$\lambda = 0$$



$$\lambda > 0$$

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:

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

Wartość własne jest g-krotnie zdegenerowana.

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

~~Jeśli chcemy skonstruować ciąg przyleżni dla $E_n^{(0)}$ i któregoś z tych stanów $|\Phi_{n\alpha}\rangle$ musimy najpierw usunąć degenerację lub sporządzić aby $\langle \Phi_{n\alpha} | \hat{V} | \Phi_{n\beta} \rangle = 0$~~

Zdefiniujemy operator \hat{V}' taki że:

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

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

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

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

V - macierz brzegowa repr. \hat{V} u bazie $|\Phi_k\rangle$

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

\hat{V}' - macierz brzegowa repr. \hat{V}' u bazie $|\Phi_k\rangle$

H_0 - macierz brzegowa repr. H_0 u bazie $|\Phi_k\rangle$

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

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

Rozwiążujemy ściśle zagadnienie własne dla \hat{H}'_0 w sprawiedla się do diagonalizacji macierzy H'_0 . Zauważmy, iż ponieważ

H'_0 ma niediagonalną tylko klatkę o wymiarach $g \times g$

zatem diagonalizacja sprawiedla się do diagonalizacji

klatek $g \times g$: $\tilde{H}'_0 = \begin{bmatrix} E_{n_1}^{(0)} + \lambda V_{n_1 n_1} & \dots & \lambda V_{n_1 n_g} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda V_{n_g n_1} & \dots & E_{n_g}^{(0)} + \lambda V_{n_g n_g} \end{bmatrix}$

Zatem

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

wyznacza nam stany własne:

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

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

$$\hat{H}'_0 |\Phi_k\rangle = E_k^{(0)} |\Phi_k\rangle ; k \neq n$$

$$\hat{H}'_0 |\tilde{\Phi}_{np}\rangle = \tilde{E}_{np}^{(0)} |\tilde{\Phi}_{np}\rangle ; \beta = 1, 2, \dots, g$$

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

Zauważamy, iż nauczyliśmy się po rozważaniu (8) degeneracji nie zostają całkowicie zniszczone, tzn. istnieją np. stany $|\tilde{\Phi}_{np}\rangle$ i $|\tilde{\Phi}_{np'}\rangle$ odpowiadające tej samej wart. energii E_{np} , to element macierzowy $\langle \tilde{\Phi}_{np} | (\hat{V} - \hat{V}') | \tilde{\Phi}_{np'} \rangle = 0$.

Dzięki temu w sześciu przybliżeniu nie wystąpi niezkoncentrowanie.

Powyższa procedura można stosować również w przypadku gdy energie nie są zdegenerowane, ale zachodzi:

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

dla pełnych n, m . W takim przypadku rachunek zaburzeń zastosowany do stanu n -tego lub m -tego może prowadzić do błędnego wyniku. Należy więc najpierw rozwiązać zagadnienie

w formie dla

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

definiujące nowe stany $|\tilde{\Phi}_n\rangle = C_n^1 |\Phi_n\rangle + C_m^1 |\Phi_m\rangle$

$$|\tilde{\Phi}_m\rangle = C_n^2 |\Phi_n\rangle + C_m^2 |\Phi_m\rangle$$

odpowiedające energiom: $\tilde{E}_1^{(0)}$; $\tilde{E}_2^{(0)}$ ~~i dopiero d~~

Teraz można już stosować rozważanie w sześciu perturbacyjnym (z uzupełnieniem o zaburzenia).

Przykład

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

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

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

~~stany własne~~

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

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

Znajdziemy przybliżenie $E_n(\lambda)$ stosując rachunek zrównoważony.

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

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

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

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

Skorzystamy z własności op. kreatywnej i anihilacyjnej dla osc. harmonicznego:

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

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

Zatem

$$\begin{aligned} \langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_m \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle \Phi_n | \hat{a}^2 | \Phi_m \rangle + \langle \Phi_n | (\hat{a}^\dagger)^2 | \Phi_m \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle \Phi_n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | \Phi_m \rangle + 2\langle \Phi_n | \hat{a}^\dagger\hat{a} | \Phi_m \rangle \right) \end{aligned}$$

Rozważmy

~~$\langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_m \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^2 (\hat{a}^\dagger)^n | \Phi_0 \rangle$~~

Rozważamy

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

stąd

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

Podobnie

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

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 $\langle \Phi_n | \hat{a}^+ \hat{a} | \Phi_m \rangle = n \delta_{n,m}$ (patrz w k I)

Zatem

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

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

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

Porównajmy z rozwinięciem doładuj energii ukoś $\lambda=0$:

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

2° Rachunek zaburzeń u przypadku zależności zaburzenia od czasu

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

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

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

W tym celu musimy skonstruować rachunek zaburzeń dla pełnego równia Schrödingera: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$

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

Rozważmy $|\psi(t)\rangle$ u bazie stanów ustalonych \hat{H}_0 :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle ; |\psi(0)\rangle = |\Phi_u\rangle \Rightarrow a_k(0) = \delta_{ku}$$

Podstawiając do równa Schrödingera otrzymujemy: warunek początkowy

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle + i\hbar \sum_k a_k(t) \left(-\frac{iE_k^{(0)}}{\hbar}\right) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\Phi_k\rangle = \\ = \sum_k a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \hat{H} |\Phi_k\rangle = \sum_k a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} E_k^{(0)} |\Phi_k\rangle + \\ + \sum_k a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} \lambda \hat{V}(t) |\Phi_k\rangle \end{aligned}$$

Działając na polaryzacji z lewej strony przez ketowem $\langle \Phi_u |$ otrzymujemy:

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

Oznaczamy $\langle \Phi_u | \hat{V}(t) | \Phi_k \rangle = V_{uk}(t)$

Ponieważ $\langle \Phi_u | \Phi_k \rangle = \delta_{ku}$ stąd

$$\frac{da_u}{dt} e^{-iE_u^{(0)}t/\hbar} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} V_{uk}(t)$$

czyli

$$(*) \quad \frac{da_u}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k a_k(t) e^{i(E_u^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar} V_{uk}(t)$$

Jest to jasne r-nie (wtedy r-n) na współczynniki $a_m(t)$, pozwalające obliczyć a_m dla dowolnego t przy ustalonych warunkach początkowych (w naszym przypadku $a_m(0) = \delta_{mu}$). Jest to wtedy r-ni warunkowych r-odu pierwszego, ponieważ r-nie Schrödingera jest r-niem r-odu pierwszego względem czasu.

Szukamy rozwiązań w postaci szeregu:

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

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

Podstawiając do (*) i porzucając wyrazy przy potęgach λ otrzymujemy kolejne według 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 oznaczamy $\omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} \left[\frac{1}{s} \right]$

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

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

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

Zatem $a_m^{(0)} = J_{mn} - 2$ warunek początkowy

Pierwszy według rachunku zaburzeń:

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

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

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

Rozważmy więc jako szczególny przypadek zaburzenie harmonikum.

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

Wtedy
$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk} t'} (e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'}) V_{mk}$$

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

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

Zauważmy, że wyrażenie w nawiasie jest zazwyczaj różne od zero gdy

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

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

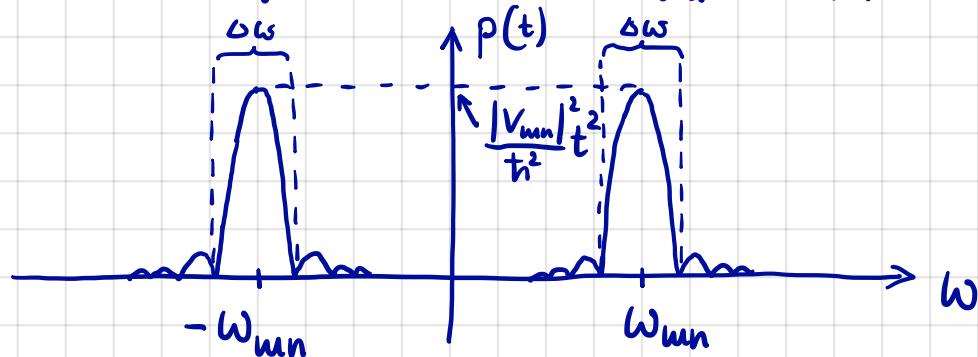
wynosi:

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

$$\left| \frac{e^{i(\omega_{mn} \pm \omega)t} - 1}{\omega_{mn} \pm \omega} \right|^2 = \frac{1 + e^{i(\omega_{mn} \pm \omega)t} + e^{-i(\omega_{mn} \pm \omega)t} + 1}{(\omega_{mn} \pm \omega)^2} = \frac{2 + 2 \cos((\omega_{mn} \pm \omega)t)}{(\omega_{mn} \pm \omega)^2} = \\ = \frac{4 \sin^2 \left[\frac{(\omega_{mn} \pm \omega)t}{2} \right]}{(\omega_{mn} \pm \omega)^2}$$

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

gdzie λ zostało skrócone do \hat{V} : $\lambda V_{mn} \rightarrow V_{mn}$

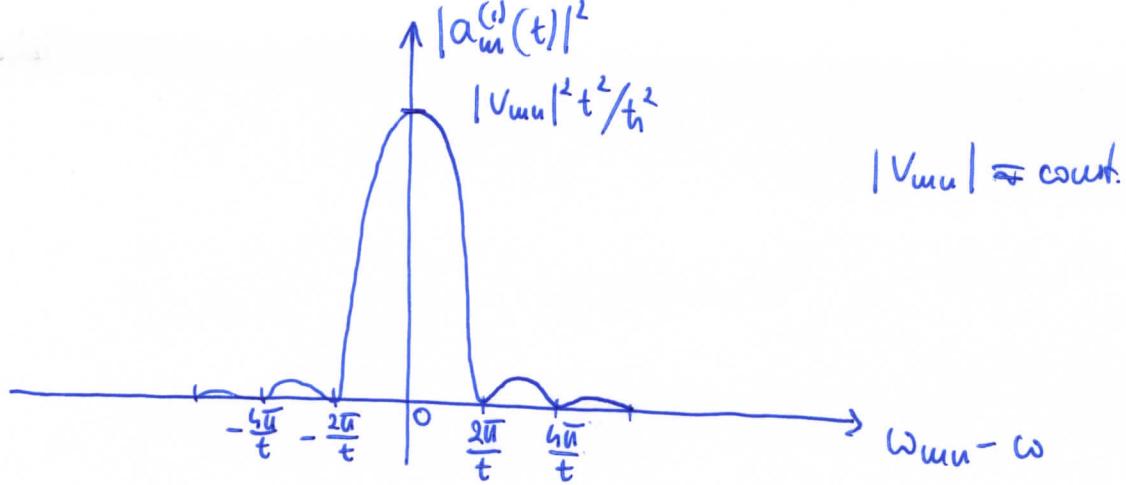


$$\hbar \omega_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$$

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

Zatem w pierwszym razie rachunku układ poddany zaburzeniu harmoniciemu o częstotliwości ω będzie z największym prawdopodobieństwem ulegać do stanu o energii $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} + \hbar \omega$ lub ulegać deeksytacji (emisja ujemna) do stanu o energii $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} - \hbar \omega$.

Czon interferencyjny staje się znikomy (ω porównanie z maksymalną wartością $p(t)$) dla czasu $t \gg \frac{1}{\omega_{mn}}$, bo $\Delta \omega = \frac{4\pi}{t}$ (patrz rysunek).



Uwagi

- Pod wpływem słabego zaburzenia harmonicznego o częstotliwości ω stanu układu kuantowego, po odprowadzeniu dąrgu czasie, z dużym prawdopodobieństwem będzie mieć energię $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)} + \hbar\omega$ gdzie $E_n^{(0)}$ było energią początkową układu.
- W przypadku układu kuantowego o widmie dyskretującym sposobem na spowodowanie przejścia układu w stan o energii E_1 do stanu o energii E_2 ($E_2 > E_1$ - wzbudzenie układu) jest poddanie układu zaburzenia o częstotliwości $\hbar\omega = E_2 - E_1$ - jest to ujemne rezonans.
- Stosunkowość rachunku zaburzeń:

$$|a_m^{(0)}(t)|^2 \ll 1$$

Jest to prawdziwe warunek na t . Dla stanów rezonansowych (czyli taliich że $E_m^{(0)} = E_n^{(0)} + \hbar\omega$) warunek ten po krótkim czasie powinno być spełniony (patrz rysunek).

- O prawdopodobieństwie przejścia decyduje wartość wielkości elementu macierzystego potencjalu zaburzającego:
 $V_{mn}(t) = \langle \Phi_m | \hat{V}(t) | \Phi_n \rangle$

Wzbudzenie układu do stanów o widmie ciągim

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

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

W przypadku widma ciągłego należy zastąpić sumowanie całkowaniem:

$p(t) = \int_a^b dx |\alpha_x^{(1)}(t)|^2$ - gdzie parametr x numeruje stany widma ciągłego

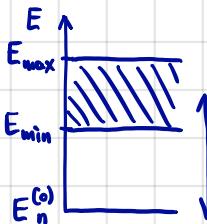
Wygodnie jest zastąpić x przez energię E :

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

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

stanów przypadających na przedział: $(E, E+dE)$

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



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

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

Wtedy:

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

Zauważmy, że dominujący wkład do całki pochodzi od otoczenia $x=0$ tzn. od

$$\text{energii bliskich } E = E_n^{(0)} + \hbar\omega$$

Pry założeniu, że $g(x)$ oraz $|\langle \alpha(x) | \hat{V} | \Phi_n \rangle|^2$ są wolnoruchimi funkcjami x

w otoczeniu $x=0$ otrzymujemy:

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

Rozciąggnięcie 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:

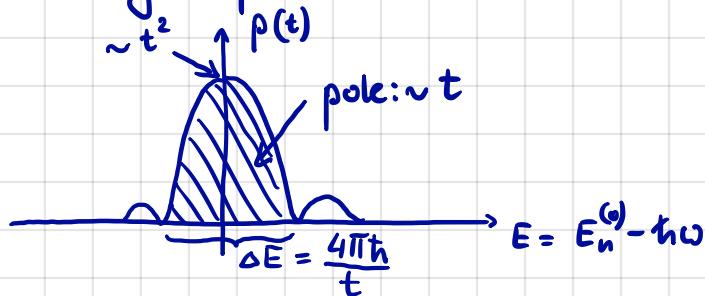
$$p(t) = 2\pi \frac{t}{\hbar} g(E_m^{(0)}) |\langle \alpha(E_m^{(0)}) | \hat{v} | \Phi_n \rangle|^2$$

Zatem prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu wynosi:

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

Relacja (*) nazywa się zasadą reguły Fermiego (Fermi golden rule).

i) Załaczymy, że w odróżnieniu od p-stwa uzbudzenia do stanu dyskretnego, który rośnie jak t^2 w 2. zasadzie reguły Fermiego: $p(t) \sim t$. Równica bierze się stąd, że 2. zasada reguły Fermiego opisuje uzbudzenie do grupy stanów końcowych



ii) 2. zasada reguły Fermiego stosuje się do czasów odpowiednio dłużnych, dla których przedział $\Delta E = \frac{4\pi\hbar}{t}$ jest na tyle mały, że wielkość $g(E) |\langle \alpha(E) | \hat{v} | \Phi_n \rangle|^2$ jest w tym przediale z dobrym przybliżeniem stała.

iii) Ponadto t musi być na tyle małe aby stosowaćłyby się rachunki zaburzeń t2n:

$$|\Gamma t| \ll 1$$

Sprzeczenie stanu dyskretnego do widma ciągłego (czas życia układu)

Rozważmy przypadek zaburzenia stałego w czasie, t2n.

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

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

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

Założymy że przedział energii E jestma ciągłygo zakresu i sobie E_n .

Spełnione są następujące warunki ortogonalności:

$$\begin{cases} \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = 1 \\ \langle \Phi_n | \alpha(E) \rangle = 0 \\ \langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha'), \text{ oraz warunek zupełności: } |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| + \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \end{cases}$$

Założymy, że $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \langle \alpha | \hat{V} | \alpha \rangle = 0$ (jeśli takie elementy macierzowe będąby niezerowe to mówią je włączone do \hat{H}_0).

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

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

Pytanie: jakie jest p-stwo, że układ odstępny i chwil po początkowej $t=0$ w stanie $|\Phi_n\rangle$ znajdzie się po czasie t w stanach widma ciągłygo?

Stosując zasadę reguły Fermiego dla przypadku $\omega=0$ (stałe zaburzenie) mamy:

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

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

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

Rozważmy zachowanie $p(t)$ dla dużych t wykorzystując poza pierwszy krok rachunku zaburzeń:

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

Konstatując z tego, iż \hat{V} nie zależy od czasu oraz $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \langle \alpha | \hat{V} | \alpha \rangle = 0$

mamy:

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

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

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

Rozważmy całkę:

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

gdzie

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

Funkcja $f(E)$ jest ujemna, co oznacza, że całka jest znaczco 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 $\int_0^t e^{-i(E-E_n)(t-t')/\hbar} dt'$ jest rozbicia gdy $t \rightarrow \infty$ i $E = E_n$.

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

Ponieważ interesują nas dłuższe czasy, zatem mamy położyć $t \rightarrow \infty$, czyli:

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

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

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

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

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

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

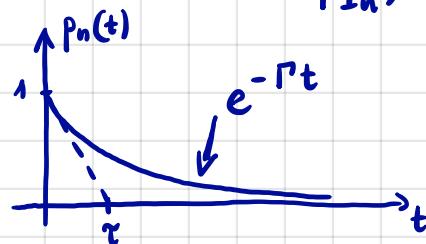
$$(*) \quad \alpha_n(t) \approx e^{-\frac{\Gamma t}{2}} e^{-i \delta E_n \cdot t / \hbar}$$

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

Poniższy wykres jest stosowny dla długich czasów: $t \gtrsim \frac{1}{\Gamma}$

Wzór $(*)$ określa prawo rozpadu układu kuantowego.

Czas życia układu w stanie $|\Phi_n\rangle$ określany jako $\tau = \frac{1}{\Gamma}$



Uwierzajmy, że spłaszczenie stanu ze stanami widma ciągłego powoduje dwa efekty:

1) Nieoduracalny rozpad układu kuantowego, tzn. przejście układu do widma ciągłego (cośon $e^{-\Gamma t/2}$ we wzorze $(*)$)

2) Modyfikacja energii E_n na skutek spłaszczenia 2 widma ciągłym:

$$\delta E_n = P \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE g(E) \frac{|\langle \Phi_n | \hat{V} | \alpha(E) \rangle|^2}{E_n - E} \quad \leftarrow \begin{cases} \text{Porólkuj 2 poprawka do} \\ \text{energii w drugim miedzicie} \\ \text{rachunku zaburzeń} \end{cases}$$

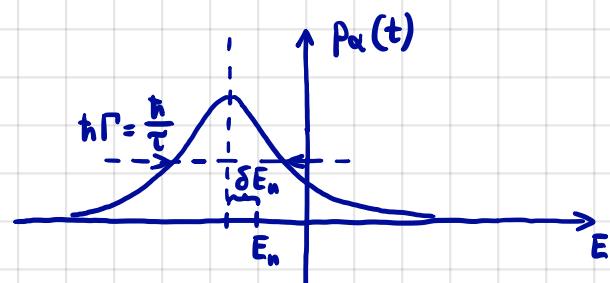
Rozkład energii stanów końcowych po długim czasie: $t \gg \frac{1}{\Gamma}$

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

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

czyli

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



Ponieważ $|\langle \Phi_n | \hat{V} | \alpha(E) \rangle|^2$ jest praktycznie stała 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 $\hbar\Gamma = \frac{\hbar}{T}$ odwrotnie proporcjonalnie 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, ułtady molekularne,
- rozpadów cząstek elementarnych,
- ...

Zauważamy, że opisany proces rozpadu upodadza zasadę niezniczoności pomiędzy czasem życia a szerokością stanu, która odzwierciedla rozkład energii końcowych.

Im krótszy czas życia ułtadu kuantowego tym większy rozkład energii stanów końcowych:

$$\Delta E \tilde{t} = \hbar \quad ; \quad \Delta E = \hbar\Gamma$$

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

Tego typu relacje postaci: $\boxed{\Delta E \cdot t \sim \hbar}$ noszą nazwę relacji niezniczoności domieszczonej czasu i energii.

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

Stany "czyste" i mieszane

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

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

- unioskujemy o f-falowej na podstawie dokonanych pomiarów.
- interesujący nas układ jest częścią większego układu, z którym może wymieniać energię, ■■■ psd, itd. (np. respol kuantowy w mechanice statystycznej).

W takim przypadku o układzie mówimy jedynie jedynie, że np. w pewnej chwili czasu to zasiedla się 2 prawdopodobieństwa p_1 w stanie $|\Phi_1(t)\rangle$, z p-stwem p_2 w stanie $|\Phi_2(t)\rangle$, it.d.

Taki stan układu nazywamy stanem mieszającym

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 mieszającym używamy operatora gęstości: ~~$\hat{\rho}(t)$~~ $\hat{\rho}(t) = \sum_i |\Phi_i(t)\rangle p_i \langle \Phi_i(t)| = \sum_i \hat{P}_i(t) p_i$

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

Zauważamy, że $\hat{g}(t)^+ = \hat{g}(t)$ oraz

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

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

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

Taki przypadek odpowiada stanowi "czystym", ponieważ
oznacza, że układ znajduje się w stanie 1 w stanie
 $|\Phi_j(t)\rangle$, czyli jego f. falowa wynosi $\hat{\Phi}_j(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \Phi_j(t) \rangle$.

Zatem operator gestosci $\hat{g}(t)$ opisuje zarysowanie stanu
"czystego" ($[\hat{g}(t)]^2 = \hat{g}(t)$) i stanu mieszane ($[\hat{g}(t)]^2 \neq \hat{g}(t)$).

Pry pomocy $\hat{g}(t)$ możemy obliczyć wartość średnią
dowolnego op. \hat{A} w stanie mieszającym :

$$\bar{A}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i p_i \langle \Phi_i(t) | \hat{A} | \Phi_i(t) \rangle = \sum_i \langle \Phi_i(t) | \hat{A} \hat{g}(t) | \Phi_i(t) \rangle =$$

$$\text{czyli } = \text{Tr} \{ \hat{A} \hat{g}(t) \}$$

Zauważamy, że wartość $\bar{A}(t)$ nie zależy od wyboru bazy
ortogonalnej, po której wykonujemy sumowanie.

Dowód

Rozważmy dowolną bazę ortogonalną $|\psi_k\rangle$; ~~$\langle \psi_k | \psi_l \rangle = \delta_{kl}$~~ $\langle \psi_k | \psi_l \rangle = \delta_{kl}$

$$\text{Tr} \{ \hat{A} \hat{g} \} = \sum_k \langle \psi_k | \hat{A} \hat{g} | \psi_k \rangle = \sum_k \underbrace{\langle \psi_k | \hat{A} | \psi_l \rangle}_{\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \hat{I}} \langle \psi_l | \hat{g} | \psi_k \rangle =$$

$$\sum_i p_i \langle \Phi_i(t) | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_l \rangle \langle \psi_l | \hat{g} | \psi_k \rangle =$$

$$= \sum_{k,l,i} p_i \langle \Phi_i(t) | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_l \rangle \langle \psi_l | \Phi_i(t) \rangle =$$

$$= \bar{A}(t)$$

Zatem

$$\boxed{\bar{A}(t) = \text{Tr} \{ \hat{A} \hat{g}(t) \}}$$

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

$$\bar{A}(t) = \text{Tr}\{\hat{A}|\hat{\varphi}(t)\rangle\} = \sum_i \delta_{ij} \langle \Phi_i(t) | \hat{A} | \Phi_j(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle_{\Phi_j}$$

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

Evolução czasowa $\bar{A}(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}}{dt} &= \frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{A}|\hat{\varphi}(t)\rangle\} = \frac{d}{dt} \sum_k \langle \varphi_k | \hat{A} | \hat{\varphi}(t) \rangle = \\ &= \sum_k \langle \varphi_k | \hat{A} \frac{d\hat{\varphi}}{dt} | \varphi_k \rangle = \text{Tr}\{\hat{A} \frac{d\hat{\varphi}}{dt}\} \end{aligned}$$

ale

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\varphi}}{dt} &= \sum_i p_i \frac{d}{dt} |\Phi_i(t)\rangle \langle \Phi_i(t)| = \sum_i p_i \left(\frac{d}{dt} |\Phi_i(t)\rangle \right) \langle \Phi_i(t)| + \\ &+ \sum_i p_i |\Phi_i(t)\rangle \frac{d}{dt} (\langle \Phi_i(t)|) = \begin{cases} \frac{d}{dt} |\Phi_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\Phi_i(t)\rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \Phi_i(t)| = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Phi_i(t)| \hat{H}^+, \hat{H}^+ = \hat{H} \end{cases} \\ &= \sum_i \frac{p_i}{i\hbar} \hat{H} |\Phi_i(t)\rangle \langle \Phi_i(t)| - \sum_i \frac{p_i}{i\hbar} |\Phi_i(t)\rangle \langle \Phi_i(t)| \hat{H} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\varphi}(t)] \end{aligned}$$

Czyli

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{\hat{A}[\hat{H}, \hat{\varphi}(t)]\} = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{\hat{A}(\hat{H}\hat{\varphi}(t) - \hat{\varphi}(t)\hat{H})\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{\hat{A}\hat{H}\hat{\varphi}(t) - \hat{H}\hat{A}\hat{\varphi}(t)\} = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{[\hat{A}, \hat{H}]\hat{\varphi}(t)\} \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy z właściwości: $\text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = \text{Tr}\{\hat{B}\hat{A}\}$

zademonstrowanej dla dowolnych op. \hat{A} i \hat{B} (prawidłże).

Podsumowując:

$i\hbar \frac{d\bar{A}}{dt} = \text{Tr}\{[\hat{A}, \hat{H}]\hat{\varphi}(t)\}$	$; i\hbar \frac{d\hat{\varphi}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\varphi}(t)]$
--	--

Dygresja: W mechanice klasycznej analogiem $\hat{\varphi}$ jest funkcja $\varphi(\vec{q}, \vec{p}, t)$, która określa gesturę p-stwa w chwili czasu t z uzupełnieniem ujemnego o współrzednych: $\vec{q}(t); \vec{p}(t)$.

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

Wstęp do kwantowej teorii wozpraszania

Cząstka swobodna i problem uzupełniania:

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

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

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

W reprezentacji położenioowej:

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

Stany $|\psi_{\vec{p}}\rangle$ tworzą bazę stanów orthonormalnych, \vec{k} -wektory falew

nienormowanych:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{p}} | \psi_{\vec{p}'} \rangle &= \int d^3r (\psi_{\vec{p}} | \vec{r}) \langle \vec{r} | \psi_{\vec{p}'} \rangle = |N|^2 \int d^3r e^{i(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{r} / \hbar} = \\ &= |N|^2 \int d^3r e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} = |N|^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \end{aligned}$$

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

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

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

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

~~Skutek / wpływ fukusy / falej jest / stan / skutku /~~

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

Ponieważ równanie rynia Schrödingera przy uzupełnieniu poczętnym: $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, 0) = \psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ daje: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \hat{H}_0 \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$

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

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

stan stacjonarny opisany funkcją falew:

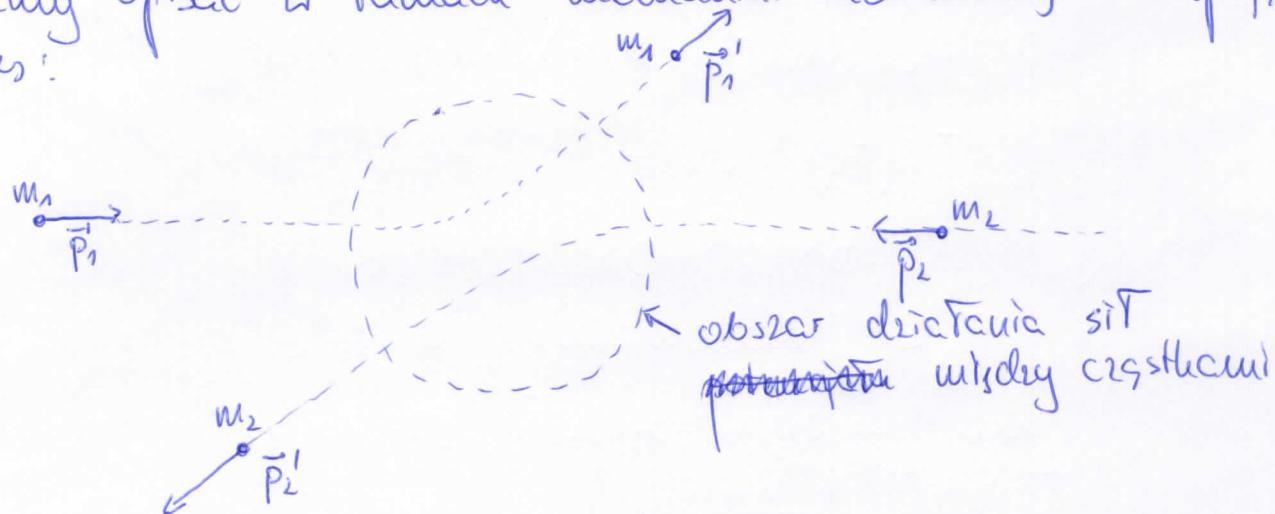
$$(\ast\ast) \Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\epsilon}{\hbar} E_p t} = e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} E_p t} \langle \vec{r} | \Psi_{\vec{p}} \rangle$$

odpowiada częstce o pradze $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ i energią $E_p = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Stany takie są uogólnione do stosowania, choć są wielnor
molek, ponieważ są stanami własnymi \hat{H}_0 .

Uniwersalna moina daje nam wzajemną kombinację dwóch stanów ($\ast\ast$) (czyli paczki falowej). Jednakże istoty otrzymujemy stany nie będące stanami własnymi \hat{H}_0 .

Rozpraszanie jako zadanie dwóch ciał:

Chcemy opisać w ramach mechaniki kwantowej następujący proces:



$$\text{Zatem } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

gdzie $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ jest funkcja falowa dwóch częstek.

Przy czym spełnione są następujące warunki:

$$(*) \begin{cases} \lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi_{\vec{p}_1}(\vec{r}_1, t) \Psi_{\vec{p}_2}(\vec{r}_2, t) \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \sum_{\vec{p}'_1, \vec{p}'_2} \Psi_{\vec{p}'_1}(\vec{r}_1, t) \Psi_{\vec{p}'_2}(\vec{r}_2, t) c_{\vec{p}'_1 \vec{p}'_2} \quad i \quad \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \end{cases}$$

Ponieważ w procesie rozpraszania energia całkowita układu jest zachowana zatem wystarczy rozwiązać zadanie niezależne od czasu: $\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$$\text{golrie} \quad E = E_{\bar{p}_1} + E_{\bar{p}_L} = E_{\bar{p}_1^1} + E_{\bar{p}_L^1}$$

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

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

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

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

Motua vosepcfolací na 2 r-hic: jeden opisující ruch
široké ruky (slibodny) i druhé opisující ruch
hluboké ruky (patr. atomu vodoru) postaci!

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

$$\text{gdue } \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = e^{-\frac{1}{\hbar} P \cdot R} \psi(\bar{r})$$

$$\text{OTQ2} \quad E = \frac{P}{2M} + \varepsilon$$

Ponieważ ruch swobodny może nie umożliwić zadanych kryteriów do procesu wyprenansowania zatem cota informacja o procesie wyprenansowania jest zawarta w r-ku (*).

Warunki biogosp (x) sprawadzaję się teraz do:

~~$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ikx}$$~~

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

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

Spodziewamy się zrealizować wzajemne postacie:

$$(a) \quad \Psi_e(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \Psi_e^{(+)}(\vec{r})$$

takie叠加

R-nie (**) motyw Lapise'a w postaci:

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

$$(\text{***}) (\nabla^2 + k^2) \psi_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{2\mu}{h^2} V(\vec{r}) \psi_\varepsilon(\vec{r})$$

Ogólne rozwijanie r-nia (**) zgodne z warunkiem (a) ma postaci: $\psi_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{h^2} \int d^3r' G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_\varepsilon(\vec{r}')$

~~Względem~~ gdzie $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ jest względem równania:

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

Sprawdzenie:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_\varepsilon(\vec{r}) = (\nabla^2 + k^2) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{h^2} \int d^3r' (\nabla^2 + k^2) G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_\varepsilon(\vec{r}') = \\ = 0 + \frac{2\mu}{h^2} \int d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_\varepsilon(\vec{r}') = \frac{2\mu}{h^2} V(\vec{r}) \psi_\varepsilon(\vec{r})$$

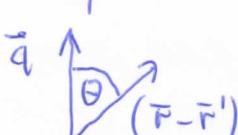
Funkcja $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ nazywamy funkcją Green'a.

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

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

Czyli

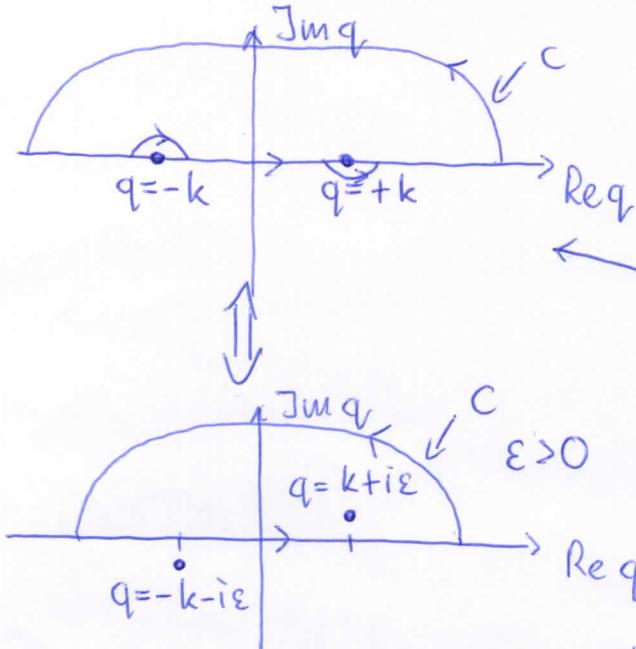
$$G_0(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{0-1}^{\infty} q^2 dq d(\cos\theta) d\varphi \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'| \cos\theta}}{k^2 - q^2}$$

\vec{q} 

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

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

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i |\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{k^2 - q^2} q dq \quad \begin{matrix} \uparrow \\ q \rightarrow -q \end{matrix}$$



Ta całka jest nieokreślona dopóki nie zdefiniujemy sposobu objęcia biegunków.

Tak wybieramy:
Jak się okazuje taki wybór jest zgodny z warunkiem (a).

$$G_0^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi)^2 i |\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{(k+i\epsilon)^2 - q^2} dq = \left\{ \begin{array}{l} \text{Lemat} \\ \text{Jordana} \end{array} \right\} =$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi)^2 i |\vec{r} - \vec{r}'|} \int_C \frac{e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} dq}{(k+i\epsilon)^2 - q^2} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Przez residue} \\ \text{Biegun: } q = k + i\epsilon \end{array} \right\} =$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi)^2 i |\vec{r} - \vec{r}'|} 2\pi i \frac{e^{i(k+i\epsilon)|\vec{r} - \vec{r}'|}}{(k+i\epsilon)^2 - (k-i\epsilon)^2} (k+i\epsilon)$$

Czyli

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

Stąd

$$\psi_\epsilon(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_\epsilon(\vec{r}')$$

R-nie (a) jest "rozwiązańiem" r-nia Schrödingera dla ruchu wstępniego ostatek ze szczególnym uzupełnieniem biegunkami.

Zauważmy ponadtem, i.e. $G_0^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') \xrightarrow{|\vec{r}'| \rightarrow \infty} -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}$ opisuje rozechodzącą się falą kulistą.

Drugi człon fukcji (Φ) przedstawia zatem superpozycję fal kulistych generowanych z każdego punktu \vec{r}' , dla którego $V(\vec{r}') \neq 0$ (por. wzajemna Huygheus).

Punkty czynny i amplituda wibracji

strumień cząstek
padających

$$dS = r^2 d\Omega ; \quad r \gg R$$

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$$

R - zasięg potencjału.

Klasycznie:

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

Kwantowo: fali wibracyjnej

~~$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{wartość gęstości prądu g-stwa} \check{j} \text{ przechodzącego przez pow. } dS}{\text{wart. gęstości prawdopodobieństwa fali padającej.}}$$~~

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

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

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

Wartość gęstości prawdopodobieństwa fali padającej:

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

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

Wartość gestosci prądu stwa fali wypromowanej przedstawiająca przez polienekwens \vec{ds} :

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

przy czym $|\vec{r}| \gg R$ - czasig oddziaływanie

$$\vec{ds} = \vec{n} r^2 d\Omega, \quad \vec{n} = \boxed{\vec{r}} / r$$

Zatem

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

Rozważmy $\varphi_{\varepsilon}(\vec{r})$ dla dużych $|\vec{r}|$ (tzn. dlio dalekich niż czasig oddziaływanie wyznaczony potencjałem $V(\vec{r}) \neq 0$).

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

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

$$\begin{aligned} |\vec{r}-\vec{r}'| &= \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2} \approx \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + (-2xx' - 2yy' - 2zz')} \approx \\ &\approx \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \left[1 + \frac{xx' + yy' + zz'}{x^2 + y^2 + z^2}\right] = r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} \end{aligned}$$

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

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{r} \cdot \vec{r}'} \boxed{}$$

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

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

$$\text{gdzie } \boxed{A(\theta, \varphi) = -\sqrt{2\pi} \frac{\mu}{\hbar^2} \int d^3 r' e^{-ik\vec{r} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi_{\varepsilon}(\vec{r}')} \left. \begin{array}{l} \text{amplituda} \\ \text{rozpraszania} \end{array} \right.$$

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

Czyli

$$\begin{aligned} |\vec{f}_{sc} \cdot \vec{ds}| &= \left| \frac{\hbar}{2\mu i} \frac{1}{(2\pi)^3} |A(\theta, \varphi)|^2 \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \right| r^2 d\Omega = \\ &= \frac{\hbar}{2\mu} \frac{1}{(2\pi)^3} |A(\theta, \varphi)|^2 \left| \frac{e^{-ikr}}{r} \left(ik \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2} \right) - c.c. \right| r^2 d\Omega \\ &= \frac{\hbar}{2\mu} \frac{1}{(2\pi)^3} |A(\theta, \varphi)|^2 \frac{2k}{r^2} r^2 d\Omega \end{aligned}$$

Zatem

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

Czyli

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

- Wzór (**) jest zdefiniowany w układzie średnic masy, tzn. w układzie w którym $\vec{P} = 0$. Przesłanie do tego układu w momencie, w którym zajmujemy się vorw. zagadnienia ruchu względnego częstek powiążeć ruch średnic masy (czyli kładąc $\vec{P} = 0$). Aby przejść do innego laboratopijnego ($\vec{P} \neq 0$) trzeba przekształcić kąty θ i φ . Tym ucinając (**) czyli σ jest takie same we wszystkich układach.
- Zauważmy, że kolejne człony rozwiniecia $\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ znajdują się po podstawieniu do $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ i przejściu: $|\vec{r}| \rightarrow \infty$.
- Ze wzorów (**) i (**) wynika, że cała informacja o wzajemaniu jest zawarta w amplitudzie wypraszania.

Prybliżenie Borna

$$A(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{\mu}{2\pi}} \frac{1}{h^2} \int d^3r' e^{i\vec{k}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi_\epsilon(\vec{r}')$$

Zatrzymyjmy, iż wozressanie jest stałe, tzn. $\varphi_\epsilon(\vec{r}') \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}$

Wtedy

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

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

$$A(\theta, \varphi) \approx -\frac{\mu}{2\pi h^2} \int d^3r' V(\vec{r}') e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}'} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Prybliżenie Borna} \\ \text{dla amplitudy} \\ \text{wzressania.} \end{array} \right.$$

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

Narunek stosowności przybliżenia Borna: $|\varphi_\epsilon^{(+)}(\vec{r})| \ll \left| \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right|$

Czyli

$$\begin{aligned} & \cancel{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}} \cancel{\frac{2\mu}{h^2}} \cancel{\int d^3r'} \cancel{\frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')}}{4\pi h^2 |\vec{r}-\vec{r}'|}} \cancel{V(\vec{r}') \varphi_\epsilon(\vec{r}')} \approx \cancel{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}} \cancel{\frac{\vec{r}=0}{\varphi_\epsilon(\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}} = \\ & = \cancel{\frac{2\mu}{h^2}} \cancel{\frac{1}{4\pi}} \cancel{\int d^3r'} \cancel{\frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{r'}} \cancel{V(\vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}} \cancel{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}} \end{aligned}$$

~~Prybliżenie Borna stosuje się do potencjałów odkł. jest istotny zakres jego zasięgu, jest masy.~~

Musimy pokazać, iż daje to następujący warunek stosowności przybliżenia Borna:

$$\begin{cases} (kR)^3 \frac{\tilde{V}}{\epsilon} \ll 1 & \text{dla } kR \gg 1 \\ (kR)^2 \frac{\tilde{V}}{\epsilon} \ll 1 & \text{dla } kR \ll 1 \end{cases}$$

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

Czasem zdarza się przypadki patologiczne.

Np. dla potencjału kulombowskiego przybliżenie Borna daje wynik dość dobry.

Przykład

Rozważmy potencjał Yukawa postaci: $V(r) = g \frac{e^{-\alpha r}}{r}$; $\alpha > 0$
 $g = \text{const.}$

Obliczamy różniczkowy prawidłowy czynny w przybliżeniu Borna.

$$\begin{aligned}
 A_B(\theta, \varphi) &= -\frac{\mu}{2\pi h^2} \int dr' g \frac{e^{-\alpha r'}}{r'} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}'} = -\frac{\mu}{2\pi h^2} \int_0^{\infty} d\varphi \int_0^{\pi} \sin(\theta) \int_0^{\infty} r' dr' g \frac{e^{-\alpha r'}}{r'} e^{iqr' \cos\theta} \\
 &= -\frac{\mu}{h^2} \int_0^1 d(\cos\theta) \int_0^{\infty} r' dr' g e^{-\alpha r'} e^{iqr' \cos\theta} = \boxed{\int_0^1 d(\cos\theta) \int_0^{\infty} r' dr' g e^{-\alpha r'} e^{iqr' \cos\theta}} \\
 &= -\frac{\mu}{h^2} g \int_0^{\infty} r' dr' e^{-\alpha r'} \frac{1}{iqr'} (e^{iqr'} - e^{-iqr'}) = -\frac{2\mu}{h^2 q} g \int_0^{\infty} dr' \sin(qr') e^{-\alpha r'} = \\
 &= -\frac{2\mu}{h^2 q} g \left[-\frac{1}{q} \cos(qr') e^{-\alpha r'} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{1}{q} \cos(qr') \alpha e^{-\alpha r'} dr' \right] = \\
 &= -\frac{2\mu}{h^2 q} g \left[\frac{1}{q} - \frac{1}{q^2} \alpha \sin(qr') e^{-\alpha r'} \Big|_0^\infty - \frac{\alpha^2}{q^2} \int_0^\infty \sin(qr') e^{-\alpha r'} dr' \right]
 \end{aligned}$$

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

$$A_B(\theta, \varphi) = A_B(\theta) = -\frac{2\mu}{h^2} g \frac{1}{q^2 + \alpha^2}; \quad q = |\vec{k} - \vec{k}_r| \bullet \\ q^2 = k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}_r + k_r^2 = 2(k^2 - \vec{k} \cdot \vec{k}_r)$$

Niech θ będzie kątem pomiędzy \vec{k} i \vec{k}_r :

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

$$\text{Czyli } A_B(\theta) = -\frac{2\mu}{h^2} g \frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha^2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{dQ} = \frac{4\mu^2 g^2}{(4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha^2)^2 h^4}$$

Wtedy $\alpha = 0$ i $g = Z_1 Z_2 e^2$ otrzymujemy zasadę Rutherforda

$$\left| \frac{d\sigma}{dQ} = \left(\frac{\mu^2 Z_1 Z_2 e^2}{2h^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2 \right| \leftarrow \begin{array}{l} \text{Różniczkowy prawidłowy czynny w} \\ \text{ukt. średnicowej dla uderzenia} \\ \text{częstotliwości } Z_1 e \text{ i } Z_2 e. \end{array}$$

Ruch cząstki kwantowej i klasycznej

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

R-nie to ma wzorzącą postać: (*) $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$
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  $\hat{U}(t-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$

jest operatorem ewolucji i ma następujące właściwości:

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

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 fizycznego operatora ewolucji.

Rozliczamy bazy ortogonalne w p. Hilberta: $|\Phi_n\rangle$

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

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

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

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

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

Widac zatem, że element macierzowy operatora ewolucji:

$U_{kk'}(t-t_0) = \langle \Phi_k | \hat{U}(t-t_0) | \Phi_{k'} \rangle$ określa amplitudę przejścia z stanu $|\Phi_{k'}\rangle$ do stanu $|\Phi_k\rangle$, który u chwili t_0 znajdował się w stanie $|\Phi_{k'}\rangle$ i który u chwili t u znajdzie się w stanie $|\Phi_k\rangle$.

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

Rozważmy teraz F-ukie (ψ) w reprezentacji położeniowej:

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

$$(czyli \quad \psi(\vec{r}, t) = \int U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) \psi(\vec{r}', t_0) d^3 r')$$

$$\text{gdzie oznaczamy } U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) = \langle \vec{r} | \hat{U}(t-t_0) | \vec{r}' \rangle.$$

Zbadajmy strukturę funkcji $U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0)$, która określa amplitudę p-stre zadejścia cząstek w chwili t w punkcie \vec{r} , jeśli w chwili t_0 znajdują się w punkcie \vec{r}' .

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

$$\text{gdzie } \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 : \hat{V} = V(\vec{r})$$

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

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

$$\begin{aligned} \text{Rozważmy jednak: } & \lim_{\tau \rightarrow 0} \hat{U}(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow 0} e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{T} + \hat{V})\tau} = \\ & = \lim_{\tau \rightarrow 0} (1 - \frac{i}{\hbar}(\hat{T} + \hat{V})\tau + O(\tau^2)) = \lim_{\tau \rightarrow 0} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} \end{aligned}$$

$$\text{Ale 2 wartości op. } \hat{U} \text{ wynika iż: } \hat{U}(t-t_0) = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} [\hat{U}(\tau)]^N$$

Czyli

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

Zatem

$$U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ N\tau = t-t_0}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_{N-1} \langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} | \vec{r}_{N-1} \rangle \langle \vec{r}_{N-1} | \dots | \vec{r}_1 \rangle \langle \vec{r}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} | \vec{r}' \rangle$$

Rozważmy element macierzowy:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \langle \vec{r}_{\text{all}} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} | \vec{r}_{\text{all}} \rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \int d^3 r \int d^3 p \langle \vec{r}_{\text{all}} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\tau} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\tau} | \vec{r}_{\text{all}} \rangle$$

$$\text{gdzie skorzystaliśmy z tego, iż } \int d^3 r | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | = \mathbb{I} \text{ i } \int d^3 p | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | = \mathbb{I}$$

Zauważmy, że

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

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

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

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

Zatem

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

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

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

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

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

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

czyli

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

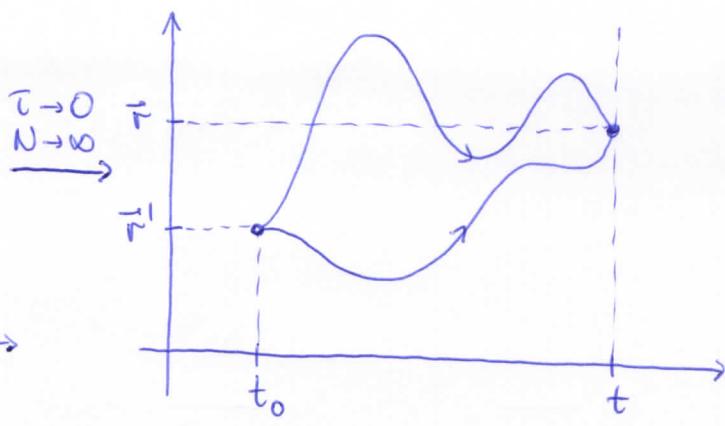
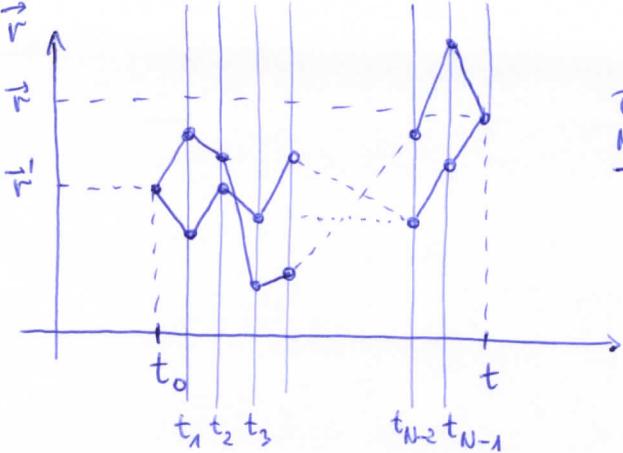
gdzie $\vec{v}_i = \vec{G}(t_i) ; \vec{r}_i = \vec{r}(t_i) ; t_i = i\tau ; i = 1, 2, \dots, N$

Zatem

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

f. Lagrange'a

Wzór (2) pozwala policzyć $U(\vec{r}, \vec{r}', t - t_0)$ dla wybranego potencjału $V(\vec{r})$.



Zatem moimy zapisać:

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

gdzie przez $S[\vec{D}\vec{r}]$ oznaczamy $\lim_{\substack{\hbar \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ N\tau \rightarrow t - t_0}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar dt} \right)^{\frac{3N}{2}} S d_{\vec{r}_1}^3 \dots d_{\vec{r}_{N+1}}^3$

Zatem amplituda prawdopodobieństwa jest równa sumie po liniowych trajektoriach łączących punkty $\vec{r}' \approx \vec{r}$, przy czym wtedy 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: $\hbar \rightarrow 0$

Rozważmy postać wyrażenia (\star) lub $(\star\star)$ w granicy $\hbar \rightarrow 0$.

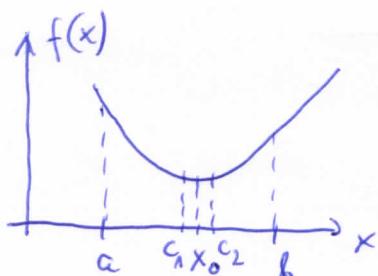
Wynik pomocniczy:

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

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

Dodatek

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) : $f'(x) \neq 0$

$$\begin{cases} y = f(x) \\ x = \tilde{f}(y) - \text{istnieje f. odwrotna bo } f'(x) \neq 0 \\ dx = f'(y) dy ; \tilde{f}'(y) \neq 0 \text{ bo } f'(x) \neq 0. \end{cases}$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} f(x)} dx =$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{h \rightarrow 0} \int_a^{f(c_1)} f'(y) e^{\frac{i}{h} y} dy = \tilde{f}'(y) \frac{i}{h} e^{\frac{i}{h} y} \Big|_{f(a)}^{f(c_1)} - \frac{i}{h} \int_a^{f(c_1)} \tilde{f}''(y) e^{\frac{i}{h} y} dy = \\
 &= \frac{i}{h} \left[\tilde{f}'(y) e^{\frac{i}{h} y} \Big|_{f(a)}^{f(c_1)} - \int_a^{f(c_1)} \tilde{f}''(y) e^{\frac{i}{h} y} dy \right] = O(h)
 \end{aligned}$$

Analogicznie: $\int_a^b e^{\frac{i}{h} f(x)} dx \xrightarrow{h \rightarrow 0} O(h)$

Rozważmy $\lim_{h \rightarrow 0} \int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{h} f(x)} dx = \begin{cases} \text{jeli } (c_1, c_2) \text{ jest} \\ \text{dostatecznie mały} \\ \text{to } f(x) \approx f(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2 \end{cases} =$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{h \rightarrow 0} \int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{h} [f(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2]} dx = \lim_{h \rightarrow 0} e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \int_{c_1}^{c_2} e^{\frac{i}{h} \frac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2} dx
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{cases} y = x - x_0 \\ dy = dx \end{cases} = \lim_{h \rightarrow 0} e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \int_{c_1 - x_0}^{c_2 - x_0} e^{\frac{i}{h} \frac{1}{2} f''(x_0) y^2} dy = \begin{cases} \text{Niech } c_1 \text{ i } c_2 \\ \text{będą takie iż} \\ c_1 - x_0 = -\varepsilon = -(c_2 - x_0); \varepsilon > 0 \end{cases} = \\
 &= \lim_{h \rightarrow 0} e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} e^{\frac{i}{h} \frac{1}{2} f''(x_0) y^2} dy = \lim_{h \rightarrow 0} 2e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \int_0^\varepsilon e^{\frac{i}{h} \frac{1}{2} f''(x_0) y^2} dy = \begin{cases} z = \frac{1}{2h} f''(x_0) y^2 \\ y = \sqrt{\frac{2h}{f''(x_0)} z} \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{h \rightarrow 0} 2e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \int_0^\infty e^{iz} \frac{1}{\sqrt{f''(x_0)}} \frac{1}{2\sqrt{z}} dz = \lim_{h \rightarrow 0} \sqrt{h} e^{\frac{i}{h} f(x_0)} \underbrace{2 \int_0^\infty e^{iz} \frac{1}{\sqrt{2f''(x_0)z}} dz}_{A(x_0)}
 \end{aligned}$$

Czyli dominujący wkład do całki $\int_a^b e^{\frac{i}{h} f(x)} dx$ dla granicy $h \rightarrow 0$ wynosi ~~okolica~~ otoczenie punktu $x_0 \in (a, b)$, dla których $f'(x_0) = 0$: $\lim_{h \rightarrow 0} \int_a^b e^{\frac{i}{h} f(x)} dx = \sqrt{h} A(x_0) e^{\frac{i}{h} f(x_0)}$

Rozważmy teraz

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

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

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

Dominujący wkład to całki pochodzą od tych \vec{r}_j dla których

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

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

$$\text{ale} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ddot{\vec{r}}_{j+1} - 2\ddot{\vec{r}}_j + \ddot{\vec{r}}_{j-1}}{\tau^2} = \ddot{\vec{r}}_j$$

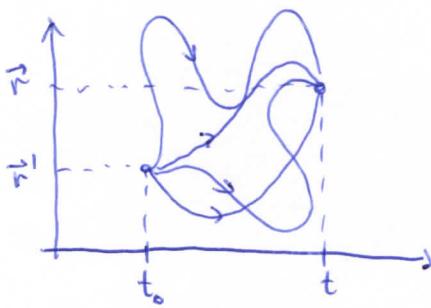
czyli mamy: $(-m\ddot{\vec{r}}_j - \vec{\nabla}_j V) \tau = 0$

Zatem dominujący udział do catti pochodni od \vec{r}_j , dla którego spełnione jest klasyczne r-nie ruchu: $m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_j = -\vec{\nabla}_j V$

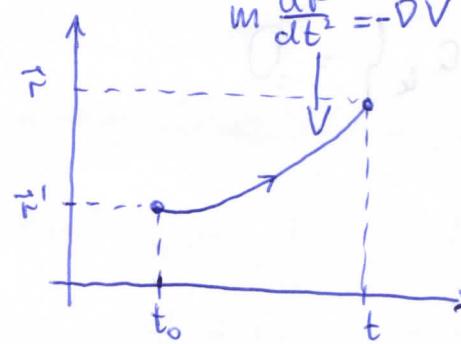
Zatem w granicy klasycznej udział do $U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0)$ pochodzi od trajektorii, dla której $\oint \int_{t_0}^t L dt = 0$ czyli dla której spełnione są r-nia Eulera-Lagrange'a.

$$U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) \xrightarrow{h \rightarrow 0} A e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t L(\vec{r}_a, \dot{\vec{r}}_a) dt}; \quad \oint \int_{t_0}^t L(\vec{r}_a, \dot{\vec{r}}_a) dt = 0$$

gdzie \vec{r}_a i $\dot{\vec{r}}_a$ oznaczaj \vec{s} potocnia i prakocia dla trajektorii klasycznej, A - sta \vec{r} a niezależna od t.



$$\xrightarrow{h \rightarrow 0}$$



trajektoria klasyczna
 $m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} V$

Podsumowanie

1^o Rozwinięcie r-nia Schrödingera jest określone poprzez op. evolucji $\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$. W reprezentacji potocniowej $U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) = \langle \vec{r} | \hat{U}(t-t_0) | \vec{r}' \rangle$ wyznacza f. fakto \vec{s} u chwilii czasu t na podstawie zadanego f. fakto \vec{s} u chwilii t₀: $\psi(\vec{r}, t) = \int d^3 r' U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) \psi(\vec{r}', t_0)$

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

gdzie L jest funkcja Lagrange'a czasu t i potencja \vec{s} V(\vec{r}).

3^o W granicy klasycznej: ($\hbar \rightarrow 0$): $U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) \sim e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0} L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) dt}$ gdzie $\vec{r}_a(t)$ jest trajektorią klasyczną zdefiniowaną liczbami:

$$\oint \int_{t_0}^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) dt = 0. \quad \text{Może zatem zinterpretować wyrażenie 2. jako sumę po wszystkich trajektoriach: } U(\vec{r}, \vec{r}', t-t_0) = \int [D\vec{r}] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) dt}$$

4º Granica klasyczna ($t \rightarrow 0$) stosuje się wtedy jeśli zmiany dziedziny $\int_{t_0}^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) dt$ liczone wzdłuż sąsiednich trajektorii są małe w porównaniu z t . Przez sąsiednie trajektorie rozumie się trajektorie odróżnicowe od siebie. Odróżnicowość jest determinowana precyjną unikalną pomiarową lub wynikającą z jakichś związkuje się badany układ. Np. trajektorie elektronu odległe od siebie o 1 \AA są odróżnicowe w przypadku ruchu elektronów w atomie, natomiast nieodróżnicowane w przypadku ruchu elektronów w lampie elektronowej. Stąd wynika, iż granica klasyczna oznacza małe masy lub małe zmiany układów.

5º Przybliżenie klasyczne mechaniki kwantowej jest analogiczne do przybliżenia optiki falowej przez optykę geometryczną.

Mechanika kwi.: f. falowa → trajektorie częstele (r. Schrödinger) : mechanika klasyczna (zai. Hamiltona)

Optika falowa : fala e.m. → przeniesienie : optika grom. (r. Maxwell) (zai. Fermata)

6º Dwie metody kuantowania układu klasycznego:

Kwantowanie kanoniczne

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

$$H(\vec{q}, \vec{p})$$

2º Zastępujemy współrzędne kanoniczne sprzątne przez operatory

$$\begin{aligned}\vec{q} &\rightarrow \hat{\vec{q}} \\ \vec{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_q\end{aligned}$$

3º Konstruujemy Hamiltonian

$$\hat{H} = H(\hat{\vec{q}}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_q) \quad i \text{ r-nie s.}$$

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

Kwantowanie metodą całek po trajektoriach

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

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$$

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

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

3º Funkcję falową obliczamy z równa

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

Metoda WKB (Wentzel - Kramers - Brillouin)

Rozwiniemy r-nie Schrödingera:

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

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

Dla ustalonego \vec{r} i t $\psi(\vec{r}, t)$ jest liczbą zespoloną, zatem możemy napisać: $\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) e^{i\frac{\hbar}{\hbar} S(\vec{r}, t)}$

gdzie $A(\vec{r}, t)$ i $S(\vec{r}, t)$ są funkcjami rzeczywistymi.

Podstawiąc do (*) otrzymujemy:

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

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

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

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

Rozwijamy oddzielnie cząsticę rzeczywistą i urojoną tego równia:

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

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

Ad 2°

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

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

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

$$\text{Oraz } \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{\hbar}{2mi} (A e^{-\frac{i}{\hbar}S} \vec{\nabla} (A e^{\frac{i}{\hbar}S}) - A e^{\frac{i}{\hbar}S} \vec{\nabla} (A e^{-\frac{i}{\hbar}S})) = \frac{\hbar}{2mi} [A \vec{\nabla} A + 2A^2 \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S - A \vec{\nabla} A] = \frac{\hbar}{mi} \frac{i}{\hbar} A^2 \vec{\nabla} S$$

Czyli r-nie ϑ jest po prostu r-niemie ciągły:

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

Ad 1°

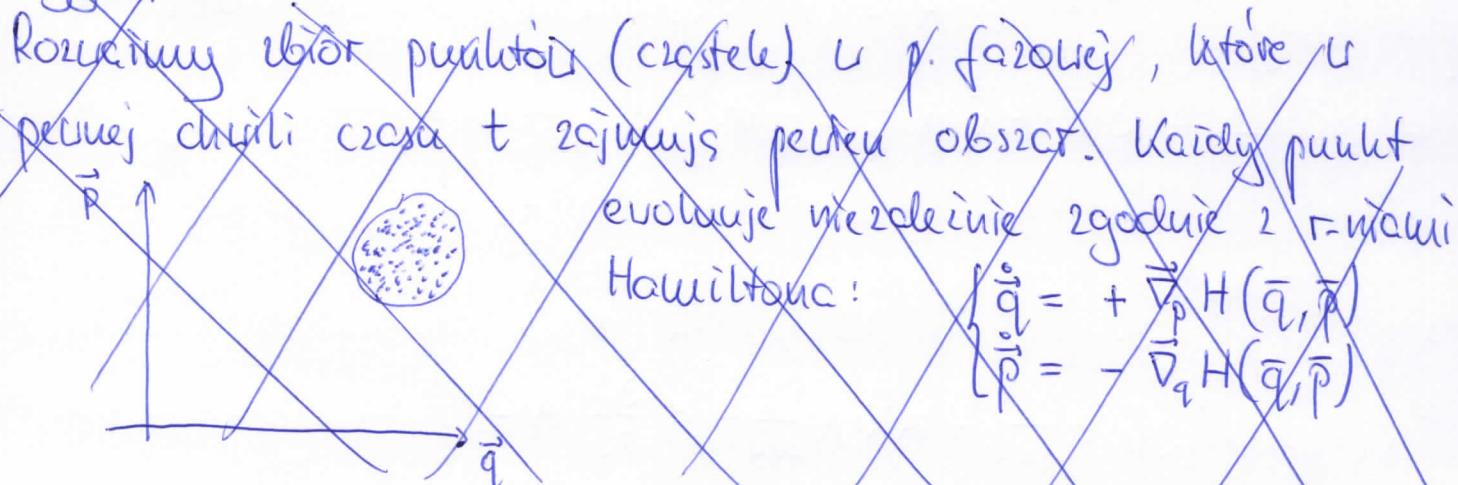
$$-A^2 \frac{\partial S}{\partial t} = A^2 \left[\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{r}) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} A \vec{\nabla}^2 A$$

Rozliczamy granice klasyczne: $\hbar \rightarrow 0$

Wtedy otrzymujemy: $\begin{cases} -\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{r}) \\ \frac{\partial}{\partial t} A^2 + \vec{\nabla} [A^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m}] = 0 \end{cases}$

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

Dygresja



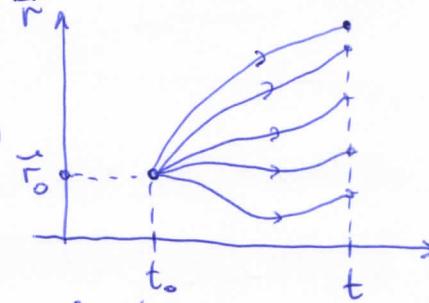
Dygresja

Rozważamy cęstka kierująca się od punktu $\vec{r}_0 = \vec{r}(t_0)$ do punktu $\vec{r}_1 = \vec{r}(t_1)$ w przediale czasu $t_1 - t_0$. Trajektoria tego ruchu jest wyznaczona przez warunek stałościąci drążania: $\int S = 0$, przy warunkach brzegowych: $\int \vec{r}_0 = \int \vec{r}_1 = 0$ (gdzie $S = \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) dt$)

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

Dla takich trajektorii mówimy odefiniowac drążanie jako funkcję punktu końcowego, do którego dociera cęstka w chwili t :

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



Obliczmy zbiory S dla sęsiednich trajektorii:

$$\begin{aligned} \int S &= \int_{t_0}^t \int L dt' = \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}'} \cdot \int \vec{r}' dt' + \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} \cdot \int \dot{\vec{r}}' dt' \right) dt' = \left\{ \int \dot{\vec{r}}' = \int \frac{d \vec{r}'}{dt} = \right. \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}'} \cdot \int \vec{r}' dt' + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} \right) \int \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} \cdot \int \vec{r}' dt' \right) dt' = \left. \frac{d}{dt} \int \vec{r}' dt' \right|_{t_0}^t \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{r}'} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} \right) \cdot \int \vec{r}' dt' + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} \cdot \int \vec{r}' dt' \right|_{t_0}^t = \vec{p}' \cdot \int \vec{r}' dt' \Big|_{t_0}^t \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, iż dla każdej trajektorii klasycznej spełniona jest równica 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 $\int \vec{r}'(t_0) = \vec{r}_0 = 0$

Stąd $\int S = \vec{p}' \cdot \int \vec{r}'$ gdzie $\vec{p}' = \vec{p}(t)$

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

Zauważmy ponadto, iż 2 r-nia (*) mają:

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

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

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: $\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\vec{r}, \frac{\partial S}{\partial \vec{r}})$

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

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

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

Zatem w granicy klasycznej funkcja fazowa mała skonstruować 2 rozwiązań r-nia H-J (+ r-nie ciągłe w 2°). $S(\vec{r}, t)$, które jest (dla ustalonego \vec{r} i t) fazą funkcji fazyjnej ma 2 klasycznego punktu vidzenia tzw. liniowość, iż $\vec{\nabla}S = \vec{p}$ czyli położenie stacj fazy jest prostopadłe do trajektorii klasycznych (por. 2 opisy fazy i geometrii).

Koniec dygresji.

W granicy klasycznej r-nia:
$$\left. \begin{array}{l} -\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V(\vec{r}) \\ \frac{\partial S}{\partial t} = -\vec{\nabla}(S(\vec{r}, t)) \cdot \frac{\vec{\nabla}S}{m} \end{array} \right\} (*)$$

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

opisuje ruch nieoddrzucnych punktów materialnych o masie m , o położeniu $S(\vec{r}, t)$ i pędzie $\vec{p}(\vec{r}, t)$, gdy leidy 2 punktami materialnymi porusza się zgodnie z r-niami Hamiltona:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\vec{p}} = \boxed{\quad} - \vec{\nabla}_r H \\ \dot{\vec{r}} = \vec{\nabla}_p H \end{array} \right. ; \quad H = H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

R-nia (*) stanowią pierwotne przybliżenie funkcji falowej i noszą nazwę przybliżenia WKB. (44)

Mając skomutującą cięg kolejnych przybliżeń zwany metodą WKB

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

Pредставление то nie jest jednoznaczne, bo $A(\vec{r}, t) \rightarrow -A(\vec{r}, t)$ jest równoważne $S(\vec{r}, t) \rightarrow S(\vec{r}, t) + \frac{i}{\hbar} \ln A(\vec{r}, t) (2n+1)$; $n=0, \pm 1, \dots$

Przyjmijmy iż $A(\vec{r}, t) \geq 0$. Wtedy

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(S(\vec{r}, t) + \frac{i}{\hbar} \ln A(\vec{r}, t))} = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{G}(\vec{r}, t)}$$

gdzie $\tilde{G}(\vec{r}, t) \stackrel{\text{def.}}{=} S(\vec{r}, t) - i \hbar \ln A(\vec{r}, t)$

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

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

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

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

Zakładały, iż prawa strona stawia niewielkie zaburzenie i szukamy rozwiązań w postaci: $(**) \tilde{G}(\vec{r}, t) = G_0(\vec{r}, t) + \hbar G_1(\vec{r}, t) + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \hbar^k G_k$

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

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

$$\hbar^0 : \frac{1}{2m} (\nabla G_0)^2 + V(\vec{r}) + \frac{\partial G_0}{\partial t} = 0 \quad (a)$$

$$\hbar^1 : \frac{1}{m} \nabla G_0 \cdot \nabla G_1 + \frac{\partial G_1}{\partial t} = \frac{i}{2m} \nabla^2 G_0 \quad (b)$$

:

Nietrudno sprawdzić, iż r-nia (a) i (b) są równoważne r-niom (4) jeśli uzupełnimy: $G_0 = S$ i $G_1 = -i \ln A$

Przypadek stanów stacjonarnych:

Jeli $\psi(\vec{r}, t) = \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$ to oznacza, i.e.

$$A(\vec{r}, t) = A(\vec{r}) \quad \text{oraz} \quad S(\vec{r}, t) = S(\vec{r}) - Et$$

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

Wtedy r-nie (**) ma postać:

$$(*\alpha') \left[\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + [V(\vec{r}) - E] = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S \right]$$

a ciąg przybliżeń metody WKB ma postać:

$$h^0: \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S_0)^2 + [V(\vec{r}) - E] = 0 \quad (\alpha')$$

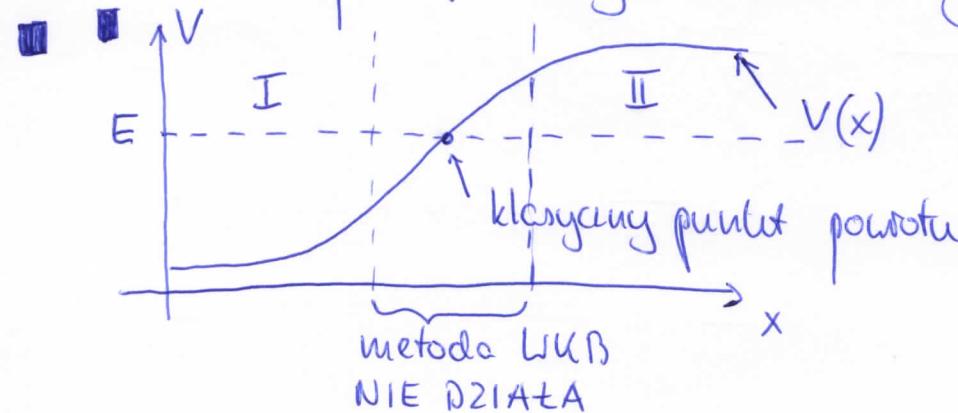
$$h^1: \frac{1}{m} \vec{\nabla} S_0 \cdot \vec{\nabla} S_1 = \frac{i}{2m} \vec{\nabla}^2 S_0 \quad (\beta')$$

⋮

Warunki stosowania metody WKB:

Zauważmy, i.e. 2 r-nie (***) wynika, i.e. czteronu $\frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S$ można traktować jako małe zaburzenie gdy $\frac{\hbar}{2m} |\vec{\nabla}^2 S| \ll |E - V(\vec{r})|$
lub równoważnie $\frac{\hbar}{2m} |\vec{\nabla}^2 S| \ll \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2$

Pierwszy z tych warunków oznacza, i.e. metoda WKB można stosować w pełni odległość od kierującego punktu powrotu.



Równoważnie 2 drugiego warunku, podstępując $S \approx S_0 = S$
otrzymujemy $\frac{\hbar}{2m} |\vec{\nabla}^2 S| \ll \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2$, ale $\vec{p} = \vec{\nabla} S$

$$\text{zatem } \textcircled{*} \text{ i } |\vec{\nabla} \cdot \vec{p}(\vec{r})| \ll |\vec{p}(\vec{r})|^2 =$$

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

Przykład

Rozważamy 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 wygólnią jak na poniższym rysunku.

Znajdziemy przybliżenie LK B dla funkcji $\varphi_E(x)$ w obrębie I ($E > V(x)$) i obrębie II ($E < V(x)$ - obręb niedostępny klasycznie).

Obszar I: Z r-nia (a') mamy $\frac{1}{2m} \left(\frac{d\tilde{\psi}_0}{dx} \right)^2 - (E - V(x)) = 0$

$$\text{Czyli } \frac{d\tilde{\psi}_0}{dx} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

$$\tilde{\psi}_0(x) = \pm \int_a^x \sqrt{2m(E - V(x))} dx' ; a - \text{dowolna stała}$$

$$\text{Z r-nia (b'): } \frac{1}{m} \frac{d\tilde{\psi}_0}{dx} \frac{d\tilde{\psi}_1}{dx} = \frac{i}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \tilde{\psi}_0$$

$$\pm \sqrt{2m(E - V(x))} \frac{d\tilde{\psi}_1}{dx} = \pm \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - V(x))}$$

$$\frac{d\tilde{\psi}_1}{dx} = \frac{i}{2} \frac{\frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - V(x))}}{\sqrt{2m(E - V(x))}} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \ln \left[\sqrt{2m(E - V(x))} \right]$$

$$\tilde{\psi}_1(x) = \frac{i}{2} \ln \left[\sqrt{2m(E - V(x))} \right] + \text{stała dowolna}$$

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

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

Zauważamy, iż w mechanice klasycznej $\sqrt{2m(E-V(x))} = p(x) = \hbar k(x)$ (47)
 Stąd (I) $\Psi_E(x) \xrightarrow{\text{WKB}} \frac{\alpha}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i \int_a^x k(x') dx'}$

stata α jest wyznaczona przez warunek normalizacji $\Psi_E(x)$.

Zauważamy, iż $|\Psi_E(x)|^2 \sim \frac{1}{p(x)}$

Obszar II: Z równia (a') mamy $\frac{1}{2m} \left(\frac{d\tilde{\psi}_0}{dx} \right)^2 + (V(x) - E) = 0$

$$\text{Czyli } \frac{d\tilde{\psi}_0}{dx} = \pm i \sqrt{2m(V(x)-E)}$$

$$\tilde{\psi}_0(x) = \pm i \int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx' ; b - \text{stała dowolna}$$

$$\text{Z równia (b'): } \pm \frac{1}{m} i \sqrt{2m(V(x)-E)} \frac{d\tilde{\psi}_1}{dx} = \frac{i}{2m} \frac{d}{dx} \left[\pm i \sqrt{2m(V(x)-E)} \right]$$

$$\frac{d\tilde{\psi}_1}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\sqrt{2m(V(x)-E)}} = \frac{d}{dx} \left(\frac{i}{2} \ln \left[\sqrt{2m(V(x)-E)} \right] \right)$$

$$\tilde{\psi}_1(x) = \frac{i}{4} \ln [2m(V(x)-E)] + \text{stała dowolna}$$

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

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

Wtedy

$$(II) \Psi_E(x) \xrightarrow{\text{WKB}} \frac{\beta}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \int_b^x \alpha(x') dx'} ; b, \beta - \text{stałe}$$

Zatem woznaczenie w obranze I opisuje funkcję oscylującą w przestrzeni. Również w obranze II opisuje funkcję zanikającą eksponentialnie (gdy odnaczymy wozu. 2 "+ " na postawie warunku biegowego $\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi_E(x) = 0$). Zauważamy, iż sygnowe oscylacji funkcji I i zanikania funkcji II zależą od różnicy $|E - V(x)|$. Aby otrzymać pełne woznaczenie zawierające obranze wokół punktu porotu należy "zsytać" woznaczenia I i II.

1^o Równanie Schrödingera i transformacja Galileusza

Zgodnie z 2 zasadami względności F-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:

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

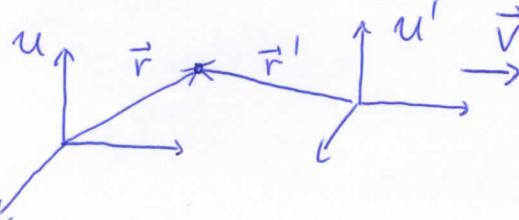
to w układzie U' powinno zachodzić:

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

gdzie \tilde{V} jest potencjałem V widzianym w układzie U' , tzn.

$\tilde{V}(\vec{r}', t') = V(\vec{r}' + \vec{v}t', t')$ przy czym (\vec{r}, t) i (\vec{r}', t') są

związanymi transformacjami Galileusza: (G) $\begin{cases} \vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t \\ t' = t \end{cases}$



ψ' jest funkcją falową widzianą w układzie U' .

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa założenia cząstki w punkcie nie może zależeć od układu odniesienia zatem $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi'(\vec{r}', t')|^2$

Oznacza to, że ψ i ψ' mogą się różnić w najwyżej fazą:

$$\psi'(\vec{r}', t') = e^{i\alpha(\vec{r}', t')} \psi(\vec{r}, t) ; \alpha(\vec{r}, t) \in \mathbb{R}$$

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 $\langle \hat{\vec{p}} \rangle_{U'} = \int d^3r' \psi'^*(\vec{r}', t') \hat{\vec{p}} \psi'(\vec{r}', t')$ - wart. oczekiwana mieniąca w układzie U'

$\langle \hat{\vec{p}} \rangle_u = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{\vec{p}} \psi(\vec{r}, t)$ - wart. oczekiwana mieniąca w układzie U

Stąd mamy:

$$\int d^3r' \psi'^*(\vec{r}', t') \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}' \psi'(\vec{r}', t') = \begin{cases} \vec{\nabla}' = \vec{\nabla} \\ d^3r' = d^3r \end{cases} = \int d^3r \cdot e^{-i\alpha} \psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} (e^{i\alpha} \psi) =$$

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

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

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

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

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

~~Funkcja $\tilde{\alpha}(t)$ moimy określić wzorującą ruch częstki w ustawionej energii. Jeśli w ustawionej energii wynosi E , to wynosi $\tilde{\alpha}(t)$~~

Funkcja $\tilde{\alpha}(t)$ moimy wzorować wzorującą ruch częstki swobodnej.

Jeśli w ustawionej energii częstka ma pd \vec{p} i energię $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$,

to w ustawionej U' funkcja falowa częstki powinna być postaci:

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

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

$$\text{zatem } \psi'(\vec{r}', t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} [(\vec{p} - m \vec{V}) \cdot (\vec{r} - \vec{V}t) - \frac{(\vec{p} - m \vec{V})^2}{2m} t]} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p} \cdot \vec{r} - m \vec{V} \cdot \vec{r} - \vec{p} \cdot \vec{V}t + m \vec{V}^2 t - \frac{\vec{p}^2 t}{2m} + \vec{p} \cdot \vec{V}t - \frac{m \vec{V}^2 t}{2}]} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} m \vec{V} \cdot \vec{r} + \frac{i}{\hbar} m \frac{\vec{V}^2}{2} t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{czyli } \tilde{\alpha}(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{m \vec{V}^2}{2} t$$

Podsumowując:

Jeśli w ustawionej ruch częstki opisywany jest funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$, to w ustawionej U' : $(***) \psi'(\vec{r}', t') = e^{\frac{i}{\hbar} [-m \vec{V} \cdot \vec{r} + \frac{m \vec{V}^2 t}{2}]} \psi(\vec{r}, t)$.

Oczywiście oba ustawione są inertialne i transformacja Galileusza powiązany z nimi dana jest równaniem (G).

Sprawdżmy teraz czy równanie Schrödingera jest niezmienione uogólnieniem (59) transformacji Galileusza, tzn. czy $\varphi'(\vec{r}', t')$ spełnia (xx).

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

$$\text{ale } \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial F} \frac{\partial \vec{F}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\partial}$$

$$\text{or} \quad \vec{\nabla}' = \vec{\nabla} \quad ; \quad \tilde{V}(\vec{r}', t') = V(\vec{r}' + \vec{v}t', t') = V(\vec{r}, t)$$

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

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

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

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

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

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

$$\text{Czyl} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi$$

Ale to pest r-nie (x) spētūsne u ultadie u.

Zatem r-nie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji Galileusza przy czym funkcja falowa transformuje się zgodnie z ułorem (A A A)

20 Transformacja Lorentza

Oznaczenia:

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

Transformacja Lorentza określa ~~związek między współrzędnymi~~^{związek} pomiędzy \tilde{x}^μ i \tilde{x}'^μ w dwóch ieracyjnych układach odrzucenia u i u' poruszających się względem siebie z prędkością \vec{v} . Jeśli $|v| \ll c$ to transformacja Lorentza przechodzi w transformację Galileusza (G).

Niezmienikiem transformacji Lorentza jest wielkość: $(ct)^2 - \vec{r} \cdot \vec{r}$ (51)

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

Dlatego wygodnie jest wprost podzielić dwa typy wektorów w cztero-wymiarowej przestrzeni:

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

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

Wtedy bowiem $\vec{x}^\mu \cdot \vec{x}_\mu = \sum_{\mu=0}^3 x^\mu x_\mu = (ct)^2 - \vec{r} \cdot \vec{r}$ jest niezmienikiem

Oznaczmy macierią transformacji Lorentza przez L , tzn.:

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

$$\text{czyli } \boxed{x'^\mu = \sum_{\nu=0}^3 L_{\mu\nu} x^\nu} \quad (*)$$

Macierz transformacji Lorentza jest macierzą 4×4 zależną od prędkości światowej v udziałów ierogonalnych u i u' .

Macierz L jest nieosobliwa i ma wyznacznik równy ± 1 .

Zbadajmy właściwości transformacyjne \vec{x}'_μ . Przypuszczyjmy, iż

$$\vec{x}'_\mu = \tilde{L} \vec{x}_\mu \quad \text{czyli} \quad x'_\mu = \sum_{\nu=0}^3 \tilde{L}_{\mu\nu} x_\nu$$

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

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

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

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

Zatem wektory \vec{x}_μ transformują się w następujący sposób:

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

Terminologia

Wielkości, które nie zmieniają się przy transformacji Lorentza nazywamy skalarami.

Wielkości, które transformują się zgodnie z prawem (⊗) lub (⊗+) nazywamy czterowektoram.

Przykład

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

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

Czterovelkorem jest równieci wektor zbudowany z potencjałami pola e.m. (czteropotencjał): $\tilde{A}^\mu = (\tilde{\varphi}(\vec{r}, t), \tilde{A}(\vec{r}, t))$
 $\tilde{A}_\mu = (\tilde{\varphi}(\vec{r}, t), -\tilde{A}(\vec{r}, t))$

Zauważmy, że mając dane dwa dowolne czterowektory: \tilde{x}^μ i \tilde{p}^μ możemy wyliczyć skalar: $\tilde{x}_\mu \cdot \tilde{p}^\mu$

Zatem skalarem jest $\tilde{x}^\mu \cdot \tilde{p}^\mu = E^2 - \vec{p} \cdot \vec{r}$

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

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

Sprawdzimy czy $\tilde{\partial}_\mu = (\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla})$ jest czterovelkorem.
 Rozważmy $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ i ukt. U^1 : $\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \sum_{v=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^v} \frac{\partial x^v}{\partial x^\mu}$

Ale z r-nia (8), $\tilde{x}^{\mu'} = L \tilde{x}^\mu \Rightarrow \tilde{x}^\mu = L^{-1} \tilde{x}^{\mu'}$

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

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

Ponownując 2 (8) widać, że $\tilde{\partial}_\mu$ jest czterovelkorem kowariantnym.
 Analogicznie można pokazać, że $\tilde{\partial}^\mu = (\frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}) = (\frac{\partial}{\partial x^0}, -\vec{\nabla})$ jest czterovelkorem kontraktantym.

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

Ogólnie: Tensorem rzędu N o n indeksach kowariantnych i m -kontraktantnych ($n+m=N$) nazywamy wielkość, która przy zmianie uktoru iżycia całego transformuje się w następujący sposób:

$$T_{\mu_1 \dots \mu_n}^{v_1 \dots v_m} = \sum_{\mu'_1, \dots, \mu'_n=0}^3 \sum_{v'_1, \dots, v'_m=0}^3 (L^{-1})_{\mu'_1 \mu_1} \dots (L^{-1})_{\mu'_n \mu_n} L_{v'_1 v'_1} \dots L_{v'_m v'_m} T_{\mu'_1 \dots \mu'_n}^{v'_1 \dots v'_m}$$

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

3. Równanie Klein-Gordona

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

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

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

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

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

Szukamy rozwiązań postaci $\varphi(\bar{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} (\bar{p} \cdot \bar{r} - Et)}$ - 2 do kladu odcisnąć do statej 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:

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

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

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

Zatem ostatecznie szukane r-nie ma postać:

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

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

Równanie (x) nazywa się r-niem Klein-Gordona.

Problem I

Równanie (1) oprócz rozkładania o energii $E_p = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} > 0$ ma również rozkładanie odpowiadające $E_p = -\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} < 0$
 Czyli mamy: $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} \mp |E|t)}$

Jaka jest interpretacja fizyczna rozkładów $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)$?

Problem II

Wyprowadzimy równe ciągłość.

Z równia (2) mamy: $\varphi^*(\vec{r}, t) [\bar{\partial}_\mu \bar{j}^\mu + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2] \varphi(\vec{r}, t) = 0$
 $\varphi(\vec{r}, t) [\bar{\partial}_\mu \bar{j}^\mu + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2] \varphi^*(\vec{r}, t) = 0$

Odejmując równia stronami otrzymujemy:

$$\frac{1}{c^2} \varphi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi - \frac{1}{c^2} \varphi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi^* - \varphi^* \nabla^2 \varphi + \varphi \nabla^2 \varphi^* = 0$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{c} \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{1}{c} \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right) - \vec{\nabla} \cdot (\varphi^* \vec{\nabla} \varphi - \varphi \vec{\nabla} \varphi^*) = 0 \quad \boxed{\frac{\hbar}{2m_0 c}}$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\hbar}{2m_0 c i} \left[\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right] \right) - \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

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

Zatem wielkość $\frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right)$ pojawia się ufoisacząc 2 gestości p-stre $\vec{s}(\vec{r}, t)$.

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

Lub w zapisie relatywistycznym niezmienniczym: $\boxed{\bar{\partial}_\mu \bar{j}^\mu = 0} \quad (**)$

gdzie $\vec{j}^0 = c \vec{s}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m_0 c} \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right)$

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

Zauważmy, że 2 niezmiennicze równe K-G w jednej transformacji

Lorentza wynika, i.e. (**) jest spełnione u kiedyś i wcale nie ukt. odniesienia. To oznacza, i.e. wielkość \vec{j}_μ jest czterowektorem (czterooperator). (55)

Problem polega na tym, i.e. ponieważ r-nie K-G jest r-niem vōničkowym drugiego rzędu względem czasu więc $\frac{\partial \psi}{\partial t}$; $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$ są dozwolone. To oznacza, i.e. $\vec{g}(\vec{r}, t)$ nie jest dodatnio określona. Nie można jej zatem interpretować jako gęstości prawdopodobieństwa.

Interpretacja (Pauli & Weisskopf)

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

Rozwiązania rezygnista r-nia K-G opisują części bezspinowe i nienurodowane.

Rozwiązania zespolone opisują części bezspinowe i natadowane przy czym rozwiązanie typu φ_+ opisuje części o ładunku +e, a rozwiązanie φ_- - części o ładunku -e.

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

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

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

Wtedy

$$e\vec{g}_{\pm}(\vec{r}, t) = \frac{ie}{2m_e c^2} \left[\varphi_{\pm}^* \frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial t} - \varphi_{\pm} \frac{\partial \varphi_{\pm}^*}{\partial t} \right] =$$

$$= \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left[S d^3 p |f_{\pm}(\vec{p})|^2 \left(-\frac{i}{\hbar} |\vec{E}_p| + \frac{i}{\hbar} |\vec{E}_p| \right) \right] =$$

$$= \pm \frac{e}{m_0 c^2} S d^3 p |f_{\pm}(\vec{p})|^2 |\vec{E}_p|$$

Kwestia normalizacji

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

Jeżeli mamy, że w objętości V w pierwszej chwili czasu znajdują się części o ładunku $\pm e$ to:

$$\pm e = e \int_V d^3 r g(\vec{r}, t) = \pm \frac{e}{m_0 c^2} \int_V S d^3 p |f_{\pm}(\vec{p})|^2 |\vec{E}_p|$$

Czyli $1 = \frac{V}{m_0 c^2} \int_V S d^3 p |f_{\pm}(\vec{p})|^2 |\vec{E}_p|$

Stąd widać, że wygodnie jest wybrać normalizację postaci:

$$\boxed{\psi_{\pm}(\vec{r}, t) = S d^3 p a_{\pm}(\vec{p}) \sqrt{\frac{m_0 c^2}{V |\vec{E}_p|}} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} \mp |\vec{E}_p| t)}}$$

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

Zauważmy, że rozważanie opisujące części niezidentyczne oznaczamy jako:

$$\psi_0(\vec{r}, t) = \int d^3 p \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m_0 c^2}{V |\vec{E}_p|}} \left(a_+(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - |\vec{E}_p| t)} + a_-(-\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (-\vec{p} \cdot \vec{r} + |\vec{E}_p| t)} \right)$$

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

$$\boxed{\psi_0(\vec{r}, t) = \int d^3 p \sqrt{\frac{2 m_0 c^2}{V |\vec{E}_p|}} a_0(\vec{p}) \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - |\vec{E}_p| t) \right]}$$

Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym

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

$$[(\tilde{\partial}_\mu + \alpha \tilde{A}_\mu) \cdot (\tilde{\partial}^\mu + \alpha \tilde{A}^\mu) + \left(\frac{\mu_0 c}{\hbar}\right)^2] \psi(\tilde{x}^\mu) = 0$$

gdzie α jest stałą

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

$$\tilde{p} \rightarrow \tilde{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

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

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

$$\text{Zatem mamy: } \left[\left(\tilde{\partial}_\mu + \frac{ie}{\hbar c} \tilde{A}_\mu \right) \cdot \left(\tilde{\partial}^\mu + \frac{ie}{\hbar c} \tilde{A}^\mu \right) + \left(\frac{\mu_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(\tilde{x}^\mu) = 0$$

$$\left[\left(\partial_0 + \frac{ie}{\hbar c} A_0 \right) \left(\partial^0 + \frac{ie}{\hbar c} A^0 \right) + \left(\vec{\partial} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \left(-\vec{\partial} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) + \left(\frac{\mu_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(\tilde{x}^\mu) = 0$$

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

$$\boxed{\left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar} \varphi(F, t) \right)^2 - \left(\vec{\partial} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(F, t) \right)^2 + \left(\frac{\mu_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(F, t) = 0 \quad (*)}$$

R-nie (*) opisuje ruch natadowanej, bezspinowej części u joku e.m.

Zauważmy, iż po włączeniu pola e.m. funkcja $\varphi(F, t)$ musi być zespłana.

Równanie K-G jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu względem czasu. Czy można utworzyć równie pierwotnego rzędu, niezmiennicie względem transformacji Lorentza.

Rozważmy równie:

$$(*) [\alpha \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu + \beta] \Phi(\vec{x}^\mu) = 0$$

Jeśli α i β są stałe, a \vec{r}^μ jest przekrojkiem to (*) jest w sposób oczywisty niezmiennicie względem transformacji Lorentza. Ponieważ (*) pozwala opisywać ruch cząstki swobodnej więc skonstruujemy równanie w postaci:

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

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

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

Zatem musi zachodzić: $\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{r}^\mu \cdot \vec{p}_\mu + \beta = 0 \quad \left| \left(\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{r}^\mu \cdot \vec{p}_\mu + \beta \right) \right.$

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

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

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

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

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 równie ~~deje~~ mażete na końca warunki na \vec{r}^μ oraz α i β .

Zauważmy, że jeśli:

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

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

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

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

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

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

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

Zatem Γ -nie (**) ostatecznie przyjmuje postać:

$$(***)[i\hbar \bar{\gamma}^\mu \cdot \bar{\gamma}_\mu - m_0 c] \Psi(\bar{x}^\mu) = 0$$

przy czym $\bar{\gamma}^\mu$ jest czterowektorem, którego elementy spełniają liczniki (**). R-nie (**) nazywa się Γ-niem Diraca.

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

Warunki (**) spełnione przez obiekty γ^μ noszą nazwę algebry Clifford'a.

Okazuje się, że obiekty γ^μ mają reprezentację macierzową przy czym najmniejszym macierzą spełniającą warunek (**) są macierze 4×4 .

Macierze γ^μ nazywamy macierzą gamma.

(60)

Macierze r^μ spełniające algebrę Clifforda (**) nie są wyznaczane jednoznacznie. Przypuśćmy, iż r^μ spełniają (***) oraz że S jest ~~odwzorcą~~^{odwzorcą} macierzą (istnieje S^{-1}) o tym samym rozmiarze co macierze gamma.

Zdefiniujmy $r^{\mu i} = S r^\mu S^{-1}$.

$$\begin{aligned} \text{Wtedy } r^{\mu i} r^{\nu i} &= r^{\nu i} r^{\mu i} = S r^\mu S^{-1} S r^\nu S^{-1} + \\ &+ S r^\nu S^{-1} S r^\mu S^{-1} = S(r^\mu r^\nu + r^\nu r^\mu) S^{-1} = \\ &= 2 S g_{\mu\nu} S^{-1} = 2 g_{\mu\nu} S S^{-1} = 2 g_{\mu\nu} \end{aligned}$$

Zatem macierze $r^{\mu i}$ wówczas spełniają (**).

W szczególnej formie macierze r^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:

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

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

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

$$\text{Naprzyleci: } (r^0)^2 + (r^0)^2 = 2 \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} = 2 I$$

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

$$r^i r^j + r^j r^i = \begin{bmatrix} -\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i \end{bmatrix} = 0, \quad \text{bo } \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0 \quad \text{dla } i = 1, 2, 3.$$

Sprawdzić w dół. [Szczególna reprezentacja (D) nazываемy]
[reprezentacja Diraca]

Oznaczenie (Feynman) : $\mathbf{A} = \vec{\gamma}^\mu \cdot \vec{A}_\mu$

W takim zapisie równanie Diraca ma postać: $[i\hbar \vec{\gamma} - m_0 c] \vec{\Phi}(\vec{x}^\mu) = 0$.

Zauważmy, że ponownie (**) jest spełnione przez macierze, to równanie Diraca jest tak naprawdę układem (przynajmniej czterech) równań różniczkowych. Czyli $\vec{\Phi}(\vec{x}^\mu) = \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{x}^\mu) \\ \psi_2(\vec{x}^\mu) \\ \vdots \end{bmatrix}$

Równanie Diraca zostało zaproponowane, aby wyjaśnić właściwości cząstek o spinie $1/2 \hbar$ (w szczególności elektronu) i oddziaływanie takich cząstek z polem e.m. (patr: anomalous efekt Zeemana - MKI).

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

$$(***) \quad \vec{\Phi}(\vec{x}^\mu) = \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{x}^\mu) \\ \psi_2(\vec{x}^\mu) \\ \psi_3(\vec{x}^\mu) \\ \psi_4(\vec{x}^\mu) \end{bmatrix}$$

Uwaga: Mimo że $\vec{\Phi}$ posiada 4 składowe to nie jest czterowektorem.

Pytanie podstawowe: Czy f-falowa (**) spełniająca równanie Diraca ma szansę opisywać poprawnie cząstki o spinie $1/2 \hbar$, skoro wiemy, że takie cząstki wymagają raczej f-falowej w postaci spinora (patr. MKI): $\varphi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \varphi_+(\vec{r}, t) \\ \varphi_-(\vec{r}, t) \end{bmatrix}$?

W tym celu zauważmy, że równanie Diraca dla cząstki swobodnej o czterospołdzie \vec{p}_μ w układzie odniesienia, w którym cząstka spoczywa. Wtedy $\vec{p}_\mu = \left(\frac{E}{c}, 0, 0, 0 \right) = (m_0 c, 0, 0, 0)$ [bo $(\frac{E}{c})^2 - p_\parallel^2 = m_0^2 c^2$]

W takiu przypadku:

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x^0}$$

Podstawiając do równa 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

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

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

znaczy, że tylko ψ_1 i ψ_2 mogą być różne od zero, tzn.

$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Czyli w ultiadzie odniesienia, w którym cała grupa funkcji falowej tworzą jak spinor.

znaczy to również, że w dowolnym ultiadzie odniesienia f. falowa ma co prawda w ogólności 4 składowe, ale tylko dwa z nich są niezależne.

(podobieństwo: patrz polaryzacja fal e.m.).

Czyli ~~całka~~ całość ma dodatkowy określony stopień swobody:

~~$$\Phi(\vec{x}^{\mu}) = \Phi_+(\vec{x}^{\mu}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} + \Phi_-(\vec{x}^{\mu}) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}$$~~

Rozwinięcie cięgostci

Rozwinięcie to nie Diraca i to nie hermitowsko sprzężone:

$$[ih \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu - m_0 c] \underline{\Phi}(\vec{x}^\mu) = 0$$

$$-ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+(\vec{x}^\mu) \cdot \vec{r}^\mu + m_0 c \underline{\Phi}^+(\vec{x}^\mu) = 0$$

Pomnóżmy pierwsze to nie 2 linię stroną przed $\underline{\Phi}^+$, a drugie przed $\underline{\Phi}$ ^{z prawej} odejmując stronami.

$$\underline{\Phi}^+ ih \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi} - m_0 c \underline{\Phi}^+ \underline{\Phi} + ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ (\vec{r}^\mu)^+ \underline{\Phi} + m_0 c \underline{\Phi}^+ \underline{\Phi} = \\ = ih \underline{\Phi}^+ \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi} + ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ (\vec{r}^\mu)^+ \underline{\Phi} = 0$$

Zauważmy jednak, że $r^0 = (r^0)^+ ; r^i = (r^i)^+ ; i = 1, 2, 3$

(wynika to bezpośrednio z reprezentacji Diraca macierzy gamma).

Widac więc, że 2 uagi na antyhermitowskość macierzy r^i nie można polubić tego to nie zapisać w postaci:

$$\underline{\Phi}^+ \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi} + \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ (\vec{r}^\mu)^+ \underline{\Phi} \neq \vec{\partial}_\mu \cdot (\underline{\Phi}^+ \vec{r}^\mu \underline{\Phi})$$

Zauważmy jednak, że $(r^\mu)^+ = r^0 r^\mu r^0$ zatem jeśli zamiast $\underline{\Phi}^+$ użyjemy $\bar{\underline{\Phi}} = \underline{\Phi}^+ r^0$ to otrzymamy:

$$\bar{\underline{\Phi}} [ih \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu - m_0 c] \underline{\Phi} = 0$$

i to nie hermitowsko sprzężone:

$$[-ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ (\vec{r}^\mu)^+ - m_0 c \underline{\Phi}^+] \bar{\underline{\Phi}} = 0$$

Czyli

$$-ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ (\vec{r}^\mu)^+ (r^0)^+ \underline{\Phi} - m_0 c \underline{\Phi}^+ (r^0)^+ \underline{\Phi} = \left| \begin{array}{l} \vec{r}^\mu + r^0 = \\ (r^0) \vec{r}^\mu = \\ \vec{r}^0 \vec{r}^\mu = r^0 \vec{r}^\mu \end{array} \right. \\ = -ih \vec{\partial}_\mu \underline{\Phi}^+ r^0 \cdot \vec{r}^\mu \underline{\Phi} - m_0 c \bar{\underline{\Phi}} \underline{\Phi} = \\ = -ih \vec{\partial}_\mu \bar{\underline{\Phi}} \cdot \vec{r}^\mu \underline{\Phi} - m_0 c \bar{\underline{\Phi}} \underline{\Phi} = 0$$

Odejmując te r-nia stronami otrzymujemy:

$$\bar{\Phi} i\hbar \vec{r}^\mu \cdot \vec{\partial}_\mu \bar{\Phi} + i\hbar \partial_\mu \bar{\Phi} \cdot \vec{r}^\mu \bar{\Phi} = 0$$

Czyli $i\hbar \vec{\partial}_\mu \cdot (\bar{\Phi} \vec{r}^\mu \bar{\Phi}) = 0$

Zatem jeśli zdefiniujemy: $\vec{j}^\mu = \bar{\Phi} \vec{r}^\mu \bar{\Phi}$ to otrzymujemy r-nie ciągłeści

$$\boxed{\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{j}^\mu = 0}$$

Ponieważ r-nie zostało wyproduczone dla dowolnego układu odniesienia więc \vec{j}^μ jest czterowektorem (bo $\vec{\partial}_\mu \cdot \vec{j}^\mu$ musi być skalarem).

Ponadto ponieważ \vec{r}^μ jest 2 rożnieniem czterowektorem więc wielkość $\bar{\Phi} \bar{\Phi}$ jest skalarem.

$$j^0 = \bar{\Phi} r^0 \bar{\Phi} = \bar{\Phi}^+ r^0 r^0 \bar{\Phi} = \bar{\Phi}^+ \bar{\Phi} = \sum_{k=1}^4 |\varphi_k|^2$$

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

Widac iż teraz j^0 ma sens gęstości p-stwa bo jest dodatnio określona.

Oddziaływanie e.m.

Analogicznie do r-nia K-G spodziewamy się iż r-nie Diraca w obecności pola e.m. ma postać.

$$[i\hbar \vec{r}^\mu \cdot (\vec{\partial}_\mu + \alpha \vec{A}_\mu) - m_e c] \bar{\Phi}(\vec{x}^\mu) = 0$$

gdzie $\vec{A}_\mu = (\varphi, -\vec{A})$ i α jest pewna stała.

Pamiętając, iż w obecności pola e.m. $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$
 Czyli $\hat{\vec{p}} \rightarrow \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)$

Zatem widać iż $\alpha = \frac{ie}{\hbar c}$

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 спинie $\frac{1}{2}$ i polu e.m.

Rozkładamy teraz r-nie spinowe 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 $-\vec{\gamma}^\mu \cdot \vec{\gamma}^\nu$ też spełnia algebra Clifforda, bo

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

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

Zdefiniując zatem macierz S taką że $-\gamma^\mu \cdot \vec{\gamma}^\nu = S \gamma^\mu S^{-1}$

Podstawiając do równia (**) 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 $\boxed{\Phi_c(\vec{x}^\mu) = S^{-1} \Phi^*(\vec{x}^\mu)} \quad (***)$

Zatem f. falowa Φ_c opisuje cząstkę o спинie $\frac{1}{2}$ i masie m_0 , ale przeciwnym ładunkiem -e.

Zatem podobnie jak w r-niu K-G r-nie Diraca również przedstawia 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 zadośrodzenia tego zjawiska jest istnienie dwóch rodzajów rozumu o energiach $\pm E$.

Zasada zachowania momentu pędu

Rozważmy funkcję Diraca dla cząstki wolnej:

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

gdzie $\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$; $\gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma}_i \\ -\vec{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix}$; $\vec{\partial}_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial(x^t)}, \vec{\nabla} \right)$

Przepiszmy to funkcję w formie przypominającej funkcję Schrödingera:

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

Mamy

$$\left(i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial(x^t)} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial(x^t)} \end{bmatrix} + i\hbar \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ -\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} m_0 c & 0 \\ 0 & m_0 c \end{bmatrix} \right) \Phi(\vec{x}\mu) = 0$$

$$i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix} \Phi(\vec{x}\mu) = \left(i\hbar c \begin{bmatrix} 0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \end{bmatrix} + m_0 c^2 \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \right) \Phi(\vec{x}\mu)$$

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 funkcji Diraca rola Hamiltonianu pełni:

$$\hat{H} = -i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m_0 c^2 \beta$$

Dla części wolnej moment pędu powinien być zachowany. Policzmy zatem:

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = [-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma} + m_0 c^2 \beta, \sum_{k,l} \varepsilon_{ikl} x_k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_l}] =$$

$$\hat{L}_i = (\vec{r} \times \vec{p})_i$$

$$= -i\hbar c \frac{\hbar}{i} \sum_{k,l,m} \left[x_m \frac{\partial}{\partial x_m}, \varepsilon_{ikl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \right] =$$

$$= -\hbar^2 c \sum_{k,l,m} x_m \varepsilon_{ikl} \left(\frac{\partial}{\partial x_m} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} - x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial}{\partial x_m} \right) =$$

$$= -\hbar^2 c \sum_{k,l,m} x_m \varepsilon_{ikl} \delta_{km} \frac{\partial}{\partial x_l} = -\hbar^2 c \sum_{k,l} \varepsilon_{ikl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} = -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{\sigma})_i$$

Zatem $[\hat{H}, \hat{L}'] = -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{\sigma})$

czyli operator orbitalnego momentu pędu nie komutuje z Hamiltonianem wynikającym z równa Piraca.

Rozważmy zmodyfikowany operator momentu pędu:

$$\hat{J} = \hat{L} + \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$$

Wtedy

$$[\hat{H}, \hat{J}_i] = [\hat{H}, \hat{L}_i + \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}_i] = -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{\sigma})_i + \frac{1}{2} \hbar [-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i] =$$

$$= -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{\sigma})_i - \frac{1}{2} i \hbar^2 c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \begin{bmatrix} 0 & [\sigma_k, \sigma_i] \\ [\sigma_k, \sigma_i] & 0 \end{bmatrix} = \left\{ [\sigma_k, \sigma_i] = 2i \sum_l \varepsilon_{kil} \sigma_l \right\} =$$

$$= -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{\sigma})_i - \frac{1}{2} i \hbar^2 c \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial x_k} 2i \varepsilon_{kil} \begin{bmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{bmatrix} =$$

$$= -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{v})_i + \hbar^2 c \sum_{k,l} \epsilon_{ilk} \begin{bmatrix} 0 & \Sigma_k \\ \Sigma_l & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_k} =$$

$$= -\hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{v})_i + \hbar^2 c (\vec{\alpha} \times \vec{v})_i = 0$$

Czyli Hamiltonian komutuje z operatorem \hat{J} :

$$[\hat{H}, \hat{J}] = 0$$

gdzie $\hat{J} = \hat{L} + \frac{1}{2} \hbar \vec{\alpha}$ reprezentuje całkowity moment pędu cząstki (orbitalny i spinowy)

Stąd wynika, że spinowy moment pędu dodaje się do orbitalnego momentu pędu cząstki (tzw. poliniem 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 $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ ($2j+1$ wartości)

Wyprzadzenie funkcji Pauliego z funkcji Diraca

Rozważmy elektromagnetyzm w polu e.m.

$$\left[i\hbar \vec{\nabla}^{\mu} \cdot \left(\vec{\partial}_{\mu} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}_{\mu} \right) - m_0 c \right] \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

gdzie $\vec{A}_{\mu} = (\varphi, -\vec{A})$

Przepisujemy to funkcje do postaci: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \hat{H} \Phi$

$$\left(i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar c} \varphi & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c} \varphi \end{bmatrix} + i\hbar \begin{bmatrix} 0 & \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \\ -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} m_0 c & 0 \\ 0 & m_0 c \end{bmatrix} \right) \Phi(\vec{x}^{\mu}) = 0$$

$$i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix} \Phi(\vec{x}^{\mu}) = \left(\begin{bmatrix} e\varphi & 0 \\ 0 & -e\varphi \end{bmatrix} - i\hbar c \begin{bmatrix} 0 & \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \\ -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} m_0 c^2 & 0 \\ 0 & m_0 c^2 \end{bmatrix} \right) \Phi(\vec{x}^{\mu})$$

Zatem mamy: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{x}^{\mu}) = \hat{H} \Phi(\vec{x}^{\mu})$

gdzie

$$\hat{H} = -i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) + m_0 c^2 \beta + e\varphi(\vec{r}, t)$$

Rozważmy: $\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_+ \\ \Phi_- \end{bmatrix}$

Wtedy

$$(*) \begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_+(\vec{r}, t) = -i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \Phi_-(\vec{r}, t) + (m_0 c^2 + e\varphi) \Phi_+(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_-(\vec{r}, t) = -i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \Phi_+(\vec{r}, t) + (-m_0 c^2 + e\varphi) \Phi_-(\vec{r}, t) \end{cases}$$

Badając strukturę wzajemnych połączeń funkcji odpowiadających dodatniom energiom w granicy nierelatywistycznej:

$$(**) m_0 c^2 \gg e\varphi \text{ oraz } \left| \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{\pm} \right| \ll |m_0 c^2 \Phi_{\pm}|$$

Niech

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i\omega_0 c^2 t}{\hbar}} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) \\ \tilde{\Phi}_-(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i\omega_0 c^2 t}{\hbar}} \tilde{\Phi}_-(\vec{r}, t) \end{cases}$$

Wstawiając do równań (*):

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+ = -i\hbar c \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}) \tilde{\Phi}_- + e\varphi \tilde{\Phi}_+ \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_- = -i\hbar c \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}) \tilde{\Phi}_+ + (e\varphi - 2\omega_0 c^2) \tilde{\Phi}_- \end{array} \right.$$

W granicy nierelatywistycznej drugie z równań przybliżyc przez:

$$0 \approx -i\hbar c \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}) \tilde{\Phi}_+ - 2\omega_0 c^2 \tilde{\Phi}_-$$

Stąd w granicy nierelatywistycznej mamy:

$$\tilde{\Phi}_- = -\frac{i\hbar c \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A})}{2\omega_0 c^2} \tilde{\Phi}_+$$

Wstawiając do pierwszego z równań (***), otrzymujemy:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+ = -\frac{\hbar^2 c^2 [\vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A})]^2}{2\omega_0 c^2} \tilde{\Phi}_+ + e\varphi \tilde{\Phi}_+$$

czyli

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\omega_0} [\vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A})]^2 + e\varphi \right) \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t)$$

Rozważmy człon:

$$[\vec{G} \cdot (\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A})]^2 = \sum_{k,l} G_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) G_l \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) =$$

$$= \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right)^2 + \sum_{k \neq l} G_k G_l \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right)$$

$$\sum_{k \neq l} G_k G_l \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) =$$

$$= \sum_{k>l} \left[G_k G_l \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) + G_l G_k \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) \right] =$$

$$G_k G_l = -G_l G_k \quad \text{dla } k \neq l$$

$$= \sum_{k>l} G_k G_l [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l] = \frac{1}{2} \sum_{k>l} G_k G_l [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l] - \frac{1}{2} \sum_{k>l} G_l G_k [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l]$$

$$\text{gdzię } \hat{\pi}_k = \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k$$

czyli

$$\sum_{k \neq l} G_k G_l \hat{\pi}_k \hat{\pi}_l = \frac{1}{2} \sum_{k>l} [G_k, G_l] [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l] = i \sum_{k>l} \sum_m \epsilon_{klm} G_m [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l]$$

ale

$$[\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_l] = \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right) =$$

$$= + \frac{ie}{\hbar c} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_k} \right) \quad \cancel{\text{wzór na } \epsilon_{klm}}$$

czyli

$$\sum_{k \neq l} G_k G_l \hat{\pi}_k \hat{\pi}_l = i \sum_{k>l} \sum_m \epsilon_{klm} G_m \frac{ie}{\hbar c} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_k} \right) =$$

$$= - \frac{e}{\hbar c} \sum_{k>l} \sum_m G_m \epsilon_{klm} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_k} \right) = + \frac{e}{\hbar c} \frac{1}{2} \sum_m \sum_{k,l} G_m \epsilon_{mkk} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_k} \right) =$$

$$= + \frac{e}{\hbar c} \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \quad \leftarrow \text{bo } (\vec{\nabla} \times \vec{A})_m = \sum_{k,l} \epsilon_{mkl} \frac{\partial A_k}{\partial x_l} = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \epsilon_{mkl} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_k} \right)$$

zatem podsumowując

$$\left[\vec{G} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \right]^2 = \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right)^2 + \frac{e}{\hbar c} \vec{G} \cdot \vec{B}$$

Czyli równanie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \right]^2 \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) + e\varphi \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t)$$

można zapisać w postaci:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 + \frac{e\mu_B}{\hbar c} \vec{\nabla} \cdot \vec{B} \right] \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) + e\varphi \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t)$$

Ostatecznie otrzymujemy równanie Pauliego:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) - \frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\nabla} \cdot \vec{B} \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t) + e\varphi \tilde{\Phi}_+(\vec{r}, t)$$

gdzie $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ jest magnetonem Bohra

Zatem równanie Diraca daje automatycznie poprawne spłaszczenie spinu z polem magnetycznym dla elektronu.

Zauważmy, że to spłaszczenie jest inne niż dla orbitalnego momentu pędu; które jest postaci: $\frac{e}{2m_0c} \vec{L} \cdot \vec{B}$

Natomiast dla spinu mamy: $\frac{e}{m_0c} \vec{\hat{s}} \cdot \vec{B}$; $\vec{\hat{s}} = \frac{1}{2} \vec{\nabla}$

Czyli ogólnie spłaszczenie z polem magnetycznym jest postaci:

$$\hat{\mu} \cdot \vec{B}$$

gdzie $\hat{\mu} = g \frac{e}{2m_0c} \left\{ \begin{array}{l} \vec{\hat{s}} ; g=1 \\ \vec{\hat{l}} ; g=2 \end{array} \right.$

Podsumowanie

(6)

- 1) Można utworzyć wersje równań Schrödingerów, które dają poprawny opis cząstek kwantowych (zgodność z doświadczeniami Lidera atomowych). (nie wspomina się Hamiltonianem)
- 2) Relatywistyczne wersje równań Schrödingerów przedstawiają istnienie spinu cząstek (równie Diraca) i istnienie antycząstek, czyli cząstek o tej samej masie i przeciwnym Tadunkiem.
- 3) Równie Diraca opisuje dobrze właściwości cząstki pulsowej z spinem (elektron, pozyton). Daje natomiast niepoprawne spłaszczenie spinu z polem e.m. dla cząstek ztorowych (np. proton, neutron).
- 4) Relatywistyczna mechanika kwantowa jest teorią spójną jedynie dla cząstek slobodnych. W przypadku istnienia cząstek oddziaływań (np. elektromagnetycznego) relatywistyczna mechanika kwantowa jest jedynie przybliżeniem dobrym dla wolnozmienionych (w czasie i przestrzeni) pól.
Przyczyną tego jest iż w przypadku szybkozmienionych pol zewnętrznych pojawia się możliwość kreacji i anihilacji cząstek. Dlatego teoria oparta na pojęciu funkcji falowej, pojedynczej cząstki jest niespójna.
- 5) Poprawne połaczenie 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 fala jest w tej teorii obiektem pochodnym, który opisuje konkretne wzbudzenie pola kwantowego.